ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ, 2020, том 490, с. 47–50

МАТЕМАТИКА

УДК 519.676

АЛГОРИТМЫ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВРЕМЕННОЙ АСИМПТОТИКИ ПОТОКА ЧАСТИЦ С РАЗМНОЖЕНИЕМ В СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЕ

© 2020 г. Член-корреспондент РАН Г. А. Михайлов[1,2], Г. З. Лотова[1,2,*]

Поступило 06.06.2019 г.
После доработки 06.06.2019 г.
Принято к публикации 29.10.2019 г.

Работа посвящена исследованию флуктуаций числа частиц, рассеивающихся и размножающихся в случайной среде в зависимости от времени. С этой целью построены рандомизированные алгоритмы метода Монте-Карло для оценки вероятностных моментов параметра соответствующей экспоненциальной асимптотики.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, весовые модификации, теория переноса, временная постоянная размножения частиц

DOI: 10.31857/S2686954320010051

1. Рассматривается для простоты изложения односкоростной нестационарный процесс переноса частиц с изотропным рассеянием. В качестве математической модели процесса используется цепь Маркова $\{x_n\}$, $n = 0,1, \ldots, N$, соответствующих "столкновений" в фазовом пространстве $X = R \times V \times T$ координат, скоростей (с фиксированным значением v модуля) и времени, т.е. $x_n = (\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n, t_n)$, причем $\mathbf{v}_n = \dfrac{v(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1})}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}|}$, $t_n = t_{n-1} + \dfrac{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}|}{v}$. Эта модель определяется плотностью $f(x)$ точки x_0 и плотностью $k(x', x)$ перехода из состояния x' в x, причем

$$\int_X k(x', x)\mathrm{d}x = q(x') \le 1 - \delta, \quad \delta > 0, \tag{1}$$

и тем самым среднее число переходов конечно, например, в ограниченной системе [1]. Заданы $\sigma_s(x)$ и $\sigma_f(x)$ – коэффициенты рассеяния и деления, среднее число ν частиц в точке деления, $\sigma_c(x)$ – коэффициент поглощения. Полный коэффициент ослабления потока частиц $\sigma(\mathbf{r}) = \sigma_s(\mathbf{r}) + \sigma_f(\mathbf{r}) + \sigma_c(\mathbf{r})$ (см. [1]).

Методы Монте-Карло используют для оценки линейных функционалов вида $J_h = (\varphi, h)$, $h \in L_\infty$, где $\varphi(x)$ – плотность столкновений, удовлетворяющая уравнению $\varphi = K\varphi + f$, в котором K – интегральный оператор с ядром $k(x', x)$. При выполнении условия (1) имеем $\|K\|_{L_1} < 1$ и, следовательно, спектральный радиус оператора $\rho(K) < 1$ (см. [1]). Для построения весовой модификации алгоритма используют цепь Маркова с начальной плотностью $f_0(x)$ и плотностью перехода $p(x', x)$, вспомогательные веса

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

и "оценку по столкновениям" $\xi = \sum_{n=0}^{N} Q_n h(x_n)$. Если выполняются "условия несмещенности" [1], то $\mathrm{E}\xi = (\varphi, h)$. Если при этом $\rho(K_p) < 1$, где K_p – оператор с ядром $k^2(x', x)/p(x', x)$, и $f^2/f_0 \in L_1(X)$, то $\mathrm{D}\xi < +\infty$ [1].

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

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

[1]*Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия*
[2]*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия*
**E-mail: lot@osmf.sscc.ru*

можно представить [2] в виде

$$J(t) = \iiint\limits_{RV\,0}^{\infty} f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t-\tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau,$$

где $F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) = \iint\limits_{RV} \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}$.

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. В работе [2] фактически доказана следующая

Л е м м а 1. *Пусть точка* $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ *распределена для* $t_0 \equiv 0$ *с плотностью* $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, $\left|\frac{f^{(m)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})}\right| < C < +\infty$, $m = 0, 1, \ldots, n$, $\rho(K_p) < 1$ *и* $F(x) < C < +\infty$. *Тогда выполняется соотношение* $J^{(m)}(t) = \mathrm{E}\xi_t^{(m)}$, *где*

$$\xi_t^{(m)} = \sum_{n=0}^{N} Q_n h(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n) \frac{f^{(m)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - t_n)}{f_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)}, \quad Q_0 \equiv 1,$$

