

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОЦЕНКИ ПО СТОЛКНОВЕНИЯМ ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ СМОЛУХОВСКОГО МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО

А. В. Бурмистров<sup>1,2</sup>, М. А. Коротченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

<sup>2</sup> *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.642

Рассматривается нелинейное уравнение Смолуховского, которое часто возникает при описании процессов коагуляции частиц в различных физических системах. В работе изучается уравнение с линейными коэффициентами коагуляции, зависящими от размера взаимодействующих частиц [1]. Для численной оценки линейных функционалов от решения этого уравнения строится “модельная” эволюция “физического” многочастичного ансамбля с помощью соответствующих марковских цепей. В рамках “весового” статистического моделирования разработаны новые оценки “по столкновениям” для численного решения рассматриваемого кинетического уравнения. Построенные оценки могут быть использованы для рандомизированного ветвления траекторий модельного ансамбля коагулирующих частиц.

**Ключевые слова:** статистическое моделирование, динамика многочастичного ансамбля, уравнение коагуляции, параметрические производные, мультипликативный вес.

## Введение

В данной работе мы рассмотрим динамику системы, состоящей из частиц с целочисленными размерами, в которой протекает процесс коагуляции, описываемый уравнением Смолуховского. Будем называть  $k$ -мером мультимер (частицу) размера  $k \in \mathbb{N}$ .

Пусть заданы коэффициенты коагуляции  $K_{lm}$ , которые не зависят от пространственных координат и такие, что вероятность взаимодействия двух мультимеров ( $l$ -мера и  $m$ -мера), в результате которого образуется новый мультимер ( $(l+m)$ -мер), в течение временного интервала  $\Delta t$  равна  $K_{lm}\Delta t$ . В этом случае, функция  $u_k(t)$  — концентрация  $k$ -меров в системе в момент времени  $t$  — удовлетворяет уравнению Смолуховского с заданными коэффициентами следующего вида:

$$\frac{\partial u_k(t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{l+m=k} K_{lm} u_l(t) u_m(t) - \sum_{l \geq 1} K_{kl} u_k(t) u_l(t), \quad k \geq 1. \quad (1)$$

Зададим начальные условия  $u_k(t_0) = u_{0k}$ , ( $k > 0$ ), и тем самым полностью определим задачу Коши для этого уравнения.

В настоящей работе мы численно оцениваем линейные функционалы от решения  $u_k(t)$ , а также их параметрические производные с помощью весовых модификаций методов Монте — Карло. Для этого мы рассмотрим динамику многочастичного ансамбля и будем моделировать однородную марковскую цепь (см., например, [2]). Переходы в этой цепи происходят в результате коагуляции пары мультимеров. Для символа Кронекера и дельта-функции Дирака будем использовать стандартные обозначения:  $\delta_{l,m}$  и  $\delta(\cdot)$ , соответственно. Для описания рассматриваемого процесса взаимодействия введем обозначения:

- $N_0$  и  $N$  — начальное (без ограничения общности  $t_0 = 0$ ) и текущее число мультимеров, моделируемых в ансамбле ( $N_0 \geq N$ );

- $\pi = (i, j)$  — номера мультимеров, которые взаимодействуют в данный момент времени (таким образом коагулируют  $l_i$ -мер и  $l_j$ -мер);
- вектор  $W = (N, l_1, \dots, l_N) \in \mathbf{W}$  однозначно описывает текущее состояние нашего ансамбля;
- расширенный вектор  $M = (W, \pi) \in \mathbf{M}$ , описывает текущее состояние моделируемого ансамбля в модифицированном фазовом пространстве. При этом  $dM = dW d\mu(\pi)$ ; и под интегрированием по дискретной мере  $\mu$  понимаем суммирование по всевозможным парам  $(i, j)$ , а интегрирование по  $dW$ , в свою очередь, является суммированием по всему множеству значений  $N$  и  $l_1, \dots, l_N$ .
- вероятность  $P(W, t)$  описывает распределение состояния ансамбля в текущий момент времени  $t$ ;
- $\mathcal{C}(W) = \sum_{\pi} c(N, l_i, l_j)$ , где

$$c(N, l_i, l_j) = \frac{1 - \delta_{1,N}}{N_0} \sum_{l=1}^{\infty} K_{l_i, l_j} \delta_{l_i + l_j, l}.$$

