

УДК 519.642

Весовые алгоритмы метода Монте-Карло для оценки и параметрического анализа решения кинетического уравнения коагуляции*

А.В. Бурмистров^{1,2}, М.А. Коротченко¹

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090
E-mails: burm@osmf.sccc.ru (Бурмистров А.В.), kmaria@osmf.sccc.ru (Коротченко М.А.)

Бурмистров А.В., Коротченко М.А. Весовые алгоритмы метода Монте-Карло для оценки и параметрического анализа решения кинетического уравнения коагуляции // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2014. — Т. 17, № 2. — С. 125–138.

Рассматривается уравнение Смолуховского с линейными коэффициентами коагуляции, зависящими от двух параметров. Построены весовые алгоритмы для оценки линейных функционалов от решения рассматриваемого уравнения. Предложенные алгоритмы позволяют одновременно оценивать как функционалы для различных наборов параметров, так и параметрические производные. Кроме того, в работе разработаны ценностные алгоритмы и проанализирована их эффективность для вычисления двух функционалов: концентрации мономеров в ансамбле в заданный момент времени, а также концентрации мономеров и димеров. Значительное уменьшение трудоемкости достигается путем ценностного моделирования двух элементарных переходов: выбора времени между взаимодействиями и выбора номера пары взаимодействующих частиц.

Ключевые слова: статистическое моделирование, эволюция многочастичной системы, уравнение Смолуховского, функция ценности, параметрическая производная, мультипликативный вес, трудоемкость.

Burmistrov A.V., Korotchenko M.A. Weight Monte Carlo algorithms for estimation and parametric analysis of the solution to the kinetic coagulation equation // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2014. — Vol. 17, № 2. — P. 125–138.

The Smoluchowski equation with linear coagulation coefficients depending on two parameters is considered. We construct weight algorithms for estimating various linear functionals in an ensemble, which is governed by the equation under study. The algorithms constructed allow us to estimate the functionals for various parameters as well as parametric derivatives using the same set of trajectories. Moreover, we construct the value algorithms and analyze their efficiency for estimating the total monomer concentration as well as the total monomer and dimer concentration in the ensemble. A considerable gain in computational costs is achieved via the approximate value simulation of the time between interactions combined with the value simulation of the interacting pair number.

Key words: statistical modeling, evolution of many-particle system, Smoluchowski equation, value function, parametric derivative, multiplicative weight, computational cost.

В данной работе мы рассматриваем уравнение Смолуховского, которое описывает широкий класс процессов коагуляции в различных физических системах, состоящих из частиц с целочисленными размерами. Предположим, что при заданных коэффициентах

*Работа выполнена при финансовой поддержке СО РАН (Междисциплинарный интеграционный проект № 47), РФФИ (проекты № 11-01-00252, № 12-01-00034, № 12-01-31134, № 13-01-00746, № 14-01-00340, № 14-01-31451) и проекта Ведущие научные школы НШ-5111.2014.1

коагуляции K_{kl} вероятность взаимодействия (или *столкновения*) частиц с размерами k и l в течение временного интервала Δt равна $K_{kl}\Delta t$. Будем называть k -мером частицу размера k . Тогда в пространственно однородном случае концентрация k -меров $n_k(t)$ в момент времени t удовлетворяет следующему кинетическому уравнению:

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

Это уравнение представляет скорость изменения концентрации k -меров по времени в виде суммы двух слагаемых: первое слагаемое — это скорость, с которой k -меры появляются в результате коагуляции частиц меньшего размера (множитель $1/2$ необходим для того, чтобы каждое такое взаимодействие было учтено только один раз); второе слагаемое описывает уменьшение концентрации k -меров за счет их коагуляции с другими частицами. Присоединяя к уравнению (1) начальные условия

$$n_k(0) = n_0(k), \quad k > 0,$$

получим задачу Коши для нелинейного уравнения Смолуховского. В настоящей работе для оценки линейных функционалов от решения $n_k(t)$ мы построим весовые модификации статистических алгоритмов, в том числе специальный вид весовых алгоритмов — ценностные, а также весовые алгоритмы для оценки параметрических производных.

Для численной оценки линейных функционалов нами будет рассмотрена эволюция многочастичной системы (см. [3]). С этой целью будем моделировать однородную цепь Маркова, переходы в которой осуществляются в результате парных взаимодействий. Далее будем использовать следующие обозначения:

N_0 — начальное число частиц в системе, заданное в момент времени $t = 0$;

l_i — размер частицы с номером i ;

$N \leq N_0$ — текущее число частиц в системе;

$\varpi = (i, j)$ — номер пары взаимодействующих частиц;

вектор $X = (N, L_N) = (N, l_1, \dots, l_N) \in \mathbf{X}$ описывает фазовое состояние многочастичной системы;

$A(X) = \sum_{\varpi} a(N, l_i, l_j)$, где $a(1, l_i, l_j) \equiv 0$, а при $N > 1$ имеем

$$a(\varpi) \equiv a(N, l_i, l_j) = \frac{1}{N_0} \sum_{l=1}^{\infty} K_{l_i, l_j} \delta_{l_i+l_j, l},$$

здесь $\delta_{m,n}$ — символ Кронекера;

$P(X, t)$ — набор вероятностей, описывающий распределение состояния системы в момент времени t ;

вектор $Z = (X, \varpi) \in \mathbf{Z}$ описывает фазовое состояние многочастичной системы в модифицированном фазовом пространстве. При этом $dZ = dX d\mu_0(\varpi)$, и интегрирование по мере μ_0 является суммированием по всем возможным парам ϖ , а интегрирование по dX означает суммирование по всем значениям N и L_N .

Отметим, что в предположении молекулярного хаоса в пределе при $N_0 \rightarrow \infty$ можем получить (см. [6]):

$$\frac{1}{N_0} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{l_2=1}^{\infty} \cdots \sum_{l_N=1}^{\infty} NP(N, l, l_2, \dots, l_N, t) \rightarrow n_l(t).$$

Данный предельный переход позволит нам оценивать функционалы от решения уравнения (1) посредством интегрального уравнения, используя описанный ниже алгоритм.

