

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.676

ЧИСЛЕННО-СТАТИСТИЧЕСКОЕ И АНАЛИТИЧЕСКОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ АСИМПТОТИКИ СРЕДНЕГО ПОТОКА ЧАСТИЦ
С РАЗМНОЖЕНИЕМ В СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЕ¹⁾

© 2021 г. Г. З. Лотова^{1,*}, Г. А. Михайлов^{2,**}

¹ 630090 Новосибирск, пр-т акад. Лаврентьева, 6, Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН, Россия

² 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1, Новосибирский государственный университет, Россия

*e-mail: lot@osmf.sscs.ru

**e-mail: gam@sscc.ru

Поступила в редакцию 11.07.2020 г.
Переработанный вариант 21.10.2020 г.
Принята к публикации 11.02.2021 г.

Известно, что плотность потока частиц в размножающей среде при достаточно широких условиях асимптотически экспоненциальна по времени t с некоторым параметром λ , т.е. с показателем λt . Если среда случайна, то параметр λ — случайная величина, и для оценки временной асимптотики среднего (по реализациям среды) числа частиц можно в некотором приближении осреднять экспоненту по распределению λ . В предположении гауссовости этого распределения таким образом получается асимптотическая “сверхэкспоненциальная” оценка среднего потока, выражаемая экспонентой с показателем $tE\lambda + t^2 D\lambda/2$. Для численной экспериментальной проверки такой оценки разработано вычисление вероятностных моментов случайного параметра λ на основе рандомизации фурье-приближений специальных нелинейных функционалов. Дано приложение указанной новой формулы к исследованию пандемии COVID-19. Библ. 11. Фиг. 1. Табл. 3.

Ключевые слова: статистическое моделирование, асимптотика по времени, случайная среда, поток частиц, COVID-19.

DOI: 10.31857/S0044466921060077

1. ВВОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Настоящая статья посвящена исследованию временной асимптотики среднего потока частиц, рассеивающихся с размножением в случайной среде. С этой целью разработано осреднение соответствующих аналитических и численно-статистических оценок (т.е. оценок метода Монте-Карло), получаемых для детерминированных реализаций среды.

Известно (см., например, [1]), что плотность потока частиц $\Phi(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ в системе, образованной размножающей средой в области \mathbf{D} , в достаточно широких условиях является асимптотически экспоненциальной по времени t

$$\Phi(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) \asymp e^{\lambda t} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad t \rightarrow \infty.$$

Временная постоянная λ является ведущим характеристическим числом соответствующего однородного стационарного кинетического уравнения:

$$(\mathbf{v}, \text{grad } \Phi) + (\sigma + \tau/v)\Phi = \sigma_s \int w_s(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{r}) \Phi' dv' + \sigma_f \int \mathbf{v}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) w_f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{r}) \Phi' dv'. \quad (1.1)$$

Здесь $\Phi \equiv \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ — стационарная плотность потока (характеристическая функция уравнения (1.1)), $\Phi' \equiv \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}')$; $\sigma \equiv \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ — полное сечение (коэффициент ослабления); $\sigma = \sigma_s + \sigma_f + \sigma_c$, σ_s — сечение рассеяния, σ_f — сечение деления (w_s, w_f — соответствующие индикатрисы), σ_c — сечение

¹⁾ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 18-01-00356, 18-01-00599).

поглощения; ν – число частиц, вылетающих из точки деления; $\mathbf{v} = \nu\omega$ – вектор скорости, ω – единичный вектор направления, $\nu = |\mathbf{v}|$; \mathbf{r} – пространственная точка.

С целью построения и исследования алгоритмов метода Монте-Карло далее в качестве соответствующей уравнению (1.1) (см., например, [2]) математической модели процесса переноса используется однородная обрывающаяся с вероятностью единица цепь Маркова, состояниями которой являются фазовые точки последовательных “столкновений частицы с элементами вещества”, т.е. точки, в которых происходят мгновенные изменения скорости частицы. Указанная цепь Маркова x_0, x_1, \dots, x_N рассматривается в фазовом пространстве $X = R \times V \times T$ координат, скоростей и времени, т.е. $x_n = (\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n, t_n)$, где \mathbf{r}_n – точка n -го столкновения, \mathbf{v}_n – скорость непосредственно перед столкновением, а $t_n = t_{n-1} + |\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n|/|\mathbf{v}_{n-1}|$ – время “жизни” сталкивающейся частицы. Рассматриваемая цепь определяется плотностью $f(x)$ распределения начального столкновения x_0 и плотностью $k(x', x)$ перехода из состояния x' в x , причем предполагается, что