Как было показано в работе [5], в предположении молекулярного хаоса имеет место следующий предельный переход

$$\frac{1}{N_0} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{l_2=1}^{\infty} \dots \sum_{l_N=1}^{\infty} N P(N, l, l_2, \dots, l_N, t) \rightarrow u_l(t), \text{ при } N_0 \rightarrow \infty.$$

Этот факт обосновывает правомерность использования описанных ниже интегрального уравнения и алгоритмов для оценки функционалов от решения  $u_l(t)$  уравнения (1).

В работе [4] был предложен подход, заключающийся во введении новой координаты — номера пары  $\pi$  коагулирующих мультимеров — в набор фазовых координат. Такая модификация фазового пространства позволила авторам построить в работе [4] интегральное уравнение второго рода относительно новой искомой функции  $F(W, \pi, t) = c(\pi)P(W, t)$  в модифицированном пространстве  $\mathbf{M} \times [0, T]$ :  $F = \mathbf{K}F + F_0$  или

$$F(M, t) = \int_0^t \int_{\mathbf{M}} F(M', t') K(M', t' \rightarrow M, t) dM' dt' + F_0(M, t). \quad (2)$$

Здесь  $F_0(M, t) = \delta(t) \cdot F_0(M)$  — источник, а ядро имеет вид

$$K(M', t' \rightarrow M, t) = K_1(t' \rightarrow t|W') \cdot K_2(\pi|W') \cdot K_3(W' \rightarrow W|\pi).$$

При этом

$$K_1(t' \rightarrow t|W') = \mathcal{C}(W') \exp\{-\mathcal{C}(W')(t - t')\},$$

то есть время между элементарными взаимодействиями распределено экспоненциально. Вероятность взаимодействия пары  $\pi = (i, j)$  в  $N'$ -частичном ансамбле имеет вид

$$K_2(\pi|W') \equiv K_2(i, j|W') = \frac{c(\pi)}{\mathcal{C}(W')} = \frac{c(N', l_i, l_j)}{\mathcal{C}(W')}.$$

Последний множитель  $K_3(W' \rightarrow W|\pi)$  описывает изменение ансамбля после коагуляции выбранной пары: в результате взаимодействия двух выбранных мультимеров с номерами  $i$  и  $j$  образуется новый мультимер размера  $l = l_i + l_j$ , и тем самым общее число мультимеров в моделируемом ансамбле уменьшается на единицу ( $N = N' - 1$ ).

Заметим, что мультипликативная структура ядра оператора  $\mathbf{K}$  позволяет на основе уравнения (2) строить весовые модификации алгоритмов метода Монте—Карло, поскольку обобщенные функции в ядре присутствуют в виде сомножителей. В работе [6] показано, что оператор  $\mathbf{K}$  можно рассматривать действующим из  $L_1(\mathbf{M} \times [0, T])$  в  $L_1(\mathbf{M} \times [0, T])$ . Более того, в силу конечности интервала  $[0, T]$ , его норма строго меньше единицы, и поэтому ряд Неймана для уравнения (2) сходится в норме  $L_1$ . Следовательно мы можем строить весовые оценки функционалов на основе уравнения (2).

