

УДК 519.245

ОПТИМИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННО-СТАТИСТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ОЦЕНКИ СРЕДНЕГО ПОТОКА ЧАСТИЦ В СЛУЧАЙНОЙ РАЗМНОЖАЮЩЕЙ ОГРАНИЧЕННОЙ СРЕДЕ¹⁾

© 2024 г. Г. З. Лотова^{1,2,*}, Г. А. Михайлов^{1,2,***}, С. А. Роженко^{1,***}

¹630090 Новосибирск, пр-т Акад. Лаврентьева, 6, ИВМиМГ СО РАН, Россия

²630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1, НГУ, Россия

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

**e-mail: gam@sscc.ru

***e-mail: sergroj@mail.ru

Поступила в редакцию 16.05.2024 г.

Переработанный вариант 16.05.2024 г.

Принята к публикации 26.07.2024 г.

Изучаются аппроксимации случайных функций, численно моделируемые для исследования стохастического процесса переноса частиц, включая задачи о флуктуациях критичности процесса в случайных размножающих средах. Сформулирована простейшая сеточная модель изотропного случайного поля, воспроизводящая эффективную среднюю корреляционную длину, что обеспечивает высокую точность решения стохастических задач переноса при малом корреляционном масштабе. Предлагаемые алгоритмы апробированы при решении тестовой задачи оценки сверхэкспоненциального среднего потока частиц в случайной размножающей среде. Библ. 18. Фиг. 1. Табл. 6.

Ключевые слова: численное статистическое моделирование, случайная среда, поле Вороного, сеточная аппроксимация, поток частиц, сверхэкспоненциальная асимптотика, погрешность оценок, трудоемкость вычислений.

DOI: 10.31857/S0044466924110148, **EDN:** KFNRZF

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1. В ряде работ изучается поток частиц (квантов излучения), осредненный по реализациям рассеивающей и размножающей случайной среды (см., например, [1]–[5]). Это практически важно потому, что при выполнении соответствующего свойства эргодичности такое осреднение эквивалентно осреднению измеряемой величины (например, яркости) по поверхности достаточно протяженных детектора или источника частиц; необходимым также является изучение параметров критичности для случайно возмущенных размножающих сред. Исследования проводятся, в частности, для так называемых “мозаичных” моделей однородных изотропных случайных полей (сред) с известными корреляционными функциями, которые в значительной степени определяют осредненную вероятность прохождения частицы через слой вещества при заданном одномерном (т. е. одноточечном) распределении поля (см. [6]).

В работе [6] представлены две модели “мозаичных” случайных полей, которые строятся на основе специального разбиения пространства на ячейки со случайным выбором значения поля в каждой ячейке, согласно некоторому распределению (независимо от остальных ячеек).

Для построения модели, называемой мозаичным полем Пуассона, пространство разбивается на ячейки ансамблем базовых гиперплоскостей, в котором гиперплоскость определяется точкой пуассоновского точечного потока интенсивности τ_p во вспомогательном параметрическом пространстве. Точка этого пространства объединяет расстояние от заданного центра до базовой гиперплоскости и значение ее “внешней” нормали. Геометрические свойства таких разбиений детально изучены в [2] (см. также [4], [5], [7]). В работе [5] (см. также [8]) построено кусочно-постоянное двумерное мозаичное поле Пуассона и показано, что его корреляционная функция экспоненциальна. В работе [4] дано l -мерное обобщение такого поля, то есть построено l -мерное кусочно-постоянное экспоненциально коррелированное мозаичное поле. В [4] также показано, что мозаичное поле Пуассона является однородным и изотропным в “узком” смысле.

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект FWNM-2022-0002).

Основная рассматриваемая здесь модель, называемая далее мозаичным полем Вороного, строится на основе пуассоновского точечного потока интенсивности τ_v , который определяет разбиение пространства на ячейки, каждая из которых является множеством точек наиболее близких к одной из точек потока (диаграмма Вороного).

Обозначим $\rho(\mathbf{r}; P)$ – мозаичное поле Пуассона, $\rho(\mathbf{r}; V)$ – мозаичное поле Вороного, $\mathbf{r} \in R^3$. Для реализации поля $\rho(\mathbf{r}; V)$ строится пуассоновский точечный поток в пространстве R^3 с параметром τ_v , а для $\rho(\mathbf{r}; P)$ – точечный поток в пространстве $R^+ \times S^{(3)}$ с параметром τ_p , где $S^{(3)}$ – единичная сфера в R^3 с центром в начале координат. Для обоих полей пространство R^3 разбивается на ячейки, как указано выше, и для каждой ячейки независимо выбирается случайное постоянное в ячейке значение поля $\rho(\mathbf{r})$, согласно некоторому распределению с конечной дисперсией. Отметим, что для поля Пуассона каждая подобласть полностью определяется (идентифицируется) набором

$$(\gamma_1, \dots, \gamma_k, \dots), \quad \gamma_k = \text{sign}(F_k(\mathbf{r})),$$

где $F_k(\mathbf{r}) = (\mathbf{n}_k, (h_k \mathbf{n}_k - \mathbf{r})) = 0$ – уравнение соответствующей плоскости Γ_k , заданное скалярным произведением, h_k – расстояние от начала координат до гиперплоскости, \mathbf{n}_k – значение “внешней”, т.е. направленной от начала координат, нормали к Γ_k , а \mathbf{r} – произвольная точка подобласти. Алгоритм построения реализации трехмерного поля Пуассона более детально описан в [4] (см. также [9]).

Особую роль в прикладных исследованиях играет величина $L = \int_0^\infty K(r)dr$, где $K(r)$ – нормированная корреляционная функция, то есть коэффициент корреляции между $\rho(\mathbf{r})$ и $\rho(\mathbf{r}')$ при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r$. Эту величину иногда называют корреляционной длиной в связи с тем, что для простейшей “ступенчатой” аппроксимации $K(r) \approx K_h(r) = \chi(0, h)$ выполняется равенство $L = h$, где $\chi(a, b)$ – индикатор интервала (a, b) .

В случае изотропного поля величину L называют также радиусом корреляции. Для неизотропного однородного поля L зависит от направления вектора $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Соответствующее осреднение дает возможность приближенного распространения результатов настоящей работы на слабо неизотропные поля.