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

3. Известно, что при выполнении довольно общих условий в случае источника, локализованного в точке $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$, имеет место асимптотическое при $t \to \infty$ соотношение [3, 4]:

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \sim C(\mathbf{r}, \mathbf{v}) e^{\lambda t}, \quad C(\mathbf{r}, \mathbf{v}) < C_0 < +\infty, \qquad (2)$$

где λ – ведущее характеристическое число соответствующего однородного стационарного уравнения переноса с заменой $\sigma_c \mapsto \sigma_c + \frac{\lambda}{|\mathbf{v}|}$. Эти условия, в частности, имеют место для односкоростного процесса переноса частиц в ограниченной среде с достаточно быстро убывающей по времени плотностью источника.

Т е о р е м а 1. *Если выполняются соотношения*

$$\int f^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) e^{-\lambda t} dt < +\infty, \quad n = 0, 1, \qquad (3)$$

соотношение (2) *и условия леммы* 1, *то*

$$\frac{J'(t)}{J(t)} \to \lambda \quad \text{при} \quad t \to +\infty. \qquad (4)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Прямое интегрирование с учетом соотношений (2), (3) дает равенства

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

причем $\varepsilon(t)$, $\varepsilon_1(t) \to 0$ для $t \to +\infty$. Интегрируя функцию $J'(t)$ в пределах $(\tau, +\infty)$ при $\tau \to \infty$ для $\lambda < 0$, получаем $J'(t) = C\lambda e^{\lambda t}[1 + \varepsilon_1(t)]$, т.е. $C_1 = \lambda C$. В случае $\lambda > 0$ тот же результат получается путем введения дополнительного поглощения с коэффициентом $\sigma_c^{(0)} > \frac{\lambda}{|\mathbf{v}|}$. Это завершает доказательство теоремы 1.

4. Определяемую леммой 1 и теоремой 1 оценку метода Монте-Карло можно рандомизировать с целью изучения флуктуаций значения λ для процесса переноса частиц в случайной среде [2]. Будем полагать, что $\sigma(\mathbf{r})$ – случайное поле, причем отношения $\frac{\sigma_s}{\sigma}$, $\frac{\sigma_f}{\sigma}$, а также индикатрисы рассеяния и деления фиксированы. При этом $J(t) := J(t, \sigma)$, $J'(t) := J'(t, \sigma)$ и $\lambda(\sigma) \approx \frac{J'(t, \sigma)}{J(t, \sigma)}$ соответственно теореме 1. В дальнейшем аргумент t будет опускаться, т.е. $J(t, \sigma) \mapsto J(\sigma)$.

Практически важными являются величины $\mathrm{E}\lambda(\sigma)$ и $\mathrm{D}\lambda(\sigma)$. Логически простейший (прямой) способ их оценки методом Монте-Карло состоит в реализации достаточно точных оценок величины $\frac{J'(t, \sigma)}{J(t, \sigma)}$ для выборки σ достаточно большого объема. Однако такой способ может быть слишком трудоемким для реалистических моделей среды и процесса переноса [5]. Поэтому в настоящей работе для построения рандомизированного алгоритма используется соотношение

$$\mathrm{E}\frac{J'(\sigma)}{J(\sigma)} \approx \lambda_n = \mathrm{E}\left[J'(\sigma) \sum_{s=0}^{n} \frac{(-1)^s}{J_0^{s+1}} (J(\sigma) - J_0)^s\right],$$

где $J_0 \approx \mathrm{E}J(\sigma)$.

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: $\lambda_n = \mathrm{E}\tilde{\lambda}_n$, где

$$\tilde{\lambda}_n = \xi'(\Omega_{n+1}, \sigma) \sum_{s=0}^{n} \frac{(-1)^s}{J_0^{s+1}} \prod_{k=1}^{s} (\xi(\Omega_k, \sigma) - J_0). \qquad (5)$$

Для осреднения произведений из (5) целесообразно использовать несовпадающие сочетания по s элементов из группы $\Omega_1, \ldots, \Omega_{i-1}, \Omega_{i+1}, \ldots, \Omega_{n+1}$ после подстановки $\Omega_i \to \Omega_{n+1}$ в (5), в связи с тем, что в качестве выделенной $(n + 1)$-й траектории можно рассматривать любую из совокупности $\{\Omega_i\}$, $i = 1, 2, \ldots, n + 1$. Соответствующие различным сочетаниям произведения и суммы наиболее просто вычислять последовательным пересчетом соответственно возрастанию s. Получаемую таким образом статистическую оценку обозначим через $\tilde{\lambda}_n^{(i)}$. Пусть $\tilde{\lambda}_n^* = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} \tilde{\lambda}_n^{(i)}$.