Разработанные модификации весового моделирования основаны на методике, предложенной в работе [5], которая заключается в модификации фазового пространства путем введения номера пары ϖ в число фазовых координат. Данный подход позволил в работе [5] получить интегральное уравнение специального вида относительно функции $F(X, \varpi, t) = a(\varpi)P(X, t)$ в модифицированном фазовом пространстве $\mathbf{Z} \times [0, T]$: $F = \mathbf{K}F + F_0$ или

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

Здесь $F_0(Z, t) = F_0(Z)\delta(t)$ и $\delta(\cdot)$ — дельта-функция Дирака. Данное уравнение может быть использовано с целью построения стандартных весовых модификаций статистического моделирования многочастичных систем в силу мультипликативной структуры своего ядра

$$K(Z', t' \rightarrow Z, t) = K_1(t' \rightarrow t|X') \cdot K_2(\varpi|X') \cdot K_3(X' \rightarrow X|\varpi).$$

Распределение времени между элементарными взаимодействиями является экспоненциальным:

$$K_1(t' \rightarrow t|X') = A(X') \exp\{-A(X')(t - t')\}.$$

Вероятность того, что в N' -частичной системе будет взаимодействовать пара с номером $\varpi = (i, j)$, равна

$$K_2(\varpi|X') \equiv K_2(i, j|X') = \frac{a(\varpi)}{A(X')} = \frac{a(N', l_i, l_j)}{A(X')}.$$

Наконец, функция $K_3(X' \rightarrow X|\varpi)$ описывает преобразование в системе после взаимодействия пары частиц $\varpi = (i, j)$, которое состоит в замене взаимодействующих частиц i и j одной частицей с размером $l = l_i + l_j$. Таким образом, в результате взаимодействия число частиц в системе уменьшается, т.е. $N = N' - 1$.

Несмотря на наличие в ядре оператора \mathbf{K} обобщенных функций, его можно рассматривать действующим из $L_1(\mathbf{Z} \times [0, T])$ в $L_1(\mathbf{Z} \times [0, T])$ (см. [9]). Кроме того, в силу конечности временного интервала норма $\|\mathbf{K}\|_{L_1} < 1$. Следовательно, ряд Неймана:

$$F(Z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{K}^n F_0(Z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} F_n(Z, t)$$

для уравнения (2) сходится в норме L_1 . Заметим, что $F_n(Z, t)$ — плотность распределения n -х взаимодействий в системе. Это обстоятельство позволяет использовать уравнение (2) для построения весовых оценок.

При решении кинетических уравнений, как правило, оценивают функционалы следующего вида:

$$J_H(T) = \int_{\mathbf{X}} H(X) P(X, T) dX.$$

В работе [5] было показано, что для функции

$$\tilde{H}(X, t) = H(X) \exp\{-A(X)t\}, \quad H(X) \in L_{\infty}, \quad (3)$$

выполняется следующее равенство:

$$J_H(T) = \int_0^T \int_{\mathbf{z}} \tilde{H}(X, T-t') F(Z, t') \, dZ \, dt' \equiv (F, \tilde{H}),$$

таким образом, $J_H(T)$ является линейным функционалом от решения F уравнения (2).

1. Постановка задачи

В данной работе мы рассматриваем случай линейных коэффициентов коагуляции, зависящих от двух параметров \mathbf{a} и \mathbf{b} :

$$K_{lm} = \mathbf{a} + \mathbf{b} \frac{(l+m)}{2}. \quad (4)$$

Коэффициенты такого вида встречаются, например, в классической модели полимеров $\mathbf{A}-R-\mathbf{B}_{f-1}$ (см. [7]). В рамках этой модели мономерами считают молекулы с $f-1$ химически активными молекулами одного типа (\mathbf{B}) и одной молекулой другого типа (\mathbf{A}). Между молекулами типа \mathbf{A} и типа \mathbf{B} образуются химические связи, при этом взаимодействия между молекулами одного типа ($\mathbf{A}-\mathbf{A}$ или $\mathbf{B}-\mathbf{B}$), а также взаимодействия между молекулами одного мультимера (чтобы исключить образование циклов) запрещены. В результате взаимодействий образуются ветвящиеся молекулы при $f \geq 3$ (см. рисунок).

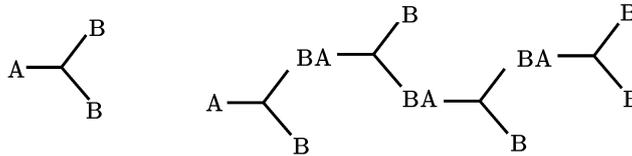


Рис. Пример мономера и 4-мера для $f = 3$

Поскольку число свободных молекул типа \mathbf{A} в l -мере равно 1, а число свободных молекул типа \mathbf{B} равно $[(f-2)l+1]$, то для данной модели скорость коагуляции (или полимеризации) $K_{lm}(f)$ пропорциональна $(l+m)(f-2)+2$, т. е. имеет форму (4). В рассматриваемом нами случае линейных коэффициентов K_{lm} имеем:

$$a(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \varpi) = \frac{2\mathbf{a} + \mathbf{b}(l_i + l_j)}{2N_0}, \quad A(\mathbf{a}, \mathbf{b}, X) = \frac{(N-1)}{2} \left[\mathbf{a} \frac{N}{N_0} + \mathbf{b} \right].$$

При этом множители ядра K имеют следующий вид:

$$K_1(\mathbf{a}, \mathbf{b}, t' \rightarrow t | X') = A(\mathbf{a}, \mathbf{b}, X') \exp\{-A(\mathbf{a}, \mathbf{b}, X')(t-t')\},$$

$$K_2(\mathbf{a}, \mathbf{b}, i, j | X') = \frac{2\mathbf{a} + \mathbf{b}(l_i + l_j)}{\mathbf{a}N(N-1) + \mathbf{b}N_0(N-1)}.$$

В настоящей работе будут построены новые весовые алгоритмы для решения трех задач:

1. Для оценки функционалов $J_H(T) \equiv J_H(\mathbf{a}, \mathbf{b}, T)$ для различных наборов параметров \mathbf{a} и \mathbf{b} при моделировании динамики многочастичной системы только для одной пары параметров \mathbf{a}^* и \mathbf{b}^* ;

2. Для оценки параметрических производных $\frac{\partial J_H}{\partial \mathbf{a}}(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, T)$ и $\frac{\partial J_H}{\partial \mathbf{b}}(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, T)$;
3. Для уменьшения трудоемкости вычисления двух функционалов: концентрации мономеров в ансамбле в заданный момент времени, т. е. функционала $J_{H_1}(T)$ с функцией

$$H_1(X) = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^N \delta(l_i - 1), \quad (5)$$

а также концентрации мономеров и димеров, т. е. функционала $J_{H_{12}}(T)$ с функцией

$$H_{12}(X) = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^N [\delta(l_i - 1) + \delta(l_i - 2)]. \quad (6)$$

Для этого случая будут разработаны ценностные алгоритмы.