Мы будем оценивать функционалы с весовой функцией  $H(W) \in L_{\infty}$  вида:

$$G_H(T) = \int_{\mathbf{W}} H(W) P(W, T) dW,$$

которые, как правило, возникают при решении кинетических уравнений. В работе [4] было показано, что  $G_H(T)$  является линейным функционалом от решения  $F$  уравнения (2):

$$G_H(T) = \int_0^T \int_M \underbrace{H(W) \exp\{-C(W)(T-t')\}}_{\tilde{H}(W, T-t')} F(M, t') dM dt' \equiv (F, \tilde{H}), \quad (3)$$

## 1 Постановка задачи

Мы рассматриваем уравнение Смолуховского с линейными коэффициентами

$$K_{lm} = \alpha + \beta \frac{(l+m)}{2}, \quad (4)$$

которые зависят от двух заданных постоянных параметров  $\alpha$  и  $\beta$ . Подробное описание “классической модели полимеров  $\mathbf{A}-R-\mathbf{B}_{f-1}$ ”, в которой возникают коэффициенты вида (4), можно найти, например, в работе [7].

В качестве мономеров в этой модели рассматривают соединения из  $f$  молекул: одной молекулой типа  $\mathbf{A}$  и  $(f-1)$  молекулами типа  $\mathbf{B}$ . Молекулы обоих типов химически активны, однако химические связи образуются исключительно между молекулами разных типов и разных мультимеров. Это приводит к образованию ветвящихся мультимеров при  $f \geq 3$  (см. рисунок в [1]). Легко понять, что в описанной модели скорость полимеризации (или коагуляции) имеет вид (4) с  $\beta = (f-2)\alpha$ .

Поскольку

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{\alpha}{N_0} &= \frac{\alpha}{2N_0} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N 1 = \frac{(N-1)}{2} \alpha \frac{N}{N_0}, \\ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{\beta}{2N_0} (l_i + l_j) &= \frac{\beta}{2N_0} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \left( \sum_{j \neq i}^N (l_i + l_j) \right) = \frac{\beta}{4N_0} \sum_{i=1}^N (N_0 + (N-2)l_i) = \frac{(N-1)}{2} \beta, \end{aligned}$$

то для линейных коэффициентов вида (4) имеем:

$$\begin{aligned} c(\alpha, \beta, \pi) &= \frac{\alpha + (l_i + l_j)\beta/2}{N_0} = \frac{2\alpha + \beta(l_i + l_j)}{2N_0}, \\ C(\alpha, \beta, W) &= \frac{(N-1)}{2} \left[ \alpha \frac{N}{N_0} + \beta \right]. \end{aligned}$$

Таким образом компоненты ядра  $K$  вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} K_1(\alpha, \beta, t' \rightarrow t | W') &= C(\alpha, \beta, W') \exp\{-C(\alpha, \beta, W')(t-t')\}, \\ K_2(\alpha, \beta, i, j | W') &= \frac{c(\alpha, \beta, i, j)}{C(\alpha, \beta, W')} = \frac{2\alpha + \beta(l_i + l_j)}{\alpha N(N-1) + \beta N_0(N-1)}. \end{aligned}$$

При этом легко проверить условия нормировки:

$$\int K_1 dt \equiv 1, \quad \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N K_2(i, j) \equiv 1.$$

В настоящей работе мы построим новые весовые алгоритмы метода Монте — Карло для решения двух задач:

1. численно оценить набор функционалов  $G_H(T) \equiv G_H(\alpha, \beta, T)$  одновременно для различных значений параметров  $\alpha$  и  $\beta$  с помощью моделирования эволюции многочастичного ансамбля для некоторой пары значений параметров  $\alpha^*$  и  $\beta^*$ ;
2. оценить параметрические производные этих функционалов  $\frac{\partial G_H}{\partial \alpha}(\alpha^*, \beta^*, T)$  и  $\frac{\partial G_H}{\partial \beta}(\alpha^*, \beta^*, T)$ .

