Сибирский математический журнал
Май—июнь, 2002. Том 43, № 3

УДК 518:517.948

ВЕСОВЫЕ МЕТОДЫ МОНТЕ–КАРЛО ДЛЯ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

Г. А. Михайлов, С. В. Рогазинский

Аннотация: Построены весовые модификации статистического моделирования ансамбля взаимодействующих частиц, связанного с приближенным решением нелинейного уравнения Больцмана. Для этого было использовано специальное интегральное уравнение, полученное на основе расширения фазового пространства системы путем введения новой координаты — номера пары частиц, осуществляющих элементарное взаимодействие. Весовой метод дает, в частности, возможность эффективно изучать зависимость вычисляемых функционалов от параметров задачи, например от параметров дифференциальных сечений взаимодействующих пар. На этой основе можно приближенно решать обратные задачи относительно параметров модели. Можно также увеличивать частоту моделирования сортов частиц, дающих основной вклад в изучаемые функционалы. Библиогр. 9.

Работа посвящена построению и обоснованию весовых модификаций метода прямого статистического моделирования (ПСМ) для приближенного решения нелинейного кинетического уравнения Больцмана [1–3]. Следует отметить, что ранее уже были построены модификации ПСМ, в которых отдельным частицам присваивались «веса», связанные с искусственным перераспределением типов частиц в начальный момент времени [1–3]. Соответствующие весовые оценки не являются статистически эквивалентными оценкам ПСМ. Их состоятельность, т. е. асимптотическая (по числу взаимодействующих частиц) эквивалентность оценкам ПСМ достигается путем специальной рандомизации на основе «физических» соображений баланса.

В работе [2] рассмотрена наиболее общая и в значительной степени обоснованная весовая модификация ПСМ такого типа под названием метода «дополнительной переменной». С точки зрения общей теории весовых статистических методов решения интегральных уравнений [4, 5] эта модификация также является методом прямого моделирования для модифицированного интегрального уравнения [2], определяющего математическую модель эволюции ансамбля взаимодействующих частиц.

Для построения и обоснования алгоритмов ПСМ с целью нахождения приближенного решения нелинейного кинетического уравнения Больцмана может быть использовано линейное интегральное уравнение [6], которое эквивалентно N-частичному уравнению Леонтовича [7], с регуляризованным по пространственным переменным эффективным сечением парных столкновений [8]. Однако использовать это уравнение непосредственно для построения стандартных

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 00–01–00797), Интеграционного гранта СО РАН 2000 (№ 43) и гранта «Ведущие научные школы» (№ 00–15–96173).

весовых модификаций прямого моделирования невозможно, так как его ядро представляет собой сумму взаимно сингулярных слагаемых. В настоящей работе это затруднение преодолевается путем введения номера взаимодействующей пары частиц в число координат фазового пространства системы, в результате чего в ядре остается лишь один сингулярный сомножитель. Для такого ядра оказывается возможным построение алгоритма с «глобальным» весом, который после каждого элементарного перехода в моделируемой цепи Маркова домножается на стандартный $[4,5]$ весовой множитель. Это позволяет распространить хорошо разработанную теорию весовых методов $[4,5]$ на рассматриваемый класс задач и, в частности, дает возможность оценивать параметрические производные от решения, что особенно важно при численном исследовании влияния различных параметров на решение нелинейного уравнения Больцмана.

В связи с общностью предлагаемого подхода построение весовых модификаций метода прямого моделирования проводится для газовой смеси, состоящей из M химических сортов, причем возможен переход из сорта в сорт без изменения количества взаимодействующих частиц. Для простоты газовая смесь рассматривается в неограниченном пространстве. Переход к общему случаю начально-краевой задачи не приводит к принципиальным изменениям в построении весов, а лишь усложняет изложение второстепенными деталями, связанными с учетом взаимодействия частиц с ограничивающими область поверхностями, а также входящих в область потоков. Прямое моделирование этих процессов хорошо известно [6], что позволяет естественным образом включить их в сферу применения весовых методов.