2. Весовое моделирование цепи Маркова

Для решения первой задачи, поставленной в предыдущем пункте, мы предлагаем моделировать динамику многочастичной системы для параметров \mathbf{a}^* и \mathbf{b}^* , а для оценки функционалов, соответствующих другим значениям параметров, использовать весовые множители. С этой целью рассмотрим вспомогательную цепь Маркова:

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

с переходной плотностью

$$P^*(Z', t' \rightarrow Z, t) = P_1(t' \rightarrow t | X') \cdot P_2(\varpi | X') \cdot K_3(X' \rightarrow X | \varpi)$$

и плотностью $P_0(Z)\delta(t)$ — распределения начального состояния (Z_0, t_0) . Случайные весовые множители запишем в соответствии со стандартными формулами:

$$Q_0 = F_0(Z)/P_0(Z), \quad Q_n = Q_{n-1}Q(Z_{n-1}, t_{n-1}; Z_n, t_n);$$

$$Q(Z', t'; Z, t) = \frac{K_1(\mathbf{a}, \mathbf{b}, t' \rightarrow t | X')}{P_1(t' \rightarrow t | X')} \cdot \frac{K_2(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \varpi | X')}{P_2(\varpi | X')}.$$

Процесс моделирования каждого взаимодействия в цепи Маркова состоит из двух последовательных элементарных переходов: сначала выбирается временной интервал между взаимодействиями, а затем выбирается пара частиц, участвующих во взаимодействии. Мы предлагаем при моделировании этих переходов использовать следующие плотность P_1 и вероятности P_2 :

$$P_1(t' \rightarrow t | X') = K_1(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, t' \rightarrow t | X');$$

$$P_2(\varpi | X') = K_2(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \varpi | X').$$

Для случая $P_0(Z) = F_0(Z)$, учитывая представление функций K_1 и K_2 , мы можем получить набор элементарных весов $Q(Z_{n-1}, t_{n-1}; Z_n, t_n; \mathbf{a}, \mathbf{b} | \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*)$ в следующем виде:

$$Q(Z_{n-1}, t_{n-1}; Z_n, t_n; \mathbf{a}, \mathbf{b} | \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*) = \frac{2\mathbf{a} + \mathbf{b}(l_i + l_j)}{2\mathbf{a}^* + \mathbf{b}^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_n} \times$$

$$\exp \left\{ -\frac{N_{n-1} - 1}{2} \left[\frac{N_{n-1}}{N_0} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*) + (\mathbf{b} - \mathbf{b}^*) \right] (t_n - t_{n-1}) \right\}.$$

Для оценки величины $J_H(\mathbf{a}, \mathbf{b}, T) = (F(\mathbf{a}, \mathbf{b}), \tilde{H})$ можно использовать оценку по столкновениям ξ или оценку по поглощениям η — случайные величины, являющиеся функционалами от траекторий моделируемой цепи Маркова (см., напр., [4, 9]):

$$\xi(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{n=0}^{\kappa} Q_n \tilde{H}(X_n, T - t_n),$$

$$\eta(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{Q_{\kappa} \tilde{H}(X_{\kappa}, T - t_{\kappa})}{q(X_{\kappa}, t_{\kappa})}, \quad q(X', t') = 1 - \int_{t'}^T P_1(t' \rightarrow t | X') dt.$$

Принимая во внимание представление (3), можно показать, что $\eta = \tilde{Q}_{\kappa} H(X_{\kappa})$ с итоговым весом в виде

$$\tilde{Q}_{\kappa}(\mathbf{a}, \mathbf{b} | \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*) = \prod_{k=1}^{\kappa} \left[\frac{2\mathbf{a} + \mathbf{b}(l_i + l_j)}{2\mathbf{a}^* + \mathbf{b}^*(l_i + l_j)} \Big|_{t=t_k} \right] \times$$

$$\prod_{k=1}^{\kappa+1} \exp \left\{ -\frac{N_{k-1} - 1}{2} \left[\frac{N_{k-1}}{N_0} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*) + (\mathbf{b} - \mathbf{b}^*) \right] (t_k - t_{k-1}) \right\},$$

где $t_0 \equiv 0$ и $t_{\kappa+1} \equiv T$.

Используя результаты, изложенные в работе [9], можно получить следующие теоремы.

Теорема 1. Пусть $P_0(X) \neq 0$ при $F_0(X) \neq 0$, а также пусть $Q(Z', t'; Z, t) < +\infty$ для $Z', Z \in \mathbf{Z}$ и $t', t < T$, тогда $\mathbf{E}\xi = J_H(T)$. Если $q(X, t') > 0$ для $t' < T$, тогда $\mathbf{E}\eta = J_H(T)$. Кроме того, если веса равномерно ограничены и $H \in L_{\infty}$, тогда существует такое T^* , что дисперсии оценок ограничены при $T < T^*$.

Учитывая вид весов $Q_n(\mathbf{a}, \mathbf{b} | \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*)$, можно показать, что условия теоремы 1 выполняются для некоторых интервалов $\mathbf{a}^* - \varepsilon_a \leq \mathbf{a} \leq \mathbf{a}^* + \varepsilon_a$ и $\mathbf{b}^* - \varepsilon_b \leq \mathbf{b} \leq \mathbf{b}^* + \varepsilon_b$.

Для решения второй задачи, поставленной в предыдущем пункте, мы будем использовать следующую теорему, которая применима в нашем случае в силу форм интегрального оператора \mathbf{K} с ядром K и интегрального оператора \mathbf{K}_P с ядром K^2/P^* .

