УДК 519.245

Исследование сверхэкспоненциального роста среднего потока частиц в случайной размножающей среде*

Г.З. Лотова[1,2], Г.А. Михайлов[1,2]

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

[2]Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ), ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090

E-mails: lot@osmf.sscc.ru (Лотова Г.З.), gam@sscc.ru (Михайлов Г.А.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале "Numerical Analysis and Applications" № 4, Vol. 16, 2023.

Лотова Г.З., Михайлов Г.А. Исследование сверхэкспоненциального роста среднего потока частиц в случайной размножающей среде // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2023. — Т. 26, № 4. — С. 401–413.

Для эффективного численно-аналитического исследования сверхэкспоненциального роста среднего потока частиц с размножением в случайной среде вводится новая корреляционно-сеточная аппроксимация однородного изотропного случайного поля плотности. Сложность реализации траектории частицы при этом не зависит от корреляционного масштаба. Для сеточной аппроксимации случайного поля ограниченной плотности обоснована возможность гауссовской асимптотики средней скорости размножения. Она обеспечивает суперэкспоненциальный рост потока в некотором начальном интервале времени. На основе тестовых расчетов построена оценка дальнейшего сверхэкспоненциального роста потока.

DOI: 10.15372/SJNM20230405
EDN: JAMRIC

Ключевые слова: *численное статистическое моделирование, поток частиц, сверхэкспоненциальная асимптотика, случайная среда, поле Вороного, сеточная аппроксимация.*

Lotova G.Z., Michailov G.A. Investigation of the overexponential growth of the mean particles flux with multiplication in a random medium // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2023. — Vol. 26, № 4. — P. 401–413.

A new correlative-grid approximation of a homogeneous and isotropic random density field is introduced for the effective numerically-analytical investigation of overexponential growth of the mean particles flux in a random medium with multiplication. In this case the complexity of the particle trajectory realization is not dependent on the correlation scale. For the correlative-grid approximation the possibility of a Gaussian asymptotics of the mean particles multiplication rate is justified for a random field of bounded density. It ensures a superexponential growth of the flux in some initial time interval. An estimate of further overexponential flux growth is constructed based on some test computations.

Keywords: *numerical statistical simulation, particles flux, overexponential asymptotics, random medium, the Voronoi mosaic, grid approximation.*

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект № 0251-2021-0002).

1. Введение

1.1. Настоящая работа посвящена детальному исследованию сверхэкспоненциальной зависимости от времени среднего числа частиц, рассеивающихся и размножающихся в случайной среде. В качестве основополагающей физической модели с целью построения компьютерно-экономичных алгоритмов статистического моделирования для этого рассматривается односкоростной процесс переноса частиц. В качестве математической модели процесса используется однородная обрывающаяся с вероятностью единица цепь Маркова, состояниями которой являются фазовые точки последовательных "столкновений частицы с элементами вещества", т. е. точки, в которых происходят мгновенные изменения скорости частицы. Указанная цепь Маркова $x_0, x_1, \ldots, x_N$ рассматривается в фазовом пространстве $X = R \times V \times T$ координат, скоростей и времени, т. е. $x_n = (\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n, t_n)$, где $\mathbf{r}_n$ — точка n-го столкновения, $\mathbf{v}_n = v\omega_n$ — скорость, а $t_n = t_{n-1} + \big|\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n\big|/v$ — время "жизни" сталкивающейся частицы; $\big|\mathbf{v}_n\big| = v$. Рассматриваемая цепь определяется плотностью $f(x)$ распределения начального столкновения x_0 и плотностью $k(x', x)$ перехода из состояния x' в x, причем предполагается, что

$$\int\limits_X k(x', x)\,\mathrm{d}x = q(x') \le 1 - \delta, \qquad \delta > 0, \tag{1.1}$$

т. е. цепь обрывается с вероятностью единица, и среднее число переходов конечно. Условие (1.1) выполняется, например, для ограниченной системы [1, 2]. Ядро $k(x', x)$ получается (см., например, [1,2]) из следующей характеризации процесса переноса. Задается кусочно-непрерывный и ограниченный коэффициент ослабления (иначе — сечение взаимодействия) $\sigma(x) = \sigma(\mathbf{r}, v)$, причем $\sigma(x) = \sigma_s(x) + \sigma_f(x) + \sigma_c(x)$, где $\sigma_s(x)$ и $\sigma_f(x)$ — коэффициенты рассеяния и деления с заданными интегрируемыми индикатрисами $w_s(\omega'; \omega, \mathbf{r})$ и $w_f(\omega'; \omega, \mathbf{r})$, а $\sigma_c(x)$ — коэффициент поглощения; задается также $\nu(\mathbf{r}, v)$ — число частиц деления в точке $(\mathbf{r}, v)$. Отношения $\sigma_s(x)/\sigma(x)$, $\sigma_f(x)/\sigma(x)$ и $\sigma_c(x)/\sigma(x)$ равны вероятностям рассеяния, деления и поглощения непосредственно после столкновения в фазовой точке x, а плотность распределения длины l свободного пробега из $\mathbf{r}'$ в $\mathbf{r}$ равна $p(l) = \sigma(\mathbf{r}(l), v)\exp(-\tau_{\mathrm{op}}(l))$, где $\tau_{\mathrm{op}}(l)$ — оптическая длина пробега [1, 2]. Нетрудно видеть, что плотность столкновений $\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)$, где $\varphi_n(x)$ — плотность распределения столкновений номера n, представляет собой ряд Неймана для интегрального уравнения второго рода:

$$\varphi = K\varphi + f, \quad f \equiv \varphi_0,$$

где K — интегральный оператор с ядром $k(\cdot, \cdot)$. Как указано, например, в [1,2], несмотря на наличие в ядре $k(x', x)$ обобщенных множителей $\delta(\omega - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ и $\delta(t - t' - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/v)$, оператор K можно рассматривать действующим из $L_1(X)$ в $L_1(X)$ тем более, что в рассматриваемой задаче все функции неотрицательны. При выполнении условия (1.1) имеем $\|K\|_{L_1} < 1$, и, следовательно, спектральный радиус оператора $\rho(K) < 1$.