## 2 Весовое моделирование цепи Маркова

Для оценки функционалов вида  $G_H(T) \equiv G_H(\alpha, \beta, T)$  мы будем моделировать эволюцию многочастичного ансамбля для фиксированных значений параметров  $\alpha^*$  и  $\beta^*$ . При этом разницу, появляющуюся из-за отличия  $G_H(\alpha, \beta, T)$  от  $G_H(\alpha^*, \beta^*, T)$ , будем учитывать с помощью весовых множителей. Для этого будем моделировать вспомогательную марковскую цепь

$$\{M_n, t_n\}_{n=0}^\kappa; \quad \kappa = \max_n \{n : t_n < T\}$$

с переходной плотностью

$$P^*(M', t' \rightarrow M, t) = P_1(t' \rightarrow t|W') \cdot P_2(\pi|W') \cdot K_3(W' \rightarrow W|\pi)$$

и плотностью  $\delta(t) \cdot F_0(M)$  распределения начального состояния  $(M_0, t_0)$ . Случайные весовые множители определяются после каждого шага по стандартным формулам (см., например, [3]):

$$Q_0 = 1, \quad Q_n = Q_{n-1} Q(M_{n-1}, t_{n-1}; M_n, t_n);$$

$$Q(M', t'; M, t) = \frac{K_1(\alpha, \beta, t' \rightarrow t|W')}{P_1(t' \rightarrow t|W')} \cdot \frac{K_2(\alpha, \beta, \pi|W')}{P_2(\pi|W')}.$$

Моделирование каждого перехода в марковской цепи состоит из двух последовательных элементарных этапов: на первом этапе выбирается временной интервал между взаимодействиями, после этого выбираются два мультимера для взаимодействия. Мы предлагаем на этих этапах использовать плотность  $K_1$  и вероятности  $K_2$  при фиксированных значениях параметров  $\alpha^*$  и  $\beta^*$ :

$$P_1(t' \rightarrow t|W') = K_1(\alpha^*, \beta^*, t' \rightarrow t|W'); \quad P_2(\pi|W') = K_2(\alpha^*, \beta^*, \pi|W').$$

С учетом вида функций  $K_1$  и  $K_2$ , мы получим формулы для элементарных весов  $Q(M', t'; M, t; \alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*)$  на каждом шаге (обозначим  $W' = W_{n-1}$  и заметим, что  $[\mathcal{C}(\alpha, \beta, W') - \mathcal{C}(\alpha^*, \beta^*, W')] = \mathcal{C}(\alpha - \alpha^*, \beta - \beta^*, W')$ ):

$$Q(M_{n-1}, t_{n-1}; M_n, t_n; \alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) = \frac{K_1(\alpha, \beta, t_{n-1} \rightarrow t_n|W')}{K_1(\alpha^*, \beta^*, t_{n-1} \rightarrow t_n|W')} \cdot \frac{K_2(\alpha, \beta, \pi|W')}{K_2(\alpha^*, \beta^*, \pi|W')} =$$

$$= \frac{2\alpha + \beta(l_i + l_j)}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_n} \cdot \exp \left\{ -\frac{N_{n-1} - 1}{2} \left[ \frac{N_{n-1}}{N_0} (\alpha - \alpha^*) + (\beta - \beta^*) \right] (t_n - t_{n-1}) \right\}.$$

Для оценки величины  $G_H(\alpha, \beta, T) = (F(\alpha, \beta), \tilde{H})$  в данной работе построим оценку по столкновениям  $\xi$  — функционал от траекторий моделируемой марковской цепи (см., например, [3, 6]):

$$\xi(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) = \sum_{n=0}^\kappa Q_n(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) \tilde{H}(W_n, T - t_n|\alpha, \beta),$$

Заметим, что оценка по поглощениям  $\eta$  была построена авторами в работе [1].