Теорема 2. Пусть в условиях теоремы 1 функция $F_0/P_0 \in L_1$, а спектральные радиусы $\rho(\mathbf{K}) < 1$, $\rho(\mathbf{K}_P) < 1$. Пусть также величина $\|K'_c\|$ равномерно ограничена в некотором интервале для $c = \mathbf{a}$ или $c = \mathbf{b}$: $c^* - \varepsilon_c \leq c \leq c^* + \varepsilon_c$. Тогда

$$\mathbf{E} \left(\frac{\partial \xi}{\partial c} \right) = \frac{\partial J_H}{\partial c}(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, T), \quad \mathbf{Var} \left(\frac{\partial \xi}{\partial c} \right) < +\infty;$$

$$\mathbf{E} \left(\frac{\partial \eta}{\partial c} \right) = \frac{\partial J_H}{\partial c}(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, T), \quad \mathbf{Var} \left(\frac{\partial \eta}{\partial c} \right) < +\infty.$$

Например, для оценки по поглощениям получаем

$$\frac{\partial J_H}{\partial \mathbf{a}}(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, T) = \mathbf{E}[\tilde{Q}_{\kappa}^{\mathbf{a}} H(X_{\kappa})], \quad \frac{\partial J_H}{\partial \mathbf{b}}(\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, T) = \mathbf{E}[\tilde{Q}_{\kappa}^{\mathbf{b}} H(X_{\kappa})],$$

здесь веса имеют следующий вид:

$$\tilde{Q}_\kappa^b = \sum_{k=1}^{\kappa} \frac{(l_i + l_j)}{2} \left[\mathbf{a}^* + \frac{\mathbf{b}^*}{2} (l_i + l_j) \right]_{t=t_k}^{-1} - \sum_{k=1}^{\kappa+1} \left[\frac{(N_{k-1} - 1)}{2} \right] (t_k - t_{k-1}),$$

$$\tilde{Q}_\kappa^a = \sum_{k=1}^{\kappa} \left[\mathbf{a}^* + \frac{\mathbf{b}^*}{2} (l_i + l_j) \right]_{t=t_k}^{-1} - \sum_{k=1}^{\kappa+1} \left[\frac{N_{k-1}(N_{k-1} - 1)}{2N_0} \right] (t_k - t_{k-1}),$$

где $t_0 \equiv 0$ и $t_{\kappa+1} \equiv T$.

3. Ценностное моделирование для уменьшения трудоемкости

В данном пункте представлены алгоритмы ценностного моделирования для оценки двух функционалов: $J_{H_1}(T)$ и $J_{H_2}(T)$. Целью данных алгоритмов является уменьшение дисперсии оценок путем использования информации о функции ценности (см. [4]) для оптимального выбора переходных плотностей P_1 и P_2 . Хотя обычно функция ценности неизвестна, мы воспользуемся тем фактом, что для нашей задачи функция ценности пропорциональна количеству мономеров N_1 (при оценке функционала H_1) или общему количеству мономеров и димеров $N_1 + N_2$ (для функционала H_{12}) [2, 8].

Как уже отмечалось, процесс моделирования каждого взаимодействия в цепи Маркова состоит из двух последовательных элементарных переходов: выбора временного интервала между взаимодействиями и выбора пары частиц, участвующих во взаимодействии. Далее мы опишем эти переходы подробнее.

3.1. Ценностное моделирование времени между взаимодействиями

Для первого элементарного перехода мы предлагаем воспользоваться экспоненциальным приближением к функции ценности, полученным в [1] для случая постоянных коэффициентов коагуляции (что соответствует значениям $\mathbf{a} = 1$, $\mathbf{b} = 0$). С помощью такого подхода в [8] были построены эффективные ценностные алгоритмы для случая аддитивных коэффициентов коагуляции (т. е. для $\mathbf{a} = 0$, $\mathbf{b} = 1$).

Следующим элементарным переходом в процессе моделирования цепи Маркова является выбор номера взаимодействующей пары. Этот алгоритм зависит от вида функционала и поэтому описан ниже для каждого из искомым функционалов J_{H_1} и $J_{H_{12}}$ отдельно.

3.2. Ценностный выбор пары для оценки J_{H_1}

Пусть N' — полное число частиц, а N'_1 — число мономеров, имеющих в системе перед выбором номера пары ϖ .

Предлагаемый ниже алгоритм ценностного моделирования номеров взаимодействующих частиц направлен на “сохранение” мономеров в модельном ансамбле. Данный подход приводит к уменьшению трудоемкости оценки концентрации мономеров в момент времени T .

Каждая из возможных взаимодействующих пар попадает в одно из трех непересекающихся подмножеств: $\varpi \in \varpi_1 \cup \varpi_2 \cup \varpi_0$. Выбор подмножества зависит от того, на сколько изменилось количество мономеров в системе в результате взаимодействия. Оно может уменьшиться на один (в результате взаимодействия ‘минус 1’ пары), на два (при взаимодействии ‘минус 2’ пары) или не измениться (при взаимодействии ‘минус 0’ пары):

ϖ_1 содержит ‘минус 1’ пары вида $\{\text{мономер-мультимер}\}$;

ϖ_2 содержит ‘минус 2’ пары вида $\{\text{мономер-мономер}\}$;

ϖ_0 содержит ‘минус 0’ пары вида $\{\text{мультимер-мультимер}\}$.

Под мультимером в данном случае понимаем частицу с размером l при $l \geq 2$.

Представим физическое распределение

$$\mathcal{P}_0(i, j) = \alpha[2\mathbf{a} + \mathbf{b}(l_i + l_j)], \quad \alpha = \frac{1}{[N' - 1][\mathbf{a}N' + \mathbf{b}N_0]},$$

номера взаимодействующей пары в следующем рандомизированном виде:

$$1 \equiv \sum_{\varpi} \mathcal{P}_0(\varpi) = p_1 \sum_{\varpi_1} f_1(\varpi) + p_2 \sum_{\varpi_2} f_2(\varpi) + p_0 \sum_{\varpi_0} f_0(\varpi). \quad (7)$$

Здесь p_m — вероятность выбора множества ϖ_m , а $f_m(\varpi)$ — вероятность выбора пары $\varpi = (i, j)$ из множества ϖ_m , $m = 0, 1, 2$, причем:

$$\begin{aligned} p_2 &= \alpha N'_1(N'_1 - 1)[\mathbf{a} + \mathbf{b}], \\ p_1 &= \alpha N'_1[2\mathbf{a}(N' - N'_1) + \mathbf{b}(N_0 + N' - 2N'_1)], \\ p_0 &= \alpha(N' - N'_1 - 1)[\mathbf{a}(N' - N'_1) + \mathbf{b}(N_0 - N'_1)]. \end{aligned} \quad (8)$$