$$\int_X k(x', x) dx = q(x') \leq 1 - \delta, \quad \delta > 0, \quad (1.2)$$

т.е. цепь обрывается с вероятностью единица, и среднее число переходов конечно. Условие (1.2) выполняется, например, для ограниченной системы (см. [2], [3]). Субстохастическое ядро $k(x', x)$ получается (см. [2], [3]) из характеристики процесса переноса, которая определяет и уравнение (1.1). Отношения $\sigma_s(x)/\sigma(x)$, $\sigma_f(x)/\sigma(x)$ и $\sigma_c(x)/\sigma(x)$ равны вероятностям рассеяния, деления и поглощения непосредственно после столкновения в фазовой точке x , а плотность распределения длины ℓ свободного пробега из \mathbf{r}' в \mathbf{r} равна $p(\ell) = \sigma(r(\ell)) \exp(-\tau_{\text{оп}}(\ell))$, где $\tau_{\text{оп}}(\ell)$ – оптическая длина пробега (см. [2], [3]). Видно, что плотность столкновений $\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)$, где $\varphi_n(x)$ – плотность распределения столкновений номера n , представляет собой ряд Неймана для интегрального уравнения II рода

$$\varphi = K\varphi + f, \quad f \equiv \varphi_0,$$

где K – интегральный оператор с ядром $k(\cdot, \cdot)$. Как указано, например, в [2], [3], несмотря на наличие в ядре $k(x', x)$ обобщенных множителей $\delta(\mathbf{v}'/|\mathbf{v}'| - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ и $\delta(t - t' - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/|\mathbf{v}'|)$, оператор K можно рассматривать действующим из $L_1(X)$ в $L_1(X)$ тем более, что в рассматриваемой задаче все функции неотрицательны. При выполнении условия (1.2) имеем $\|K\|_{L_1} < 1$, и, следовательно, спектральный радиус оператора $\rho(K) < 1$.

Используемая обычно в теории переноса интенсивность излучения $\Phi(x)$ (плотность потока частиц) связана с плотностью столкновений соотношением $\varphi(x) = \sigma(x)\Phi(x)$. Метод Монте-Карло, как правило, используется для оценки линейных функционалов вида $J_h = (\varphi, h) = (\sigma\Phi, h)$, $h \in L_{\infty}$. Для построения весовых алгоритмов метода Монте-Карло используется цепь Маркова с начальной плотностью $f_0(x)$ и плотностью перехода $p(x', x)$, содержащей указанные обобщенные множители, например, цепь столкновений для других значений параметров σ , σ_s , σ_f , σ_c . При этом вводятся вспомогательные веса по формулам

$$Q_0 = \frac{f(x_0)}{f_0(x_0)}, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}.$$

Если выполняются “условия несмещенности”:

$$\text{supp } f_0(\cdot) \supset \text{supp } f(\cdot) \quad \text{и} \quad \text{supp } p(\cdot, \cdot) \supset \text{supp } k(\cdot, \cdot), \quad (1.3)$$

то (см. [2], [3])

$$J_h = E\xi, \quad \text{где} \quad \xi = \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n).$$

Если, кроме того, $\rho(K_p) < 1$, где K_p – оператор с ядром $k^2(x', x)/p(x', x)$, и $f^2/f_0 \in L_1(X)$, то $D\xi < +\infty$. Случайная величина ξ называется *оценкой по столкновениям* для функционала J_h .

Отметим, что новая скорость обычно моделируется следующим образом: с вероятностью $\sigma_s(x')/\sigma(x')$ – согласно индикатрисе $w_s(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r}')$, а с вероятностью $\sigma_f(x')/\sigma(x')$ – согласно

$w_f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r}')$; для построения весовой модификации номер типа моделирования (т.е. типа столкновения) вводится в число координат фазового пространства (см. [2], [3]).

2. ОЦЕНКА ВЕЛИЧИНЫ λ

В этом разделе рассматриваются два подхода к оценке временной константы λ размножения частиц, которая определяет асимптотику $C \exp(\lambda t)$ функции Φ в детерминированной среде (см., например, [1]). Известно (см. [1]), что если величину λ/v (v – скорость частицы) добавить к сечению поглощения, то система становится критической, т.е. λ – характеристическое число уравнения (1.1).