Используемая обычно в теории переноса интенсивность излучения $\Phi(x)$ (плотность потока частиц) связана с плотностью столкновений соотношением $\varphi(x) = \sigma(x)\Phi(x)$. Методы Монте–Карло, как правило, используются для оценки линейных функционалов вида $J = (\varphi, h) = (\sigma\Phi, h)$, $h \in L_\infty$. Для построения весовых алгоритмов метода Монте–Карло используется цепь Маркова с начальной плотностью $f_0(x)$ и плотностью перехода $p(x', x)$, содержащей указанные обобщенные множители, например цепь столкновений для других значений параметров σ, σ_s, σ_f, σ_c. При этом вводятся вспомогательные веса по формулам

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

Если выполняются “условия несмещенности”

$$\operatorname{supp} f_0(\cdot) \supset \operatorname{supp} f(\cdot) \quad \text{и} \quad \operatorname{supp} p(\cdot,\cdot) \supset \operatorname{supp} k(\cdot,\cdot), \tag{1.2}$$

то (см., например, [1,2])

$$J = \mathrm{E}\,\xi, \quad \text{где} \;\; \xi = \sum_{n=0}^{N} Q_n h(x_n).$$

Если, кроме того, $\rho(K_p) < 1$, где K_p — оператор с ядром $k^2(x', x)/p(x', x)$, и $f^2/f_0 \in L_1(X)$, то $\mathrm{D}\xi < +\infty$. Случайная величина ξ называется “оценкой по столкновениям” для функционала J.

Отметим, что новое направление скорости ω в точке $\mathbf{r}$ обычно моделируется следующим образом: с вероятностью $\sigma_s(\mathbf{r}, v)/\sigma(\mathbf{r}, v)$ — согласно $w_s(\omega; \omega', \mathbf{r})$, а с вероятностью $\sigma_f(\mathbf{r}, v)/\sigma(\mathbf{r}, v)$ — согласно $w_f(\omega; \omega', \mathbf{r})$. Для построения весовой модификации номер типа моделирования (т. е. типа столкновения) вводится в число координат фазового пространства [1,2]. Такой прием позволяет вычислять вес Q_n, последовательно перемножая весовые множители, соответствующие выбору типа взаимодействия (рассеяние или поглощение), нового направления и длины пробега. На этой основе, в частности, доказывается используемое далее (для “ослабления” размножения) утверждение из [1].

Лемма 1.1. *Если в реализуемой вспомогательной модели используется сечение поглощения $\sigma_c(\mathbf{r}) + \lambda_0/v$, то текущий вес частицы в момент времени t после реализации рассеяния домножается на величину $\exp(\lambda_0 t)$.*

1.2. При сформулированных выше условиях для интенсивности излучения $\Phi(x)$ справедливо также следующее интегро-дифференциальное кинетическое уравнение [3]:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, v\omega, t)}{\partial t} + (\omega, \operatorname{grad}\Phi) + \sigma(\mathbf{r}, v)\Phi(\mathbf{r}, v\omega, t)$$
$$= \int \left[\sigma_s(\mathbf{r}, v) w_s(\omega; \omega', \mathbf{r}) + \nu(\mathbf{r}, v)\sigma_f(\mathbf{r}, v) w_f(\omega; \omega', \mathbf{r})\right] \Phi(\mathbf{r}, v\omega', t) d\omega' + \Phi_0(\mathbf{r}, v\omega, t), \tag{1.3}$$

где $\Phi_0(\mathbf{r}, v\omega, t)$ — плотность распределения частиц в источнике.

Далее дополнительно упростим процесс переноса, полагая рассеяние (в том числе после деления) изотропным, т. е. $w_s = w_f \equiv 1/(4\pi)$.

Непосредственно из (1.3) следует

Лемма 1.2. *Если $w_s = w_f \equiv 1/(4\pi)$, то $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ не меняется при следующей замене параметров процесса переноса: $\sigma_s \mapsto 0$, $\sigma_c \mapsto 0$, $\sigma_f \mapsto \sigma$, $\nu \mapsto \nu' = \dfrac{\sigma_s + \nu\sigma_f}{\sigma}$.*

2. Основная оценка

Здесь для простоты изложения полагаем $v = 1$, т. е. $x = (\mathbf{r}, \omega, t)$.

2.1. Пусть $\varphi_0(x; \mathbf{r}_0, \omega_0)$ — плотность столкновений (по аргументу x) от одного столкновения в точке $(\mathbf{r}_0, \omega_0, 0)$, т. е. для $f(x) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\delta(\omega - \omega_0)\delta(t)$.

Функционал

$$J(t) = \int\limits_R \int\limits_V \varphi(\mathbf{r}, \omega, t) h(\mathbf{r}, \omega) \mathrm{d}\mathbf{r}\, \mathrm{d}\omega \quad \forall f \in L_1(X), \quad h \in L_\infty(R \times V), \tag{2.1}$$

можно представить в виде [4]

$$J(t) = \int\limits_R \int\limits_V \int\limits_0^\infty f(\mathbf{r}_0, \omega_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \omega_0, \tau) \mathrm{d}\mathbf{r}_0\, \mathrm{d}\omega_0\, \mathrm{d}\tau, \tag{2.2}$$

где

$$F(\mathbf{r}_0, \omega_0, t) = \int\limits_R \int\limits_V \varphi_0(\mathbf{r}, \omega, t; \mathbf{r}_0, \omega_0) h(\mathbf{r}, \omega) \mathrm{d}\mathbf{r}\, \mathrm{d}\omega$$

есть соответствующая функция Грина по времени.