Для мозаичных случайных полей $K(r) = P(A_r)$, где $P(A_r)$ – вероятность события, состоящего в том, что точки \mathbf{r} и \mathbf{r}' при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r$ находятся в одной ячейке. В [7] для поля Вороного фактически получено выражение $K(r)$, которое авторами настоящей работы было представлено в более удобном для вычислений виде:

$$K(r) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 2\pi R^2 \tau_v \exp\left(\tau_v \left(-\frac{4}{3}\pi R^3 - V_s(R(1-s)) + V_s(r_1 + r - Rs)\right)\right) ds dR,$$

где функция $V_s(u) = \pi u (3R^2(1-s^2) + u^2) / 6$, а $r_1 = \sqrt{R^2 + r^2 - 2Rrs}$. Отсюда для этого поля корреляционная длина $L_v \approx 0.45915\tau_v^{-1/3}$.

Для мозаичного поля Пуассона $P(A_r) = e^{-\pi\tau_p r}$ (см., например, [2], [4]), т.е. корреляционная функция является экспоненциальной. Следовательно корреляционная длина $L_p = 1/(\pi\tau_p)$. Хотя $K(r)$ для мозаичного поля Вороного не является экспоненциальной функцией [7], однако расчеты показали, что она близка к ней.

Поле Вороного является геометрически (и физически) более естественным и проще приближенно реализуется сравнительно с полем Пуассона в рассматриваемой ограниченной области D . Поэтому для верификации представленной далее компьютерно экономичной приближенной сеточной модели случайной функции была использована “мозаика” Вороного. При этом учитывалось, что вспомогательный пуассоновский точечный поток следует моделировать в несколько расширенной области, вводя пограничный слой толщины kL с соответствующей поправкой осредненной корреляционной длины. Такую модель назовем kL -усеченным полем Вороного.

2. СЕТОЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ $\rho_h(\mathbf{r})$ ОДНОРОДНОГО СЛУЧАЙНОГО ПОЛЯ $\rho(\mathbf{r})$

2.1. Основанный на рандомизации алгоритма максимального сечения (см. [10]), сформулированный в [11] КР-алгоритм реализует вычислительную аппроксимацию процесса переноса. Он весьма экономичен, так как не требует реализации поля $\rho(\mathbf{r})$ в целом и двойной рандомизации. Однако этот алгоритм в основном эффективен для существенно анизотропного рассеяния при условии, что $L < 0.4/\sigma_{\max}$, где σ_{\max} – параметр алгоритма такой, что для коэффициента $\sigma(\mathbf{r})$ ослабления излучения выполняется соотношение $\sigma(\mathbf{r}) \leq \sigma_{\max}$, $\mathbf{r} \in D$ [11]. Недостатком КР-алгоритма является также невозможность оценки физически значимой величины дисперсии $D(\zeta|\rho)$ вычисляемой оценки ζ за исключением бернуlliевой оценки с малым параметром $p = E\zeta$.

Эти соображения (см. [12]) определили мотивацию разработки компьютерно экономичной сеточной аппроксимации поля плотности $\rho_h(\mathbf{r})$, которая фактически представляет собой геометрически детерминированную

стохастическую мозаику, аналогичную полю Вороного и в определенном далее смысле аппроксимирующую его.

Сеточная аппроксимация (сеточная мозаика) $\rho_h(\mathbf{r})$ строится на основе разбиения пространства R^3 прямоугольной сеткой, т.е. на кубики $\{S_h\}$ со стороной h . Для каждого элемента S_h независимо реализуется случайное значение ρ соответственно заданному одномерному распределению поля $\rho(\mathbf{r})$. Осредненное значение l_h корреляционной длины для поля $\rho_h(\mathbf{r})$ строится по формуле

$$l_h = \frac{h^{-3}}{4\pi} \int \int_{S_h} l_{S_h}(\mathbf{r}, \omega) d\mathbf{r} d\omega,$$

где $l_{S_h}(\mathbf{r}, \omega)$ – расстояние от точки \mathbf{r} до границы кубика S_h в направлении ω . Ясно, что выполняются равенства

$$L = l_h = h l_1, \quad h = L/l_1,$$

причем достаточно точные вычисления дали значение $l_1 = 0.448317$ с погрешностью, не превышающей 0.000001.

Трудоемкость (сложность) мозаики $\rho_h(\mathbf{r})$ существенно меньше трудоемкости мозаики Вороного, так как для определения значения поля в данной точке не требуется перебора значений ρ для всех элементов сетки. Номер элемента прямоугольной сетки, в которой находится точка $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ определяется очевидным образом с помощью стандартной встроенной функции вычисления целой части (например, $\text{floor}(x_i/h)$ в C++). Для экономии компьютерного времени можно реализовать сеточные значения $\rho_h(\mathbf{r})$ по мере необходимости, зануляя соответствующий массив данных в начале траектории частицы.

2.2. Известно (см., например, [13]), что трудоемкость алгоритма метода Монте-Карло определяется величиной $S(\zeta) = T_\zeta D_\zeta$, где T_ζ – среднее время моделирования на ЭВМ для получения одного выборочного значения ζ . Если для каждой реализации поля моделировать m условно-независимых траекторий частиц, то согласно “формуле полной дисперсии” (см., например, [13]), величину дисперсии соответствующего среднего значения ζ_m можно представить в виде

$$D = D_{\zeta_m} = D_0 + \frac{D_1}{m}, \quad D_0 = \text{DE}(\zeta|\rho), \quad D_1 = \text{ED}(\zeta|\rho), \quad (2.1)$$

где D_0 – физически значимая дисперсия оценки по флуктуациям поля ρ , а D_1 – среднее значение условной дисперсии по траекториям Ω для фиксированной реализации поля ρ . Отметим, что здесь D – “элементарная” дисперсия (на одну траекторию). Выполняется очевидное соотношение для среднего времени реализации оценки ζ_m :

$$T_{\zeta_m} = T_0 + mT_1, \quad (2.2)$$

где T_0 – среднее время, затрачиваемое на реализацию случайного поля, а T_1 – среднее время, затрачиваемое на моделирование одной случайной траектории. Величина трудоемкости $S(\zeta_m)$ в этом случае, как функция от m , имеет минимум в точке (см., например [13])

$$m_{\text{opt}} = \sqrt{\frac{T_0 D_1}{T_1 D_0}}, \quad \text{и} \quad S(\zeta_{m_{\text{opt}}}) = \left(\sqrt{T_0 D_0} + \sqrt{T_1 D_1} \right)^2.$$

Значение m_{opt} можно оценить, сделав два предварительных расчета для $m = 1$ и $m > 1$, подставив полученные значения для D_{ζ_1}, D_{ζ_m} в (2.1) и найдя решение системы из двух линейных уравнений для D_0, D_1 . Аналогичным способом определяются значения T_0, T_1 из (2.2) для полученных из расчетов значений T_{ζ_1}, T_{ζ_m} . Отметим еще раз, что D_0 – физически значимая дисперсия в то время, как D “элементарна”.