Теорема 2. *Если выполняются условия леммы* 1, *причем* $\rho(K_p(\sigma)) < 1 - \varepsilon$ $(\varepsilon > 0)$ $\forall\sigma$, *то* $\mathrm{E}\tilde{\lambda}_n^* = \lambda_n$ *и* $\mathrm{D}\tilde{\lambda}_n^* \le \mathrm{D}\tilde{\lambda}_n < +\infty$.

Доказательство строится путем прямого осреднения и оценок на основе сформулированных выше утверждений и условной независимости траекторий $\Omega_1, \ldots, \Omega_{n+1}$.

Оценку $\tilde{\lambda}_n^*$ естественно называть комбинированной. Отметим, что величина $\mathrm{D}\tilde{\lambda}_n^*$ может быть существенно меньше величины $\mathrm{D}\tilde{\lambda}_n$ при $\mathrm{D}\sigma \ll 1$ вследствие слабой коррелированности реализаций произведений в $\tilde{\lambda}_n^*$ для фиксированных значений s.

Аналогичная несмещенная элементарная оценка на основе леммы 1 для $\mu_n \approx \mathrm{E}\left[\frac{J'(\sigma)}{J(\sigma)}\right]^2$ строится по формуле

$$\tilde{\mu}_n = \xi'(\Omega_{n+1},\sigma)\xi'(\Omega_{n+2},\sigma)\times$$
$$\times\sum_{s=0}^{n}\frac{(-1)^s(s+1)}{J_0^{s+2}}\prod_{k=1}^{s}\left(\xi(\Omega_k,\sigma)-J_0\right)$$

с использованием $n+2$ условно независимых траекторий. Более эффективная комбинированная оценка $\tilde{\mu}_n^* = \frac{\sum_{i=1}^{n+1}\mu_n^{(i)}}{n+1}$ строится по аналогии с $\tilde{\lambda}_n^*$ для фиксированного значения $\xi'(\Omega_{n+2},\sigma)$.

Для численного тестирования был рассмотрен односкоростной процесс переноса частиц с изотропным рассеянием (в том числе и после акта деления) в шаре радиуса $R = 7.72043$ с параметрами: σ – случайная величина, равномерно распределенная в интервале (0.7; 1.3);

$$\frac{\sigma_s}{\sigma} \equiv 0.97; \quad \frac{\sigma_f}{\sigma} \equiv 0.03;$$
$$\nu \equiv 2.5; \quad \sigma_c \equiv 0; \quad v = |\mathbf{v}| = 1.$$

Как указано в [2], такой шар при $\sigma \equiv 1$ с достаточной степенью точности критичен. Соответствующая прецизионная оценка величины λ методом Монте-Карло подтверждается расчетами в улучшенном диффузионном приближении [6], которые дали значение λ_d $(\sigma = 1) = 0.000000...$ С использованием этого приближения путем моделирования значений σ были получены следующие тестовые статистические оценки: $\mathrm{E}\lambda_d = -0.00103$, $\mathrm{D}\lambda_d = 0.00022$. Среднеквадратическая погрешность имеет здесь порядок последнего десятичного разряда. Для построения эффективного алгоритма метода Монте-Карло на основе теоремы 2 в сформулированную модель было введено поглощение с постоянным неслучайным коэффициентом σ_c/v, который приводит к замене $\lambda \mapsto \lambda - \frac{\sigma_c}{v}$ $\forall\sigma$. Отметим, что такой прием является универсальным и может существенно повысить эффективность весового метода, исключая необходимость ветвления моделируемых траекторий, как это видно из дальнейшего.