Предполагается, что $f(\mathbf{r}_0, \omega, -t) = 0$, и вследствие этого $F(\mathbf{r}, \omega, -t) = 0$ при $t > 0$. Символом $f^{(m)}$ далее обозначается m-кратная производная от функции f по t, причем $f^{(0)} \equiv f$.

Теорема 2.1. *Предполагается, что* $|f^{(m)}| \le c_0 f_0(\mathbf{r}, \omega)$, $m = 0, 1, \ldots, n$; f_0 — *плотность вероятностей и* $F(x) \le C < +\infty$. *Пусть точка* $(\mathbf{r}_0, \omega_0)$ *распределена для* $t_0 = 0$ *с плотностью* $f_0(\mathbf{r}, \omega)$, *причем* $|f^{(m)}(\mathbf{r}, \omega, t)/f_0(\mathbf{r}, \omega)| < C < +\infty$, $\rho(K_p) < 1$ *и выполняются условия несмещенности* (1.2). *Тогда* $J^{(m)}(t) = \mathrm{E}\xi^{(m)}$, *где* $\xi^{(m)} = \sum_{k=0}^{N} Q_k h(\mathbf{r}_k, \omega_k) \times f^{(m)}(\mathbf{r}_0, \omega_0, t - t_k)/f_0(\mathbf{r}_0, \omega_0)$, $Q_0 = 1$, *причем* $\mathrm{D}\xi^{(m)} < +\infty$, $m = 1, 2, \ldots, n$.

Доказательство. Для $m = 0$ оценка $\xi^{(0)}$ — это вариант метода условных математических ожиданий [2], так как $\xi^{(0)} = \mathrm{E}\big(\tilde{J}^{(0)} \mid \{\mathbf{r}_k, \omega_k\}\big)$, где $\tilde{J}^{(0)} \equiv \tilde{J}^{(0)}(t)$ — асимптотически несмещенная статистическая оценка функции $J(t)$, связанная со случайным выбором значения t_0 для фиксированной траектории $\{\mathbf{r}_k, \omega_k\}$, $k = 0, 1, \ldots, N$, и $\mathrm{E}\xi^{(0)} = J(t)$. В [4] это соотношение получено более сложно путем рандомизации выражения (2.2) с использованием оценки по столкновениям для сопряженного решения. Далее, условия теоремы позволяют построить мажоранты для корректного внесения операции дифференцирования под знаки математического ожидания и суммы в выражении $\mathrm{E}\xi^{(0)}$, что и дает оценки величин $\mathrm{E}\xi^{(m)}$. Соотношение $\mathrm{D}\xi^{(m)} < +\infty$ выполняется вследствие ограничений $\rho(K_p) < 1$ и $f/f_0 < C < +\infty$ [1, 2]. $\square$

Отметим, что в [1] дано довольно сложное обоснование оценки $\xi = \xi^{(0)}$ для решения задач оптического зондирования с реальными источниками излучения.

2.2. Рассмотрим теперь оценку параметра экспоненциальной временной асимптотики в теории переноса. Известно, что при выполнении довольно общих условий в случае источника, локализованного в точке $(\mathbf{r}_0, \omega_0, 0)$, имеет место асимптотическое при $t \to \infty$ соотношение (см. [3])

$$\Phi(\mathbf{r}, \omega, t) \sim C(\mathbf{r}, \omega) \mathrm{e}^{\lambda t}, \quad C(\mathbf{r}, \omega) < C_0 < +\infty, \tag{2.3}$$

где λ — ведущее характеристическое число соответствующего однородного стационарного уравнения переноса с заменой $\sigma_c \mapsto \sigma_c + \lambda/v$. Эти условия, в частности, имеют место для односкоростного процесса переноса частиц в ограниченной среде с достаточно быстро убывающей по времени плотностью источника. Сказанное выше дает возможность построить оценку величины λ. Следующее утверждение фактически доказано в работе [4].

Теорема 2.2. *Если выполняются соотношения*

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

соотношение (2.3) *и условия теоремы 2.1, то*

$$\frac{d\ln J(t)}{dt} = \frac{J'(t)}{J(t)} \to \lambda \ \ \textit{при} \ \ t \to +\infty.$$

3. Предварительная общая формулировка сверхэкспоненциального роста среднего потока частиц в случайной среде при $\boldsymbol{\sigma \le \sigma_{\max} < +\infty}$

Предполагается, что $\sigma \equiv \sigma(\mathbf{r}, v)$ — однородное изотропное случайное поле, причем отношения σ_s/σ, σ_f/σ фиксированы. Если $h_0(\mathbf{r}) = I_{\mathbf{D}}(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r})$, где $I_{\mathbf{D}}$ — индикатор области $\mathbf{D}$, то функционал

$$J(t,\sigma) = (\varphi, h_0) = \int\int \varphi(\mathbf{r},\omega v,t)h_0(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\,d\omega$$

представляет собой полный поток частиц в области $\mathbf{D}$ для заданного момента времени t.

Как и в [5] полагаем, что $J(t,\sigma) \sim \exp^{\lambda(\sigma)t}$ при $t \to \infty$ для $f_0(t) = \delta(t)$ и

$$\int\limits_0^\infty f(t)\exp^{-\lambda(\sigma)t}\,dt < C_0 < +\infty.$$

Соответственно этому, предполагая гауссовость случайной величины $\lambda(\sigma)$ и равномерность (по σ) предельного перехода $J(t,\sigma) \longrightarrow_{t\to\infty} C(\sigma)\mathrm{e}^{\lambda(\sigma)t}$, можно оценить асимптотику функции $\mathrm{E}J(t,\sigma) = I(t)$ в некотором интервале $(T_\lambda < t < T^*)$:

$$I(t) \approx \frac{C}{\sqrt{2\pi}d}\int\limits_{-\infty}^{-\infty}\exp(tx)\exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2d^2}\right)dx,$$