Для определенности будем рассматривать следующую задачу Коши для регуляризованного уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial n_s h_s}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial n_s h_s}{\partial \mathbf{r}} = \sum_{s'=1}^{M}\sum_{q'=1}^{M}\sum_{q=1}^{M}\int\int n_s n_q\{h'_s h'_q - h_s h_q\}$$
$$\times W^{(\varepsilon)}(\mathbf{r},\mathbf{v}',s';\mathbf{v},s|\mathbf{r}_1,\mathbf{v}'_1,q',\mathbf{v}_1,q)d\mathbf{r}_1 d\mathbf{v}' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}_1,$$

$$n_s h_s|_{t=0} = n_s^{(0)}(\mathbf{r})h_s^{(0)}(\mathbf{r},\mathbf{v}), \quad s=1,\ldots,M; \quad (\mathbf{r},\mathbf{v})\in\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3,$$

здесь $n_s h_s \equiv n_s(\mathbf{r},t)h_s(\mathbf{r},\mathbf{v},t)$, $h'_q \equiv h_q(\mathbf{r},\mathbf{v}',t)$, $W^{(\varepsilon)}\big(\mathbf{r},\mathbf{v}',s';\mathbf{v},s|\mathbf{r}_1,\mathbf{v}'_1,q',\mathbf{v}_1,q\big) = |\mathbf{v}-\mathbf{v}_1|\sigma^{(\varepsilon)}\big(\mathbf{r},\mathbf{v}',s';\mathbf{v},s|\mathbf{r}_1,\mathbf{v}'_1,q',\mathbf{v}_1,q\big)$, где $\sigma^{(\varepsilon)}\big(\mathbf{r},\mathbf{v}',s';\mathbf{v},s|\mathbf{r}_1,\mathbf{v}'_1,q',\mathbf{v}_1,q\big)$ — регуляризованное по пространственным переменным эффективное сечение парных столкновений [6], а ε — параметр регуляризации, причем имеет место в слабом смысле предельное соотношение

$$\sigma^{(\varepsilon)}\big(\mathbf{r},\mathbf{v}',s';\mathbf{v},s|\mathbf{r}_1,\mathbf{v}'_1,q',\mathbf{v}_1,q\big) \underset{\varepsilon\to 0}{\longrightarrow} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\sigma\big(\mathbf{v}',s';\mathbf{v},s|\mathbf{v}'_1,q',\mathbf{v}_1,q\big).$$

Отметим, что $\sigma^{(\varepsilon)}(\cdot)$ и $\sigma(\cdot)$ содержат произведение δ-функций, учитывающих физические законы сохранения при парном взаимодействии частиц.

1. Математическая модель стохастической кинетики многочастичной системы. Рассмотрим следующую математическую модель смеси газов, состоящей из M сортов, и будем полагать, что газ находится в неограниченном пространстве. Каждый сорт газа имеет плотность числа частиц $n_s(\mathbf{r},t)$, $s=1,\ldots,M$, $n(\mathbf{r},t)=\sum\limits_{s=1}^{M} n_s(\mathbf{r},t)$ — плотность смеси. Каждая частица этой смеси в данный момент времени описывается заданием следующих величин: s — сорт частицы; $\mathbf{r},\mathbf{v}$ — ее координаты и скорость.

В момент времени $t = 0$ состояние каждого сорта газа описывается посредством функции $n_s^{(0)} h_s^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, причем

$$\iint h_s^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} = 1.$$

Для описания стохастической кинетики такой смеси газов удобно рассматривать ее как простой газ, состоящий из N частиц, включив в число фазовых переменных сорт частицы, т. е. полагаем $x = (\mathbf{r}, \mathbf{v}, s)$, где $s \in \mathbf{S} = \{1, \dots, M\}$, $(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$.

Введем фазовое пространство $\mathbf{X}$ системы N частиц, обозначив

$$X = (x_1, \dots, x_N) = (R, V, S) \in \mathbf{X}, \quad dx = d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\mu(s),$$

причем интегрирование по мере μ означает суммирование по всем значениям s. Состояние системы из N частиц в момент времени $t = 0$ задается плотностью

$$f_0(X) = \prod_{i=1}^{N} f^{(0)}(x_i), \quad f^{(0)}(x) = (n_s^{(0)}/n^{(0)}) h_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}), \tag{1.1}$$

причем

$$\int f^{(0)}(x) dx = 1.$$

Согласно [9] модельный процесс стохастической кинетики системы из N частиц представляет собой однородную марковскую цепь, переходы в которой осуществляются в результате элементарных парных взаимодействий. Распределение времени между элементарными взаимодействиями в системе определяется состоянием системы и является экспоненциальным. Участок N-частичной траектории, соответствующий прямолинейному движению всех частиц между двумя последовательными элементарными взаимодействиями, будем называть *свободным пробегом системы*.

