

# ВЕКТОРНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО С КОНЕЧНОЙ ТРУДОЕМКОСТЬЮ

И. Н. Медведев<sup>1,2</sup>

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

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

УДК 519.245 : 519.676

В работе представлена новая универсальная модификация весовой векторной оценки по столкновениям с ветвлением траектории цепи соответственно элементам матричного веса. Доказано, что трудоемкость построенного алгоритма ограничена, если ограничены базовые функционалы. Представлены результаты численных расчетов с использованием модифицированной весовой оценки для некоторых задач теории переноса излучения с учетом поляризации.

**Ключевые слова:** система линейных интегральных уравнений 2-го рода, весовая векторная оценка, матричный вес, ветвление траектории в цепи Маркова, конечная трудоемкость алгоритма, перенос поляризованного излучения.

## 1 Вводная информация

Рассмотрим систему интегральных уравнений второго рода:

$$\varphi_i(x) = \sum_{j=1}^m \int_X k_{ij}(x, y) \varphi_j(y) dy + h_i(x) \quad (1)$$

или в векторном виде  $\Phi = \mathbf{K}\Phi + H$ , где  $H^T = (h_1, \dots, h_m) \in L_\infty$ ,

$$\mathbf{K} \in [L_\infty \rightarrow L_\infty], \quad \|\mathbf{K}\|_{L_\infty} = \text{vrai} \sup_{i,x} |h_i(x)|,$$

а интегрирование производится по мере Лебега в  $\kappa$  — мерном евклидовом пространстве  $X$ .

Предполагается, что спектральный радиус  $\lambda(\mathbf{K}) < 1$ . При этом имеет место разложение решения в ряд Неймана

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{K}^n H. \quad (2)$$

Известно ([2], [3]) что для сходимости ряда (2) достаточно выполнения неравенства  $\|\mathbf{K}^{n_0}\| < 1$  для некоторого  $n_0 \geq 1$ . Отметим, что здесь

$$\|\mathbf{K}\| = \sup_{x,i} \sum_{j=1}^m \int |k_{ij}(x, y)| dy. \quad (3)$$

Рассмотрим цепь Маркова  $\{x_n\}$ ,  $(n = 0, \dots, N)$  с плотностью перехода  $p(x, y)$ , где  $N$  — случайный номер последнего состояния, а  $x_0 \equiv x$ . Известно [2], что такая цепь обрывается с вероятностью 1 и более того,  $E(N) < +\infty$ , если  $\lambda(B_p) < 1$ , где  $B_p$  — интегральный оператор с ядром  $p(x, y)$  (в частности, если  $p(x) \geq \varepsilon > 0$ ).

---

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 15-01-00894 а, 16-01-00530 а, 17-01-00823 а)) и программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33.

Стандартная векторная оценка метода Монте — Карло “по столкновениям” для величины  $\Phi(x)$  строится на основе соотношений

$$\Phi(x) = E\xi_x, \quad \xi_x = H(x) + \sum_{n=1}^N Q_n H(x_n),$$

$$Q_0 = I, \quad Q_{n+1} = Q_n K(x_n, x_{n+1}) / p(x_n, x_{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots, \quad (4)$$

где  $I$  — единичная матрица, а  $K(x, y)$  — матрица ядер  $\{k_{ij}(x, y)\}$ ,  $(i, j = 1, \dots, m)$ . Заметим, что соотношение  $\Phi(x) = E\xi_x$  справедливо при выполнении аналогичных рассмотренным в [2] для случая  $m = 1$  “условий несмещенности” и дополнительного условия  $\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$ , где  $\mathbf{K}_1$  — оператор, получаемый из оператора  $\mathbf{K}$  заменой ядер на их модули. Здесь условия несмещенности [2] преобразуются к виду:

$$p(x, y) > 0, \quad \text{если} \quad \sum_{i,j=1}^m |k_{ij}(x, y)| > 0, \quad (5)$$

а оценка  $\xi_x$  однозначно определяется рекурсией

$$\xi_x = H(x) + \delta_x Q(x, y) \xi_y, \quad (6)$$

где  $Q(x, y) = K(x, y) / p(x, y)$  — матричный вес, а  $\delta_x$  — индикатор необрыва цепи при переходе  $x \rightarrow y$ .

В [2] приведено следующее уравнение для матрицы вторых моментов  $\Psi(x) = E(\xi_x \xi_x^T)$ :

$$\Psi(x) = \chi(x) + \int_X \frac{K(x, y) \Psi(y) K^T(x, y)}{p(x, y)} dy, \quad (7)$$

или  $\Psi = \chi + \mathbf{K}_p \Psi$ , где  $\chi = H\Phi^T + \Phi H^T - HH^T$ . Это уравнение рассматривается в пространстве  $\mathbf{L}_\infty$  матричнозначных функций с нормой

$$\|\Psi\| = \text{vrai sup}_{i,j,x} |\Psi_{i,j}(x)|.$$

и имеет место [2] следующее выражение:

$$\|\mathbf{K}_p\|_{\mathbf{L}_\infty} = \sup_{i,x} \int \frac{\left( \sum_{j=1}^m |k_{ij}(x, y)| \right)^2}{p(x, y)} dy. \quad (8)$$