где $a = \mathrm{E}\lambda(\sigma)$, $d^2 = \mathrm{D}\lambda(\sigma)$. При этом также предполагается, что множители $C(\sigma)$ и $\mathrm{e}^{\lambda(\sigma)t}$ в асимптотике слабо коррелированы и, следовательно, $C \approx \mathrm{E}C(\sigma)$. Используя интегральную формулу из [6], далее получаем

$$I(t) \approx C\exp\left(\frac{d^2}{2}t^2 + at\right). \tag{3.1}$$

Следовательно, можно предположить, что

$$\frac{d\ln I(t)}{dt} \approx d^2t + a. \tag{3.2}$$

Определяемый формулой (3.1) закон роста среднего числа частиц можно назвать “суперэкспоненциальным”. Отметим, что формулы (3.1), (3.2) могут служить основой для численных исследований конкретных вариантов задачи при $t < T^* < +\infty$ (см. п. 5). Эти исследования позволяют эвристически приближенно выделить следующие интервалы времени:

- $(0, T_\lambda)$ — доасимптотический интервал влияния начальной плотности;
- (T_λ, T^*) — интервал суперэкспоненциальной асимптотики типа (3.1);
- $(T^*, +\infty)$ — интервал перехода к предельной асимптотике $\ln I(t) = O(\lambda_{\max} t)$. Здесь $\lambda_{\max} = \lambda(\sigma_{\max})$.

Интервал (T_λ, T^*) был, в частности, определен для сферически слоистой случайной мозаики, которая позволила достаточно точно оценить величины $a \approx \mathrm{E}\lambda(\sigma)$ и $d^2 \approx \mathrm{D}\lambda(\sigma)$ [5]. В связи с исследованием суперэкспоненты в последнем пункте работы будет доказана (для специальной сеточной модели σ) теорема о необходимой при этом гауссовской асимптотике распределения величины $\lambda(\sigma)$.

Интервал $(T^*, +\infty)$ будет определяться далее (см.п. 5) для задачи с изотропным случайным полем. Возможность реализации такого интервала показывает следующее утверждение.

Теорема 3.1. *Пусть для* $0 < \varepsilon < \sigma_{\max}$ *с вероятностью* $p(\varepsilon) > 0$ *выполняются соотношения* $\sigma \geq \sigma_{\max} - \varepsilon$ *и, соответственно,* $\lambda(\sigma) \geq \lambda_{\max} - \delta(\varepsilon)$, *где* $\delta(\varepsilon) > 0$ *— монотонно убывающая непрерывная функция, причем* $\delta(0) = 0$. *Тогда*

$$I(t) \sim O(e^{\lambda_{\max} t}), \quad t \to +\infty.$$

Доказательство. Ясно, что функция $I(t)$ не может возрастать быстрее, чем $e^{\lambda_{\max} t}$. С другой стороны, $I(t)$ в асимптотике, согласно условию теоремы, возрастает быстрее, чем $e^{(\lambda_{\max} - \delta)t}$ для сколь угодно малого $\delta > 0$. Таким образом утверждение теоремы справедливо. □

Сказанное выше и анализ результатов численного моделирования (см. п. 5), показывают целесообразность следующей аппроксимации

$$\frac{d \ln I(t)}{dt} = \lambda_s(t) = \lambda_s(t_0) \frac{1 - \exp(-\beta t^{1-\alpha})}{1 - \exp(-\beta t_0^{1-\alpha})} \tag{3.3}$$

для некоторого $t_0 > T_\lambda$ и $0 < \alpha \ll 1$. Полагая, согласно теореме 3.1, $\lambda_s(+\infty) = \lambda_{\max}$, получаем

$$\beta = -t_0^{\alpha-1} \ln\left(1 - \frac{\lambda_s(t_0)}{\lambda_{\max}}\right). \tag{3.4}$$

Параметр α целесообразно определять так, чтобы достаточно хорошая равномерная аппроксимация функции $\lambda_s(t)$ сохранялась при некоторой вариации t_0.

Согласно (3.3), имеем

$$\ln I(t) = \ln I(t_0) + \frac{\lambda_s(t_0)}{1 - e^{-\beta t_0^{1-\alpha}}} \left(t - t_0 - \int_{t_0}^{t} e^{-\beta t_1^{1-\alpha}} dt_1\right).$$

Расчеты в тестовой задаче (см. п. 5) показали, что значение β может быть достаточно малым для использования приближения $\exp(-\beta t^{1-\alpha}) \approx 1 - \beta t^{1-\alpha}$ в довольно большом интервале (t_0, t_1). Это приближение дает следующие оценки

$$\lambda_s(t) \approx \lambda_s(t_0) \left(\frac{t}{t_0}\right)^{1-\alpha},$$

$$\ln I(t) \approx \ln I(t_0) + \frac{\lambda_s(t_0)}{t_0^{1-\alpha}(2-\alpha)}(t^{2-\alpha} - t_0^{2-\alpha})$$

для $t_0 \leq t < t_1$. В заключение пункта укажем, что значение $\lambda_s(t)$ вычисляется методом двойной рандомизации [2] согласно формуле

$$\lambda_s(t) = \frac{I'(t)}{I(t)} = \frac{\mathrm{EE}(\xi^{(1)}(\Omega,\sigma)|\sigma)}{\mathrm{EE}(\xi^{(0)}(\Omega,\sigma)|\sigma)} \approx \frac{\tilde{I}'(t)}{\tilde{I}(t)}, \tag{3.5}$$

где Ω — траектория частицы, которая строится для построенной реализации поля σ.

Для каждой реализации среды здесь можно строить лишь одну траекторию Ω частицы. Отметим, что полная дисперсия оценки $\tilde{I}'(t)/\tilde{I}(t)$ оценивается сверху стандартным способом с помощью линеаризации дроби (3.5).