Вероятность элементарного взаимодействия в системе Nчастиц за время dt равна $A(X)dt$, где

$$A(X) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} a(x_i, x_j), \quad a(x_i, x_j) = \sigma(x_i, x_j) |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|;$$

$$\sigma(x_i, x_j) = \sum_{s'=1}^{M} \sum_{q'=1}^{M} \int \int \sigma^{(\varepsilon)} \big(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, s; \mathbf{v}_i', s' | \mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, q, \mathbf{v}_j', q'\big)\, d\mathbf{v}_i' d\mathbf{v}_j'$$

— сечение взаимодействия частиц с номерами i и j. Предполагается, что

$$0 < c_0 \le a(x_i, x_j) \le c_1 < \infty, \quad 1 \le i < j \le N.$$

Вероятность того, что столкновение в системе N частиц реализует пара частиц с номерами i и j, равна $a(x_i, x_j)/A(X)$. При этом распределение новых скоростей частиц $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$ и сортов (s_i, s_j) определяется дифференциальным сечением столкновения пары:

$$\begin{aligned} k\big(\mathbf{v}_i', s_i', \mathbf{v}_j', s_j' \to \mathbf{v}_i, s_i, \mathbf{v}_j, s_j | \mathbf{r}_i', \mathbf{r}_j'\big) \\ = \sigma^{(\varepsilon)} \big(\mathbf{r}_i', \mathbf{v}_i', s_i'; \mathbf{v}_i, s_i | \mathbf{r}_j', \mathbf{v}_j', s_j'; \mathbf{v}_j, s_j\big) \sigma^{-1}\big(x_i', x_j'\big), \end{aligned}$$

а скорости и сорта остальных частиц не изменяются. Здесь m_i — масса i-й частицы, а δ_{ij} — символ Кронекера. Отметим, что $\sigma^{(\varepsilon)}(x_i, x_j)$ строится путем регуляризации обобщенных функций, учитывающих локальный по пространству характер столкновений [6, 8]. Параметр регуляризации обозначим через ε.

Время свободного пробега системы распределено с экспоненциальной плотностью $A(R(t), V, S)E(R', V, S, t)$, где

$$E(R', V, S, t) = e^{-\int\limits_0^t A(R'+t'V, V, S)\,dt'}.$$

Здесь $R(t) = R' + tV$, а R' — начальная точка пробега системы.

Будем рассматривать описанную выше цепь Маркова в расширенном фазовом пространстве, введя в число фазовых переменных номер пары, реализующей столкновение в системе. Этот важный исходный момент приводит к «расслоению» распределения столкновений в системе по номеру пары частиц $\pi = (i, j)$. Такое преобразование фазового пространства необходимо для вывода специального интегрального уравнения, на основе которого можно строить весовые модификации статистического моделирования рассматриваемой многочастичной системы. С этой целью будем фиксировать состояние $Z = (R, S, \pi, V)$ расширенной системы сразу после определения новых скоростей соответственно номеру π пары, реализующей элементарное взаимодействие, т. е. непосредственно перед началом нового свободного пробега системы.

Переход системы из состояния Z' в состояние Z осуществляется следующим образом:

1) выбирается время τ свободного пробега системы согласно плотности $A(R(t), V', S')E(R', V', S', t)$, $R(t) = R' + tV'$;

2) вычисляются координаты всех частиц: $R = R' + \tau V'$;

3) разыгрывается номер $\pi = (i, j)$ пары частиц, реализующей очередное столкновение, согласно вероятностям $a'(\pi)/A(R, V', S')$, где $a'(\pi) = a(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}'_i, s'_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{v}'_j, s'_j)$;

4) определяются скорости V всех частиц: для частиц с номерами (i, j) новые скорости и сорта выбираются согласно плотности распределения $k(\mathbf{v}'_i, s'_i, \mathbf{v}'_j, s'_j \to \mathbf{v}_i, s_i, \mathbf{v}_j, s_j|\mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j)$, скорости и сорта остальных частиц не изменяются.