Принимая во внимание представление (3):

$$\tilde{H}(W_n, T - t_n|\alpha, \beta) = H(W_n) \exp\{-\mathcal{C}(\alpha, \beta, W_n)(T - t_n)\}, \quad H(\cdot) \in L_\infty,$$

можно показать, что для оценки  $\xi$  имеет место равенство

$$\xi = \sum_{n=0}^\kappa Q_n(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) \cdot E(T, n|\alpha, \beta) \cdot H(W_n)$$

с весами

$$\tilde{Q}_n(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) = \prod_{k=1}^n \left[ \frac{2\alpha + \beta(l_i + l_j)}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_k} \right] \prod_{k=1}^n \exp\{-\mathcal{C}(\alpha - \alpha^*, \beta - \beta^*, W_{k-1})(t_k - t_{k-1})\} \times E(T, n|\alpha, \beta),$$

где  $t_0 \equiv 0$ ,  $t_{\kappa+1} \equiv T$  и  $E(T, n|\alpha, \beta) = \exp\{-\mathcal{C}(\alpha, \beta, W_n)(T - t_n)\}$ .

Используя результаты работы [6], можно доказать следующие теоремы.

**Теорема 1.** Если  $Q(M', t'; M, t) < +\infty$  для  $M', M \in \mathbf{M}$  и  $t', t < T$ , то  $\mathbf{E}\xi = G_H(T)$ . Если, кроме того, веса  $Q$  равномерно ограничены и  $H \in L_\infty$ , то существует такое  $T^*$ , что  $\mathbf{Var}\xi < +\infty$  при  $T < T^*$ .  $\square$

Принимая во внимание вид весов  $Q_n(\alpha, \beta | \alpha^*, \beta^*)$ , возможно показать, что существуют некоторые интервалы  $\alpha^* - \varepsilon_\alpha < \alpha < \alpha^* + \varepsilon_\alpha$  и  $\beta^* - \varepsilon_\beta < \beta < \beta^* + \varepsilon_\beta$ , на которых условия Теоремы 1 удовлетворены.

Пусть  $\mathbf{K}_P$  — интегральный оператор с ядром  $K^2/P^*$ ,  $\rho(\cdot)$  — спектральный радиус оператора.

**Теорема 2.** Если в условиях Теоремы 1 имеем  $\rho(\mathbf{K}) < 1$ ,  $\rho(\mathbf{K}_P) < 1$ , а величины  $\|K'_\alpha\|$  и  $\|K'_\beta\|$  равномерно ограничены в некоторых интервалах  $\alpha^* - \varepsilon_\alpha < \alpha < \alpha^* + \varepsilon_\alpha$  и  $\beta^* - \varepsilon_\beta < \beta < \beta^* + \varepsilon_\beta$ , то:

$$\mathbf{E} \left( \frac{\partial \xi}{\partial \alpha} \right) = \frac{\partial G_H}{\partial \alpha}(\alpha^*, \beta^*, T), \quad \mathbf{Var} \left( \frac{\partial \xi}{\partial \alpha} \right) < +\infty, \quad \mathbf{E} \left( \frac{\partial \xi}{\partial \beta} \right) = \frac{\partial G_H}{\partial \beta}(\alpha^*, \beta^*, T), \quad \mathbf{Var} \left( \frac{\partial \xi}{\partial \beta} \right) < +\infty. \quad \square$$

Возможно показать, что, в силу структуры ядер операторов  $\mathbf{K}$  и  $\mathbf{K}_P$ , в нашем случае условия Теоремы 2 также выполнены.

В случае оценки по столкновениям для параметрических производных получаем (здесь  $\gamma = \alpha$  или  $\gamma = \beta$ ):

$$\frac{\partial \xi}{\partial \gamma} = \sum_{n=0}^{\kappa} \left[ \frac{\partial Q_n}{\partial \gamma}(\alpha, \beta | \alpha^*, \beta^*) \cdot E(T, n | \alpha, \beta) + Q_n(\alpha, \beta | \alpha^*, \beta^*) \cdot \frac{\partial E}{\partial \gamma}(T, n | \alpha, \beta) \right] \cdot H(W_n). \quad (5)$$