Мономеры внутри групп ϖ_1 и ϖ_2 выбираются равномерно. Мультимеры внутри групп ϖ_0 и ϖ_1 выбираются в соответствии с физическими вероятностями \mathcal{P}_j , $j = N'_1 + 1, \dots, N'$, которые имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \text{для пар из } \varpi_1: \mathcal{P}_j &= \frac{2\mathbf{a} + \mathbf{b}(1 + l_j)}{2\mathbf{a}(N' - N'_1) + \mathbf{b}(N_0 + N' - 2N'_1)}, \\ \text{для пар из } \varpi_0: \mathcal{P}_j &= \frac{2\mathbf{a}(N' - N'_1 - 1) + \mathbf{b}(N_0 - N'_1) + \mathbf{b}l_j(N' - N'_1 - 2)}{2(N' - N'_1 - 1)[\mathbf{a}(N' - N'_1) + \mathbf{b}(N_0 - N'_1)]}. \end{aligned}$$

С целью ‘сохранения’ мономеров моделирование номера пары будем производить в соответствии с (7), где заменим вероятности p_m из (8) на вероятности q_m , пропорциональные числу оставшихся мономеров:

$$\begin{aligned} q_1 &= p_1(N'_1 - 1)/C_M, \quad q_2 = p_2(N'_1 - 2)/C_M, \quad q_0 = p_0 N'_1 / C_M, \\ C_M &= \mathbf{E}(N_1) = \alpha N'_1(N' - 2)(\mathbf{a}N' - \mathbf{a} + \mathbf{b}N_0 - \mathbf{b}). \end{aligned}$$

Данное преобразование учитывается в мультипликативном весе $Q_{\varpi} = p_m/q_m$.

3.3. Ценностный выбор пары для оценки $J_{H_{12}}$

Для оценки функционала $J_{H_{12}}$ мы воспользуемся методом, описанным в предыдущем пункте, внося в него некоторые изменения, обусловленные видом функционала $J_{H_{12}}$. Пусть N'_2 — количество димеров, имеющихся в системе перед выбором номера пары ϖ , $N'_{12} = N'_1 + N'_2$. В данном случае в ценностном алгоритме выбора пары будет использоваться распределение, пропорциональное суммарному количеству мономеров и димеров в системе, а именно величине $N_1(X) + N_2(X)$. Кроме того, далее мультимером будем называть частицу с размером l при $l \geq 3$.

Принимая это во внимание, разобьем множество возможных взаимодействующих пар на шесть непересекающихся подмножеств: $\varpi_{11} \cup \varpi_{1k} \cup \varpi_{2k} \cup \varpi_{22} \cup \varpi_{12} \cup \varpi_{kk}$. Выбор

подмножества связан с величиной, на которую может измениться полное количество мономеров и димеров в результате взаимодействия (эта величина может уменьшиться на 1, 2 или не измениться):

- ϖ_{11} содержит ‘минус 1’ пары вида {мономер-мономер};
- ϖ_{1k} содержит ‘минус 1’ пары вида {мономер, мультимер};
- ϖ_{2k} содержит ‘минус 1’ пары вида {димер, мультимер};
- ϖ_{22} содержит ‘минус 2’ пары вида {димер-димер};
- ϖ_{12} содержит ‘минус 2’ пары вида {мономер, димер};
- ϖ_{kk} содержит ‘минус 0’ пары вида {мультимер-мультимер}.

Далее представим физическое распределение \mathcal{P}_0 номера взаимодействующей пары в следующем виде, аналогичном (7):

$$1 \equiv \sum_{\varpi} \mathcal{P}_0(\varpi) = p_{11} \sum_{\varpi_{11}} f_{11}(\varpi) + p_{1k} \sum_{\varpi_{1k}} f_{1k}(\varpi) + p_{2k} \sum_{\varpi_{2k}} f_{2k}(\varpi) + p_{12} \sum_{\varpi_{12}} f_{12}(\varpi) + p_{22} \sum_{\varpi_{22}} f_{22}(\varpi) + p_{kk} \sum_{\varpi_{kk}} f_{kk}(\varpi), \quad (9)$$

здесь p_{mn} — вероятность выбора множества ϖ_{mn} , а $f_{mn}(\varpi)$ — вероятность выбора пары $\varpi = (i, j)$ из множества ϖ_{mn} , $m, n \in \{1, 2, k\}$:

$$\begin{aligned} p_{11} &= p_2, & p_{12} &= \alpha N'_1 N'_2 [2\mathbf{a} + 3\mathbf{b}], & p_{22} &= \alpha N'_2 (N'_2 - 1) [\mathbf{a} + 2\mathbf{b}], \\ p_{1k} &= \alpha N'_1 [2\mathbf{a}(N' - N'_{12}) + \mathbf{b}(N_0 + N' - 2N'_{12} - N'_2)], \\ p_{2k} &= \alpha N'_2 [2\mathbf{a}(N' - N'_{12}) + \mathbf{b}(N_0 + 2N' - 3N'_{12} - N'_2)], \\ p_{kk} &= \alpha (N' - N'_{12} - 1) [\mathbf{a}(N' - N'_{12}) + \mathbf{b}(N_0 - N'_{12} - N'_2)]. \end{aligned} \quad (10)$$

Мономеры и димеры внутри соответствующих групп ϖ_{11} , ϖ_{1k} , ϖ_{2k} , ϖ_{22} и ϖ_{12} выбираются равномерно. Мультимеры внутри групп ϖ_{1k} , ϖ_{2k} и ϖ_{kk} выбираются в соответствии с физическими вероятностями \mathcal{P}_j , $j = N'_{12} + 1, \dots, N'$, которые имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \text{для пар из } \varpi_{1k}: \mathcal{P}_j &= \frac{2\mathbf{a} + \mathbf{b}(1 + l_j)}{2\mathbf{a}(N' - N'_{12}) + \mathbf{b}(N_0 + N' - 2N'_{12} - N'_2)}, \\ \text{для пар из } \varpi_{2k}: \mathcal{P}_j &= \frac{2\mathbf{a} + \mathbf{b}(2 + l_j)}{2\mathbf{a}(N' - N'_{12}) + \mathbf{b}(N_0 + 2N' - 3N'_{12} - N'_2)}, \\ \text{для пар из } \varpi_{kk}: \mathcal{P}_j &= \frac{2\mathbf{a}(N' - N'_{12} - 1) + \mathbf{b}[(N_0 - N'_{12} - N'_2) + l_j(N' - N'_{12} - 2)]}{2(N' - N'_{12} - 1)[\mathbf{a}(N' - N'_{12}) + \mathbf{b}(N_0 - N'_{12} - N'_2)]}. \end{aligned}$$