Начальное состояние $Z_0 = (R_0, S_0, \pi_0, V_0)$ в расширенном фазовом пространстве, т. е. точка первого столкновения в системе для $t_0 = 0$, выбирается соответственно (1.1), причем номер π_0 можно определять произвольно, так как он не влияет на распределение следующего столкновения. Плотность распределения точки Z_0, t_0 обозначим через $F_0(Z, t)$.

2. Построение базового интегрального уравнения. Исходя из вышеизложенного, далее получим выражение переходной плотности из состояния (Z', t') в состояние (Z, t). Последовательные состояния системы в расширенном фазовом пространстве будем называть столкновениями.

Пусть в точке Z' в момент времени t' произошло столкновение в системе. Согласно п. 4 плотность распределения скоростей частиц непосредственно после взаимодействия пары с номером $\pi = (i, j)$ частиц с номерами i, j имеет вид

$$K_1(V', S' \to V, S|R, \pi) = k\big(\mathbf{v}'_i, s'_i, \mathbf{v}'_j, s'_j \to \mathbf{v}_i, s_i, \mathbf{v}_j, s_j|\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j\big) \prod_{\substack{m=1\\ m\neq i,j}}^{N} \delta\big(\mathbf{v}_m - \mathbf{v}'_m\big).$$

Записав в соответствии с пп. 1–4 вероятность того, что очередное столкновение произойдет около точки Z в элементе объема dZ фазового пространства в интервале времени $(t, t+dt)$, получим выражение переходной плотности из состояния (Z', t') в состояние (Z, t):

$$K(Z', t' \to Z, t) = \widetilde{K}(Z', t' \to Z, t) a'(\pi) A^{-1}(R, V', S'), \tag{2.1}$$

$$\widetilde{K}(Z', t' \to Z, t) = A(R, V', S') E(R', V', S', t-t') \\ \times \delta(R - R' - (t-t')V') K_1(V', S' \to V, S | R, \pi).$$

Обозначим через $F(Z, t)$ плотность столкновений в системе. Нетрудно видеть, что

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

где $F_n(Z, t)$ — плотность распределения n-го столкновения, представляет собой ряд Неймана для интегрального уравнения второго рода

$$F(Z, t) = \int_0^t \int_{\mathbb{Z}} F(Z', t') K(Z', t' \to Z, t) dZ' dt' + F_0(Z, t), \tag{2.2}$$

или $F = \mathbf{K}F + F_0$, где $\mathbf{K}$ — интегральный оператор с ядром (2.1); здесь $dZ = dX d\mu_0(\pi)$, причем интегрирование по мере μ_0 означает суммирование по всем различным парам (i, j).

Оператор $\mathbf{K}$, несмотря на наличие в ядре обобщенных функций, можно, как указано в [4, 5], рассматривать действующим из $L_1(\mathbb{Z} \times [0, T])$ в $L_1(\mathbb{Z} \times [0, T])$, тем более что в рассматриваемой задаче все функции неотрицательные. Используя конечность временного интервала, нетрудно показать, что $\|\mathbf{K}\|_{L_1} < 1$. Следовательно, ряд Неймана для интегрального уравнения (2.2) сходится по норме L_1.

Для обоснования алгоритмов статистического моделирования обычно используют интегральное уравнение для плотности $\varphi(X, t)$ столкновений в системе [6]:

$$\varphi(X, t) = \int_0^t \int_{\mathbf{X}} \varphi(X', t') K^{(L)}(X', t' \to X, t) dX' dt' + \varphi_0(X, t), \tag{2.3}$$

где

$$K^{(L)}(X', t' \to X, t) = \sum_{\pi} a(Z') A^{-1}(Z') K_1(V', S' \to V, S | R', \pi) \\ \times A(R', V, S) E(R', V, S, t-t') \delta(R - R' - (t-t')V),$$

а

$$\varphi_0(X, t) = \int_{\mathbb{R}}^{3N} f_0(R', V, S) \delta(t') A(R', V, S) E(R', V, S, t-t') \delta(R - R' - (t-t')V)\, dR' dt'.$$

Известна асимптотическая (при $\varepsilon \to 0$) эквивалентность уравнения (2.3) N-частичному уравнению Леонтовича, которое, в свою очередь, асимптотически (при $N \to \infty$) эквивалентно уравнению Больцмана в предположении молекулярного хаоса [7].