3. ЭФФЕКТИВНЫЙ КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ РАДИУС L_{eff} ДЛЯ ОГРАНИЧЕННОЙ СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЫ

3.1. Здесь рассматриваются приближенно однородные изотропные случайные среды типа указанного в конце введения L -усеченного поля Вороного. Численное статистическое моделирование процесса переноса излучения в таких средах показало, что средние значения функционалов при этом в значительной степени определяются значениями L_{eff} осредненной корреляционной длины, которое для мозаичного поля оптической плотности в выпуклой области $\mathbf{D} \subset R^3$ вычисляется по формуле (см. [14])

$$L_{\text{eff}} = E \int_{\mathbf{D}} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} I_S(\mathbf{r} + t\omega) f(\mathbf{r}, \omega) dt d\omega d\mathbf{r}. \quad (3.1)$$

Здесь $S \subset \mathbf{D}$ — элемент мозаики, содержащий точку \mathbf{r} , I_S — индикатор области S , $f(\mathbf{r}, \omega)$ — аппроксимация средней плотности потока частиц (если известна, иначе $f(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{D}|}$, т. е. \mathbf{r} выбирается равномерно в \mathbf{D} , а направление ω изотропно).

Для мозаики с выпуклыми элементами (например, Вороного, Пуассона)

$$L_{\text{eff}} = E \int_{\Omega} \int_{\mathbf{D}} h_S(\mathbf{r}, \omega) f(\mathbf{r}, \omega) d\omega d\mathbf{r}, \quad (3.2)$$

где $h_S(\mathbf{r}, \omega)$ — расстояние от точки \mathbf{r} до границы содержащего \mathbf{r} элемента мозаики вдоль направления ω .

Формула (3.2) допускает простую геометрическую интерпретацию: L_{eff} — среднее расстояние от случайной точки до границы соответствующего элемента мозаики в случайном направлении. Именно на этой основе определяется значение L для однородного изотропного случайного поля (см., например, [7]). Такая интерпретация показывает, что при использовании усеченного мозаичного поля плотности для моделирования переноса излучения в ограниченной случайной среде следует определять L_{eff} путем осреднения расстояний $h_S(\mathbf{r}, \omega)$ (или более общих из (3.1) для “невыпуклой” мозаики) с учетом влияния границы области \mathbf{D} . Ясно, что это влияние ослабевает при $L \rightarrow 0$, однако пренебрегать им нецелесообразно, как показывает приведенное далее решение задачи об оценке динамики средней интенсивности односкоростного излучения в шаре со случайной плотностью. Заметим, что геометрическая интерпретация величины L_{eff} дает возможность построения сеточной аппроксимации однородного неизотропного поля с параметрами L_x, L_y, L_z .

3.2. Моделировался односкоростной процесс переноса частиц в шаре радиуса $R = 7.72043$ со случайной плотностью $\rho = \rho(\mathbf{r})$ и макроскопическими сечениями $\rho\sigma^{(0)}, \rho\sigma_s^{(0)}, \rho\sigma_f^{(0)}$, причем (см. [12])

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

Одномерное распределение поля $\rho(\mathbf{r})$ равномерно на отрезке $[1 - \varepsilon, 1 + \varepsilon]$. При $\rho \equiv 1$ шар критичен: $\lambda = 0 \pm 10^{-7}$, где λ — параметр асимптотики полного потока: $J(t, \rho) \sim e^{\lambda(\rho)t}$.

Для построения эффективных алгоритмов метода Монте-Карло в сформулированную модель было введено поглощение с постоянным неслучайным коэффициентом σ_c/v , который приводит к замене $\lambda \mapsto \lambda - \sigma_c/v \forall \sigma(\mathbf{r}, v)$, как указано в [12]. Следовательно, получаемые асимптотические оценки необходимо преобразовывать по формулам: $\tilde{I}(t) := \tilde{I}(t)e^{\sigma_c t}$, $(\ln \tilde{I}(t))' := (\ln \tilde{I}(t))' + \sigma_c$, где $I(t) = EJ(t, \rho)$. Как и в [12] было использовано осреднение, состоящее в том, что моделировался процесс с константами $\sigma_s^* = 0$, $\sigma_f^* = \rho\sigma_s + \rho\sigma_f + \sigma_c$, $v^* = 1$, а вес в каждой точке физического столкновения домножался на величину

$$q^*(\rho) = \frac{\sigma_s + v\sigma_f}{\sigma_s + \sigma_f + \sigma_c/\rho} \leq \frac{\sigma_s + v\sigma_f}{\sigma_s + \sigma_f + \sigma_c/(1 + \varepsilon)} = 1$$

при $\sigma_c = \sigma_f(v - 1)(1 + \varepsilon)$.

