

УДК 519.676

## Замечания о практически эффективных алгоритмах численного статистического моделирования\*

Г.А. Михайлов

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук,  
просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090  
E-mail: gam@osmf.sccc.ru

**Михайлов Г.А.** Замечания о практически эффективных алгоритмах численного статистического моделирования // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2014. — Т. 17, № 2. — С. 177–190.

Рассматривается ряд алгоритмов численного моделирования случайных величин и функций, а также параметрического численно-статистического анализа, в разработке которых принял участие автор. Даны практически важные уточнения и разъяснения формулировок и обоснований алгоритмов.

**Ключевые слова:** базовое случайное число, плотность распределения, метод дискретной суперпозиции, ветвление траекторий, метод подобных траекторий, случайное поле, гистограмма.

**Mikhailov G.A.** About efficient algorithms of numerically-statistical simulation // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2014. — Vol. 17, № 2. — P. 177–190.

A set of numerical algorithms for the simulation of random variables and functions as well for the parametrical numerically-statistical analysis are considered. Important specifications and explanations of the algorithms formulations and substantiation, which are effective from the standpoint of practice, are given.

**Key words:** base random number, probability density function, discrete superposition method, branching of trajectories, similar trajectory method, random field, histogram.

---

## Введение

В настоящее время имеется большое количество комплексов алгоритмов и компьютерных программ для решения различных прикладных задач методами численного статистического моделирования. Однако довольно часто возникают новые актуальные задачи, решение которых предварительно оценивается методами Монте-Карло с помощью оперативного программирования. Для этой цели особенно подходят, может быть, сравнительно трудоемкие, но логически простые и легко программируемые алгоритмы. В настоящей статье с дополнительными, практически важными, замечаниями представлен ряд таких алгоритмов, в разработке которых, в той или иной степени, принял участие автор. Даны уточнения и разъяснения формулировок и обоснований, а также указания о возможном использовании рассматриваемых методов. С точки зрения автора это может расширить сферу применения численного статистического моделирования.

---

\*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты № 12-01-00034, № 13-01-00746, № 13-01-00441), МИП СО РАН № 47, № 126 и проекта Ведущие научные школы НШ-5111.2014.1.

## 1. Моделирование равномерно распределенных пар номеров

Пусть  $\xi, \eta \in \overline{1, n}$ ,  $\xi \neq \eta$ . Такие равновероятные пары номеров, в частности, моделируются при решении нелинейных кинетических уравнений методом Монте-Карло (см., напр., [1]).

Известен следующий алгоритм:

$\alpha_1 := \text{rand}$ ;     $\alpha_2 := \text{rand}$ ;  
 $\xi := \text{entier}(\alpha_1 \times n) + 1$ ;     $\eta := \text{entier}(\alpha_2 \times (n - 1)) + 1$ ;  
 если  $\eta \geq \xi$ , то  $\eta := \eta + 1$ .

Обоснование этого алгоритма следует из соотношения

$$P(\xi = i, \eta = j) = P(\xi = i)P(\eta = j | \xi = i) = \frac{1}{n-1}P(\xi = i), \quad j = 1, \dots, i-1, i+1, \dots, n,$$

которое связано с тем, что распределение на любом фиксированном подмножестве рассматриваемых пар также равномерно. Интересно заметить, что здесь допустима подстановка  $\alpha_2 = n\alpha_1 - \xi + 1$  (см. далее п. 4).

Здесь и далее через  $\text{rand}$  обозначена процедура, реализующая следующее, т. е. каждый раз новое псевдослучайное число. Символом  $\alpha$  с различными индексами обозначаются независимые реализации базового случайного числа, равномерно распределенного в  $(0, 1)$ .

*Дополнительное замечание:* случайные номера  $\text{entier}[n(n^{k-1}\alpha - \text{entier}(n^{k-1}\alpha))] + 1$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$ , независимы и равномерно распределены в  $\overline{1, n}$ .

## 2. Моделирование гамма- и бета-распределений

**2.1.** Рассматривается распределение с плотностью

$$f_{\nu, \lambda}(x) = \frac{x^{\nu-1} e^{-\lambda x}}{\Gamma(\nu)}, \quad x > 0, \quad \lambda > 0,$$

при  $0 < \nu < 1$ . Известно, что случай произвольного  $\nu$  сводится к рассматриваемому на основе правила композиции гамма-распределений [2].

Справедливо представление

$$\xi_{\nu, \lambda} = \frac{\xi_{\nu}}{\lambda},$$

где  $\xi_{\nu}$  распределено с плотностью

$$f_{\nu}(x) = \frac{x^{\nu-1} e^{-x}}{\Gamma(\nu)}, \quad x > 0,$$

так как  $P(\frac{\xi_{\nu}}{\lambda} < x) = F_{\nu}(\lambda x) = F_{\nu, \lambda}(x)$ . Моделирование  $\xi_{\nu}$  осуществляется “мажорантным” методом исключения (см., напр., [2]) на основе соотношения

$$g(x) = x^{\nu-1} e^{-x} \leq g_1(x) = \begin{cases} x^{\nu-1}, & x \leq 1, \\ e^{-x}, & x > 1, \end{cases}$$