4. Модели изотропных случайных полей. Сеточная аппроксимация

Ранее суперэкспоненциальный рост среднего потока был получен авторами для сферически симметричного случайного поля $\sigma(\mathbf{r}, v)$ [5]. Целью настоящей работы является проведение аналогичного исследования для более реалистичного (см., например, [7]) однородного поля типа случайной мозаики Вороного (см. далее п. 5). Для повышения эффективности численно-статистических расчетов предложена универсальная корреляционно-сеточная аппроксимация однородного изотропного поля с сохранением осредненного по реализациям корреляционного масштаба, что обеспечивает удовлетворительную оценку среднего потока для достаточно слабой корреляции. Кроме весьма существенного уменьшения трудоемкости моделирования, такая аппроксимация дает возможность исследовать флуктуации результатов, соответствующие флуктуациям $\sigma(\mathbf{r}, v)$, и выяснить возможность нормализации распределения параметра $\lambda(\sigma)$ при уменьшении корреляционного масштаба среды.

Детальные численные исследования (см., например, [8]) показали, что осредненная вероятность прохождения частицы для изотропного поля σ в значительной степени определяется корреляционным радиусом

$$L = \int_0^\infty k(l)\,dl,$$

где $k(l) \geq 0$ — коэффициент корреляции между значениями поля $\sigma(\mathbf{r}, v)$, $\sigma(\mathbf{r}', v)$ при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = l$ и одномерным распределением среды. В связи с этим в настоящей работе для исследования осредненного потока частиц в качестве базового используется имеющее простой геометрический смысл мозаичное поле Вороного. Оно строится на основе пуассоновского точечного потока $\{\mathbf{r}_i\}$, $i = 1, 2, \ldots$, интенсивности λ_p, который определяет разбиение пространства на ячейки, каждая из которых является множеством точек, наиболее близких к одной из точек потока (мозаика или диаграмма Вороного). Геометрические свойства такого разбиения детально изучены, например, в [9]. Элементы разбиения являются выпуклыми многогранниками, и $L \approx 0.459\lambda_p^{-1/3}$ [9].

Предлагаемая в настоящей работе корреляционно-сеточная аппроксимация поля $\sigma(\mathbf{r}, v) = \sigma_h(\mathbf{r}, v)$ строится путем разбиения пространства R^3 на ансамбль $\{S_h\}$ кубиков с ребром h, в каждом из которых значения поля выбираются независимо из одномерного распределения σ (с конечной дисперсией). Соответствующий эффективный корреляционный радиус ℓ_h получается путем осреднения указанного выше коэффициента корреляции $k(\ell)$ по $\mathbf{r} \in S_h$ и случайному направлению $\omega = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, т. е. по формуле

$$\ell_h = \frac{1}{4\pi h^3} \int\limits_{S_h} \int\limits_{\Omega} \ell(\mathbf{r}, \omega)\, d\mathbf{r}\, d\omega, \tag{4.1}$$

где $\ell(\mathbf{r}, \omega)$ — расстояние от $\mathbf{r} \in S_h$ до границы S_h в направлении ω. Ясно, что

$$L = \ell_h = h\ell_1$$

и $h = L/\ell_1$. Расчеты дали значение $\ell_1 = 0.44831$ с погрешностью, не превосходящей 10^{-5}. Отметим, что трудоемкость (сложность) построения траектории частицы для $\sigma_h(\mathbf{r}, v)$ не зависит от h. Это позволяет эффективно оптимизировать сеточную модель по числу M траекторий, моделируемых для каждой реализации $\sigma_h(\mathbf{r}, v)$ в алгоритме двойной рандомизации, а также оценить среднеквадратическую погрешность результатов, соответствующую флуктуациям поля σ.

5. Тестовая задача

5.1. Для проведения тестовых расчетов рассматривался односкоростной процесс переноса частиц в шаре радиуса $R = 7.72043$ со случайной плотностью $\rho = \rho(\mathbf{r})$ и макроскопическими сечениями $\rho\sigma^{(0)}$, $\rho\sigma_s^{(0)}$, $\rho\sigma_f^{(0)}$, где

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

Одномерное распределение поля $\rho(\mathbf{r})$ равномерно на отрезке $[1-\varepsilon, 1+\varepsilon]$. При $\rho \equiv 1$ шар критичен: $\lambda = 0 \pm 10^{-7}$.

Для построения эффективных алгоритмов метода Монте–Карло в сформулированную модель было введено поглощение с постоянным неслучайным коэффициентом σ_c/v, который приводит к замене $\lambda \mapsto \lambda - \sigma_c/v\ \forall\, \sigma(\mathbf{r}, v)$, как указано в конце п. 1. Отметим, что такой прием является универсальным и может существенно повысить эффективность весового метода, исключая необходимость ветвления моделируемых траекторий.

На основе леммы 1.2 было использовано осреднение, состоящее в том, что моделировался процесс с константами $\sigma_s^* = 0$, $\sigma_f^* = \rho\sigma_s + \rho\sigma_f + \sigma_c$, $\nu^* = 1$, а вес в каждой точке столкновения домножался на величину

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

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

В расчетах, как и в [5], был использован метод максимального сечения (см., например, [1]) с $\sigma_{\max} = 1 + \varepsilon$. Для уменьшения дисперсии оценок, основанных на соотношении (3.5), значения $\xi^{(0)}$ и $\xi^{(1)}$ вычислялись для всех столкновений, включая “дельта-рассеяние”, в отличие от работы [5], где они вычислялись только для “физических” столкновений.

Таким образом, для построения, в частности, оценок потока частиц использовались элементарные оценки вида

$$\xi^{(0)} = \sum_{n=0}^{N} \frac{\psi_n(t)}{\sigma_{\max}},$$

где ψ_n вычислялись для каждого столкновения. Для физических столкновений соответствующая формула имеет вид

$$\tilde{\xi}^{(0)} = \sum_{n=0}^{N} \frac{\psi_n(t)\delta_n}{\sigma_n},$$

где δ_n — индикатор физического столкновения.

Лемма 5.1. *Выполняется соотношение* $\mathrm{D}\xi^{(0)} \le \mathrm{D}\tilde{\xi}^{(0)}$.