Формула (5) используется для значений  $(\alpha, \beta) = (\alpha^*, \beta^*)$ . Заметим, что  $Q_n(\alpha^*, \beta^* | \alpha^*, \beta^*) \equiv 1$ . Далее,

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \alpha}(T, n | \alpha^*, \beta^*) &= -\frac{(N_n - 1)N_n}{2N_0}(T - t_n)E(T, n | \alpha^*, \beta^*) = -C_n^a \cdot E(T, n | \alpha^*, \beta^*), \\ \frac{\partial E}{\partial \beta}(T, n | \alpha^*, \beta^*) &= -\frac{(N_n - 1)}{2}(T - t_n)E(T, n | \alpha^*, \beta^*) = -C_n^b \cdot E(T, n | \alpha^*, \beta^*). \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_n}{\partial \alpha}(\alpha^*, \beta^* | \alpha^*, \beta^*) &= \sum_{k=1}^n \left[ \frac{2}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_k} - \frac{(N_{k-1} - 1)N_{k-1}}{2N_0}(t_k - t_{k-1}) \right] = dQ_n^a, \\ \frac{\partial Q_n}{\partial \beta}(\alpha^*, \beta^* | \alpha^*, \beta^*) &= \sum_{k=1}^n \left[ \frac{l_i + l_j}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_k} - \frac{(N_{k-1} - 1)}{2}(t_k - t_{k-1}) \right] = dQ_n^b. \end{aligned}$$

Из двух последних равенств следуют рекуррентные соотношения

$$\begin{aligned} dQ_0^a &= 0, \quad dQ_n^a = dQ_{n-1}^a + \frac{2}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_n} - \frac{(N_{n-1} - 1)N_{n-1}}{2N_0}(t_n - t_{n-1}), \\ dQ_0^b &= 0, \quad dQ_n^b = dQ_{n-1}^b + \frac{l_i + l_j}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_n} - \frac{(N_{n-1} - 1)}{2}(t_n - t_{n-1}). \end{aligned}$$

В итоге получаем следующие формулы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial \alpha}(T | \alpha^*, \beta^*) &= \sum_{n=0}^{\kappa} [dQ_n^a - C_n^a] \cdot E(T, n | \alpha^*, \beta^*) \cdot H(W_n), \\ \frac{\partial \xi}{\partial \beta}(T | \alpha^*, \beta^*) &= \sum_{n=0}^{\kappa} [dQ_n^b - C_n^b] \cdot E(T, n | \alpha^*, \beta^*) \cdot H(W_n). \end{aligned}$$

### 3 Численные результаты

В данном параграфе мы приводим результаты численной оценки двух функционалов, полученные при помощи предложенных алгоритмов, для тестовой задачи с известным аналитическим решением. А именно, рассматриваем уравнение (1) с коэффициентами коагуляции вида (4) и начальными данными  $u_l(0) = \delta_{l,1}$ . В этом монодисперсном случае аналитическое решение известно и имеет вид (см., например, [8]):

$$u_l(t) = \lambda(t)(1 - \lambda(t))^{l-1} \left( \frac{\alpha \lambda(t) + \beta}{\alpha + \beta} \right)^{1+l\beta/\alpha}, \quad \lambda(t) = \frac{\beta}{(\alpha + \beta) \exp\{\beta t/2\} - \alpha},$$

где  $\lambda(t) = \sum_{i=1}^{\infty} u_i(t)$  — полная концентрация мультимеров.

Результаты численных расчетов приведены в Таблицах 1-3, в которых мы используем следующие обозначения:

$\sigma$  — среднеквадратичное отклонение;

$\varepsilon$  — относительная погрешность (в процентах).