причем случайная величина  $\xi_1$  с плотностью  $(\nu^{-1} + e^{-1})^{-1} g_1(x)$  моделируется “методом обратной функции”, т. е. путем решения уравнения

$$\frac{1}{\nu^{-1} + e^{-1}} \int_0^{\xi_1} g_1(x) dx = \alpha.$$

Если  $\alpha < \frac{\nu^{-1}}{\nu^{-1} + e^{-1}} = \frac{1}{1 + \nu e^{-1}}$ , то

$$\frac{1}{\nu^{-1} + e^{-1}} \int_0^{\xi_1} x^{\nu-1} dx = \alpha, \quad \xi_1 = [\alpha(1 + \nu e^{-1})]^{1/\nu}, \quad (2.1)$$

иначе

$$\frac{1}{\nu^{-1} + e^{-1}} \int_1^{\xi_1} e^{-x} dx = \alpha - \frac{\nu^{-1}}{\nu^{-1} + e^{-1}}, \quad \xi_1 = -\ln[(e^{-1} + \nu^{-1})(1 - \alpha)]. \quad (2.2)$$

В используемом далее алгоритме исключения, основанном на проверке неравенства  $\alpha_1 g_1(\xi_1) < g(\xi_1)$ , можно уменьшить число вычислительных операций, сокращая один из множителей в выражении  $g(\xi_1)$ , т. е. в случае (2.1) полагать  $\xi = \xi_1$ , если  $\alpha_1 < e^{-\xi_1}$ , а в случае (2.2) такое значение  $\xi$  реализовать, если  $\alpha_1 < \xi_1^{\nu-1}$ . Известно, что среднее число циклов в такой процедуре исключения пропорционально величине  $S(\nu) = (\nu^{-1} + e^{-1})/\Gamma(\nu)$ , причем  $S(0) = 1$ ,  $S(1) = 1 + e^{-1}$  и  $S'_\nu(\nu) > 0$ ,  $0 < \nu < 1$  [2].

Отметим, что моделирование гамма-распределений широко используется при решении стохастических задач метеорологии и финансовой математики.

## 2.2. Плотность бета-распределения определяется формулой

$$f_{p,m}(x) = \frac{x^{p-1}(1-x)^{m-1}}{B(p,m)}, \quad 0 < x < 1,$$

где  $p, m > 0$  — параметры.

В [2] для случая целого  $m$  дана следующая моделирующая формула:

$$\xi_{p,m} = \exp\left(\sum_{k=1}^m \frac{\ln \alpha_k}{p+k-1}\right). \quad (2.3)$$

Приведенный в [2] вывод этой формулы является нестандартным и технически сложным. Его проверка затруднительна и, по-видимому, в связи с этим формула (2.3) незаслуженно мало используется. Однако эту формулу можно обосновать переходом к случайной величине  $\ln \xi_{p,m}$ , плотность распределения которой легко выводится индукцией по  $m$  с использованием формулы свертки

$$\begin{aligned} C_0 \int_0^x e^{-zp}(1-e^{-z})^{m-1} e^{-(p+m)(x-z)} dz &= C_0 e^{-(p+m)x} \int_0^x e^z (e^z - 1)^{m-1} dz \\ &= C e^{-(p+m)x} (e^x - 1)^m = C e^{-px} (1 - e^{-x})^m. \end{aligned}$$

Для  $p, m$  нецелых можно использовать мажорантный вариант метода исключения, рассматривая в качестве мажоранты для  $x^{p-1}(1-x)^{m-1}$  одну из функций:

$$x^{[p]-1}(1-x)^{m-1}, \quad x^{p-1}(1-x)^{[m]-1},$$

кроме случая  $p, m < 1$ , для которого предварительно используется алгоритм суперпозиции (см. п. 4) на основе представления

$$f_{p,m}(x) = \frac{p}{p+m} f_{p+1,m}(x) + \frac{m}{p+m} f_{p,m+1}(x).$$

### 3. Метод “мажорантного (максимального) сечения” для моделирования обобщенного экспоненциального распределения

Пуассоновский случайный точечный поток  $\{\tau_i\}$ ,  $i = 0, 1, \dots$ , интенсивности  $\sigma(t)$  характеризуется тем, что случайные величины  $\tau_i - \tau_{i-1}$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) распределены соответственно с плотностями

$$f_i(t|\tau_{i-1}) = \sigma(t + \tau_{i-1}) \exp(-T(t; \tau_{i-1})), \quad t > 0,$$

где  $T(t; \tau_{i-1}) = \int_0^t \sigma(t' + \tau_{i-1}) dt'$ ;  $\tau_0 = 0$ .

Предполагается, что  $T(\infty; \tau_{i-1}) = +\infty$ . Распределение случайной величины  $\xi = \tau_1$  с плотностью

$$f(t) \equiv f_1(t|0) = \sigma(t) \exp\left(-\int_0^t \sigma(t') dt'\right), \quad t > 0,$$

будем называть обобщенным (или неоднородным) экспоненциальным.