2.1. Дифференцируя уравнение (1.1) в операторном виде k раз по τ , получаем

$$L\Phi^{(k)} + \left(\sigma + \frac{\tau}{v}\right)\Phi^{(k)} = S\Phi^{(k)} + S_f\Phi^{(k)} - \frac{k}{v}\Phi^{(k-1)} \tag{2.1}$$

или $R_1\Phi^{(k)} = -(k/v)\Phi^{(k-1)}$. Следовательно,

$$\Phi^{(k)} = (-1)^{(k-1)} k! (R_1^{-1}v)^{-(k-1)} \Phi^{(1)}.$$

При выполнении стандартных спектральных свойств резольвентного оператора (см. [1]) имеем $k\Phi^{(k-1)}/\Phi^{(k)} \rightarrow \tau_1, k \rightarrow \infty$. Отсюда получаем следующий предельный вид уравнения (2.1):

$$L\Phi^* + \left(\sigma + \frac{\tau}{v}\right)\Phi^* = S\Phi^* + S_f\Phi^* - \frac{\tau_1}{v}\Phi^*.$$

Таким образом,

$$\lambda = \tau + \tau_1 \quad \text{и} \quad kJ^{(k-1)}/J^{(k)} \rightarrow \lambda - \tau. \tag{2.2}$$

Для оценки производных по τ от линейного функционала J моделируется цепь столкновений с параметрами $\tau = 0, v \equiv 1$, причем $Q_n = \tilde{v}_n \exp(-\tau t_n)$, где t_n – полное время пробега частицы до r_n и \tilde{v}_n – вес, учитывающий деления для простейшей модификации процесса без ветвления (см. [2]). Отсюда

$$\frac{\partial^k Q_n}{\partial \tau^k} = Q_n^{(k)} = \tilde{v}_n (-t_n)^k \exp(-\tau t_n).$$

Поскольку τ/v добавляется к сечению поглощения, то величина $\|K_p\|$, модифицированная заменами $\sigma_f \mapsto \sigma_f + \sigma_c, v \mapsto v\sigma_f/(\sigma_f + \sigma_c)$, может быть сделана меньше единицы выбором достаточно большого τ . Нетрудно обосновать здесь несмещенность соответствующих оценок $\xi^{(k)}$ производных $J^{(k)}$ и конечность их дисперсий при $\|K_p\| < 1$ на основе векторного подхода; условия конечности дисперсий менее ограничительны, если моделируется ветвление (см. [3]).

Рассмотренный подход был сформулирован в [4] и детально разработан в [5]. Его недостатком является необходимость трудоемких расчетов кратных производных $\xi^{(k)}$, дисперсии которых весьма сильно возрастают при увеличении k в реальных задачах. Тем не менее в [5] на основе дополнительного вычисления производных от оценок λ по значениям кусочно-постоянной случайной функции $\sigma(\tau)$ были получены достаточно точные тестовые оценки величин $E\lambda, D\lambda$ для модельной сферически-симметричной системы; они будут использованы в разд. 4 настоящей работы.

Далее сформулирован более универсальный подход к оценке величины λ на основе использования функции Грина по параметру времени t .

2.2. Пусть $\varphi_0(x; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ – плотность столкновений (по аргументу x) от одного столкновения в точке $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$, т.е. для $f(x) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)\delta(t)$.

Функционал

$$J(t) = \int_R \int_V \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} \quad \forall f \in L_1(X), \quad h \in L_\infty(R \times V),$$

можно представить в виде (см. [5])

$$J(t) = \int_R \int_V \int_0^\infty f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau,$$

где

$$F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) = \int_R \int_V \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}.$$

Предполагается, что $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, -t) \equiv 0$, и вследствие этого $F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, -t) \equiv 0$, при $t > 0$.

Символом $f_t^{(m)}$ далее обозначается m -кратная производная от функции f по t .

Лемма 1 (см. [2]). Пусть точка $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ распределена для $t_0 \equiv 0$ с плотностью $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, выполняются условия (1.3),

$$|f^{(m)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) / f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})| < C_0 < +\infty, \quad \rho(K_p) < 1,$$

и $F(x) < C < +\infty$. Тогда выполняется соотношение $J^{(m)}(t) = E \xi_t^{(m)}$, где

$$\xi_t^{(m)} = \sum_{k=0}^N Q_k h(\mathbf{r}_k, \mathbf{v}_k) f^{(m)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - t_k) / f_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0), \quad Q_0 \equiv 1, \quad (2.3)$$

причем $D \xi_t^{(m)} < +\infty$, $m = 0, 1, \dots, n$.

Отметим, что в [2] оценка типа ξ (т.е. $\xi_t^{(m)}$ при $m = 0$) используется для решения нестационарных задач оптического зондирования с реальными источниками излучения. В настоящей работе, следуя [5], на основе ξ и ξ' со вспомогательной плотностью $f(x)$ строятся оценки параметра λ экспоненциальной асимптотики потока частиц по времени.