С целью ‘сохранения’ мономеров и димеров моделирование пары будем производить в соответствии с представлением (9), где заменим вероятности (10) на q_{mn} , которые пропорциональны сумме оставшихся в системе мономеров и димеров:

$$\begin{aligned} q_{11} &= (N'_{12} - 1)p_{11}/C_{\text{мд}}; & q_{1k} &= (N'_{12} - 1)p_{1k}/C_{\text{мд}}; & q_{2k} &= (N'_{12} - 1)p_{2k}/C_{\text{мд}}; \\ q_{12} &= (N'_{12} - 2)p_{12}/C_{\text{мд}}; & q_{22} &= (N'_{12} - 2)p_{22}/C_{\text{мд}}; & q_{kk} &= (N'_{12} - 0)p_{kk}/C_{\text{мд}}, \\ C_{\text{мд}} &= \mathbf{E}(N_{12}) = \alpha N'_{12} (N' - 2) (\mathbf{a}N' - \mathbf{a} + \mathbf{b}N_0 - 2\mathbf{b}) + \alpha N'_1 [\mathbf{a}(N'_1 - 1) + \mathbf{b}(N' + N'_1 - 3)]. \end{aligned}$$

Такая модификация учитывается в мультипликативном весе $Q_{\varpi} = p_{mn}/q_{mn}$.

4. Результаты численных экспериментов

В данном пункте представлены результаты оценки искомых функционалов с помощью предложенных алгоритмов для задачи, аналитическое решение которой известно. Для ценностных алгоритмов проведено их сравнение с прямым моделированием. В качестве тестовой задачи рассмотрено уравнение (1) с коэффициентами (4) и начальными данными $n_0(l) = \delta_{l,1}$ (монодисперсный случай). В этом случае точное решение имеет вид (см. [10]):

$$n_l(t) = \mu(t)(1 - \mu(t))^{l-1} \left(\frac{a\mu(t) + b}{a + b} \right)^{1+lb/a}, \quad \mu(t) = \frac{b}{(a + b) \exp\{bt/2\} - a}.$$

В приведенных таблицах использованы следующие обозначения:

$\bar{\sigma}$ — среднеквадратичное отклонение;

$\varepsilon(\%)$ — относительная погрешность в процентах;

$t^{(c)}$ — время вычислений;

M — количество моделируемых траекторий;

$S_d = \bar{\sigma}_d^2 t_d^{(c)}$ и $S_v = \bar{\sigma}_v^2 t_v^{(c)}$ — трудоемкости для прямого и ценностного моделирования соответственно.

4.1. Результаты весового моделирования

Далее представлены результаты оценки трех функционалов: концентрации мономеров, т. е. функционала $J_{H_1}(T)$ с функцией H_1 вида (5); концентрации мономеров и димеров, т. е. функционала $J_{H_{12}}(T)$ с функцией H_{12} вида (6); полной концентрации мультимеров, т. е. функционала $J_{H_\mu}(T)$ с функцией

$$H_\mu(X) = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^N 1 \equiv \frac{N}{N_0}.$$

Заметим, что эти функционалы оценивают решение исходного уравнения (1):

$$J_{H_1}(T) = n_1(T) + \mathcal{O}(N_0^{-1}), \quad J_{H_{12}}(T) = n_1(T) + n_2(T) + \mathcal{O}(N_0^{-1}), \quad J_{H_\mu}(T) = \mu(T) + \mathcal{O}(N_0^{-1}).$$

Здесь $\mu(T) = \sum_{i=1}^{\infty} n_i(T)$ — полная концентрация мультимеров. Детерминированная погрешность порядка $\mathcal{O}(N_0^{-1})$ является следствием конечности числа моделируемых частиц N_0 (см. [6]). Заметим, что статистическая погрешность всех построенных алгоритмов имеет порядок $\mathcal{O}(M^{-1/2})$ (см., напр., [4]).

Результаты, представленные в таблицах 1–4, получены при моделировании $M = 10^7$ траекторий со следующими параметрами: $N_0 = 200$, $T = 1.2$, $\mathbf{a}^* = 1.3$, $\mathbf{b}^* = 1.1$. В качестве коэффициентов, при которых оценивались искомые функционалы, рассматривались $\mathbf{a} = \mathbf{a}^* \pm 10\%$ и $\mathbf{b} = \mathbf{b}^* \pm 10\%$.

Численные результаты показывают, что построенные алгоритмы одновременно оценивают как функционалы для различных параметров (\mathbf{a}, \mathbf{b}) , так и параметрические производные на одних и тех же траекториях моделируемой цепи Маркова.

Таблица 1. Оценка функционала $J_{H_1}(T)$

a	b	Точное решение $n_1(T)$	Оценка η	$\bar{\sigma}$	$\varepsilon(\%)$
1.3	1.1	$1.429 \cdot 10^{-1}$	$1.436 \cdot 10^{-1}$	$8.1 \cdot 10^{-6}$	0.46
1.3	1.21	$1.328 \cdot 10^{-1}$	$1.333 \cdot 10^{-1}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$	0.40
1.3	0.99	$1.539 \cdot 10^{-1}$	$1.547 \cdot 10^{-1}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$	0.49
1.43	1.1	$1.340 \cdot 10^{-1}$	$1.347 \cdot 10^{-1}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	0.50
1.43	1.21	$1.247 \cdot 10^{-1}$	$1.253 \cdot 10^{-1}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$	0.45
1.43	0.99	$1.441 \cdot 10^{-1}$	$1.449 \cdot 10^{-1}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	0.53
1.17	1.1	$1.527 \cdot 10^{-1}$	$1.534 \cdot 10^{-1}$	$3.7 \cdot 10^{-5}$	0.43
1.17	1.21	$1.416 \cdot 10^{-1}$	$1.422 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-5}$	0.37
1.17	0.99	$1.648 \cdot 10^{-1}$	$1.656 \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	0.49