Пусть  $\sigma(t) \leq \sigma_m(t)$ , причем пуассоновский поток  $\{\tau_i^{(m)}\}$  интенсивности  $\sigma_m(t)$  достаточно просто моделируется. Метод мажорантного сечения вытекает непосредственно [3] из известного свойства прореживания потока  $\{\tau_i^{(m)}\}$ :

*если точки  $\tau_i^{(m)}$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) исключать условно независимо с вероятностями  $1 - \sigma(\tau_i)/\sigma^{(m)}(\tau_i)$ , т. е. “отбирать” с вероятностями  $p(\tau_i) = \sigma(\tau_i)/\sigma^{(m)}(\tau_i)$ , то отобранные точки  $\{\tau_j\}$  реализуют точечный поток интенсивности  $\sigma(t)$ .*

С точностью до рассмотрения величин  $o(dt)$  это свойство следует из того, что вероятность появления отобранной точки в интервале  $(t, t + dt)$  равна  $p(t) \cdot \sigma^{(m)}(t) dt = \sigma(t) dt$ . На основе вышесказанного можно сформулировать алгоритм мажорантного сечения:

*реализуется поток  $\{\tau_i^{(m)}\}$ , причем определяется  $\nu = \min\{i : \alpha_i < \sigma(\tau_i^{(m)})/\sigma_m(\tau_i^{(m)})\}$ ; в результате  $\xi = \tau_\nu^{(m)}$ .*

Соответствующий варианту  $\sigma_m(t) \equiv \sigma_m$  “алгоритм максимального сечения” Колемана (W.A. Coleman) можно сформулировать особенно просто:

$$\xi := 0; L : \xi := \xi - \ln(\text{rand})/\sigma_m; \text{ если } \text{rand} > \sigma(\xi)/\sigma_m(\xi), \text{ то на } L.$$

При этом  $E(\nu) < +\infty$ , в частности, если  $\sigma(t) \geq \varepsilon > 0$ . Более реальный критерий конечности величины  $E(\nu)$  получается путем рассмотрения вероятности “отбора через одну точку потока  $\tau_i^{(m)}$ ” [3].

Метод мажорантного сечения широко используется при решении кинетических уравнений методом Монте-Карло для геометрически сложных (см. п. 8) радиационных моделей. Известен также рандомизированный (по слагаемым величины  $\sigma$ ) вариант этого метода под названием “метод мажорантной частоты”. Аналогичное, приведенному здесь, вероятностное обоснование этого метода дано в [4].

### 4. Метод “дискретной суперпозиции” (рандомизация моделирования)

**4.1.** Пусть  $\{p_i\}$  — вероятности,  $\{f_i(x)\}$  — плотности вероятностей,  $\{\psi_i(\alpha)\}$  — соответствующие моделирующие функции и

$$f(x) = \sum_i p_i f_i(x), \quad i = 1, 2, \dots$$

Согласно методу дискретной суперпозиции, случайная величина  $\xi$  с плотностью вероятностей  $f(x)$  моделируется следующим образом:

$$\text{если } \alpha_1 \in \Delta_k = \left[ \sum_{i=1}^{k-1} p_i, \sum_{i=1}^k p_i \right), \text{ то } \xi = \psi_k(\alpha_2).$$

Величину  $\alpha_2$  здесь можно заменить на  $(\alpha_1 - \sum_{i=1}^{k-1} p_i)/p_k$ , так как при условии  $\alpha_1 \in \Delta_k$  величина  $\alpha_1 - \sum_{i=1}^{k-1} p_i$  равномерно распределена в интервале  $[0, p_k)$ .

Таким образом получается модифицированный алгоритм [2]. Отметим, что алгоритм дискретной суперпозиции элементарно обосновывается путем вычисления функции распределения по формуле полной вероятности.

**4.2.** Далее рассмотрен практически важный пример использования модифицированного алгоритма суперпозиции.

Пусть  $f(x) \equiv f(x; s)$ ,  $\xi \equiv \xi_s$ , где  $s$  — некоторый параметр, причем

$$f(x; s) = \frac{s - s_1}{s_2 - s_1} f(x; s_2) + \frac{s_2 - s}{s_2 - s_1} f(x; s_1), \quad s_1 \leq s \leq s_2,$$

т. е.  $f(x; s)$  в интервале  $s_1 \leq s \leq s_2$  определяется линейной интерполяцией по параметру. Полагая  $(s - s_1)/(s_2 - s_1) = p_2$ ,  $f(x; s_1) = f_1(x)$ ,  $f(x; s_2) = f_2(x)$ , получаем соответствующий модифицированный алгоритм дискретной суперпозиции:

$$\text{если } \alpha < p_1, \text{ то } \xi := \psi_1(\alpha/p_1), \text{ иначе } \xi := \psi_2((\alpha - p_1)/p_2).$$

Такой алгоритм целесообразно использовать, в частности, при моделировании рассеяния частицы соответственно индикатрисе, кусочно-линейно зависящей от длины волны [5]. Если  $0 \leq \xi_s \leq s$ , то здесь целесообразно<sup>1</sup> переходить к моделированию случайной величины  $\xi_s/s$ .

**4.3.** В [6] был предложен “метод повторения” для моделирования случайного вектора  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$  с неотрицательными ковариациями  $r_{ij}$ ,  $R = \{r_{ij}\}$ , и одинаковым для всех компонент заданным одномерным распределением с математическим ожиданием  $m$  и дисперсией  $s^2$ .

В этом методе последовательность компонент случайно разбивается на группы одинаковых значений, которые затем независимо реализуются. Ясно, что для заданного разбиения  $\Delta_m$  при этом реализуется случайный вектор с корреляционной матрицей

$$R(\Delta_m) = \{r_{ij}^{(m)}\}, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

такой, что  $r_{ij}^{(m)} = 1$ , если  $\xi_i, \xi_j$  принадлежат одной и той же группе, и  $r_{ij}^{(m)} = 0$  иначе. Следовательно, если  $p_m = P(\Delta_m)$ , то имеет место соотношение

$$R = \sum_{m=1}^N p_m R(\Delta_m).$$

<sup>1</sup>Это фактически заметила Г.З. Лотова.