Известно, что при выполнении довольно общих условий в случае источника, локализованного в точке $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$, имеет место асимптотическое при $t \rightarrow \infty$ соотношение (см. [1])

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \sim C(\mathbf{r}, \mathbf{v}) e^{\lambda t}, \quad C(\mathbf{r}, \mathbf{v}) < C_0 < +\infty, \quad (2.4)$$

где λ — ведущее характеристическое число уравнения (1.1). Эти условия, в частности, имеют место для односкоростного процесса переноса частиц в ограниченной среде с достаточно быстро убывающей по времени плотностью источника. Сказанное выше дает возможность построить оценку величины λ .

Теорема 1. Если выполняются соотношения

$$\int f^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) e^{-\lambda t} dt < +\infty, \quad n = 0, 1, \quad (2.5)$$

соотношение (2.4) и условия леммы 1, то

$$\frac{J'(t)}{J(t)} \rightarrow \lambda \quad \text{при} \quad t \rightarrow +\infty. \quad (2.6)$$

Доказательство. Прямое интегрирование с учетом леммы 1 и соотношений (2.4), (2.5) дает равенства

$$J(t) = C e^{\lambda t} [1 + \varepsilon(t)], \quad J'(t) = C_1 e^{\lambda t} [1 + \varepsilon_1(t)],$$

причем $\varepsilon(t)$, $\varepsilon_1(t) \rightarrow 0$ для $t \rightarrow +\infty$. Интегрируя функцию $J'(t)$ в пределах $(\tau_0, +\infty)$ при $\tau_0 \rightarrow \infty$ для $\lambda < 0$, получаем

$$J'(t) = C \lambda e^{\lambda t} [1 + \varepsilon_1(t)], \quad \text{т.е.} \quad C_1 = \lambda C.$$

В случае $\lambda > 0$ тот же результат получается путем введения дополнительного поглощения с коэффициентом $\sigma_c^{(0)} > \lambda/v$. Это завершает доказательство теоремы 1.

3. ОЦЕНКА СРЕДНЕГО ПОТОКА ЧАСТИЦ В СТОХАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЕ

3.1. Для простоты изложения далее рассматривается однокоростной процесс переноса частиц; предполагается, что $\sigma \equiv \sigma(r)$ – случайное поле, причем отношения σ_s/σ , σ_f/σ , а также индикатрисы рассеяния и деления фиксированы.

Если $h_0(r) = I_D(r)/\sigma(r)$, где I_D – индикатор области D , то функционал $J(t, \sigma)$ представляет собой полный поток частиц в области D для заданного момента времени t . Предполагая гауссовость случайной величины $\lambda(\sigma)$ и равномерность (по σ) предельного перехода $J(t, \sigma) \rightarrow_{t \rightarrow \infty} C(\sigma)e^{\lambda(\sigma)t}$, можно оценить асимптотику функции $EJ(t, \sigma) = J_t$ при $t \rightarrow \infty$:

$$J_t \approx \frac{C}{\sqrt{2\pi d}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(tx) \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2d^2}\right] dx,$$

где $a = E\lambda(\sigma)$, $d^2 = D\lambda(\sigma)$ – математическое ожидание и дисперсия соответствующей величины. При этом также предполагается, что множители $C(\sigma)$ и $e^{\lambda(\sigma)t}$ в асимптотике слабо коррелированы и, следовательно, $C \approx EC(\sigma)$. Сделанные предположения являются естественными, например, для малого случайного возмущения многослойной (многокомпонентной) среды при условии $d \ll |a|$; их эффективность проверена в настоящей работе тестовыми расчетами (см. далее разд. 4). Используя интегральную формулу (2.3.15), № 11, из [6], далее получаем

$$J_t \approx C \exp\left(\frac{d^2}{2}t^2 + at\right). \tag{3.1}$$

Следовательно, можно предположить, что

$$\frac{d \ln J_t}{dt} \approx d^2t + a. \tag{3.2}$$

Отметим, что формулы (3.1), (3.2) могут служить основой для численных исследований конкретных вариантов задачи. Определяемый формулой (3.1) закон роста среднего числа частиц можно назвать “сверхэкспоненциальным”. Более общее и практически удобное определение сверхэкспоненциальности можно связать с увеличением *коэффициента роста* $n(t + \Delta t)/n(t)$ при увеличении t .

В реальных задачах выполняется соотношение $-\infty < \lambda_1 < \lambda(\sigma) < \lambda_2 < +\infty$; следовательно, полученная асимптотика, по-видимому, может аппроксимировать J_t лишь в некотором интервале $0 < T_1 \leq t \leq T_2 < +\infty$; в связи с этим требуются дополнительные численные исследования.