Оператор, получаемый из  $\mathbf{K}_p$  заменой ядер на их модули, обозначим  $\mathbf{K}_{p,1}$ . Предполагается, что  $\mathbf{K}_{p,1} \in [\mathbf{L}_\infty \rightarrow \mathbf{L}_\infty]$  и, следовательно,  $\mathbf{K}_p$  обладает тем же свойством. Заметим, что  $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$  включает  $\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$ , так как  $\|\mathbf{K}_1^n\|^2 \leq \|\mathbf{K}_{p,1}^n\|$ , поэтому имеет место следующее утверждение [7].

**Теорема 1.** Если  $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$ , то  $\Psi(x) = E(\xi_x \xi_x^T)$  является решением уравнения (7) и  $\Psi \in \mathbf{L}_\infty$ .

Методом Монте — Карло обычно оценивают линейные функционалы вида [1]

$$I = (F, \Phi) = \int_X F^T(x) \Phi(x) dx, \quad (9)$$

где  $F^T(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$ , причем

$$\|F^T\|_{L_1} = \sum_{j=1}^m \int_X |f_j(x)| dx < \infty.$$

Пусть точка  $x_0$  распределена с плотностью вероятностей  $\pi(x)$  такой, что  $\pi(x) \neq 0$ , если  $F^T(x) \Phi(x) \neq 0$ . Тогда, полагая  $\xi = F^T(x_0) \xi_{x_0} / \pi(x_0)$ , имеем

$$I = E\xi = E\left\{ \frac{F^T(x_0)}{\pi(x_0)} \xi_{x_0} \right\}, \quad E\xi^2 = E\left\{ \frac{F^T(x_0) \xi_{x_0} \xi_{x_0}^T F(x_0)}{\pi^2(x_0)} \right\} = E\left\{ \frac{F^T(x_0) \Psi(x_0) F(x_0)}{\pi^2(x_0)} \right\}. \quad (10)$$

Таким образом, дисперсия  $D\xi$  определяется матрицей вторых моментов  $\Psi(x)$ . В частности,  $D\xi < +\infty$ , если  $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$  и  $F^T(x) / \pi(x) \in L_1(X)$  [2], [4]. Если спектральный радиус  $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) > 1$ , то величина  $D\xi$  может быть бесконечно большой и использование весовой оценки  $\xi$  для вычисления функционала  $I$  нецелесообразно.

## 2 Векторная оценка с ветвлением траектории

Рассмотрим систему уравнений (1) с неотрицательными компонентами  $k_{ij}(x, y), h_i(x), (i, j = 1, \dots, m)$ . Здесь и далее будем предполагать, что  $\forall x, y \in X$  все элементы  $Q(x, y) = K(x, y)/p(x, y)$  матричного веса ограничены. Введем целочисленную неотрицательную случайную величину (число “ветвей”)  $\nu_n$  со следующим распределением вероятностей

$$P(\nu_n = [E\nu_n]) = 1 - (E\nu_n - [E\nu_n]), \quad P(\nu_n = [E\nu_n] + 1) = E\nu_n - [E\nu_n]. \quad (11)$$

Нетрудно проверить, что распределение (11) определяет минимальное значение  $D\nu_n$  в классе случайных целочисленных величин с фиксированным значением  $E\nu_n$  [4]

Определим случайную векторную оценку по столкновениям с ветвлением траектории следующей рекурсией:

$$\zeta_{x_0} = H(x_0) + \delta_{x_0} \frac{Q(x_0, x_1)}{E\nu_1} \sum_{i=1}^{\nu_1} \zeta_{x_1}^{(i)}, \quad (12)$$

$$\zeta_{x_{n-1}} = H(x_{n-1}) + \delta_{x_{n-1}} \frac{Q(x_{n-1}, x_n)}{E\nu_n} \sum_{i=1}^{\nu_n} \zeta_{x_n}^{(i)}, \quad (13)$$

где  $\zeta_{x_n}^{(\cdot)}$  — независимые реализации  $\zeta_{x_{n-1}}$ .

**Лемма 1.** При выполнении условий несмещенности (5) и  $\lambda(K) < 1$ , имеет место соотношение  $E\zeta_x = \Phi(x)$ .