Если это уравнение относительно вероятностей  $\{p_m\}$  не имеет решения, то метод повторения не реализуем. Оказалось, что в случае экспоненциальных, т. е. показательных,  $r_{ij}$  алгоритм метода повторения можно построить на основе моделирования пуассоновского точечного потока следующим образом.

На отрезке  $0 \leq t \leq n$  строится пуассоновский точечный поток  $\{t_k\}$  ( $k = 0, 1, \dots, m$ ;  $t_0 = 0, t_m = n$ ) интенсивности  $\sigma(t)$  [3]; при этом компоненты  $\xi_i$  для  $t_{k-1} \leq i < t_k$  образуют  $k$ -ю группу  $\Delta_m^{(k)}$  одинаковых значений.

Поскольку  $E((\xi_i - m)(\xi_j - m)) = P_{ij}s^2$ , где  $P_{ij}$  — вероятность нуля точек в отрезке  $i \leq t \leq j$ , то здесь

$$r_{ij} = s^2 P_{ij} = s^2 \exp\left(-\int_i^j \sigma(t) dt\right).$$

Если  $\sigma(t) \equiv \sigma$ , то  $r_{ij} = s^2 \exp(-\sigma|j - i|) = s^2 q^{|j-i|}$ .

Отметим, если заданное одномерное распределение безгранично делимо, то реализуемое здесь  $n$ -мерное распределение можно модифицировать путем суммирования независимых реализаций вектора. Таким образом можно построить, например, случайный вектор с достаточно реальным многомерным гамма-распределением.

## 5. Моделирование гауссовского случайного вектора

Гауссовский вектор  $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_l)^\top$  с нулевым средним ( $E\eta = 0$ ) и корреляционной матрицей  $K = \{K_{ij}\}$ ,  $i, j = 1, \dots, l$ , моделируется по формуле  $\eta = A\xi$ , где  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_l)^\top$  — вектор независимых стандартных нормальных величин и  $A = \{a_{ij}\}$  ( $1 \leq j \leq i \leq l$ ) — подходящая нижняя треугольная матрица. Будем предполагать, что матрица  $K$  строго положительно определена и соответственно строго положительными являются ее главные миноры. Поскольку  $E\xi\xi^\top = \text{diag}(1, \dots, 1)$ , то справедливо соотношение

$$EA\xi(A\xi)^\top = EA\xi\xi^\top A^\top = AE\xi\xi^\top A^\top = AA^\top = R.$$

Из последнего равенства легко получается известное (см., напр., citeMih) рекуррентное представление величин  $a_{ij}$ :

$$a_{jj} = \sqrt{R_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}^2}, \quad a_{ij} = \frac{R_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{ik}a_{jk}}{a_{jj}}.$$

Под знаком квадратного корня здесь имеет место  $j$ -й главный минор матрицы  $K$ . Если величины  $K_{ij}$  вычисляются статистически приближенно, то главные миноры могут оказаться отрицательными и матрицу  $K$  следует модифицировать. Наиболее просто это сделать, сдвинув спектр  $K_{ii} \rightarrow K_{ii} + \varepsilon$ . Более точная модификация получается занулением отрицательных собственных чисел  $K$  с использованием вращения системы координат. Таким образом, уменьшается ранг ковариационной матрицы и моделирование осуществляется линейным преобразованием вектора меньшей размерности. Разработка такого алгоритма (а также исследование погрешности, возникающей при сдвиге спектра) является одной из задач численного статистического моделирования.

В заключение этого пункта рассмотрим формулы Винера (Wiener N.):

$$\xi_1 = \sqrt{-2 \ln \alpha_1} \cos(2\pi\alpha_2), \quad \xi_2 = \sqrt{-2 \ln \alpha_1} \sin(2\pi\alpha_2). \quad (5.1)$$

Случайные величины  $\xi_1, \xi_2$  независимы и стандартно нормальны. Однако при использовании псевдослучайных чисел эти свойства воспроизводятся удовлетворительно лишь при условии достаточной равномерности распределения точки  $(\alpha_1, \alpha_2)$  в единичном квадрате. Определяемый формулами (5.1) вектор изотропен на плоскости. Известно (см., напр., [2]) более общее утверждение:

*случайный вектор  $(\xi_1, \dots, \xi_n)$  с независимыми одинаково нормально распределенными компонентами изотропен в  $R^n$ .*

С другой стороны, в [10] получено следующее выражение функции распределения  $l$ -й компоненты  $n$ -мерного единичного изотропного вектора  $\omega_n$ :

$$F_l(t) = P(x_l < t) = \frac{S_{l-1}}{S_l} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\arcsin t} \cos^{l-2}(\Theta) d\Theta,$$

где  $S_l$  — площадь поверхности единичной сферы в  $R^l$ . При экономном табулировании функции  $F_l^{-1}(\alpha)$  это дает сравнительно эффективный алгоритм моделирования  $\omega_n$ . Он особенно полезен для реализации лишь части координат  $\omega_n$ .