3.2. Практически важными здесь являются величины $E\lambda(\sigma)$ и $D\lambda(\sigma)$. Логически простейший (прямой) способ их оценки методом Монте-Карло состоит в реализации достаточно точных оценок величины $J'(t, \sigma)/J(t, \sigma)$ для выборки σ достаточно большого объема. Однако такой способ может быть слишком трудоемким для реалистических моделей среды и процесса переноса. Поэтому в [7] для построения рандомизированного алгоритма используется соотношение $(J(t, \sigma))$ заменяется на $J(\sigma)$:

$$E \frac{J'(\sigma)}{J(\sigma)} \approx \lambda_n = E \left[J'(\sigma) \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{\tilde{J}_0^{s+1}} (J(\sigma) - \tilde{J}_0)^s \right],$$

где \tilde{J}_0 – предварительная статистическая оценка величины $EJ(\sigma)$, которую здесь можно детерминировать. Простейшая (элементарная) несмещенная рандомизированная оценка величины λ_n на основе леммы 1 строится путем реализации $n + 1$ условно независимых траекторий частиц для выбранного значения σ : $\lambda_n = E\tilde{\lambda}_n$, где

$$\tilde{\lambda}_n = \xi'(\Omega_{n+1}, \sigma) \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{\tilde{J}_0^{s+1}} \prod_{k=1}^s (\xi(\Omega_k, \sigma) - \tilde{J}_0). \tag{3.3}$$

С помощью аналогичного разложения строится оценка величины $E\lambda^2(\sigma)$ (см. [7]). Видно, что $\tilde{\lambda}_0$ из (3.3) представляет собой статистическую оценку величины J'_t/J_t . В данном случае значения J'_t

и J_t оцениваются методом двойной рандомизации (см. [3]) одновременно. Для определенности сформулируем это в виде отдельного утверждения.

Лемма 2. В условиях леммы 1 справедливо равенство

$$\frac{J'_t}{J_t} = \frac{d \ln J_t}{dt} = \frac{E \xi'_t(\Omega, \sigma)}{E \xi(\Omega, \sigma)} \approx \frac{\tilde{J}'_t}{\tilde{J}_t}, \quad (3.4)$$

где $\tilde{J}_t, \tilde{J}'_t$ — соответствующие статистические оценки, получаемые методом двойной рандомизации.

Для каждой реализации среды здесь можно строить лишь одну траекторию частиц, используя (2.3) для $m = 0; 1$. Если трудоемкость моделирования среды существенно превосходит трудоемкость моделирования траектории, то целесообразно строить r условно-независимых траекторий для каждой реализации среды. Оптимальное значение r оценивается при этом по аналогии с параметром метода расщепления (см. [9]).

Отметим, что дисперсия величины \tilde{J}'_t/\tilde{J}_t оценивается сверху с помощью линеаризации дроби по формуле

$$D \left(\frac{\tilde{J}'_t}{\tilde{J}_t} \right) < \left(\frac{\sqrt{D \tilde{J}'_t}}{E \tilde{J}_t} + \frac{|E \tilde{J}'_t|}{(E \tilde{J}_t)^3} \sqrt{D \tilde{J}_t} \right)^2. \quad (3.5)$$

3.3. В [5] построен алгоритм оценки величин $E\lambda, D\lambda$ для среды со случайной кусочно-постоянной плотностью ρ на основе разложения $\lambda(\rho)$ в ряд Тейлора по (ρ_1, \dots, ρ_m) в точке $(E\rho_1, \dots, E\rho_m)$, причем для дисперсии был использован отрезок ряда до первого порядка включительно, а для математических ожиданий — до второго. В предположении независимости случайных величин $\{\rho_i\}$ выполняются соотношения

$$E\lambda \approx \lambda(E\rho_1, \dots, E\rho_m) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 \lambda}{\partial \rho_i^2} D\rho_i, \quad D\lambda \approx \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial \lambda}{\partial \rho_i} \right)^2 D\rho_i. \quad (3.6)$$

Оценку дисперсии можно уточнить, используя слагаемые второго порядка; в рассмотренном далее примере это уточнение оказалось несущественным. Таким образом, оценка (3.6) сводится к оценке производных первого и второго порядков от λ по ρ_i .

После замены λ на итерационное резольвентное приближение (см. п. 2.1) такие оценки определяются смешанными производными

$$\frac{\partial^j J_\tau^{(k-1)}}{\partial \rho_i^j}, \quad \frac{\partial^j J_\tau^{(k)}}{\partial \rho_i^j}. \quad (3.7)$$

Величины (3.7) можно вычислять, как указано в [5], используя метод Монте-Карло со вспомогательными весами, соответствующими вариациям параметров τ и $\{\rho_i\}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Полученные таким образом результаты можно независимо контролировать более трудоемкими расчетами на основе (3.3).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

4.1. Для проведения тестовых расчетов рассматривался односкоростной процесс переноса частиц в сферически-симметричной среде с кусочно-постоянной случайной плотностью $\rho = \rho(r)$ в шаре радиуса $R = 7.72043$ с макроскопическими сечениями $\rho\sigma^{(0)}, \rho\sigma_s^{(0)}, \rho\sigma_f^{(0)}$, где

$$\sigma^{(0)} = 1, \quad \sigma_s^{(0)} = 0.97, \quad \sigma_f^{(0)} = 0.03, \quad \nu = 2.5, \quad \nu = 1.$$

Для построения реализации среды шар делится на m одинаковых по объему сферических слоев; в каждом слое случайная величина $\rho \equiv \rho_i$ выбирается независимо и равномерно на отрезке $[1 - \varepsilon, 1 + \varepsilon]$.