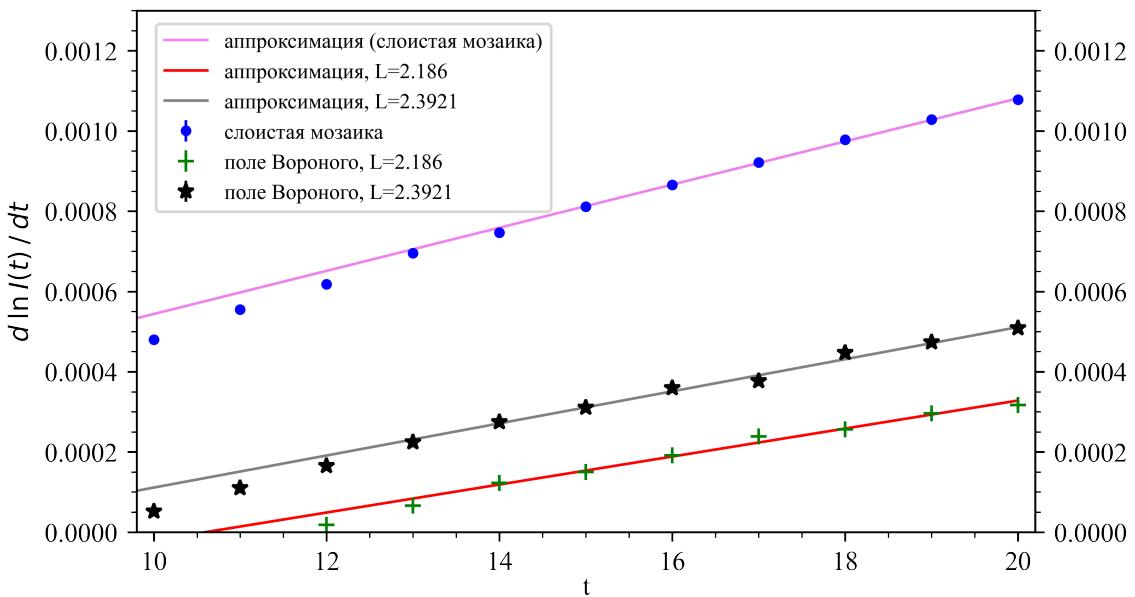
В расчетах, был использован метод максимального сечения с $\sigma_{\text{max}} = 1 + \varepsilon + \sigma_c$, оценка по столкновениям $\xi = \sum_{n=0}^N Q_n q(\mathbf{r}_n, \omega_n)$ (см. [13]) и функция Грина по времени t для оценки функции $d \ln I(t)/dt$ с помощью двойной рандомизации полного потока (см. [12]).

Плотность распределения первых столкновений была взята в виде $f_0(\mathbf{r}, t) = 4t \exp(-2t)g(\mathbf{r})$, $t > 0$, $r = |\mathbf{r}| < R$, где $g(\mathbf{r}) = C \sin(\alpha\pi)/r$ — улучшенное диффузионное приближение к пространственной характеристической функции для $\sigma = 1$, $\alpha = 0.3739866$ (см. [16]). В каждой точке столкновения в зависимости от времени t определялась величина $q(\mathbf{r}, \omega) = q_1(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r}, v)$, где $q_1(\mathbf{r}) = \sin(\alpha\pi)/r$. При этом $E\xi = (\Phi, q)$, то есть вычислялся функционал от потока частиц $\Phi(\mathbf{r}, \omega)$. Расчеты показали, что использование таких функциональных параметров алгоритма существенно ускоряет исследуемую здесь асимптотическую сходимость функции $I(t)$ при $t \rightarrow \infty$.

Сформулированная таким образом задача предварительно решалась для двух вариантов случайного поля $\rho(\mathbf{r})$.

1) Сферическая слоистая мозаика, для реализации которой шар радиуса R разбивался на шесть равнообъемных слоев, в каждом из которых независимо выбиралось значение ρ равномерно в интервале $[1 - \varepsilon, 1 + \varepsilon]$ при $\varepsilon = 0.3$. Соответствующее значение $L_{\text{eff}}^{(s)}$, вычисленное по формуле (3.1), оказалось равным 2.18605. Здесь и далее в качестве веса $f(\mathbf{r}, \omega)$ для вычисления L_{eff} использовано диффузионное приближение $g(\mathbf{r})$ к характеристической функции.

2) L -усеченное поле Вороного, для которого полагали $L = 2.186$, имея в виду, что шар достаточно большой и приближенно выполняется равенство $L_{\text{eff}}^{(V)} \approx L$.



Фиг. 1. Оценки логарифмической производной и линейная аппроксимация.

Таблица 1. Регрессионные оценки коэффициентов a и d^2

	Слоистая мозаика	Поле Вороного	
		$L = 2.3921$	$L = 2.186$
$\tilde{a} \times 10^5$	-0.36 ± 2.11	-28.9 ± 3.72	-36.6 ± 5.12
$\tilde{d}^2 \times 10^5$	5.44 ± 0.12	4.01 ± 0.21	3.51 ± 0.30

Полученные в [14] для этих вариантов, а также здесь для варианта с точным значением L_{eff} , результаты представлены графиками на фиг. 1 и в табл. 1. Они показывают некоторое, хотя и малое, различие оценок для разных вариантов поля ρ и целесообразность уравнивания величины L_{eff} при аппроксимации однородного изотропного поля в ограниченной области $\mathbf{D} \subset \mathbb{R}^3$. В качестве погрешностей в табл. 1 и далее даны их среднеквадратические оценки (“одна сигма”).

3.3. С целью указанного уравнивания значений L_{eff} было определено значение параметра $L = 0.45915 \tau^{-1/3}$ для L -усеченного поля Вороного, которое обеспечивает равенство $L_{\text{eff}}^{(V)} = 2.18605$ для шара R (как и в сферической мозаике). Возможность оценки $L_{\text{eff}}^{(V)}$ по формуле (3.2) вытекает из следующего утверждения.

Лемма 3.1. Пусть $\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m$ — начальная часть базового пуассоновского точечного потока. Тогда соответствующий точке \mathbf{r}_0 выпуклый элемент мозаики Вороного ограничен совокупностью плоскостей (внутренняя часть ансамбля)

$$\left(\frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i}{2}, \mathbf{r}' \right) = \left(\frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i}{2}, \frac{\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_i}{2} \right), \quad i = 1, \dots, m, \quad \mathbf{r}' \in \mathbb{R}^3. \quad (3.3)$$

Доказательство. Для $m = 1$ утверждение леммы очевидно; далее доказательство строится по индукции, так как пересечение “ближайших” к точке \mathbf{r}_0 полупространств сохраняет это ее преимущество перед остальными точками и свойство выпуклости.