Доказательство этого утверждения следует из того, что

$$\mathrm{E}\big(\tilde{\xi}^{(0)} \mid \Omega\big) = \sum_{n=0}^{N} \mathrm{E}\left(\frac{\psi_n(t)\delta_n}{\sigma_n} \,\middle|\, \Omega\right) = \sum_{n=0}^{N} \frac{\psi_n(t)}{\sigma_n}\frac{\sigma_n}{\sigma_{\max}} = \xi^{(0)}.$$

Плотность распределения первых столкновений была взята в виде

$$f(\mathbf{r}, t) = 4t\exp(-2t)g(\mathbf{r}), \quad t > 0, \quad r = |\mathbf{r}| < R, \tag{5.1}$$

где $g(\mathbf{r}) = C\sin(æ r)/r$ — улучшенное диффузионное приближение к пространственной характеристической функции для $\sigma = 1, æ = 0.3739866$ [10]. В (2.1) полагали также $h(\mathbf{r}, \omega) = h_1(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r}, v)$, где $h_1(\mathbf{r}) = \sin(æ r)/r$. При этом $J^{(m)} = (\Phi, h_1 f^{(m)}/f_0)$, т.е. вычисляются функционалы от потока частиц. Расчеты показали, что использование таких функциональных параметров алгоритма существенно улучшает важную здесь сходимость $J'(t)/J(t) \to \lambda$ при $t \to \infty\ \forall \rho$, сравнительно с вариантом, в котором $f(\mathbf{r}, t)$ определяется формулой (5.1), а $h(\mathbf{r}, \omega) \equiv 1$. Отметим, что формула (4.1) для сеточной мозаики дает значения $L = \ell_h = 2.186$ при $h = 4.8762$.

Базовый пуассоновский точечный поток для поля Вороного строился в шаре радиуса $R_1 = 10 \approx R + L$. Проведенные в [8] модельные расчеты показывают, что такое ограничение потока может обеспечить достаточно высокую точность оценки средней вероятности вылета частицы, которая играет определенную роль в рассматриваемой задаче.

Для сеточной модели трудоемкость построения конкретной траектории частицы существенно меньше соответствующей трудоемкости для поля Вороного, т.к. не требуется "перебор" по $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|$ для определения $\sigma_h(\mathbf{r}, v)$.

В таблице 1 приведены оценки функции $I(t)\exp(-\sigma_c t)$ и соответствующие значения среднеквадратических погрешностей δ для поля Вороного (при $m = 1$) и сеточной аппроксимации (при $M = 1 \approx M_{\mathrm{opt}}$). Здесь N_s — число траекторий.

Таблица 1. Значения $\tilde{I}(t)\exp(-\sigma_c t) \pm \delta$ при $N_s = 4 \cdot 10^9$, $L = 2.186$

t	поле Вороного	сеточная аппроксимация
1	0.124241 ± 0.000002	0.124242 ± 0.000002
5	0.173513 ± 0.000002	0.173495 ± 0.000002
10	0.129121 ± 0.000002	0.129093 ± 0.000002
15	0.096155 ± 0.000002	0.096152 ± 0.000002
20	0.071678 ± 0.000002	0.071699 ± 0.000002

Для двух вариантов поля — сеточного и Вороного — при $L = 2.186$ были вычислены достаточно точно оценки функции $I'(t)/I(t)$ в точках $t = 1, \ldots, 10, \ldots, 20$. Затем на основе линейной регрессионной аппроксимации (при $15 \le t \le 20$) были получены оценки коэффициентов d^2, a (табл. 2).

Таблица 2. Регрессионные оценки коэффициентов a и d^2

Поле	$\tilde{a} \cdot 10^5$	$\tilde{d}^2 \cdot 10^5$
сеточной аппроксимации	-23 ± 5.0	3.0 ± 0.3
Вороного	-37 ± 5.0	3.5 ± 0.2

Таким образом, можно констатировать, что в решаемой задаче результаты, полученные на основе поля Вороного и соответствующей сеточной аппроксимации, практически совпадают, а трудоемкость для сеточной аппроксимации меньше примерно в два раза.

Расхождение оценок можно, в частности, объяснить ограничением области моделирования вспомогательного точечного потока, хотя значение L вычисляется без этого ограничения.

5.2. Анализ полученных результатов показывает, что здесь, как и для сферически слоистой мозаики, выполняется соотношение $20 < T^* < 40$ (см. п. 3). Для исследования асимптотики функции $\lambda_s(t) = d \ln I(t)/dt$ расчеты были продолжены до $t < T_1 = 150$. На рисунке представлены точечные оценки функции $\lambda_s(t)$; размер используемых при этом значков приближенно совпадает со среднеквадратической погрешностью. Сплошной кривой обозначен график функции

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

при $t_0 = 40$, $\alpha = 0.2$. Значение $\beta = 0.00199$ было вычислено по формуле (3.4) для достаточно точной оценки $\lambda_{\max} = 0.022$, полученной с помощью дополнительного расчета при $\sigma = \sigma_{\max}$. Отметим, что (5.2) практически не меняется при замене $t_0 = 40$ на $t_0 = 30$, что подтверждает значимость такой оценки.