*Доказательство.* Так как все элементы в выражениях (12), (13) неотрицательны, то  $\forall n \geq 1$  в силу тождества Вальда имеем

$$E \sum_{i=1}^{\nu_n} \zeta_{x_n}^{(i)} = E\nu_n E\zeta_{x_n}.$$

Это равенство выполняется и в случае  $E\zeta_{x_n} = +\infty$ , так как вследствие неотрицательности элементов задачи имеем:

$$E \sum_{i=1}^{\nu_n} \zeta_{x_n}^{(i)} = EE \left( \sum_{n=1}^{\nu} \zeta_{x_n}^{(i)} | \nu \right).$$

Следовательно, для вычисления величины  $E\zeta_{x_0}$  можно последовательно применять рекурсию вида (6).  $\square$

Заметим, что, для оценки (12), (13) необходимо строить ветвящуюся цепь Маркова, а траекториями такой цепи будут деревья [3]. Согласно рекурсии (12), (13), после “успешного” ( $\delta_{x_{n-1}} = 1$ ) перехода  $x_{n-1} \rightarrow x_n$  из фиксированной вершины “дерева” в  $n$ -ом поколении “испускаются”  $\nu_n$  независимых траекторий с “накопленным” матричным весом

$$\tilde{Q}_n = \frac{Q(x_0, x_1)Q(x_1, x_2) \dots Q(x_{n-1}, x_n)}{E\nu_1 \dots E\nu_n} = \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n)}{E\nu_1 \dots E\nu_{n-1}E\nu_n} \quad (n \geq 1). \quad (14)$$

Стоит отметить, что величина полного матричного веса  $\tilde{Q}_n$  в каждой вершине дерева для  $n$ -ого поколения принимает разные значения. Формально в таких случаях каждой вершине дерева нужно однозначно сопоставить мультииндекс (набор чисел), который отображает историю появления этой вершины (см., например [3]) и переписать выражение (14) для каждой вершины с учетом таких мультииндексов. Однако такой подход на порядок усложняет изложение и восприятие последующего материала, поэтому здесь и далее мультииндексы будут опущены.

Введем обозначение для произвольного элемента  $\{A\}_{ij} = a_{ij}$  матрицы  $A$  и определим последовательность среднего числа ветвей

$$E\nu_1 = \sup_i \sum_{j=1}^m \{Q(x_0, x_1)\}_{ij}, \quad E\nu_n = \sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n)}{E\nu_1 \dots E\nu_{n-1}} \right\}_{ij}, \quad (n \geq 2). \quad (15)$$

Тогда, прямой подстановкой можно проверить, что  $\forall n \geq 1$

$$E\nu_1 E\nu_2 \dots E\nu_n = \sup_i \sum_{j=1}^m \{Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n)\}_{ij}. \quad (16)$$

Известно, что трудоемкость методов Монте — Карло определяется величиной  $S(\zeta) = T_\zeta D\zeta$ , где  $T_\zeta$  — среднее время моделирования на ЭВМ для получения одного выборочного значения  $\zeta$  [3], [2]. В свою очередь, величина  $T_\zeta$  пропорциональна среднему числу  $EN_\zeta$  полного числа ветвей в цепи Маркова для получения одного выборочного значения  $\zeta$ . Имеет место следующее утверждение.

**Теорема 2.** *Величина  $EN_\zeta$  ограничена, если  $\lambda(B_p) < 1$ .*

*Доказательство.* Заметим, что величину  $N_\zeta$  полного числа ветвей можно интерпретировать как полное число частиц в следующей неоднородной модификации ветвящегося процесса Гальтона-Ватсона [8]. В состоянии  $x_0$  находится одна частица (ветвь). Далее, после реализации успешного ( $\delta_{x_{n-1}} = 1$ ) случайного перехода  $x_{n-1} \rightarrow x_n$  ( $n \geq 1$ ) согласно плотности  $p(x_{n-1}, x_n)$ , частица производит случайное количество новых частиц (ветвей)  $\nu_n$  в соответствии с распределением (11), где величина  $E\nu_n$  задается выражением (15). При этом величины  $E\nu_n$  и  $\nu_n$  случайны и зависят от предыдущих состояний  $x_0, x_1, \dots, x_n$ . Поэтому здесь и далее в наших рассуждениях мы учитываем, что  $E\nu_n = E\nu_n(x_0, \dots, x_n)$ .

Получим оценку сверху для “полного” среднего количества частиц  $E(E\nu_n)$ . Согласно определения (15), для “полного” среднего количества частиц  $E(E\nu_1)$  имеет место следующее неравенство:

$$E(E\nu_1) = \int_X p(x_0, x_1) \sup_i \sum_{j=1}^m \{Q(x_0, x_1)\}_{ij} dx_1 \leq m \sup_i \int_X \sum_{j=1}^m \{K(x_0, x_1)\}_{ij} dx_1 \leq m\|\mathbf{K}\| \quad (17)$$

Заметим, что, согласно выражения для “полного” матричного веса (см. (4)), при  $n \geq 2$  имеем

$$Q_n = \frac{Q_{n-1}K(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)} = \frac{K(x_0, x_1)K(x_1, x_2) \dots K(x_{n-1}, x_n)}{p(x_0, x_1) \dots p(x_{n-1}, x_n)} = \frac{K_n}{p(x_0, x_1) \dots p(x_{n-1}, x_n)}.$$