Таким образом, для выпуклой области \mathbf{D} величина $h_S(\mathbf{r}, \omega)$ в (3.2) равна минимальному значению расстояний от \mathbf{r} в направлении ω до поверхности \mathbf{D} , а также до плоскостей (3.3), которые определяются формулами вида:

$$t_i = \frac{d_i - ((\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i), \mathbf{r})}{((\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i), \omega)}, \quad d_i = \left((\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i), \frac{\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_i}{2} \right).$$

В данном случае оказалось, что $L_{\text{eff}}^{(V)} = 2.18605$ при $L = 2.3921$, т.е. для интенсивности базового пуассоновского потока $\tau = 0.00707173$. Результаты расчетов для такого варианта L -усеченного поля Вороного представ-

лены на фиг. 1. Они демонстрируют целесообразность уравнивания значений L_{eff} при построении аппроксимаций случайных полей.

4. “СЛОИСТЫЙ” АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОЛЯ ВОРОНОГО

4.1. Тестовая задача из предыдущего раздела решалась с использованием L -смещенного поля Вороного, которое строилось на основе базового точечного пуассоновского потока с интенсивностью τ в шаре $S_L = \{\mathbf{r} \in R^3 : |\mathbf{r}| \leq R + L\}$ с $L = 0.45915\tau^{-1/3}$. Для этого сначала выбиралось значение пуассоновской случайной величины η_Λ с параметром $\Lambda = \frac{4}{3}\pi(R+L)^3\tau$ (пуассоновская мера шара S_L), а затем моделировалось η_Λ независимых точек $\{\mathbf{r}_k\}$ равномерно в этом шаре.

Однако для сферической области \mathbf{D} может быть более удобным следующий “слоистый”, фактически одномерный алгоритм моделирования поля Вороного, предложенный в [15].

4.2. “Слоистый” алгоритм построения поля Вороного в шаре S_L .

Обозначим $\{\mathbf{r}_i\}$ — пуассоновский поток, расставленный по возрастанию величины $r = |\mathbf{r}|$, $r_0 = 0$; $V(r)$ — объем шара радиуса r ; $\delta V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}) = V(r) - V(r_i)$, $r \geq r_i$; $k_i(r)$ — число точек потока в слое $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r})$;

$$\mathcal{F}_r(x) = P(r < x | r_i) = 1 - P(r \geq x | r_i) = 1 - P(k_i(x) = 0) = 1 - \exp(-\tau \delta V(r_i, r)).$$

Отсюда $\delta V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{i+1}) = -\ln \alpha / \tau$, где α — случайное число, равномерно распределенное в $(0, 1)$, и

$$r_{i+1}^3 = -\frac{3 \ln \alpha}{4\pi\tau} + r_i^3.$$

Построение реализации фактически закончено при $r_{i+1} > R + L$. Соответствующие точки $\{\mathbf{r}_i\}$ вычисляются по формулам $\mathbf{r}_i = \omega_i r_i$, где ω_i — реализация единичного изотропного вектора $(\omega_i^{(1)}, \omega_i^{(2)}, \omega_i^{(3)})$ [10]:

$$\omega_i^{(1)} = 1 - 2\alpha_1 = \mu, \quad \omega_i^{(2)} = \sqrt{1 - \mu^2} \sin(2\pi\alpha_2), \quad \omega_i^{(3)} = \sqrt{1 - \mu^2} \cos(2\pi\alpha_2).$$

В работе [15] также показано, что при моделировании траектории частицы методом максимального сечения слоистый алгоритм может дать “неурезанную” (статистически точную) реализацию поля Вороного, если выполняется следующее “правило остановки”. Введем обозначения: $\mathbf{r}_n^{(c)}$ — очередная точка столкновения, r — минимальное расстояние от $\mathbf{r}_n^{(c)}$ до точек $\{\mathbf{r}_k\}$, $k = 1, \dots, i$, уже реализованной части базового пуассоновского потока. Простые геометрические соображения показывают, что при $|\mathbf{r}_{i+1}| \geq r + |\mathbf{r}_n^{(c)}|$ значение r не изменится, т. е. величина r определяет “ячейку” Вороного и тем самым значение случайной плотности в точке $\mathbf{r}_n^{(c)}$; если же $|\mathbf{r}_{i+1}| < r + |\mathbf{r}_n^{(c)}|$, то “слоистая” выборка продолжается.

В заключение этого раздела отметим, что с помощью сформулированных алгоритмов были вычислены значения $L_{\text{eff}}^{(V)}$ для задачи из предыдущего раздела, причем для второго из них использовался длиннопериодный датчик случайных чисел по методу вычетов (см. [17]), а для первого — хорошо известный датчик Mersenne twister. Они оба дали значение 2.01079 с погрешностью порядка 0.00001. Таким образом, был реализован многомерный тест моделирования трехмерного случайного поля Вороного.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЕРХЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО РОСТА СРЕДНЕГО ПОТОКА ЧАСТИЦ ПРИ $\sigma(\mathbf{r}, v) \leq \sigma_{\max} < +\infty$

5.1. В условиях задачи из разд. 3 предполагается, что коэффициент ослабления $\sigma(\mathbf{r}, v) = \sigma_0(\mathbf{r}, v)$ — однородное изотропное случайное поле (при $\mathbf{r} \in R^3$), причем отношения σ_s/σ , σ_f/σ фиксированы. Далее в этом разделе символом σ обозначается введенное таким образом случайное поле $\sigma(\mathbf{r}, v)$.

Как и в [12] полагаем, что $J(t, \sigma) \sim e^{\lambda(\sigma)t}$ при $t \rightarrow \infty$. Соответственно этому, предполагая гауссовость случайной величины $\lambda(\sigma)$ и равномерность (по σ) предельного перехода $J(t, \sigma) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} C(\sigma)e^{\lambda(\sigma)t}$, можно оценить асимптотику функции $EJ(t, \sigma) = I(t)$ в некотором интервале ($T_\lambda < t < T^*$):

$$I(t) \approx \frac{C}{\sqrt{2\pi}d} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(tu) \exp\left(-\frac{(u-a)^2}{2d^2}\right) du \approx C \exp\left(\frac{d^2}{2}t^2 + at\right), \quad (5.1)$$

где $a = E\lambda(\sigma)$, $d^2 = D\lambda(\sigma)$. При этом также предполагается, что множители $C(\sigma)$ и $e^{\lambda(\sigma)t}$ в асимптотике слабо коррелированы и, следовательно, $C \approx EC(\sigma)$.