Для построения эффективного алгоритма метода Монте-Карло на основе леммы 2 в сформулированную модель было введено поглощение с постоянным неслучайным коэффициентом σ_c/ν , который приводит к замене $\lambda \mapsto \lambda - \sigma_c/\nu \forall \sigma$. Отметим, что такой прием является универ-

Таблица 1. Оценки $E\lambda$ и $\sqrt{D\lambda}$

m	Метод Монте-Карло формула (3.3), $\varepsilon = 0.3$		Формула (4.2) $\varepsilon = 0.3$		Формула (4.2) $\varepsilon = 0.1$	
	$E\lambda$	$\sqrt{D\lambda}$	$E\lambda$	$\sqrt{D\lambda}$	$E\lambda$	$\sqrt{D\lambda}$
1	-0.00104 ± 0.00001	0.0143 ± 0.0025	-0.00102	0.014	0.00011	0.0047
6	0.000224 ± 0.000003	0.0065 ± 0.0009	0.00023	0.0066	0.000026	0.0022

сальным и может существенно повысить эффективность весового метода, исключая необходимость ветвления моделируемых траекторий, как это рассмотрено далее.

Используя уравнение переноса (см. [2], [3]), можно сделать замену

$$\sigma_f \mapsto \sigma_f + \sigma_c, \quad v \mapsto v\sigma_f/(\sigma_f + \sigma_c).$$

В численном эксперименте моделировался процесс переноса с константами $\sigma_s^* = \sigma_s$, $\sigma_f^* = \sigma_f + \sigma_c$, $v^* = 1$. Вспомогательные веса при этом определяются формулой $Q_n = [v\sigma_f/(\sigma_f + \sigma_c)]^{n_i}$, где n_i – число делений, предшествующих данному столкновению (см. [5]). Было использовано значение $\sigma_c = 0.059$, для которого $v\sigma_f/(\sigma_f + \sigma_c) < 1$ и тем самым (см. [2], [3]) $\rho(K_p) < 1 \forall \sigma$. Плотность распределения первых столкновений взята в виде

$$f(\mathbf{r}, t) = 2t \exp(-2t) f_d(\mathbf{r}), \quad t > 0, \quad r = |\mathbf{r}| < R, \tag{4.1}$$

где $f_d(\mathbf{r}) = C \sin(\alpha(\rho)r)/r$ – улучшенное диффузионное приближение к пространственной характеристической функции для $\sigma = 1$, $\alpha(1) = 0.3739866$ (см. [8]). Для оценки величин $E\lambda$, $D\lambda$ полагали также $h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = h_0(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r})$, где $h_0(\mathbf{r}) = \sin(\alpha(\rho)r)/r$, причем (см. [8])

$$\alpha(\rho) = [\pi(\sigma_s + v\sigma_f)\rho]/[R(\sigma_s + v\sigma_f) + 0.71044].$$

При этом $J_t = (\Phi, h_0 f_t / f_0)$, т.е. вычисляется функционал от потока частиц. Расчеты показали, что использование таких функциональных параметров алгоритма существенно улучшает сходимость в (2.6) сравнительно с $f_d(\mathbf{r}) \equiv \left(\frac{4}{3}\pi R^3\right)^{-1}$ и даже сравнительно с вариантом, в котором $f(\mathbf{r}, t)$ определяется формулой (4.1), а $h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv 1$. Нетрудно проверить, что для сформулированных выше характеристик вычислительной модели выполняются условия леммы 1.