## 6. Алгоритмы с ветвлением траекторий и задача минимизации дисперсии целочисленной случайной величины

Эффективный коэффициент  $k_{ef}$  размножения частиц по поколениям актов ветвления траекторий можно оценивать путем прямого моделирования, которое дает числа  $\{n_i\}$  частиц, появляющихся в актах соответствующих номеров. В результате строится следующая статистическая оценка (см., напр., [7]):

$$k_{ef} \approx \tilde{k} = \frac{n_2 + \dots + n_m}{n_1 + n_3 + \dots + n_{m-1}} = \frac{L(2, m)}{L(1, m-1)}.$$

При этом для улучшения оценки какое-то количество  $N$  начальных поколений не учитывается, т. е. делается замена  $n_N \rightarrow n_1$  [7].

В [7] дана следующая асимптотически точная (при  $N, n_1 \rightarrow \infty$ ) оценка среднего квадрата погрешности:

$$D\tilde{k} \approx \frac{k_{ef} \left(1 - \frac{k_{ef}}{E\nu}\right) + \frac{k_{ef}}{E\nu} D\nu}{L(1, m-1)}, \quad (6.1)$$

где  $\nu$  — случайное число частиц, появляющихся в одном акте ветвления. Интересно отметить, что до работы [7] слагаемое с  $D\nu$  игнорировалось, по-видимому, потому, что в качестве основных рассматривались модели с фиксированным  $\nu$ . Величина  $k_{ef}$  в рамках заданной модели переноса частиц вполне определяется значением  $q = E\nu$  независимо от распределения  $\nu$ . Поэтому, согласно (6.1), возникает задача минимизации величины  $D\nu$ .

**Лемма 6.1.** *Величина  $D\nu$  минимальна в классе  $\Sigma_q$  целочисленных случайных величин  $\nu$  с заданным значением  $E\nu = q$  и равна  $(q - [q])(1 - q + [q])$ , если*

$$P(\nu = [q]) = 1 - (q - [q]), \quad P(\nu = [q] + 1) = q - [q], \quad (6.2)$$

*причем справедливо<sup>2</sup> представление  $\nu = [q] + \alpha$ .*

<sup>2</sup>Замечание С.А. Роженко.

Доказательство леммы следует<sup>3</sup> непосредственно из хорошо известного “центрированного” представления дисперсии

$$D\nu = E(\nu - ([q] + 1/2))^2 - (E\nu - ([q] + 1/2))^2,$$

так как первое слагаемое для распределения (6.2) здесь равно 1/4, а для любого другого распределения из  $\Sigma_q$  оно больше 1/4.

## 7. Параметрические весовые оценки

**7.1.** Весовые алгоритмы моделирования здесь рассмотрим на примере решения задач односкоростной теории переноса частиц. Вероятностная модель односкоростного процесса переноса частиц определяется плотностью  $\sigma e^{-\sigma x}$  ( $\sigma > 0, x > 0$ ) распределения случайной длины  $\chi$  “свободного пробега”, плотностью  $w(y)$  ( $-1 \leq y \leq 1$ ) распределения косинуса  $\mu$  угла рассеяния и вероятностью “выживания”  $q$  в точке “столкновения” (см., напр., [5]). Функция  $w(y)$  обычно называется индикатрисой рассеяния. Для решения задач теории переноса методом Монте-Карло численно моделируется цепь Маркова столкновений частицы с элементами вещества соответственно вспомогательной радиационной модели и строится “оценка по столкновениям”. При этом используется вспомогательный вес, который после очередного случайного перехода домножается на величину

$$\frac{q}{q_0} \frac{\sigma e^{-\sigma x}}{p(x)} \frac{w(\mu)}{r(\mu)},$$

где  $p(x)$  — моделируемая плотность распределения  $\chi$ ,  $r(y)$  — моделируемая индикатриса, а  $q_0$  — моделируемая вероятность выживания.

В работе [8] использовано значение  $q_0 = 1$ , причем обрыв траектории реализуется вследствие вылета из среды. В рассмотренных условиях средний квадрат оценки по столкновениям (для функционалов от плотности “физических” столкновений) определяется интегральным уравнением 2-го рода с оператором  $K_p$ , спектральный радиус которого в случае бесконечной среды равен

$$\rho(K_p) = q^2 \int_0^\infty \frac{\sigma^2 e^{-2\sigma x}}{p(x)} dx \int_{-1}^{+1} \frac{w^2(y)}{r(y)} dy, \quad (7.1)$$

а в случае конечной среды мажорируется этой величиной [5].

Будем предполагать, что индикатриса  $w(y) = w_s(y)$  достаточно регулярно зависит от некоторого параметра  $s$ , причем  $s_1 \leq s \leq s_2$ . Например, в [8] рассматривается индикатриса Хенни–Гринштейна, определяемая средним косинусом рассеяния  $\bar{\mu}$ . Коэффициент  $\sigma$  рассматривается в интервале  $0 < \sigma_1 \leq \sigma \leq \sigma_2 < +\infty$ .

Из (7.1) следует, что для глобальной оптимизации параметрической весовой оценки по столкновениям целесообразно определять моделируемую плотность путем решения минимаксной задачи вида

$$p^* = \arg \min_{p \in P} \max_{\beta_1 \leq \beta \leq \beta_2} \int \frac{g_\beta^2(x)}{p(x)} dx, \quad (7.2)$$

где  $P$  — семейство непрерывных плотностей,  $\beta$  — параметр,  $g_\beta \in P$ ,  $\beta_1 \leq \beta \leq \beta_2$ .