Обычно при решении уравнения (2.3) методом прямого моделирования вычисляют не само решение $\varphi(X,t)$, а функционалы от потока частиц $\Phi(X,t) = A^{-1}(X)\varphi(X,t)$ в заданные моменты времени:

$$J_H(t) = \int\limits_{\mathbb{R}}^{3N} H(X)A^{-1}(X)\varphi(X,t)\,dX.$$

Непосредственно из определения функций $\varphi(X,t)$ и $F(X,t)$ получается следующее утверждение.

Лемма 2.1. *Справедливо представление*

$$J_H(t) = \int\limits_0^t \int\limits_{\mathbb{Z}} \widetilde{H}(X, t-t')F(Z,t')\,dZdt',$$

где $\widetilde{H}(X,t) = H(R+tV, V, S)E(R,V,S,t)$.

Для доказательства достаточно заметить, что величина $\widetilde{H}(X,t-t')$ представляет собой условное математическое ожидание вклада в функционал $J_H(t)$ на одном пробеге системы при условии, что она стартует из состояния X в момент времени t'.

Таким образом, для обоснования прямой статистической оценки линейного функционала $J_H(t)$ можно использовать как уравнение (2.2), так и уравнение (2.3). Однако построение стандартных весовых оценок метода Монте-Карло [4, 5] на основе уравнения (2.3) невозможно вследствие взаимной сингулярности слагаемых в ядре $K_0(\cdot,\cdot)$. В то же время эти слагаемые являются множителями ядра модифицированного интегрального уравнения (2.2). Такая структура ядра дает возможность построения весовых оценок с мультипликативными весами, которые умножаются на отношение физической и моделируемой плотностей после каждого элементарного перехода [4, 5].

3. Весовые оценки. Введем цепь Маркова $\{Z_n, t_n\}$, $n = 0,1,\ldots,\nu$, с нормированной плотностью перехода

$$P^{(1)}(Z',t' \to Z,t) = p_1(t|X',t')\delta(R-R'-(t-t')V')q(\pi|R,V',S') \\ \times p_2(V,S|R,\pi,V',S') \prod_{\substack{m=1\\ m\neq i,j}}^{N} \delta(\mathbf{v}_m - \mathbf{v}'_m)$$

и нормированной плотностью распределения начального состояния (Z_0,t_0):

$$P^{(0)}(Z,t) = P_0(Z)\delta(t).$$

Введем случайные веса по формулам

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

$$Q(Z',t';Z,t) = \{A(R,V',S')E(X',t-t')/p_1(t|X',t')\} \\ \times \{a'(\pi)A^{-1}(R,V',S')/q(\pi|R,V',S')\} \\ \times \sigma^{(\varepsilon)}(V,S|R,V',S',\pi)\sigma^{-1}\big(x'_i,x'_j\big)/p_2(V,S|R,\pi,V',S').$$

Вес Q_n в отличие от использованных в [1, 2] нестандартных весов отдельных частиц можно назвать «глобальным».

С целью оценки величины $J_H(t)$ введем случайные величины — функционалы от траектории системы:

$$\xi = \sum_{n=0}^{\nu} Q_n \widetilde{H}(X_n, t - t_n), \quad \eta = Q_\nu \widetilde{H}(X_\nu, t - t_\nu)/g(X_\nu, t_\nu),$$

где

$$g(X, t') = 1 - \int_0^t p_1(\tau | X, t')\, d\tau.$$

В теории методов Монте-Карло (см., например, [4, 5]) величину ξ принято называть оценкой по столкновениям, а величину η — оценкой по поглощениям.

Теорема 3.1. *При выполнении условий*

$$P_0(Z) \neq 0, \quad \text{если } F_0(Z) \neq 0,$$

$$Q(Z', t'; Z, t) < +\infty, \quad Z, Z' \in \mathbb{Z}; \ t, t' \in [0, T],$$

имеет место равенство $\mathbf{E}\xi = J_H(t)$. *Если дополнительно*

$$g(X, t) > 0, \quad X \in \mathbf{X}, \ t \in [0, T],$$

то $\mathbf{E}\eta = J_H(t)$.