Для оценки были выбраны два функционала:  $G_{H_1}(T)$  — концентрация мономеров, и  $G_{H_\lambda}(T)$  — полная концентрация мультимеров. Для данных функционалов весовые функции имеют следующий вид:

$$H_1(W) = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^N \delta(l_i - 1); \quad H_\lambda(W) = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^N 1 \equiv \frac{N}{N_0}.$$

Отметим, что эти функционалы приближают решение исходного уравнения (1):

$$G_{H_1}(T) = u_1(T) + \mathcal{O}(N_0^{-1}), \quad G_{H_\lambda}(T) = \lambda(T) + \mathcal{O}(N_0^{-1}),$$

а детерминированная погрешность порядка  $\mathcal{O}(N_0^{-1})$ , как показано в работе [5], здесь появляется вследствие ограниченности ансамбля моделируемых частиц начальным количеством мультимеров  $N_0$ . Кроме того, напомним известный факт (см., например, [3]) о том, что статистическая часть погрешности построенных алгоритмов имеет порядок  $\mathcal{O}(n^{-1/2})$ , где  $n$  — количество моделируемых траекторий.

Искомые функционалы оценивались при следующих значениях параметров:  $\alpha^* = 1.3$ ,  $\beta^* = 1.1$ ,  $T = 1.2$ ,  $N_0 = 10^2$ ,  $n = 10^6$ .  $\alpha = k_1 \cdot \alpha^*$ ,  $\beta = k_2 \cdot \beta^*$ , где  $k_1, k_2 \in \{0.9; 1; 1.1\}$ .

Численные результаты показывают, что построенные алгоритмы позволяют получить оценки как функционалов для различных значений параметров ( $\alpha$ ,  $\beta$ ), так и параметрических производных, используя одни и те же траектории марковской цепи.

Таблица 1: Оценка концентрации мономеров  $G_{H_1}(T)$ .

$\alpha$	$\beta$	Точное решение $u_1(T)$	Оценка $\xi$	$\sigma$	$\varepsilon$
1.3	1.1	$1.429 \cdot 10^{-1}$	$1.442 \cdot 10^{-1}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	0.88
1.3	1.21	$1.328 \cdot 10^{-1}$	$1.339 \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	0.81
1.3	0.99	$1.539 \cdot 10^{-1}$	$1.553 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-4}$	0.95
1.43	1.1	$1.340 \cdot 10^{-1}$	$1.352 \cdot 10^{-1}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	0.87
1.43	1.21	$1.247 \cdot 10^{-1}$	$1.258 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	0.78
1.43	0.99	$1.441 \cdot 10^{-1}$	$1.454 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.93
1.17	1.1	$1.527 \cdot 10^{-1}$	$1.541 \cdot 10^{-1}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$	0.91
1.17	1.21	$1.416 \cdot 10^{-1}$	$1.428 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.83
1.17	0.99	$1.648 \cdot 10^{-1}$	$1.665 \cdot 10^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-4}$	1.01

Таблица 2: Оценка концентрации мультимеров  $G_{H_\lambda}(T)$ .

$\alpha$	$\beta$	Точное решение $\lambda(T)$	Оценка $\xi$	$\sigma$	$\varepsilon$
1.3	1.1	$3.290 \cdot 10^{-1}$	$3.339 \cdot 10^{-1}$	$2.3 \cdot 10^{-4}$	1.50
1.3	1.21	$3.112 \cdot 10^{-1}$	$3.161 \cdot 10^{-1}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	1.55
1.3	0.99	$3.477 \cdot 10^{-1}$	$3.527 \cdot 10^{-1}$	$3.3 \cdot 10^{-4}$	1.44
1.43	1.1	$3.175 \cdot 10^{-1}$	$3.223 \cdot 10^{-1}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	1.54
1.43	1.21	$3.005 \cdot 10^{-1}$	$3.053 \cdot 10^{-1}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	1.59
1.43	0.99	$3.352 \cdot 10^{-1}$	$3.402 \cdot 10^{-1}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	1.47
1.17	1.1	$3.414 \cdot 10^{-1}$	$3.464 \cdot 10^{-1}$	$3.1 \cdot 10^{-4}$	1.47
1.17	1.21	$3.228 \cdot 10^{-1}$	$3.277 \cdot 10^{-1}$	$2.4 \cdot 10^{-4}$	1.52
1.17	0.99	$3.610 \cdot 10^{-1}$	$3.662 \cdot 10^{-1}$	$5.6 \cdot 10^{-4}$	1.45