Используя уравнение переноса (см., например, [1, 2]), можно сделать замену $\sigma_f \mapsto \sigma_f + \sigma_c$, $\nu \mapsto \frac{\nu\sigma_f}{(\sigma_f + \sigma_c)}$. В численном эксперименте моделировался процесс переноса с константами: $\sigma_s^* = \sigma_s$, $\sigma_f^* = \sigma_f + \sigma_c$, $\nu^* = 1$. Вспомогательные веса при этом определяются формулой $Q_n = \left(\frac{\nu\sigma_f}{\sigma_f + \sigma_c}\right)^{n_1}$, где n_1 – число делений, предшествующих данному столкновению [1]. Было использовано значение $\sigma_c = 0.059$, для которого $\frac{\nu\sigma_f}{\sigma_f + \sigma_c} < 1$ и тем самым [1] $\rho(K_p) < 1$ $\forall\sigma$. Плотность распределения первых столкновений взята в виде

$$f(\mathbf{r},t) = 2t\exp(-2t)f_d(\mathbf{r}), \quad t > 0, \quad r = |\mathbf{r}| < R, \quad (6)$$

где $f_d(\mathbf{r}) = \frac{C\sin(æ r)}{r}$ – диффузионное приближение к пространственной характеристической функции для $\sigma = 1$, $æ = 0.3739866$ [6]. Полагали также $h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv \frac{\sin(æ(\rho)r)}{r}$, где (см. [6])

$$æ(\rho) = \frac{\pi(\sigma_s + \nu\sigma_f)\rho}{R(\sigma_s + \nu\sigma_f) + \alpha}.$$

Расчеты показали, что использование таких функциональных параметров алгоритма существенно улучшает сходимость в (4) сравнительно с $f_d(\mathbf{r}) \equiv \left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)^{-1}$ и даже сравнительно с вариантом, в котором $f(\mathbf{r}, t)$ определяется формулой (6), а $h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv 1$.

Нетрудно проверить, что для сформулированных выше характеристик вычислительной модели выполняются условия теорем 1, 2, и она тем самым позволяет построить оценку значений $\mathrm{E}\lambda$ и $\mathrm{D}\lambda$. Для построения статистических оценок этих величин было реализовано 16×10^9 случайных значений оптической плотности σ; моделирование траекторий осуществлялось параллельно на восьми процессорах Intel Core i7-3930K. При этом полагали $n = 5$, т.е. для оценки $\mathrm{E}\lambda$ использовали шесть, а для оценки $E\lambda^2$ — семь условно-независимых траекторий частиц. Результативные оценки определялись на основе анализа установления (с учетом вероятностной погрешности) двух старших значащих цифр при возрастании параметров t и n. Таким образом получены следующие результативные оценки: $E\lambda = -0.00104 \pm 0.00001$ и $D\lambda = 0.00020 \pm 0.00007$ для $t = 10$, $n = 4$. В качестве погрешности здесь приведено среднеквадратическое отклонение. Эти оценки вполне соответствуют диффузионным, достаточная точность которых проверена лишь для $\sigma = 1$.

Отметим, что полученные результаты переносятся на случай многоскоростного процесса переноса с анизотропным рассеянием соответственно [2].

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ 18–01–00599, 18–01–00356.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др.* Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976.
2. *Лотова Г.З., Михайлов Г.А.* Новые методы Монте-Карло для решения нестационарных задач теории переноса излучения // ЖВМиМФ. 2002. Т. 42. № 4. С. 569–579.
3. *Дэвисон Б.* Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960.
4. *Марчук Г.И.* Методы расчета ядерных реакторов. М.: Госатомиздат, 1961.
5. *Larmier C., Zoia A., Malvagi F., Dumonteil E., Mazzolo A.* Neutron Multiplication in Random Media: Reactivity and Kinetics Parameters // Annals of Nuclear Energy. 2018. V. 111. P. 391–406. https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.09.006
6. *Романов Ю.А.* Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для расчета диффузионных задач. В кн.: Исследование критических параметров реакторных систем. М.: Атомиздат, 1960. С. 3–26.

MONTE CARLO ALGORITHMS FOR ESTIMATING THE TIME ASYMPTOTICS OF MULTIPLICATION PARTICLE FLUX IN A RANDOM MEDIUM

Corresponding Member of the RAS G. A. Mikhailov[1,2] and G. Z. Lotova[1,2]

[1]*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russian Federation*

[2]*Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation*

Received June 6, 2019

The paper is focused on investigating the fluctuations of the number of scattering and multiplying particles in a random medium dependently on time. For this purpose randomized Monte Carlo algorithms for estimating the probabilistic moments of the corresponding exponential asymptotic parameter are constructed.

Keywords: Monte Carlo method, weight modifications, transfer theory, time constant