Доказательство. Пусть Δ_n — индикатор события $t_n < T$, где T — рассматриваемый временной интервал, т. е. «время жизни» системы. Справедливо представление

$$\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n Q_n \widetilde{H}(X_n, t - t_n).$$

Используя неотрицательность всех функций, по аналогии с соответствующими утверждениями из [4, 5] можно осреднить последний ряд почленно и получить соотношение

$$\mathbf{E}\xi = \sum_{n=0}^{\infty} (\mathbf{K}^n F_0, \widetilde{H}) = (F, \widetilde{H}) = J_H(t). \tag{3.1}$$

Далее, величину η можно записать в виде

$$\eta = \sum_{n=0}^{\infty} (\Delta_n - \Delta_{n+1}) Q_n \widetilde{H}(X_n, t - t_n)/g(X_n, t_n).$$

На основе этого равенства соотношение $\mathbf{E}\eta = J_H(t)$ обосновывается по аналогии с (3.1).

4. Дисперсии оценок. Рассмотрим вопросы, связанные с конечностью введенных в предыдущем пункте оценок ξ и η. Как следует из теории весовых методов Монте-Карло (см., например, [4, 5]), выполняются соотношения

$$\mathbf{E}\xi^2 = (\chi, \widetilde{H}[2F^* - \widetilde{H}]), \quad \mathbf{E}\eta^2 = (\chi, \widetilde{H}^2/g),$$

где χ — ряд Неймана для уравнения

$$\chi = \mathbf{K}_p \chi + \{F_0^2/P_0\}\delta(t),$$

а $\mathbf{K}_p$ — интегральный оператор с ядром $Q(Z',t';Z,t)K(Z',t';Z,t)$. Здесь $F^* = \mathbf{K}^*F^* + \widetilde{H}$, причем

$$F^*(Z,t) = \mathbf{E}\xi_Z = \mathbf{E}\eta_Z,$$

где ξ_Z, η_Z соответственно оценки по столкновениям и по поглощениям для $Z_0 \equiv Z$ и $Q_0 \equiv 1$ при $t_0 = 0$. В случае прямого моделирования, т. е. при

$$Q_0 \equiv 1, \quad Q_n \equiv 1 \quad \text{и } \eta = H(R_\nu + (t - t_\nu)V_\nu, V_\nu, S_\nu),$$

величина $\mathbf{D}\eta$ конечна для любого конечного временного интервала.

Очевидно, что если весовые множители равномерно ограничены и $H \in L_\infty$, то существует такое t_0, что при $t \le t_0$ выполняются соотношения $\mathbf{D}\xi < +\infty$ и $\mathbf{D}\eta < +\infty$. Поэтому в случае $t > t_0$ целесообразно при достижении системой времени t_0 переходить от весового моделирования к прямому. Наиболее просто такой алгоритм строится и обосновывается на основе известного «двойственного» представления (см., например, [4, 5]) линейного функционала

$$J_H(t) = \int \varphi(X, t_0) F^*_{t_0}(Z,t)\, dX, \tag{4.1}$$

причем $F^*_{t_0}(Z,t) = F^*(Z, t - t_0)$, т. е.

$$F^*_{t_0}(Z,t) = \mathbf{E}\xi_{Z,t_0} = \mathbf{E}\eta_{Z,t_0}, \tag{4.2}$$

где $\xi_{Z,t_0}, \eta_{Z,t_0}$ соответственно оценки по столкновениям и поглощениям при условии, что траектория системы строится с момента времени $t_0 > 0$. На основе (4.1) вместо выражений для ξ и η получаются следующие выражения:

$$\eta_1 = Q_{\nu_0} E(X_{\nu_0}, t_0 - t_{\nu_0}) H(X_\nu, t - t_\nu),$$

$$\xi_1 = Q_{\nu_0} \{E(X_{\nu_0}, t - t_{\nu_0})/g(X_{\nu_0}, t_{\nu_0})\} \sum_{n=\nu_0+1}^{\nu} \widetilde{H}(X_n, t - t_n),$$

где $\nu_0 = \max\limits_n \{t_n < t_0\}$. Путем очевидного повторного осреднения на основе соотношений (4.1) и (4.2) получаем равенства $\mathbf{E}\xi = \mathbf{E}\eta = J_H(t)$.

Поскольку $|H(\cdot,\cdot)| \le C < +\infty$, в силу достаточной малости величина t_0 сразу получаем неравенство $\mathbf{D}\eta_1 < +\infty$. Аналогичное соотношение для ξ_1 легко получается из «повторного» представления дисперсии:

$$\mathbf{D}\xi_1 = \mathbf{DE}(\xi_1|\Omega_0) + \mathbf{ED}(\xi_1|\Omega_0),$$

где Ω_0 — участок траектории системы вплоть до момента времени t_0.