Таблица 3: Оценка производных  $\frac{\partial G_H}{\partial \alpha}(T)$  и  $\frac{\partial G_H}{\partial \beta}(T)$  для двух  $H$ .

Функционал	Точное решение	Оценка $\xi'$	$\sigma$	$\varepsilon$
$\frac{\partial G_{H_1}}{\partial \alpha}(T)$	$-7.170 \cdot 10^{-2}$	$-7.254 \cdot 10^{-2}$	$5.2 \cdot 10^{-4}$	1.18
$\frac{\partial G_{H_1}}{\partial \beta}(T)$	$-9.589 \cdot 10^{-2}$	$-9.758 \cdot 10^{-2}$	$7.6 \cdot 10^{-4}$	1.76
$\frac{\partial G_{H_\lambda}}{\partial \alpha}(T)$	$-9.198 \cdot 10^{-2}$	$-9.241 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$	0.46
$\frac{\partial G_{H_\lambda}}{\partial \beta}(T)$	$-1.654 \cdot 10^{-1}$	$-1.661 \cdot 10^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$	0.39

## Заключение

Авторами разработаны новые алгоритмы метода Монте — Карло, которые реализуют весовые оценки “по столкновениям” для решения кинетического уравнения Смолуховского. С помощью предложенных алгоритмов возможно вычислять линейные функционалы с различными значениями параметров  $\alpha$  и  $\beta$ , а также оценивать их параметрические производные, моделируя один набор траекторий марковской цепи. Эти алгоритмы возможно применять, например, в задачах интерполяции, а также для рандомизированного ветвления траекторий модельного ансамбля коагулирующих частиц.

## Список литературы

- [1] Бурмистров А.В., Коротченко М.А. Весовые алгоритмы метода Монте — Карло для оценки и параметрического анализа решения кинетического уравнения коагуляции // Сиб. журн. вычисл. математики. 2014. Т. 17, № 2. С. 125–138.
- [2] Лушников А.А. Некоторые новые аспекты теории коагуляции // Изв. АН СССР, Физ. атмосферы и океана. 1978. Т. 14, № 10. С. 738–743.
- [3] Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование (Метод Монте — Карло). Москва: Издательский центр “Академия”, 2006.
- [4] Михайлов Г.А., Рогазинский С.В. Весовые методы Монте — Карло для приближенного решения нелинейного уравнения Больцмана // Сиб. мат. журн. 2002. Т. 43, № 3. С. 620–628.
- [5] Михайлов Г.А., Рогазинский С.В., Урева Н.М. Весовой метод Монте — Карло для приближенного решения нелинейного уравнения коагуляции // Журн. вычисл. мат. и мат. физики. 2006. Т. 46, № 4. С. 714–725.
- [6] Mikhailov G.A. Parametric Estimates by the Monte Carlo Method. VSP, Utrecht, 1999.
- [7] Flory P.J. Principles of polymer chemistry. Ithaca, New York: Cornell University Press, 1953.
- [8] Spouge J.L. Solutions and critical times for the monodisperse coagulation equation when  $c(i, j) = A + B(i + j) + Cij$  // J. Phys. A: Math. Gen. 1983. V. 16, No. 4. P. 767–773.

Александр Васильевич Бурмистров — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;  
ст. преподаватель Новосибирского государственного университета; e-mail: burm@osmf.sscc.ru;  
Мария Андреевна Коротченко — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; e-mail: kmaria@osmf.sscc.ru.  
Дата поступления — 30 мая 2017 г.