Таблица 2. Оценка функционала $J_{H_{12}}(T)$

a	b	Точное решение $n_1(T) + n_2(T)$	Оценка η	$\bar{\sigma}$	$\varepsilon(\%)$
1.3	1.1	$2.083 \cdot 10^{-1}$	$2.096 \cdot 10^{-1}$	$9.5 \cdot 10^{-6}$	0.59
1.3	1.21	$1.934 \cdot 10^{-1}$	$1.945 \cdot 10^{-1}$	$3.7 \cdot 10^{-5}$	0.55
1.3	0.99	$2.245 \cdot 10^{-1}$	$2.259 \cdot 10^{-1}$	$6.7 \cdot 10^{-5}$	0.62
1.43	1.1	$1.969 \cdot 10^{-1}$	$1.982 \cdot 10^{-1}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$	0.64
1.43	1.21	$1.831 \cdot 10^{-1}$	$1.842 \cdot 10^{-1}$	$7.4 \cdot 10^{-5}$	0.59
1.43	0.99	$2.119 \cdot 10^{-1}$	$2.133 \cdot 10^{-1}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$	0.66
1.17	1.1	$2.208 \cdot 10^{-1}$	$2.220 \cdot 10^{-1}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$	0.55
1.17	1.21	$2.048 \cdot 10^{-1}$	$2.058 \cdot 10^{-1}$	$2.0 \cdot 10^{-5}$	0.50
1.17	0.99	$2.383 \cdot 10^{-1}$	$2.397 \cdot 10^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-4}$	0.61

Таблица 3. Оценка функционала $J_{H_\mu}(T)$

a	b	Точное решение $\mu(T)$	Оценка η	$\bar{\sigma}$	$\varepsilon(\%)$
1.3	1.1	$3.290 \cdot 10^{-1}$	$3.315 \cdot 10^{-1}$	$9.1 \cdot 10^{-6}$	0.76
1.3	1.21	$3.112 \cdot 10^{-1}$	$3.137 \cdot 10^{-1}$	$6.2 \cdot 10^{-5}$	0.78
1.3	0.99	$3.477 \cdot 10^{-1}$	$3.502 \cdot 10^{-1}$	$9.8 \cdot 10^{-5}$	0.73
1.43	1.1	$3.175 \cdot 10^{-1}$	$3.201 \cdot 10^{-1}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$	0.83
1.43	1.21	$3.005 \cdot 10^{-1}$	$3.031 \cdot 10^{-1}$	$1.3 \cdot 10^{-4}$	0.85
1.43	0.99	$3.352 \cdot 10^{-1}$	$3.379 \cdot 10^{-1}$	$4.2 \cdot 10^{-5}$	0.80
1.17	1.1	$3.414 \cdot 10^{-1}$	$3.438 \cdot 10^{-1}$	$7.3 \cdot 10^{-5}$	0.70
1.17	1.21	$3.228 \cdot 10^{-1}$	$3.251 \cdot 10^{-1}$	$2.9 \cdot 10^{-5}$	0.71
1.17	0.99	$3.610 \cdot 10^{-1}$	$3.636 \cdot 10^{-1}$	$2.4 \cdot 10^{-4}$	0.70

Таблица 4. Оценка производных $\frac{\partial J_H}{\partial a}(T)$ и $\frac{\partial J_H}{\partial b}(T)$

Функционал	Точное решение	Оценка η	$\bar{\sigma}$	$\varepsilon(\%)$
$\frac{\partial J_{H_1}}{\partial a}(T)$	$-7.170 \cdot 10^{-2}$	$-7.156 \cdot 10^{-2}$	$1.9 \cdot 10^{-4}$	0.18
$\frac{\partial J_{H_1}}{\partial b}(T)$	$-9.589 \cdot 10^{-2}$	$-9.687 \cdot 10^{-2}$	$2.9 \cdot 10^{-4}$	1.02
$\frac{\partial J_{H_{12}}}{\partial a}(T)$	$-9.180 \cdot 10^{-2}$	$-9.159 \cdot 10^{-2}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	0.22
$\frac{\partial J_{H_{12}}}{\partial b}(T)$	$-1.410 \cdot 10^{-1}$	$-1.425 \cdot 10^{-1}$	$4.1 \cdot 10^{-4}$	1.05
$\frac{\partial J_{H_\mu}}{\partial a}(T)$	$-9.198 \cdot 10^{-2}$	$-9.093 \cdot 10^{-2}$	$4.2 \cdot 10^{-4}$	1.14
$\frac{\partial J_{H_\mu}}{\partial b}(T)$	$-1.654 \cdot 10^{-1}$	$-1.659 \cdot 10^{-1}$	$6.5 \cdot 10^{-4}$	0.28

4.2. Результаты ценностного моделирования

Численные результаты, представленные в таблицах 5–6, показывают, что ценностное моделирование обоих элементарных переходов в цепи Маркова приводит к значительному уменьшению трудоемкости вычислений. Это происходит для любых параметров \mathbf{a} и \mathbf{b} (в таблицах приведены результаты только для одного случая). Заметим, что выигрыш в трудоемкости тем больше, чем больше значения T .

Кроме того, разработанные алгоритмы позволяют оценивать очень малые величины, оценить которые с помощью прямого моделирования не представляется возможным (см. результаты в таблице 7).

Таблица 5. Оценка функционала $J_{H_1}(T)$ для $\mathbf{a} = 1$, $\mathbf{b} = 2$ ($T = 0.1; 1; 4; 10$)

Моделирование	Оценка ξ	$\bar{\sigma}$	$\varepsilon(\%)$	t_c	S_d/S_v
$n_1(0.1) = 7.5131 \cdot 10^{-1}$ ($T = 0.1; M = 10^4; N_0 = 10^3$)					
прямое	$7.5053 \cdot 10^{-1}$	$2.9 \cdot 10^{-4}$	0.10	4.8	—
ценностное	$7.5155 \cdot 10^{-1}$	$2.0 \cdot 10^{-4}$	0.03	5.5	1.79
$n_1(1) = 1.2263 \cdot 10^{-1}$ ($T = 1; M = 10^4; N_0 = 10^3$)					
прямое	$1.2266 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.02	37.7	—
ценностное	$1.2271 \cdot 10^{-1}$	$4.7 \cdot 10^{-5}$	0.07	34.9	6.09
$n_1(4) = 3.7076 \cdot 10^{-3}$ ($T = 4; M = 10^4; N_0 = 10^2$)					
прямое	$3.6648 \cdot 10^{-3}$	$3.0 \cdot 10^{-5}$	1.16	15.2	—
ценностное	$3.6925 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	0.41	15.9	6.27
$n_1(10) = 8.9684 \cdot 10^{-6}$ ($T = 10; M = 10^5; N_0 = 2 \cdot 10^2$)					
прямое	$9.4500 \cdot 10^{-6}$	$6.9 \cdot 10^{-7}$	5.37	68.9	—
ценностное	$8.6176 \cdot 10^{-6}$	$5.4 \cdot 10^{-8}$	3.91	74.9	152