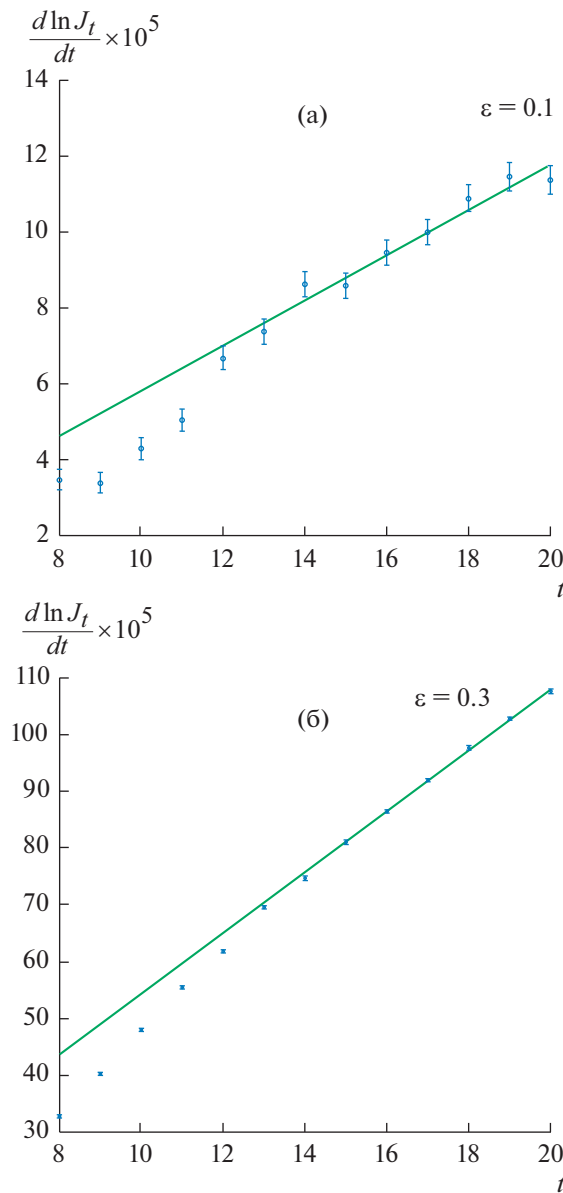
Соответствующие оценки величин $E\lambda$ и $\sqrt{D\lambda}$ приведены в первых двух столбцах табл. 1. Они были получены с помощью распределенных вычислений в ССКЦ СО РАН (Siberian Supercomputer Center SB RAS). Эти оценки определялись на основе установления двух значащих цифр при возрастании t и n с учетом статистической погрешности. Окончательные результаты получены осреднением оценок для моментов времени $t = 17, 18, 19, 20$ при $n = 4$ для $m = 2$ и $n = 2$ для $m = 6$. Это соответствует улучшению свойств оценок при $m \rightarrow \infty$. В качестве погрешности этих оценок приведены среднеквадратические отклонения.

В [5] для рассматриваемой задачи были реализованы также формулы (3.6), которые с учетом равенства $\lambda(\bar{\rho}) = 0$ здесь имеют вид

$$E\lambda \approx \frac{\varepsilon^2}{6} \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 \lambda(\bar{\rho})}{\partial \rho_i^2}, \quad D\lambda \approx \frac{\varepsilon^2}{3} \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial \lambda(\bar{\rho})}{\partial \rho_i} \right)^2. \tag{4.2}$$

Полученные таким образом результаты приведены в двух последних столбцах табл. 1. Их можно рассматривать как тестовые для $\varepsilon = 0.1$, а также для $\varepsilon = 0.3$ при $m = 1; 6$.

4.2. На фиг. 1 приведены графики оценки логарифмической производной (3.4) для $m = 6$ при $\varepsilon = 0.1; 0.3$. Точками обозначены соответствующие значения оценки (3.4), полученные с помощью распределенных вычислений в ССКЦ СО РАН. Приведенные интервальные погрешности



Фиг. 1. Оценка логарифмической производной при $\epsilon = 0.1$ и $\epsilon = 0.3$ и регрессионная аппроксимация (прямая).

представляют собой оценки вида (3.5) среднеквадратических погрешностей. Прямые на фиг. 1 линейно аппроксимируют функцию

$$y(t) = \frac{d \ln J_t}{dt}.$$

Точечные оценки этой функции дают возможность вычислить соответствующие регрессионные (для $15 \leq t_i \leq 20$) оценки $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$ коэффициентов линейной аппроксимации $y(t) \approx \beta t + \alpha$ по известным (см. [10]) формулам

$$\tilde{\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \left(\sum_{j=1}^n t_j^2 - t_i \sum_{j=1}^n t_j \right)}{n \sum_{i=1}^n t_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n t_i \right)^2} = \sum_{i=1}^n A_i y_i,$$

Таблица 2. Аналитические (соответственно (3.2)) и регрессионные оценки коэффициентов

ε	$d^2 \times 10^5$	$\tilde{\beta} \times 10^5$	$\sigma(\tilde{\beta}) \times 10^5$	$a \times 10^5$	$\tilde{\alpha} \times 10^5$	$\sigma(\tilde{\alpha}) \times 10^5$
0.1	0.48	0.5921	0.1920	2.6	-0.0480	3.3597
0.3	4.4	5.3778	0.1941	23	0.6084	3.3975