Определяемый формулой (5.1) закон роста среднего числа частиц можно назвать “суперэкспоненциальным”. Отметим, что формула (5.1) может служить основой для численных исследований конкретных вариантов задачи при $t < T^* < +\infty$ [12]. Эти исследования позволяют эвристически приближенно выделить следующие интервалы времени:

- $(0, T_\lambda)$ – доасимптотический интервал влияния начальной плотности;
- (T_λ, T^*) – интервал суперэкспоненциальной асимптотики типа (5.1);
- $(T^*, +\infty)$ – интервал перехода к предельной асимптотике $(\ln I(t))' \sim \lambda_{\max}$.

Здесь $\lambda_{\max} = \lambda(\sigma_{\max})$. Интервал (T_λ, T^*) был, в частности, определен для сферически слоистой случайной мозаики (см. разд. 3), которая позволила достаточно точно оценить величины $a \approx E\lambda(\sigma)$ и $d^2 \approx D\lambda(\sigma)$ (см. [12]). В связи с исследованием суперэкспоненты в [12] доказана (для специальной сеточной модели σ) теорема о необходимой при этом гауссовой асимптотике распределения величины $\lambda(\sigma)$.

Интервал $(T^*, +\infty)$ определяется в [12] и далее для задачи с ограниченным случайным полем. Возможность реализации такого интервала показывает следующее (см. [12]) утверждение.

Лемма 5.1. *Пусть для $0 < \varepsilon < \sigma_{\max}$ с вероятностью $p(\varepsilon) > 0$ выполняются соотношения $\sigma \geq \sigma_{\max} - \varepsilon$ и, соответственно, $\lambda(\sigma) \geq \lambda_{\max} - \delta(\varepsilon)$, где $\delta(\varepsilon) > 0$ – монотонно убывающая непрерывная функция, причем $\delta(0) = 0$. Тогда*

$$\frac{d \ln I(t)}{dt} \sim \lambda_{\max}, \quad t \rightarrow +\infty.$$

Сказанное выше и анализ результатов численного моделирования (см. разд. 3 и [12]) показывают целесообразность сформулированной в [12] асимптотической аппроксимации (см. далее (5.2)).

5.2. Для предварительного исследования “ближней” асимптотики функции $\lambda_s(t) = d \ln I(t) / dt$ в тестовой задаче в случае сеточной аппроксимации расчеты были продолжены до $t < T_1 = 150$, причем $T^* \approx 20$. В табл. 2 представлены статистические оценки этой функции (N – число траекторий), соответствующие оценки среднеквадратической погрешности δ (“одна сигма”), а также для сравнения значения функциональной оценки асимптотики логарифмической производной (см. [12]):

$$\tilde{\lambda}_s(t) = \lambda_s(t_0) \frac{1 - \exp(-\beta t^{1-\alpha})}{1 - \exp(-\beta t_0^{1-\alpha})} \quad (5.2)$$

при $t_0 = 40$, $\alpha = 0.2$. Значение $\beta = 0.00199$ было вычислено на основе леммы 5.1 и оценки $\lambda_{\max} = 0.022$, полученной с помощью дополнительного расчета при $\sigma = \sigma_{\max}$ с использованием функции Грина по времени. Отметим, что (5.2) практически не меняется при замене $t_0 = 40$ на $t_0 = 30$, что подтверждает значимость этой оценки (которая таким образом получена по значениям $\lambda_s(30)$ и $\lambda_s(40)$).

Удовлетворительное совпадение оценок в табл. 2 связано с тем, что коэффициент β в (5.2) определялся с использованием леммы 5.1, что подтверждает ее реальность, как и результаты расчетов (см. табл. 3). Отметим, что график на фиг. 1 демонстрирует суперэкспоненциальную сходимость $I(t)$ в интервале $10 < t < 20$.

Таблица 2. Значения оценки: $\lambda_s(t) \pm \delta$ при $N = 216 \times 10^9$, $L = 2.186$

t	Сеточная аппроксимация	$\tilde{\lambda}_s(t)$
10	-0.000086 ± 0.000003	0.000276
30	0.000640 ± 0.000005	0.000659
50	0.000989 ± 0.000009	0.000984
70	0.001280 ± 0.000014	0.001279
90	0.001574 ± 0.000022	0.001554
110	0.001782 ± 0.000035	0.001813
130	0.002106 ± 0.000056	0.002060
150	0.002458 ± 0.000089	0.002296

Таблица 3. Сеточная модель с L_{eff} , $\sigma_c = 0.012$, $N = 10^{10}$

t	L-Усеченное поле Вороного			Сеточная модель с L_{eff}			I_g/I_{VL}
	$I_{VL}(t)$	$\delta(t)$, %	$(\ln I)'$	$I_g(t)$	$\delta(t)$, %	$(\ln I)'$	
250	1.7019	0.012	0.0037	1.7023	0.010	0.0036	1.00
500	6.2293	0.039	0.0066	6.0404	0.038	0.0064	0.97
1000	532.41	0.232	0.0109	423.73	0.203	0.0103	0.80
2000	3.83×10^8	5.508	0.0155	1.14×10^8	2.762	0.0141	0.30

6. ИССЛЕДОВАНИЕ “ДАЛЬНЕЙ” АСИМПТОТИКИ ПОТОКА В ТЕСТОВОЙ ЗАДАЧЕ

6.1. В начале отметим, что в разд. 3, как и в [12] с целью исследования типа асимптотики функции $I(t)$ моделировался поток частиц со специальными функциональными параметрами: $f_0(t)$ — гладкая, сосредоточенная в начальный момент времени функция; “вес” точки столкновения $q(\mathbf{r}, v) = g(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r}, v)$, где $g(\mathbf{r})$ — указанное выше диффузионное приближение к характеристической функции. Это дало возможность в рамках “оценки по столкновениям” использовать рандомизированную функцию Грина по времени и на этой основе вычислять несмешанные оценки производной среднего потока, причем переход к пределу по t ускорялся использованием “функции ценности столкновений” $g(\mathbf{r})$. При этом значения параметра T_λ и тем самым параметра T^* эффективно уменьшались, сравнительно с использованной далее расчетной методикой, более близкой к прямому моделированию процесса переноса.

В настоящем разделе работы расчеты величины $I(t)$ проводились для $f_0(t) = \delta(t)$ до $t = T = 2000$ путем прямого подсчета числа частиц в заданные моменты времени $\{t_i\}$, то есть фактически для физической модели односкоростного процесса переноса.