где  $K_n \equiv K(x_0, x_1)K(x_1, x_2) \dots K(x_{n-1}, x_n)$ . С учетом последнего соотношения и выражений (15), (16), величину  $E\nu_n$  можно представить в следующем виде

$$E\nu_n = \sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n)}{E\nu_1 \dots E\nu_{n-1}} \right\}_{ij} = \frac{\sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{\sup_i \sum_{j=1}^m \{Q_{n-1}\}_{ij}} = \frac{\sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{p(x_{n-1}, x_n) \sup_i \sum_{j=1}^m \{K_{n-1}\}_{ij}} \quad (18)$$

Отсюда “полное” среднее количество частиц (ветвей) в произвольной точке  $n$ -го поколения столкновений определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} E(E\nu_n) &= \int_X \dots \int_X p(x_0, x_1) \dots p(x_{n-1}, x_n) E\nu_n dx_1 \dots dx_n \\ &= \int_X \dots \int_X p(x_0, x_1) \dots p(x_{n-1}, x_n) \frac{\sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{p(x_{n-1}, x_n) \sup_i \sum_{j=1}^m \{K_{n-1}\}_{ij}} dx_1 \dots dx_n. \end{aligned}$$

Заметим, что число  $\sup_i \sum_{j=1}^m \{A(\cdot, \cdot)\}_{ij}$  представляет собой норму для значений матричной функции  $A$  в пространстве  $\mathbf{L}_\infty$ . Используя свойство нормы

$$\sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij} \leq \sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K_{n-1} \right\}_{ij} \sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij} \quad (19)$$

и полученное выше неравенство  $E(E\nu_1) \leq m\|\mathbf{K}\|$ , можно получить следующую оценку

$$E(E\nu_n) = \int_X \dots \int_X p(x_0, x_1) \dots p(x_{n-1}, x_n) \frac{\sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{p(x_{n-1}, x_n) \sup_i \sum_{j=1}^m \{K_{n-1}\}_{ij}} dx_1 \dots dx_n.$$

$$\leq \int_X \dots \int_X p(x_0, x_1) \dots p(x_{n-2}, x_{n-1}) \int_X \sup_i \sum_{j=1}^m \int_X \left\{ K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij} dx_1 \dots dx_n \leq \|B_p^{n-1}\| m \|\mathbf{K}\|. \quad (20)$$

Рассмотрим теперь “мажорантный” ветвящийся процесс Гальтона-Ватсона, в котором после успешного ( $\delta_{x_{n-1}} = 1$ ) случайного перехода  $x_{n-1} \rightarrow x_n$  ( $n \geq 1$ ) согласно плотности  $p(x_{n-1}, x_n)$  частица производит случайное количество новых частиц (ветвей)  $\tilde{\nu}_n$  в соответствии с распределением (11), причем  $E\tilde{\nu}_n = \|B_p^{n-1}\| m \|\mathbf{K}\|$ . Введем обозначение  $N_{\tilde{\nu}}$  для полного числа частиц в таком процессе. С учетом того, что  $E(\nu_n) \leq E\tilde{\nu}_n$  можно утверждать (см. [6]), что  $EN_{\zeta} \leq EN_{\tilde{\nu}}$ . Покажем теперь, что для такого “мажорантного” ветвящегося процесса величина  $EN_{\tilde{\nu}}$  ограничена.

Известно, что условие  $\lambda(B_p) < 1$  гарантирует нам, что существует такой номер  $n_0 \geq 1$ , что  $\|B_p^{n_0}\| < 1$  [3]. Поэтому найдется такой номер  $n_1 > n_0$ , что  $E\tilde{\nu}_n = \|B_p^{n-1}\| m \|\mathbf{K}\| \leq 1 - \varepsilon_1 < 1$  [3] при  $n > n_1$  и, с учетом распределения (11),

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E\tilde{\nu}_n = \lim_{n \rightarrow \infty} P(\tilde{\nu}_n = 1) = 0.$$

Таким образом, в построенном мажорантном ветвящемся процессе до  $n_1$ -го поколения количество частиц в каждом поколении может в среднем увеличиваться, но ограничено в силу соответствующего распределения (11) для  $\tilde{\nu}_n$  и ограниченности каждого элемента в матричном весе  $Q(\cdot, \cdot)$  после очередного перехода. Следовательно  $EN_{\zeta} \leq EN_{\tilde{\nu}} < C < \infty$ .  $\square$

**Теорема 3.** Если выполняются условия леммы 1 и теоремы 2 то  $\tilde{\Psi}(x) = E(\zeta_x \zeta_x^T) \in \mathbf{L}_{\infty}(X)$ .

*Доказательство.* Как было замечено выше, для оценки  $\zeta_x$  (см. (12), (13)) необходимо строить ветвящуюся цепь Маркова. В этом случае выборочное значение вектора  $\zeta_x$  определяется случайной суммой  $N_{\zeta_x}$  слагаемых вида  $\tilde{Q}_n H(x_n)$  ( $n \geq 1$ ), определенных в соответствующих вершинах дерева.