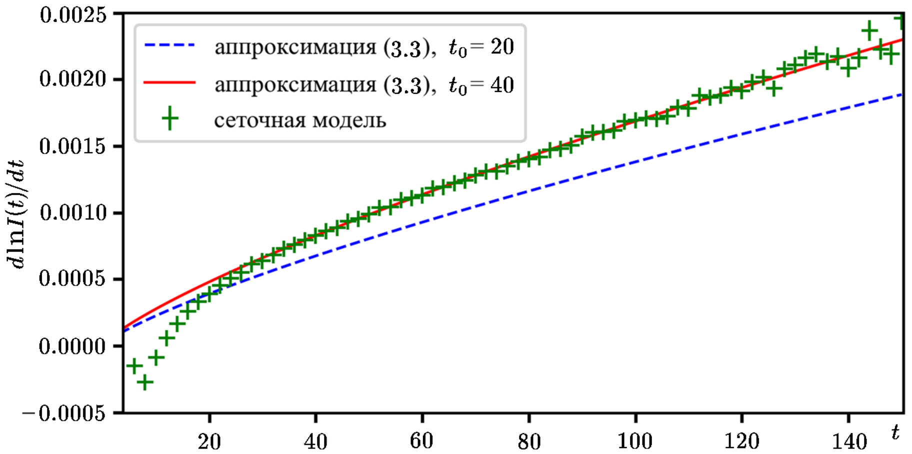

Рис. Оценки логарифмической производной и аппроксимация, $N_s = 216 \cdot 10^9$

6. Предельная теорема для распределения величины $\lambda(\sigma)$ в случае сеточной аппроксимации

Рассмотрим теперь возможность обоснования предельного гауссовского распределения величины λ для сеточной модели поля σ в рассматриваемой задаче. Обозначим через $N = N_h$ число элементов сетки (кубиков), полностью или частично принадлежащих области $\mathbf{D}$ объема V. Предполагается, что при $h \to 0$ выполняется соотношение (в частности, для куба, цилиндра, шара)

$$N_h = n_h + o(n_h), \tag{6.1}$$

где n_h — размер вписанной в $\mathbf{D}$ части сетки. В этом случае

$$\lambda = \lambda_N(\tau_1, \ldots, \tau_N),$$

причем $\tau_i = v_i(\sigma_{h,i} - 1)$, где v_i — "действующий" объем в $\mathbf{D}$ сеточного элемента (в основном, вследствие (6.1) $v_i = h^3 \sim V/n_h$), а $\sigma_{h,i}$ — независимые значения поля σ, равномерно распределенные в $[1-\varepsilon, 1+\varepsilon]$, причем $\mathrm{D}\tau_i \sim (1/3)\varepsilon^2 V^2/n_h^2$.

Далее предполагается, что

$$\left|\frac{\partial^2 \lambda_N}{\partial\tau_i \partial\tau_j}\right| \le C_1 < +\infty, \quad i, j = 1, \ldots, N. \tag{6.2}$$

Формула Тейлора 2-го порядка с малыми приращениями $\tau_i = \tau/N$, $i = 1, \ldots, N$, дает соотношение

$$\frac{\partial\lambda_1}{\partial\tau} \sim \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial\lambda_N}{\partial\tau_i},$$

которое позволяет сделать предположение (фактически численно проверенное, как и (6.2), для тестового шара [5]) о том, что

$$0 < C_0^{(1)} < \frac{\partial\lambda}{\partial\tau_i} < C_0^{(2)}, \quad i = 1, \ldots, N. \tag{6.3}$$

Теорема 6.1. *Пусть выполняются соотношения* (6.2), (6.3) *и* $\lambda_N(0, 0, \ldots, 0) = 0 \ \forall N$. *Тогда, если* $n = n_h \to \infty$, *а* $\varepsilon\sqrt{n} \to 0$, *то величина* $\frac{\sqrt{n}}{\varepsilon} C^{-1}\lambda$ *сходится по распределению к стандартной нормальной случайной величине.*

Доказательство. Используя соотношения (6.2) и (6.3), на основе формулы Тейлора 2-го порядка получаем следующее асимптотическое представление:

$$\lambda \sim C\frac{\varepsilon}{\sqrt{n}}\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}\tau_i(\partial\lambda_N/\partial\tau_i)}{\sqrt{\mathrm{D}\big(\sum_{i=1}^{N}\tau_i(\partial\lambda_N/\partial\tau_i)\big)}} + \frac{\sqrt{n}}{2C\varepsilon}\sum_{i,j=1}^{N}\frac{\partial^2\lambda}{\partial\tau_i\partial\tau_j}\tau_i\tau_j\right) = C\frac{\varepsilon}{\sqrt{n}}(\xi_N + \eta_N),$$

причем

$$\mathrm{D}\left(\sum_{i=1}^{N}\tau_i(\partial\lambda_N/\partial\tau_i)\right) \sim C^2\varepsilon^2/n, \quad |\eta_N| \le C_1 V^2 \varepsilon\sqrt{n}/(2C). \tag{6.4}$$

Умножив числитель и знаменатель в выражении ξ_N на n, получаем нормированную сумму независимых равномерно ограниченных величин $\{n\tau_i(\partial\lambda_N/\partial\tau_i)\}$, для которой, согласно [11, глава 3, §4, (c)], выполнены условия Линдеберга. Таким образом, с учетом второго неравенства в (6.4) теорема доказана. □

Отметим, что в рассматриваемой тестовой задаче нормализация λ может быть довольно быстрой, так как величины τ_i распределены равномерно; в частности известно, что нормированная сумма двенадцати независимых равномерно распределенных чисел уже имеет распределение, весьма близкое к гауссовскому. Напомним, что $h = L/\ell_1$ и, следовательно, $N_h \sim V/h^3 = V(\ell_1/L)^3$; для тестовой задачи из п. 5 имеем: $V = \frac{4}{3}\pi R^3$ и $N_h \approx 16$.

Отметим, что использование формулы Тейлора более высокого порядка при условии равномерной ограниченности соответствующих производных сохраняет утверждение теоремы 6.1, так как дополнительные слагаемые в асимптотике оцениваются степенями величины ε.

Интересно отметить, что теорема 6.1 согласуется с результатами работы [7], в которой нормализация распределения λ была получена на основе экспериментов для малой величины типа Dτ. Фактически это же показали расчеты для модельной сферически слоистой мозаики [5].

В заключение отметим, что разработанная методика может быть использована для исследования потока частиц любого типа. В частности, в [5] путем исследования мировой статистики ВОЗ для COVID-19 был выявлен интервал значимого суперэкспоненциального роста числа зараженных индивидуумов.