Для повышения вычислительной эффективности вводилось поглощение с коэффициентом σ_c и с компенсирующим весом $e^{\sigma_c t_i}$, как и в [12], причем вместо поглощения частица приобретала вспомогательный вес, который в точке рассеяния равнялся

$$v^* = \frac{\rho(v\sigma_f + \sigma_s)}{\rho\sigma + \sigma_c} = \frac{1.045\rho}{\rho + \sigma_c} > 1. \quad (6.1)$$

С использованием простого осреднения (см. разд. 3) для случайного значения плотности $\rho \in (1 - \varepsilon, 1 + \varepsilon)$ при $\varepsilon = 0.3$ моделировался односкоростной ветвящийся процесс с изотропным рассеянием и константами $\sigma^* = \sigma_f^* = \rho\sigma + \sigma_c = \rho + \sigma_c$, $\sigma_s^* = \sigma_c^* = 0$, v^* .

Для уменьшения дисперсии оценок осуществлялась статистически эквивалентная рандомизация (см. [10]) множителя (6.1) — вместо использования веса частицы v^* моделировалось ветвление со случайным числом v_0 ветвей единичного веса, таким что $E v_0 = v^*$ с минимальной возможной при этом дисперсией $D v_0$. В результате элементарных исследований оказалось, что v_0 можно моделировать по формуле

$$v_0 = [v^* + \alpha], \quad (6.2)$$

где скобки $[]$ обозначают целую часть числа, α — случайное число, равномерно распределенное в $(0, 1)$. Здесь $E v_0 = v^*$ и величина $D v_0$ минимальна в классе целочисленных случайных величин со средним значением v^* . Соответственно (6.2) выполняются соотношения

$$P(v_0 = [v^*]) = 1 - (v^* - [v^*]), \quad P(v_0 = [v^*] + 1) = v^* - [v^*], \quad D v_0 = (v^* - [v^*])(1 - (v^* - [v^*])).$$

Минимальность величины $D v_0$ для такого распределения доказана в [18].

Дополнительно отметим, что согласно правилу двойной рандомизации все ветви на одной траектории моделировались с одними значениями ρ .

6.2. Рассматриваемые далее численные результаты получены для L-усеченного поля Вороного с помощью слоистого алгоритма методом максимального сечения (см. [12]) с $\sigma_{\max} = \sigma(1 + \varepsilon) + \sigma_c$ при $\varepsilon = 0.3$. С целью более эффективного использования компьютерного времени значения плотности $\rho \in (1 - \varepsilon, 1 + \varepsilon)$ в ячейках поля моделировались по мере необходимости, причем соответствующий выборочный массив занулялся в начале построения очередной ветвящейся траектории. Одновременно были проведены сравнительные расчеты для сеточной аппроксимации с тем же значением $L_{\text{eff}} = 2.02079$, которому соответствует значение $h = 4.9571$.

Таблица 4. Сеточная модель с параметром L , $\sigma_c = 0.012$, $N = 10^{10}$

t	Сеточная модель с L			I_{gL}/I_{VL}
	$I_{gL}(t)$	$\delta(t), \%$	$(\ln I)'$	
250	1.6667	0.010	0.0035	0.98
500	5.6387	0.039	0.0062	0.91
1000	374.83	0.208	0.0100	0.65
2000	7.17×10^7	3.222	0.0139	0.19

Таблица 5. Смещение результатов L -усечением, $\sigma_c = 0.012$, $N = 10^{10}$

t	Поле Вороного		I_V/I_{VL}	I_V/I_{VLeff}
	$I_V(t)$	$\delta(t), \%$		
250	1.6830	0.012	0.99	1.01
500	5.9905	0.039	0.96	1.02
1000	460.21	0.222	0.86	1.02
2000	2.03×10^8	3.692	0.53	0.75

Далее используются следующие обозначения средних потоков: I_{VL} – для L -усеченного поля Вороного, I_V – для точного поля Вороного с параметром L , I_g – для сеточной аппроксимации с L_{eff} , I_{gL} – для сетки с параметром L , $I_{g/2}$ – для сеточной модели с L_{eff} после замены L на $L/2$.

Результаты расчетов представлены в табл. 3 и 4, где $(\ln I)' = d \ln I/dt$, а символом $\delta(t)$ обозначена относительная среднеквадратическая погрешность оценки среднего потока частиц в процентах для момента времени t ; даны статистические оценки изучаемых величин для $N = 10^{10}$ реализованных ветвящихся траекторий при $\sigma_c = 0.012$. Дополнительные расчеты показали, что это значение σ_c близко к оптимальному для сеточной модели, так как при этом оценки трудоемкости $\tilde{S}(\sigma_c) = \tilde{T}(\sigma_c) D\tilde{I}(\sigma_c)$, где \tilde{T} – среднее число пробегов частицы, а \tilde{I} – оценка потока для $t = 2000$, оказались равными

$$\tilde{S}(0.01) = 1.56 \times 10^{25}, \quad \tilde{S}(0.012) = 1.13 \times 10^{25}, \quad \tilde{S}(0.014) = 2.0 \times 10^{25}.$$

Были проведены также расчеты для исследования смещения оценок L -усечением поля Вороного. При этом поле Вороного моделировалось точно с использованием изложенного в разд. 4 “правила останова” слоистого моделирования. Полученные таким образом оценки приведены в табл. 5.

Приведенные в табл. 3 и 4 результаты показывают практическую эффективность здесь сеточной модели при равенстве L_{eff} для разных вариантов расчета до $t \approx 500 - 1000$, причем время t можно определять средним числом пробегов частицы, т.к. среднее время пробега здесь равно единице. Дополнительный расчет показал, что использование L_{eff} существенно уменьшает смещение результатов L -усечением (I_V/I_{VLeff} в табл. 5).

Можно особо отметить относительно малое смещение оценки величины $d \ln I(t)/dt$ при переходе к сеточной аппроксимации, которое можно объяснить на основе леммы 5.1, справедливой и для сеточного поля.

Для численной иллюстрации эвристически очевидной сходимости рассматриваемого смещения оценок при $L \rightarrow 0$ были проведены аналогичные расчеты для корреляционного радиуса $L/2$. Полученные результаты даны в табл. 6.