5. Параметрические оценки. Весовой метод дает возможность эффективно изучать зависимость результатов от параметров задачи, например, от параметров $\{c_k\}$ дифференциального сечения $\sigma(x_i, x_j)$, в том числе параметра регуляризации ε. При этом с помощью стандартных приемов теории весовых алгоритмов [4, 5] можно построить оценки соответствующих параметрических производных с конечной дисперсией при выполнении соотношений

$$\rho(\mathbf{K}) < 1, \quad \rho(\mathbf{K}_p) < 1, \quad F_0/P_0 \in L_1, \tag{5.1}$$

а также равномерной ограниченности величин $\|\mathbf{K}'_c\|$, $\|\widetilde{H}'_c\|_{L_\infty}$ в некотором интервале значений параметра $c_k : c_k - \varepsilon \le c \le c_k + \varepsilon$. При выполнении этих условий дополнительно к условиям теоремы 1, в частности, имеем [4, 5]

$$\mathbf{E}\left(\frac{\partial\eta}{\partial c_k}\right) = \frac{\partial J_H(t, c_k)}{\partial c_k}, \quad \mathbf{D}\left(\frac{\partial\eta}{\partial c_k}\right) < +\infty,$$

где

$$\frac{\partial \eta}{\partial c_k} = \eta \frac{\partial \ln \eta}{\partial c_k} = \eta \left\{ \sum_{n=0}^{\nu-1} \frac{\partial \ln[\sigma(X_n) a^{-1}(X_n) A(R_n + (t_{n+1} - t_n) V_n, V_n, S_n)]}{\partial c_k} \right. \\ \left. + \frac{\partial \ln \widetilde{H}(X_\nu, t - t_\nu)}{\partial c_k} \right\} H(R_\nu + (t - t_\nu) V_\nu, V_\nu, S_\nu).$$

Аналогичные выражения получаются и при использовании оценки «по столкновениям». Практически так же строятся оценки кратных параметрических производных. На этой основе можно приближенно решать обратные задачи относительно параметров модели. Отметим, что в случае прямого моделирования условия (5.1) заведомо выполняются.

Весовой метод можно использовать для перераспределения по сортам частиц при $t = 0$ с целью увеличения частоты моделирования сорта частиц, дающего основной вклад в изучаемый функционал.

Нетрудно также увеличить частоты наиболее важных пар взаимодействующих частиц. Путем несущественных изменений изложенная методика может быть распространена на случай, когда возможны изменения сортов частиц, например, в результате химических реакций.

Отметим, что вероятностную погрешность весовых оценок можно уменьшить путем независимой реализации траекторий системы на отдельных вычислительных процессорах с последующим осреднением полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Берд Г.* Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
2. *Рогазинский С. В.* Об одном подходе к решению однородного уравнения Больцмана // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1987. Т. 27, № 4. С. 564–574.
3. *Королев А. Е., Яницкий В. Е.* Прямое статистическое моделирование столкновительной релаксации в смесях газов с большим различием в концентрациях // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1983. Т. 23, № 3. С. 674–680.
4. *Mikhailov G. A.* Parametric estimates by the Monte Carlo method. Utrecht: VSP, 1999.
5. *Михайлов Г. А.* Весовые методы Монте-Карло. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
6. *Иванов М. С., Рогазинский С. В.* Экономичные схемы статистического моделирования течений разреженного газа // Мат. моделирование. 1989. Т. 1, № 7. С. 130–145.
7. *Леонтович М. А.* Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения теории случайных процессов // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1935. Т. 5. С. 75–79.
8. *Повзнер А. Я.* Об уравнении Больцмана кинетической теории газов // Мат. сб. 1962. Т. 58. С. 65–86.
9. *Кац М.* Вероятность и смежные вопросы в физике. М.: Мир, 1965.

Статья поступила 7 декабря 2001 г.

Михайлов Геннадий Алексеевич, Рогазинский Сергей Валентинович
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, пр. Акад. М. А. Лаврентьева, 6, Новосибирск 630090
gam@sscc.ru, svr@osmf.sscc.ru