Литература

1. **Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др.** Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. — Новосибирск: Наука, 1976. Перевод: Marchuk G.I., Mikhailov G.A., Nazareliev M.A. and ed. The Monte Carlo methods in Atmospheric Optics. Springer-Verlag, 1980.
2. **Михайлов Г.А., Войтишек А.В.** Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло: учеб. пособие для вузов. — М: Изд-во “Академия”, 2006.
3. **Дэвисон Б.** Теория переноса нейтронов. — М.: Атомиздат, 1960. Перевод: Davison B. Neutron transport theory. Oxford: Clarendon Press, 1957.
4. **Лотова Г.З., Михайлов Г.А.** Новые методы Монте-Карло для оценки временных зависимостей в процессе переноса излучения // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2002. — Т. 42, № 4. — С. 570–580. Перевод: Lotova G.Z., Mikhailov G.A. New Monte Carlo methods for estimating time dependences in radiative transfer process // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2002. — Vol. 42, № 4. — P. 544–554.
5. **Лотова Г.З., Михайлов Г.А.** Численно-статистическое и аналитическое исследование асимптотики среднего потока частиц с размножением в случайной среде // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2021. — Т. 61, № 8. — С. 1353–1362. — DOI: 10.31857/S0044466921060077. Перевод: Lotova G.Z., Mikhailov G.A. Numerical-statistical and analytical study of asymptotics for the average multiplication particle flow in a random medium // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2021. — Vol. 61, № 8. — P. 1330–1338. — DOI: 10.1134/S0965542521060075.
6. **Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.** Интегралы и ряды. — М.: Наука, 1981.
7. **Larmier C., Zoia A., Malvagi F., Dumonteil E., Mazzolo A.** Neutron multiplication in random media: Reactivity and kinetics parameters // Annals of Nuclear Energy. — 2018. — Vol. 111. — P. 391–406. — https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.09.006.
8. **Ambos A.Yu., Mikhailov G.A.** Solution of radiative transfer theory problems for ‘realistic’ models of random media using the Monte Carlo method // Rus. J. Num. Anal. Math. Model. — 2016. — Vol. 31, № 3. — P. 1–10. — https://doi.org/10.1515/rnam-2016-0013.

9. **Gilbert E.N.** Random subdivisions of space into crystals // Ann. Math. Statist. — 1962. — Vol. 33, № 3. — P. 958–972. — DOI: 10.1214/aoms/1177704464.
10. **Романов Ю.А.** Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для расчета диффузионных задач (усовершенствованный диффузионный метод) // Исследование критических параметров реакторных систем. — М.: Госатомиздат, 1960. — С. 3–26.
11. **Ширяев А.Н.** Вероятность. — М: Наука, 1980.

Поступила в редакцию 27 мая 2023 г.
После рецензирования без замечаний 29 мая 2023 г.
Принята к печати 05 сентября 2023 г.

Литература в транслитерации

1. **Marchuk G.I., Mikhailov G.A., Nazaraliev M.A. i dr.** Metod Monte-Karlo v atmosfernoi optike. — Novosibirsk: Nauka, 1976. Perevod: Marchuk G.I., Mikhailov G.A., Nazareliev M.A. and ed. The Monte Carlo methods in Atmospheric Optics. Springer-Verlag, 1980.
2. **Mikhailov G.A., Voitishek A.V.** Chislennoe statisticheskoe modelirovanie. Metody Monte-Karlo: ucheb. posobie dlya vuzov. — M: Izd-vo "Akademiya", 2006.
3. **Devison B.** Teoriya perenosa neitronov. — M.: Atomizdat, 1960. Perevod: Davison B. Neutron transport theory. Oxford: Clarendon Press, 1957.
4. **Lotova G.Z., Mikhailov G.A.** Novye metody Monte-Karlo dlya otsenki vremennykh zavisimostei v protsesse perenosa izlucheniya // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2002. — T. 42, № 4. — S. 570–580. Perevod: Lotova G.Z., Mikhailov G.A. New Monte Carlo methods for estimating time dependences in radiative transfer process // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2002. — Vol. 42, № 4. — P. 544–554.
5. **Lotova G.Z., Mikhailov G.A.** Chislenno-statisticheskoe i analiticheskoe issledovanie asimptotiki srednego potoka chastits s razmnozheniem v sluchainoi srede // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2021. — T. 61, № 8. — S. 1353–1362. — DOI: 10.31857/S0044466921060077. Perevod: Lotova G.Z., Mikhailov G.A. Numerical-statistical and analytical study of asymptotics for the average multiplication particle flow in a random medium // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2021. — Vol. 61, № 8. — P. 1330–1338. — DOI: 10.1134/S0965542521060075.
6. **Prudnikov A.P., Brychkov Yu.A., Marichev O.I.** Integraly i ryady. — M.: Nauka, 1981.
7. **Larmier C., Zoia A., Malvagi F., Dumonteil E., Mazzolo A.** Neutron multiplication in random media: Reactivity and kinetics parameters // Annals of Nuclear Energy. — 2018. — Vol. 111. — P. 391–406. — https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.09.006.
8. **Ambos A.Yu., Mikhailov G.A.** Solution of radiative transfer theory problems for 'realistic' models of random media using the Monte Carlo method // Rus. J. Num. Anal. Math. Model. — 2016. — Vol. 31, № 3. — P. 1–10. — https://doi.org/10.1515/rnam-2016-0013.
9. **Gilbert E.N.** Random subdivisions of space into crystals // Ann. Math. Statist. — 1962. — Vol. 33, № 3. — P. 958–972. — DOI: 10.1214/aoms/1177704464.
10. **Romanov Yu.A.** Tochnye resheniya odnoskorostnogo kineticheskogo uravneniya i ikh ispol'zovanie dlya rascheta diffuzionnykh zadach (usovershenstvovannyi diffuzionnyi metod) // Issledovanie kriticheskikh parametrov reaktornykh sistem. — M.: Gosatomizdat, 1960. — S. 3–26.
11. **Shiryaev A.N.** Veroyatnost'. — M: Nauka, 1980.