Прямая подстановка величины (15) в (14) дает нам следующее выражение

$$\tilde{Q}_n = \frac{Q_{n-1} Q(x_{n-1}, x_n)}{E\nu_1 \dots E\nu_{n-1} E\nu_n} = \frac{Q_{n-1} Q(x_{n-1}, x_n)}{\sup_i \sum_{j=1}^m \{Q_{n-1} Q(x_{n-1}, x_n)\}_{ij}}.$$

Последнее выражение гарантирует нам, что каждый случайный элемент матрицы  $\tilde{Q}_n$  ограничен единицей. Следовательно,  $\forall n \geq 1$

$$\|\tilde{Q}_n H(x_n)\| \leq m \|H\|_{L_{\infty}}, \quad \|H^T(x_n) \tilde{Q}_n^T\| \leq m \|H\|_{L_{\infty}}.$$

Поэтому

$$\|(\zeta_x \zeta_x^T)\|_{L_{\infty}} = \left\| \sum_{i=1}^{N_{\zeta}} \tilde{Q}_i H(x_i) \sum_{i=1}^{N_{\zeta}} H^T(x_i) \tilde{Q}_i^T \right\|_{L_{\infty}} \leq m^2 \|H\|_{L_{\infty}}^2 N_{\zeta}^2 < \infty,$$

и

$$\|E(\zeta_x \zeta_x^T)\|_{L_{\infty}} \leq m^2 \|H\|_{L_{\infty}}^2 EN_{\zeta}^2.$$

Последовательно применяя метод “частичного” осреднения [4] к величине  $N_{\zeta}^2$ , можно проверить, что величина  $EN_{\zeta}^2$  определяется сходящимся рядом Неймана.  $\square$

Для оценки линейных функционалов вида (9), которые зависят от решения исходной системы (1) с знакопеременными элементами  $k_{ij}(x, y)$ ,  $h_i(x)$ , ( $i, j = 1, \dots, m$ ), следует воспользоваться рекурсией  $\zeta_x^{(1)}$  вида (12), (13), если в выражениях для среднего числа ветвей (15) сделать замену  $Q(\cdot, \cdot) \rightarrow Q^{(1)}(\cdot, \cdot)$ , где  $Q^{(1)}(\cdot, \cdot)$  — матричный вес (см. (6)), соответствующий оператору  $\mathbf{K}_1$ . Из определения  $\zeta_x^{(1)}$  очевидно следует, что  $|\zeta_x^{(1)}| \leq \eta_x^{(1)}$ , где  $\eta_x^{(1)}$  — оценка вида (12), (13) с (15) для системы (1) с элементами  $|k((i, x)(j, y))|$ ,  $|h(i, x)|$ . При сделанных выше предположениях величина  $E\eta_x^{(1)}$  конечна. Вследствие теоремы Лебега о мажорируемой сходимости и условия  $\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$  для оценки  $\zeta_x^{(1)}$  имеют место равенство  $E\zeta_x^{(1)} = \Phi(x)$  и утверждения теорем 3, 2.

В конце раздела 1 было отмечено, что существенным ограничением на использование стандартной векторной оценки  $\xi = F^T(x_0)\xi_{x_0}/\pi(x_0)$  для вычисления функционала  $I = (F, \Phi)$  является условие  $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$ . Для построенной выше векторной оценки с ветвлением траектории  $\zeta^{(1)} = F^T(x_0)\zeta_{x_0}^{(1)}/\pi(x_0)$  имеет место более слабое ограничение.

**Утверждение 1** Трудоемкость  $S(\zeta^{(1)})$  ограничена, если ограничен исходный функционал  $I$  ( $\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$  и  $F^T(x)/\pi(x) \in L_1$ ).

### 3 Приложение в теории переноса излучения с учетом поляризации

Известно, что для описания поляризационных свойств света удобно использовать вектор Стокса [1, 2]  $\tilde{\Phi}(x) = (\tilde{\varphi}_1(x), \tilde{\varphi}_2(x), \tilde{\varphi}_3(x), \tilde{\varphi}_4(x))^T$ , причем, вектор функции  $\tilde{\Phi}$  образуют конус  $S_t$ , определяемый соотношениями:

$$\tilde{\varphi}_1(x) \geq 0, \quad \tilde{\varphi}_2^2(x) + \tilde{\varphi}_3^2(x) + \tilde{\varphi}_4^2(x) \leq \tilde{\varphi}_1^2(x), \quad (21)$$

а компоненты вектора  $\tilde{\Phi}$  удовлетворяют системе интегральных уравнений переноса с учетом поляризации вида (1):

$$\tilde{\varphi}_i(x) = \int \sum_{j=1}^4 k_{ij}(x, x') \tilde{\varphi}_j(x') dx' + h_i(x), \quad i = 1, \dots, 4, \quad \text{или} \quad \tilde{\Phi} = \mathbf{K}\tilde{\Phi} + H \quad (22)$$