<sup>3</sup>Замечание А.И. Саханенко.



Введем обозначение

$$J(p; g) = \int \frac{g^2(x)}{p(x)} dx.$$

В [8] показано, что в случаях, когда  $g$  — плотность распределения длины пробега или индикатриса, решение задачи (7.2) при определенных условиях совпадает с решением более простой задачи:

$$p^* = \arg \min_{p \in P} \max_{i=1,2} J(p; g_i), \quad (7.3)$$

где  $p_i \equiv p_{\beta_i}$ ,  $i = 1, 2$ .

**Лемма 7.1** [8]. *Решение минимаксной задачи (7.3) определяется выражением*

$$p_0^*(x) = C(\lambda^*) \sqrt{\lambda^* g_1^2(x) + (1 - \lambda^*) g_2^2(x)},$$

где величина  $\lambda^*$  является единственным решением относительно  $\lambda$  уравнения

$$J(\tilde{p}_\lambda; g_1) = J(\tilde{p}_\lambda; g_2), \quad 0 \leq \lambda \leq 1.$$

Рассмотрим теперь семейство  $P_1$ , удобно моделируемое методом “суперпозиции” плотностей вида

$$p_1(x) = \lambda g_1(x) + (1 - \lambda) g_2(x), \quad 0 \leq \lambda \leq 1,$$

в предположении, что  $g_1 \neq g_2$ .

**Теорема 7.1** [8]. *Для семейства  $P_1$  решение минимаксной задачи вида (7.3) определяется выражением*

$$p_1^*(x) = \frac{g_1(x) + g_2(x)}{2}.$$

В [7] также показано, что с удовлетворительной точностью в рассматриваемых задачах выполняется соотношение  $G(p_1^*) \approx G(p_0^*)$ , где  $G(p) = \max_{i=1,2} J(p, g_i)$ . Таким образом, для оптимизации параметрических оценок в задачах теории переноса целесообразно использовать вспомогательные плотности вида  $p_1$ , которые удобно моделируются модифицированным методом суперпозиции:

$$\text{если } \alpha < 1/2 \text{ то } \xi := \psi_1(2\alpha) \text{ иначе } \xi := \psi_2(2(\alpha - 1/2)),$$

где  $\psi_i$  — моделирующая функция для плотности  $p_i$ ,  $i = 1, 2$ .

В заключение отметим, что физическая векторная модель переноса поляризованного излучения, по существу, является весовой, так как предполагает преобразование ассоциируемого с “фотоном” вектора Стокса матрицей рассеяния. Реализацию (в качестве вспомогательной) скалярной модели для единичной матрицы рассеяния с вычислением соответствующего матричного веса естественно рассматривать как аналоговое моделирование. Оно позволяет эффективно оценивать влияние поляризации на интенсивность излучения, а также допускает весовые параметрические и локальные оценки (см., напр., [9]).

## 8. Экспоненциально коррелированные случайные поля и асимптотические “функции пропускания”

Обозначим через  $\mathbf{n}$  нормаль к плоскости, а через  $p$  — расстояние до этой плоскости от центра координат  $O$ . Для ограниченной области  $D \subset R^3$  пуассоновское поле плоскостей (т. е. параметрических точек  $\{p_i, \mathbf{n}_i\}$ ) реализуется следующим образом [10]. Определяется шар  $\Omega$  радиуса  $d$  с центром  $O$  такой, что  $D \subset \Omega$ . Пуассоновская параметрическая мера предполагается равной  $\Lambda(\Omega) = (4\pi d)\lambda$ , соответственно этому моделируется пуассоновский точечный ансамбль  $\{p_i, \mathbf{n}_i\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, \nu$ , интенсивности  $\lambda$  в “цилиндре”

$$A_d = \{0 \leq p \leq d, \mathbf{n} \in S^{(3)}\},$$

где  $S^{(3)}$  — единичная центральная сфера в  $R^3$ , причем случайная величина  $\nu$  имеет пуассоновское распределение с параметром  $\Lambda(\Omega)$ . Известно, что с этой целью можно для реализованного значения  $\nu = k$  выбирать независимо точки  $\{p_i, \mathbf{n}_i\}$ ,  $i = 1, \dots, k$ , соответственно равномерному распределению в цилиндре  $A_d$ . Переход от параметрического множества к пространству  $R^3$  приводит далее к множеству точек  $\{0 + p_i \mathbf{n}_i\}$ ,  $i = 1, \dots, k$ , причем  $\{p_i\}$  независимы и равномерно распределены в интервале  $(0, d)$ , а  $\{\mathbf{n}_i\}$  — независимые реализации изотропного единичного вектора  $(a_1, a_2, a_3)$ :

$$a_1 = 1 - 2\alpha_1, \quad a_2 = \sqrt{1 - a_1^2} \cos(2\pi\alpha_2), \quad a_3 = \sqrt{1 - a_1^2} \sin(2\pi\alpha_2),$$

Отметим, что в [10] была установлена однородность и изотропность такого ансамбля путем символического вычисления якобиана преобразования меры при отображении  $T \rightarrow T'$ , где  $T'$  — параметрическое пространство, связанное с центром  $O'$ , этот якобиан оказался равным единице.