Приведенные в табл. 6 оценки с учетом оценок из табл. 3 подтверждают уменьшение смещения при $L \rightarrow 0$. Время расчетов для L -усеченного поля Вороного оказалось примерно в 2.5 раза больше для параметра $L/2$, сравнительно с L . Ясно, что асимптотически при $L \rightarrow 0$ это время растет, как $A + BL^{-3}$, а для сеточной модели практически не изменяется.

В заключение отметим, что проведенные расчеты показывают возможность достаточно точной оценки влияния мелкомасштабной стохастичности среды на перенос излучения с помощью сеточной аппроксимации оптической плотности за ограниченное компьютерное время.

Таблица 6. Оценка среднего потока для параметра $L/2$

t	Поле Вороного, $L/2$			Сеточная модель, $(L/2)_{\text{eff}}$			$I_{g/2}/I_{VL/2}$
	$I_{VL/2}(t)$	$\delta(t), \%$	$(\ln I)'$	$I_{g/2}(t)$	$\delta(t), \%$	$(\ln I)'$	
250	1.0703	0.012	0.00041	1.0625	0.012	0.00036	0.99
500	1.2703	0.054	0.00096	1.2376	0.054	0.00088	0.97
1000	2.6168	0.796	0.00192	2.4210	0.827	0.00168	0.93

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Глазов Г.Н., Титов Г.А. Статистические характеристики коэффициента ослабления в разорванной облачности. I. Модель с шарами одинакового радиуса // Вопросы лазерного зондирования атмосферы. Новосибирск, 1976. С. 126–139.
- Serra J. Image analysis and mathematical morphology. London: Academic press, 1982. 610 p.
- Larmier C., Zoia A., Malvagi F., Dumonteil E., Mazzolo A. Monte Carlo particle transport in random media: The effects of mixing statistics // J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer. 2017. V. 196. P. 270–286.
- Ambos A.Yu., Mikhailov G.A. Statistical modelling of the exponentially correlated multivariate random field // Rus. J. Numer. Anal. Math. Model. 2011. V. 26. № 3. P. 213–232.
- Switzer P. A random set process in the plane with a Markovian property // Ann. Math. Statist. 1965. V. 36. P. 1859–1863.
- Ambos A.Yu., Mikhailov G.A. New algorithms of numerical-statistical modelling of radiative transfer through stochastic mediums and radiation models homogenization // Rus. J. Numer. Anal. Math. Modelling 2014. V. 29. № 6. P. 331–339.
- Gilbert E.N. Random subdivisions of space into crystals // Ann. Math. Statist. 1962. V. 33. P. 958–972.
- Пригарин С.М. Методы численного моделирования случайных процессов и полей. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2005. 259 с.
- Амбос А.Ю. Вычислительные модели мозаичных однородных изотропных случайных полей и задачи переноса излучения // Сиб. журн. вычисл. матем. 2016. Т. 19. № 1. С. 15–28. Ambos A. Yu. Numerical models of mosaic homogeneous isotropic random fields and corresponding problems of radiative transfer // Numer. Analys. Appl. 2016. V. 9. № 1. P. 12–23. <https://doi.org/10.1134/S199542391601002X>
- Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло: учеб. пособие для студ. вузов. М: Изд. центр “Академия”, 2006. 367 с.
- Medvedev I.N., Mikhailov G.A. New correlative randomized algorithms for statistical modelling of radiation transfer in stochastic medium // Rus. J. Numer. Anal. Math. Model. 2021. V. 36. № 4. P. 219–225.
- Лотова Г. З., Михайлов Г. А. Исследование сверхэкспоненциального роста среднего потока частиц в случайной размножающей среде // Сиб. журн. вычисл. матем. 2023. Т. 26. № 4. С. 401–413.
- Марчук Г.И., Михайлов Г. А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А., Каргин Б.А., Елевов Б.С. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976. 283 с.
Marchuk G. I., Mikhailov G. A., Nazareliev M. A., Darbinjan R. A., Kargin B. A., Elepov B. S. The Monte Carlo methods in Atmospheric Optics. Springer-Verlag, 1980.
- Lotova G.Z., Mikhailov G.A. Estimation of the average particle flux in a stochastically homogeneous medium by Monte Carlo method // Rus. J. Numer. Anal. Math. Model. 2022. V. 37. № 6. P. 363–371.
- Роженко С.А. Моделирование и оценка корреляционной функции поля Вороного // Марчуковские научные чтения-2022: Тез. Междунар. конф., 3–7 октября 2022 г. – ИВМиМГ СО РАН, 2022. С. 58. (<https://conf.icmmp.nsc.ru/event/1/>) DOI: 10.24412/cl-35065-2022-1-00-64

16. 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.
17. Marchenko M.A. Parallel pseudorandom number generator for largescale Monte Carlo simulations. In: Malyshkin, V. (Ed.) PaCT 2009. LNCS, V. 4671. P. 276–282. 2007.
18. Михайлов Г.А., Медведев И.Н. Оптимизация весовых алгоритмов статистического моделирования. Новосибирск: Омега прнт, 2011. 302 с.

OPTIMIZATION OF A NUMERICAL AND STATISTICAL ALGORITHM FOR ESTIMATING THE AVERAGE PARTICLE FLUX IN A RANDOM MULTIPLYING BOUNDED MEDIUM

G. Z. Lotova^{a,b,*}, G. A. Mikhailov^{a,b,***}, S. A. Rozhenko^{a,***}

^a630090 Novosibirsk, Akad Lavrentiev Ave., 6, ICM-MG, SB RAS, Russia

^b630090 Novosibirsk, Pirogova str., 1, NSU, Russia

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

**e-mail: gam@sscc.ru

***e-mail: sergroj@mail.ru

Received: 16.05.2024

Revised: 16.05.2024

Accepted: 26.07.2024

Abstract. Approximations of random functions are studied, numerically modeled to study the stochastic process of particle transport, including problems of fluctuations in the criticality of the process in random breeding media. The simplest grid model of an isotropic random field is formulated, reproducing the effective average correlation length, which ensures high accuracy in solving stochastic transfer problems at a small correlation scale. The proposed algorithms have been tested in solving the test problem of estimating the overexponential average particle flux in a random multiplying medium.

Keywords: numerical statistical modeling, random environment, Voronoi field, grid approximation, particle flow, overexponential asymptotics, estimation error, computational complexity.