Таблица 6. Оценка функционала $J_{H_{12}}(T)$ для $\mathbf{a} = 1$, $\mathbf{b} = 2$ ($T = 0.1; 1; 4; 10$)

Моделирование	Оценка ξ	$\bar{\sigma}$	$\varepsilon(\%)$	t_c	S_d/S_v
$n_1(0.1) + n_2(0.1) = 8.4460 \cdot 10^{-1}$ ($T = 0.1; M = 10^4; N_0 = 10^3$)					
прямое	$8.4363 \cdot 10^{-1}$	$3.4 \cdot 10^{-4}$	0.12	4.6	—
ценностное	$8.4516 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-4}$	0.07	5.3	3.85
$n_1(1) + n_2(1) = 1.7364 \cdot 10^{-1}$ ($T = 1; M = 10^4; N_0 = 10^3$)					
прямое	$1.7379 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	0.08	25.9	—
ценностное	$1.7388 \cdot 10^{-1}$	$6.8 \cdot 10^{-5}$	0.13	28.9	3.58
$n_1(4) + n_2(4) = 5.3553 \cdot 10^{-3}$ ($T = 4; M = 10^4; N_0 = 10^2$)					
прямое	$5.3443 \cdot 10^{-3}$	$3.6 \cdot 10^{-5}$	0.21	13.5	—
ценностное	$5.3564 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	0.02	15.1	5.37
$n_1(10) + n_2(10) = 1.2954 \cdot 10^{-5}$ ($T = 10; M = 10^5; N_0 = 2 \cdot 10^2$)					
прямое	$1.3600 \cdot 10^{-5}$	$8.3 \cdot 10^{-7}$	5.37	64.1	—
ценностное	$1.2594 \cdot 10^{-5}$	$7.2 \cdot 10^{-8}$	2.78	72.5	117

Таблица 7. Оценка функционалов $J_{H_1}(T)$ и $J_{H_{12}}(T)$ для $\mathbf{a} = 2$, $\mathbf{b} = 10$

Моделирование	Оценка ξ	$\bar{\sigma}$	$\varepsilon(\%)$
$n_1(10) = 5.3828 \cdot 10^{-23}$ ($T = 10$; $M = 10^6$; $N_0 = 10^3$)			
ценностное	$5.3047 \cdot 10^{-23}$	$1.9 \cdot 10^{-25}$	1.45
прямое	0.0	—	100
$n_1(10) + n_2(10) = 7.5460 \cdot 10^{-23}$ ($T = 10$; $M = 10^6$; $N_0 = 10^3$)			
ценностное	$7.4278 \cdot 10^{-23}$	$2.1 \cdot 10^{-25}$	1.57
прямое	0.0	—	100

Заключение

Построены весовые алгоритмы для одновременной оценки функционалов с различными параметрами \mathbf{a} и \mathbf{b} , а также параметрических производных, с использованием одного набора траекторий. Эти алгоритмы могут быть использованы, например, в задачах интерполяции.

Также разработаны ценностные алгоритмы выбора пары взаимодействующих частиц для оценки двух функционалов: концентрации мономеров и концентрации мономеров и димеров в ансамбле в заданный момент времени. Для таких функционалов ценностная модификация заключается в искусственном “сохранении” мономеров и димеров, что учитывается в мультипликативном весе. В комбинации с ценностным моделированием времени между взаимодействиями, разработанные ценностные алгоритмы приводят к значительному уменьшению трудоемкости вычислений, особенно на больших временах (при больших значениях T).

Отметим, что использование в качестве тестовой задачи монодисперсного уравнения коагуляции было вызвано тем фактом, что для него известно аналитическое решение. Все построенные алгоритмы работают и для полидисперсного случая (т.е. если в начальный момент времени частицы имеют разные размеры). Более того, предложенные алгоритмы можно адаптировать как для уравнения Смолуховского с фрагментацией (в случае, когда в результате взаимодействия большая частица может распасться на две меньшего размера), так и для уравнения с источником.

В будущем возможно решение задачи уменьшения трудоемкости алгоритмов для оценки различных функционалов (с разными параметрами \mathbf{a} и \mathbf{b}) при больших значениях T . Этого можно добиться путем комбинации весового параметрического моделирования с ценностным.

Благодарности. Авторы посвящают данную статью 80-летию своего учителя — член-корреспондента РАН Михайлова Геннадия Алексеевича.

Литература

1. **Коротченко М.А.** Статистические алгоритмы ценностного моделирования для решения уравнения Смолуховского // Вычислительные технологии. — 2008. — Т. 13, спец. выпуск № 4. — С. 68–74.
2. **Коротченко М.А., Михайлов Г.А., Рогазинский С.В.** Модификации весовых алгоритмов метода Монте-Карло для решения нелинейных кинетических уравнений // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2007. — Т. 47, № 12. — С. 2110–2121.

3. **Лушников А.А.** Некоторые новые аспекты теории коагуляции // Изв. АН СССР. Физ. атмосферы и океана. — 1978. — Т. 14, № 10. — С. 738–743.
4. **Михайлов Г.А., Войтишек А.В.** Численное статистическое моделирование (Метод Монте-Карло). — Москва: Издательский центр “Академия”, 2006.
5. **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.
6. **Михайлов Г.А., Рогазинский С.В., Урева Н.М.** Весовой метод Монте-Карло для приближенного решения нелинейного уравнения коагуляции // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2006. — Т. 46, № 4. — С. 714–725.
7. **Flory P.J.** Principles of Polymer Chemistry. — Ithaca, New York: Cornell University Press, 1953.
8. **Korotchenko M.A.** Value Monte Carlo algorithms for estimating the solution to the coagulation equation // Springer Proceedings in Mathematics & Statistics. Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2010 / L. Plaskota and H. Wozniakowski. — 2012. — Springer Proceed. — Vol. 23. — P. 511–522.
9. **Mikhailov G.A.** Parametric Estimates by the Monte Carlo Method. — Utrecht: VSP, 1999.
10. **Spouge J.L.** Solutions and critical times for the monodisperse coagulation equation when $a(i, j) = A + B(i + j) + Cij$ // J. Phys. A: Math. Gen. — 1983. — Vol. 16, № 4. — P. 767–773.

Поступила в редакцию 24 июня 2013 г.