Теперь определим кусочно-постоянное “мозаичное” случайное поле  $\sigma(x)$ ,  $x \in R^3$ , следующим образом: в подобластях, образованных пересечениями плоскостей, поле имеет независимые постоянные случайные значения, одинаково распределенные соответственно  $F_\sigma(u) = P(\sigma < u)$  со средним значением  $E\sigma$  и дисперсией  $D\sigma$ . Ясно, что каждая подобласть будет полностью определяться набором

$$(\gamma_1, \dots, \gamma_k, \dots), \quad \gamma_k = \text{sign}(\mathbf{F}_k(x)),$$

где

$$\mathbf{F}_k(x) = (\mathbf{n}_k, [p_k \mathbf{n}_k - x]) = 0$$

есть уравнение соответствующей плоскости, а  $x$  — произвольная точка подобласти.

**Лемма 8.1** [10]. *Построенное поле  $\sigma(x)$ ,  $x \in R^3$ , является однородным и изотропным с корреляционной функцией*

$$K(\overline{\Delta x}) = e^{-\pi\lambda\overline{\Delta x}D\sigma}, \quad \overline{\Delta x} = |x - x'|.$$

Лемма 8.1 устанавливает существование экспоненциально коррелированного изотропного случайного поля в  $R^3$ , и тем самым, *соответствующая экспонента положительно определена.*

В работе [11] для случайных сред такого типа дана асимптотическая (по толщине слоя среды) оценка функции пропускания излучения. Эта оценка экспоненциальна с коэффициентом  $\tilde{\sigma}_c$ , который представляет собой эффективно осредненное значение коэффициента поглощения. При определенных в [11] условиях

$$\tilde{\sigma}_c \approx \text{E}\sigma_c \left( 1 - \frac{\rho D \sigma_c}{\text{E}\sigma_c} \right),$$

где  $\rho$  — корреляционная длина в случайном поле  $\sigma_c$ . На этой основе можно сформулировать и апробировать модельными расчетами алгоритм решения обратной задачи определения  $\tilde{\sigma}_c$  и  $\rho$  по наблюдениям интенсивности проходящего излучения.

## 9. Простейшая функциональная оценка типа гистограммы

В задачах переноса частиц с ветвлением и взаимодействием траекторий (см. пункты 3, 6) статистическое моделирование дает реализацию точечного поля размещения ансамбля частиц (или столкновений) объема  $N$  в фазовом пространстве  $X$  размерности  $l$ . Исходя из этого оценивается плотность  $\varphi(x)$  частиц (или столкновений), как правило, путем построения гистограммы. Для этого определяются частоты  $\{n_i/N\}$ , где  $n_i$  — число случайных точек в  $i$ -й кубической ячейке  $\Delta_i$  (области  $D \subset X$ ), фазовый объем которой будем полагать равной  $h_i^l$ ,  $i = 1, 2, \dots$ . Ставится задача равномерной (по номеру ячейки  $i$ ) минимизации погрешности рассматриваемой оценки плотности  $\varphi(x)$  путем выбора  $\{h_i\}$  в зависимости от  $N$ . Известно (и достаточно ясно), что практически удовлетворительное решение этой задачи достигается в случае, когда вероятностная погрешность приближенно равна детерминированной, т. е. когда

$$D\left(\frac{n_i}{Nh_i^l}\right) \approx \sup_{x \in \Delta_i} \left( \varphi(x) - \text{E}\left(\frac{n_i}{Nh_i^l}\right) \right)^2. \quad (9.1)$$

В предположении слабой зависимости величин  $n_i$  для оптимизации гистограммы можно рассматривать данное точечное поле как пуассоновское с интенсивностью  $\varphi(x)$ . Отсюда

$$\text{E}(n_i) = D(n_i) = N \int_{\Delta_i} \varphi(x) dx, \quad D\left(\frac{n_i}{Nh_i^l}\right) \approx \frac{\int_{\Delta_i} \varphi(x) dx}{Nh_i^{2l}} \approx \frac{\tilde{\varphi}_i}{Nh_i^l},$$

где  $\tilde{\varphi}_i = h_i^{-l} \int_{\Delta_i} \varphi(x) dx$  — среднеинтегральное значение  $\varphi(x)$  в  $\Delta_i$ . Следовательно, (9.1) можно переписать в виде

$$\frac{\tilde{\varphi}_i}{Nh_i^l} \approx c_i h_i^2,$$

где  $c_i \approx \sup_{x \in \Delta_i} |\text{grad}\varphi(x)|^2 l/4$ .

Таким образом, приближенно оптимальное (для  $i$ -й ячейки) значение  $h$  выражается формулой

$$h_i \approx \left( \frac{\tilde{\varphi}_i}{Nc_i} \right)^{\frac{1}{l+2}}.$$

Для равномерной оптимизации гистограммы с  $h_i \equiv h$  это значение следует эффективно осреднять по  $i$ , т. е. здесь желательна не слишком сильная флуктуация величины  $\tilde{\varphi}_i/c_i$ . Отметим, что это выполняется, в частности, для экспоненциальных плотностей  $\varphi(x)$ .

Отметим также, что в [1] предложена среднеквадратическая параметрическая оптимизация глобальной статистической оценки решения кинетического уравнения на основе предположения о пуассоновости модельного ансамбля частиц в фазовом пространстве.