Здесь  $x = (\mathbf{r}, \omega)$ , где  $\mathbf{r}$  — точка физического пространства  $R$ ,  $\omega \in \Omega$  — единичный вектор направления пробега частицы и  $\mathbf{K} \in [S_t \rightarrow S_t][2]$ . Введем следующие обозначения:  $\mu = (\omega, \omega')$  — косинус угла рассеяния,  $\theta$  — азимутальный угол рассеяния,  $p_2(\mu)$  — индикатриса рассеяния,  $\sigma(\mathbf{r}) = \sigma_s(\mathbf{r}) + \sigma_c(\mathbf{r})$  — полное сечение,  $\sigma_s(\mathbf{r})$  и  $\sigma_c(\mathbf{r})$  — сечения рассеяния и поглощения соответственно,  $q(\mathbf{r}) = \sigma_s(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r})$  — вероятность рассеяния,  $l$  — длина свободного пробега,  $p_\chi(l; \mathbf{r}, \omega')$  — субстохастическая плотность распределения длины пробега из точки  $\mathbf{r}$  в направлении  $\omega'$ . Известно, что

$$p_\chi(l; \mathbf{r}, \omega') = \sigma(\mathbf{r} + \omega' l) \exp\left(-\int_0^l \sigma(\mathbf{r} + s\omega') ds\right), \quad l \leq l^*(\mathbf{r}, \omega'),$$

где  $l^*(\mathbf{r}, \omega')$  — расстояние от точки  $\mathbf{r}$  вдоль направления  $\omega'$  до границы среды, которую можно считать выпуклой. С учетом введенных вспомогательных переменных  $\mu, \theta, l$ , матрица ядер для системы (22) задается соотношением [1], [5]:

$$K(x, y) = qp_\chi(l; \mathbf{r}, \omega') P^T(\mu, \theta) \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \theta)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega' l), \quad (23)$$

где  $y = (\mathbf{r}', \omega') = (\mu, \theta, l, x')$ ,  $P^T(\mu, \theta) = L(i_1) R^T(\mu) L(-\pi + i_2)/2\pi$ ,

$$R(\mu) = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} \\ 0 & 0 & -r_{43} & r_{44} \end{pmatrix}, \quad L(i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2i & \sin 2i & 0 \\ 0 & -\sin 2i & \cos 2i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

где  $i_k = i_k(\omega, \mu, \theta)$ ;  $k = 1, 2$ ;  $\theta \in U(0, 2\pi)$ ;  $r_{ij} = r_{ij}(\mu)$ ;  $r_{11} \geq 0$ ;  $\int_{-1}^{+1} r_{11}(\mu) d\mu = 1$ . Предполагается, что среда изотропна и  $P$  не зависит от  $\mathbf{r}$ . Если рассеивающие частицы сами являются однородными сферами, то  $r_{11} = r_{22}, r_{12} = r_{21}, r_{33} = r_{44}, r_{34} = r_{43}$  [1], [2].

Известно [1], [2], что для решения системы (22) методом Монте — Карло можно построить весовую векторную оценку по столкновениям  $\xi_x$  вида (6). Несмотря на знакопеременность ядер матрицы  $K(x, y)$ , в работах [1], [2], [9] было доказано, что, в силу свойств вектор-функций Стокса (21) и оператора  $\mathbf{K} \in [S_t \rightarrow S_t]$  из системы (22), для выполнения равенства  $E\xi_x = \tilde{\Phi}(x)$  достаточно, чтобы выполнялось условие  $\lambda(\mathbf{K}) < 1$  — более слабое, чем в разделе 1. Если используется переходная плотность вида

$$p(x, y) = q_1 p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega') p_2(\mu) \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \varphi)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega' l)/(2\pi), \quad (24)$$

то, по сравнению с условиями теоремы 1, здесь для ограниченности элементов матрицы вторых моментов  $E(\xi_x \xi_x^T)$  достаточно потребовать, чтобы выполнялось условие:  $\lambda(\mathbf{K}_p) < 1$  ([2], [5]). В работе [2] было получено следующее неравенство:

$$\lambda(\mathbf{K}_p) \leq q_0 \lambda(S_p), \quad \text{где} \quad q_0 = \sup_{\mathbf{r}, \omega} \int_0^\infty \frac{q^2 p_\chi^2(l; \mathbf{r}, \omega)}{q_1 p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega)} dl, \quad (25)$$

а  $S_p$  — оператор, получаемый из  $\mathbf{K}_p$  подстановкой  $x \rightarrow \omega, y \rightarrow \omega', p \rightarrow p_2/2\pi, K \rightarrow P^T$  ( $S_p$  соответствует “чистому” рассеянию в бесконечно однородной среде).