Таблица 3. Данные ВОЗ и оценки по формуле (4.3)

Дата (2020 г.)	9.03	12.03	15.03	18.03	21.03
Данные ВОЗ	109577	125260	153517	191127	266073
Оценки по формуле (4.3)	109577	125757	152239	194400	261845

$$\tilde{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \left(nt_i - \sum_{j=1}^n t_j \right)}{n \sum_{i=1}^n t_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n t_i \right)^2} = \sum_{i=1}^n B_i y_i.$$

В рассматриваемой задаче случайные величины $\{y_i\}$ положительно коррелированы, поэтому

$$D_\alpha = \sum_{i=1}^n A_i^2 D y_i < D \tilde{\alpha} < \left(\sum_{i=1}^n |A_i| \sqrt{D y_i} \right)^2,$$

$$D_\beta = \sum_{i=1}^n B_i^2 D y_i < D \tilde{\beta} < \left(\sum_{i=1}^n |B_i| \sqrt{D y_i} \right)^2.$$

Анализ полученных на этой основе оценок дисперсий с учетом неполной зависимости величин $\{y_i\}$ показал, что оценки среднеквадратической погрешности величин $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$ можно вычислять по формулам $\sigma(\tilde{\alpha}) \approx 2\sqrt{D_\alpha}$, $\sigma(\tilde{\beta}) \approx 2\sqrt{D_\beta}$. Аналитические и регрессионные оценки коэффициентов линейной аппроксимации функции $d \ln J_t / dt$ приведены в табл. 2. Необходимые при этом значения величин $a = E\lambda$, $d^2 = D\lambda$ определялись по формулам (4.2) (см. табл. 1 и табл. 7 из [3]).

Таким образом, можно констатировать, что здесь в интервале $15 \leq t \leq 20$ аналитическая оценка показателя экспоненциальной асимптотики потока частиц по времени является удовлетворительной. Более точное соответствие статистических оценок коэффициентов их аналитическим значениям при $\varepsilon = 0.1$ можно объяснить лучшей гауссовостью распределения $\lambda(\sigma)$ для этого варианта задачи, согласно теории малых возмущений.

В заключение сделаем замечание о возможности более широкого применения полученных результатов. Они показывают, что скорость роста среднего числа частиц произвольной природы (например, микроорганизмов) при их распределенном размножении в случайной среде может быть сверхэкспоненциальной (см. разд. 3). Это соответствует увеличению коэффициента роста чисел $\{n_i\}$ частиц в фиксированные равноотстоящие моменты времени $\{t_i\}$, т.е. увеличению отношения n_{i+1}/n_i . Однако, если такое увеличение наблюдается экспериментально, то это можно связать с распределенностью “очага” размножения. В частности, согласно статистике ВОЗ (см. [11]) именно так развивалась пандемия COVID-19 в целом по всему миру с 09.03.2020 по 21.03.2020. Соответствующая численность (по дням) с погрешностью, не превышающей 2%, аппроксимируется по формуле типа (3.1) следующим образом:

$$n_i \approx 109577 \exp\{0.002965(i - 9)^2 + 0.037(i - 9)\}, \quad i = 9, 10, \dots, 21. \tag{4.3}$$

Сравнение отдельных значений численности дано в табл. 3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960. 514 с.
2. Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976. 283 с.
3. Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло: учеб. пособие для студ. вузов. М.: Издательский центр “Академия”, 2006. 367 с.
4. Михайлов Г.А. Новые методы Монте-Карло для вычисления критических значений параметров уравнения переноса частиц // Докл. АН СССР. 1993. Т. 332. № 1. С. 21–23.
5. Лотова Г.З., Михайлов Г.А. Моменты параметров критичности процесса переноса частиц в случайной среде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48. № 12. С. 2225–2236.
6. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981.
7. Михайлов Г.А., Лотова Г.З. Алгоритмы метода Монте-Карло для исследования временной асимптотики потока частиц с размножением в случайной среде // Докл. АН. 2020. Т. 490. № 1. С. 47–50.
8. Романов Ю.А. Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для расчета диффузионных задач (усовершенствованный диффузионный метод) // Исследование критических параметров реакторных систем. М.: Госатомиздат, 1960. С. 3–26.
9. Михайлов Г.А. Улучшение многомерных рандомизированных алгоритмов метода Монте-Карло с “расщеплением” // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2019. Т. 59. № 5. С. 822–828.
10. Боровков А.А. Математическая статистика: Учебник—СПб: Издательство “Лань”, 2010. 704 с.
11. Сайт Всемирной организации здравоохранения.
<https://www.who.int/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019/situation-reports/> (дата обращения 18.06.2020)