Таким образом, если  $q_0 < 1/\lambda(S_p)$ , то обычно используемые оценки вида  $\xi = F^T(x_0)\xi_{x_0}/\pi(x_0)$  для линейных функционалов вида  $\tilde{I} = (F, \tilde{\Phi})$  имеют конечную дисперсию при надлежащем выборе  $\pi(x)$  [2]. В частности, для молекулярного рассеяния [1]

$$r_{11}(\mu) = \frac{3(1+\mu^2)}{8}, \quad r_{12}(\mu) = -\frac{3(1-\mu^2)}{8}, \quad r_{33}(\mu) = \frac{3\mu}{4}, \quad r_{34}(\mu) = 0, \quad \mu \in [-1, 1], \quad (26)$$

при  $p_2 \equiv r_{11}$  было вычислено значение  $\lambda(S_p) = 1 + (3\pi - 8)/8 \approx 1.178$  [5], а следовательно, дисперсия оценки  $\xi$  в реальной среде конечна только при достаточно большом поглощении. Даже при моделировании “без поглощения” [1], [3] ( $q_1 \equiv 1, p_\chi^{(1)} = p_\chi$ ) получаем, что  $\lambda(\mathbf{K}_p) \leq (1 - \sigma_c/\sigma)^2 \lambda(S_p)$  и  $\lambda(\mathbf{K}_p) < 1$  при  $\sigma_c/\sigma > 0.0787$ . Таким образом при  $\sigma_c/\sigma < 0.0787$  дисперсия векторной оценки  $\xi$  может быть бесконечно большой величиной и вопрос об обоснованности применения векторного алгоритма Монте — Карло для оценки линейных функционалов от решения системы (22) в случае молекулярного рассеяния остаётся открытым.

Как было кратко упомянуто выше, исходя из свойств вектор-функций Стокса (21) и оператора  $\mathbf{K} \in [S_t \rightarrow S_t]$  (см. (22)) можно заметить, что в стандартной векторной оценки  $\xi_x$  все слагаемые ее первой компоненты  $\xi_{x,1}$  неотрицательны [2]. Поэтому, при выполнении условия  $\lambda(\mathbf{K}) < 1$ , величину  $\xi_{x,1}$  можно осреднять почленно (т.е.  $E\xi_{x,1} = \tilde{\varphi}_1(x)$ ), а осреднение остальных компонент производить на основе мажорантного свойства первой компоненты вектора Стокса [1], [2], [9]. Также неотрицательность первой компоненты  $\xi_{x,1}$  и условие  $\lambda(\mathbf{K}_p) < 1$  гарантируют нам возможность почленного осреднения для выражения  $\xi_x \xi_x^T$  в силу сходимости мажорантной компоненты  $E\xi_{x,1}^2 = \Psi_{11}(x)$  в ряде Неймана (7) для матрицы вторых моментов  $\Psi$  [2]. Рассмотрим теперь для решения системы (22) векторную весовую оценку  $\tilde{\zeta}_x$  с ветвлением траектории (см. (12), (13)), для которой среднее количество ветвей после каждого перехода

$$E\nu_1 = \sup_i \sum_{j=1}^m |\{Q(x_0, x_1)\}_{ij}|, \quad E\nu_n = \sup_i \sum_{j=1}^m \left| \left\{ \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n)}{E\nu_1 \dots E\nu_{n-1}} \right\}_{ij} \right|, \quad (n \geq 2), \quad (27)$$

будет определяться уже знакопеременными элементами матричного веса  $Q(\cdot, \cdot)$  оператора  $\mathbf{K}$ . В силу конструкции оценки  $\tilde{\zeta}_x$  свойств вектор-функций Стокса (21) и оператора  $\mathbf{K} \in [S_t \rightarrow S_t]$  легко заметить, что первая компонента  $\tilde{\zeta}_{x,1}$  будет так же мажорантной, а все ее слагаемые — неотрицательны. Поэтому, согласно изложенному выше, для оценки  $\tilde{\zeta}_x$  имеют место соответствующие аналоги утверждений леммы 1, теорем 3, 2 при выполнении условия  $\lambda(\mathbf{K}) < 1$ .

В качестве обобщения последних замечаний сформулируем аналог утверждения 1 для векторной оценки с ветвлением траектории  $\tilde{\zeta} = F^T(x_0)\tilde{\zeta}_{x_0}/\pi(x_0)$  линейного функционала  $\tilde{I} = (F, \tilde{\Phi})$ .

**Утверждение 2** Трудоемкость  $S(\tilde{\zeta})$  ограничена, если ограничен исходный функционал  $\tilde{I}$  ( $\lambda(\mathbf{K}) < 1$  и  $F^T(x)/\pi(x) \in L_1$ ).

## 4 Тестовая задача

Рассмотрим бесконечную однородную среду, заполненную рассеивающим и поглощающим свет веществом, с источником “естественного” излучения в точке  $x_0 = (\mathbf{r}_0, \omega_0) = ((0, 0, 0), (0, 0, 1))$  и  $\sigma(\mathbf{r}) \equiv \sigma = 1$ . Для описанной выше среды и источника рассмотрим прикладную задачу оценки интенсивности излучения, выходящего из полубесконечного слоя  $z > 0$  при молекулярном рассеянии (см. (26)). Известно, что такой функционал определяется средним значением первой компоненты вектора Стокса  $\tilde{\varphi}_1$  (см. (22)) для вылетающих частиц [1]. Результаты расчетов представлены в таблице 1, где в колонках приведены статистические оценки величин  $E(\cdot)_M$ ,  $\sigma(\cdot)_M = \sqrt{D(\cdot)/M}$  с использованием, соответственно, стандартной векторной оценки по столкновениям  $\xi$  (6), векторной оценки  $\tilde{\zeta}$  с ветвлением траектории (см. (12), (13), (27)) и модифицированной оценки  $\eta$  с ветвлением траектории только в случае, когда среднее количество ветвей  $E\nu_n$  больше единицы (см. (27)). В качестве переходной плотности была использована функция вида (24) с  $q_1 = (1 - \sigma_c)$ ,  $p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega') = p_\chi(l; \mathbf{r}, \omega') = e^{-l}$ ,  $p_2(\mu) = r_{11}(\mu)$ . Заметим, что для последней модификации величина  $D\eta$  заведомо меньше величины  $D\tilde{\zeta}$ , но, из-за дополнительных ветвей, среднее значение числа  $E\eta$  столкновений может в разы превосходить величину  $EN_{\tilde{\zeta}}$ . Результаты расчетов показывают, что для заданного значения  $\sigma_c = 0.01$ , которое существенно меньше критического значения 0.0787, наблюдается рост статистических оценок дисперсии  $D\xi_M$  при увеличении числа моделируемых траекторий, т.е. имеет место отсутствие сходимости статистической оценки дисперсии стандартной оценки  $\xi$ . Однако, значения выборочных средних  $E\xi_M$  несущественно отличаются от статистических оценок  $E\tilde{\zeta}_M, E\eta_M$  с заведомо ограниченными

соответствующими статистическими оценками среднеквадратических погрешностей.  $\sigma(\tilde{\zeta})_M, \sigma(\eta)_M$ . Дополнительно, при проведении расчетов с использованием стандартной весовой оценки  $\xi$ , вычислялась приближенная скалярная оценка  $\xi$  интенсивности излучения (без учета поляризации) [1], которая определяется средним количеством частиц, вылетевших из слоя  $z > 0$ . Анализ расчетов показал, что величины относительной трудоемкости алгоритмов при использовании оценок  $\xi, \tilde{\zeta}, \eta$  соотносятся приблизительно как 1 : 11.6 : 40.13, а размеры максимального поколения в процессе расчета  $M = 10^9$  траекторий при использовании оценок  $\tilde{\zeta}$  и  $\eta$  составили 226 и 782 соответственно. Дополнительно стоит отметить, что при использовании оценки  $\eta$  можно в одном расчете получить оценку относительной погрешности между первой компонентой вектора Стокса и ее приближенной скалярной оценкой по отношению к последней. Так, для  $M = 10^9$ , значение этой относительной погрешности составило 0.00076, а ее среднеквадратическое отклонение составило 0.00002.

Таблица 1: Оценка интенсивности излучения, выходящего из полубесконечного слоя  $z > 0$  ( $\sigma_c = 0.01$ )

M	$E\xi_M \pm \sigma(\xi)_M$	$V\xi$	$E\tilde{\zeta}_M \pm \sigma(\tilde{\zeta})_M$	$E\eta_M \pm \sigma(\eta)_M$
$10^6$	$0.722991 \pm 0.0054$	29.5	$0.753884 \pm 0.000932$	$0.752787 \pm 0.000740$
$10^7$	$0.732716 \pm 0.0022$	52.5	$0.753206 \pm 0.000294$	$0.753013 \pm 0.000234$
$10^8$	$0.743028 \pm 0.0026$	716.8	$0.753276 \pm 0.000093$	$0.753154 \pm 0.000074$
$10^9$	$0.746381 \pm 0.0013$	1650.1	$0.753272 \pm 0.000029$	$0.753237 \pm 0.000023$

## Список литературы

- [1] Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др. Метод Монте — Карло в атмосферной оптике. — Новосибирск: Наука, 1976 [Engl.transl.: Springer-Verlag, 1980]
- [2] Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте — Карло. М.: Наука, 1987 [Engl.transl.: Springer-Verlag, 1992].
- [3] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. М, Наука, 1982.
- [4] Михайлов Г.А., Медведев И.Н. Оптимизация весовых алгоритмов статистического моделирования. — Новосибирск: Омега Принт, 2011. — 304 с.
- [5] Г. А. Михайлов, С. А. Ухинов, А. С. Чимаева Дисперсия стандартной векторной оценки метода Монте — Карло в теории переноса поляризованного излучения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., Т.46, № 11, 2006, 2099–2113
- [6] Г.А. Михайлов, И.Н. Медведев Улучшение весового статистического моделирования на основе перехода к процессу Гальтона-Ватсона // Докл. РАН. — 2009 — Т. 424, № 3, С. 311–314
- [7] Михайлов Г. А., Ухинов С. А. Двойственное представление среднего квадрата векторной оценки метода Монте — Карло // Доклады РАН. 2011. Т. 438, N 5.
- [8] Севастьянов Б.А. Ветвящиеся процессы. М.: Наука 1971 г.
- [9] Ukhinov S.A., Yurkov D. I. Monte Carlo method of calculating the derivatives of polarized radiation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1998. V. 13. N 5. P. 425–444.

Медведев Илья Николаевич — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;  
e-mail: min@osmf.sscc.ru.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.