## 10. Векторная локальная оценка интенсивности поляризованного излучения

**10.1.** Настоящий пункт посвящен оценке векторных функционалов вида

$$J(\mathbf{r}^*, \omega^*, \tau) = \int_0^{\infty} \Phi(\mathbf{r}^*, \omega^*, t) \chi_{\tau}(t) dt, \quad \mathbf{r}^* \in R^3, \quad (10.1)$$

где  $t$  — время,  $\omega^*$  — направление скорости кванта, а  $\Phi = (\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, \Phi^{(3)}, \Phi^{(4)})$  — векторная интенсивность поляризованного излучения [5, 12]. Функция  $\chi_{\tau}(t)$  соответствует выбранной “конечно-элементной” аппроксимации по времени. Например, функция

$$\chi_{\tau}(t) = \begin{cases} 1, & \text{если } t \in [\tau, \tau + \Delta\tau], \\ 0, & \text{если } t \notin [\tau, \tau + \Delta\tau] \end{cases}$$

определяет элемент гистограммы. Заметим, что функционалы (10.1) представляют собой показания детектора излучения, ориентированного вдоль  $\omega^*$  в точке  $\mathbf{r}^*$  с нулевой “апертурой”:  $\gamma = 0$ .

Векторную двойную локальную оценку метода Монте-Карло с использованием вспомогательной точки  $x'$  можно представить формулами (в обозначениях из [5, 12]):

$$J = E\xi_2, \quad \xi_2 = \sum_{n=0}^N Q_n^T H_2(x_n) \chi_{\tau} \left( t_n + \frac{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'|}{v} + \frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}^*|}{v} \right),$$

$$H_2(x_n) = q(\mathbf{r}_n) \frac{P(\omega_n, \omega'; \mathbf{r}_n)}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n|^2} \sigma(\mathbf{r}') \exp(-\tau_{\text{оп}}(l_1, \mathbf{r}_n, \omega')) \frac{\sigma_s(\mathbf{r}')}{\sigma(\mathbf{r}')} \frac{P(\omega', \omega^*; \mathbf{r}')}{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'|^2} \frac{\exp(-\tau_{\text{оп}}(l_2, \mathbf{r}', \omega^*))}{p(\mathbf{r}')}.$$

Здесь

$$l_1 = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n|, \quad \omega' = \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n)}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n|}, \quad l_2 = |\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'|, \quad \omega^* = \frac{\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'|},$$

а вспомогательная промежуточная точка  $\mathbf{r}'$  моделируется согласно плотности

$$p(\mathbf{r}') = \frac{\sigma(\mathbf{r}') \exp(-\tau_{\text{оп}}(l_2, \mathbf{r}^*, -\omega^*))}{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'|^2} \delta \left( \frac{\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'|} - \omega^* \right). \quad (10.2)$$

Для этого вдоль направления  $-\omega^*$  из точки  $\mathbf{r}^*$  моделируется длина вспомогательного пробега  $l_2$  и определяется  $\mathbf{r}' = \mathbf{r}^* - \omega^* l_2$ .

Двойная локальная оценка имеет бесконечную дисперсию, так как содержит в знаменателе величину  $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n|^2$ , которая может быть как угодно близкой к нулю. Для того, чтобы дисперсия была конечной, практикуется не учитывать в оценке те точки  $\mathbf{r}'$ , которые в какой-то степени близки к  $\mathbf{r}_n$ . Это дает небольшое смещение оценки, которое оценивается далее. Заметим, что точку  $\mathbf{r}'$  можно случайно выбирать для каждой точки столкновения, но можно фиксировать и для всех точек одной реализации траектории цепи Маркова, при этом различаются лишь дисперсии соответствующих оценок.

Рассмотрим теперь смещенную векторную двойную локальную оценку  $\xi_{\rho}$ , которая получается путем “зачистки” вкладов от точек столкновения  $x_n$  внутри сферы  $S_{\rho}(\mathbf{r}')$  радиуса  $\rho$  с центром  $\mathbf{r}'$ , т. е.  $H_2(x_n) = 0$ , если  $|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'| < \rho$ . Введем обозначение  $\delta_{\rho} = J - J_{\rho}$ , где  $J_{\rho} = E\xi_{\rho}$ , т. е.  $\delta_{\rho} = (\delta_{\rho}^{(1)}, \delta_{\rho}^{(2)}, \delta_{\rho}^{(3)}, \delta_{\rho}^{(4)})^T$  — векторное смещение модифицированной двойной локальной оценки.

Переходя к оценке  $\delta_{\rho}$ , отметим, что особое значение имеет так называемый “лидарный” вариант оптического зондирования (см., напр., [5]), в котором апертура весьма

мала, а “узкоколлимированный” источник излучения испускает кванты в направлении  $-\omega^*$ , т. е. плотность начальных столкновений  $f_0(x)$  скалярна и определяется выражением (10.2). Поэтому практически важным является следующее утверждение, скалярный вариант которого доказан в [12].

**Лемма 10.1.** *Для лидарного варианта задачи при  $\gamma = 0$  имеем*

$$|\delta_\rho^{(i)}| < 2\sigma_s \rho |J^{(i)}| + o(\rho), \quad \rho \rightarrow 0, \quad i = 1, 2, 3, 4.$$

Доказательство леммы 10.1 строится почти дословно так же, как доказательство ее скалярного варианта, с тем отличием, что вместо скалярной “функции ценности”  $\varphi^*(x')$  (см., напр., [5]) следует использовать векторную “ценность” столкновения, введя вектор Стокса  $S = (I, Q, U, V)$  “налетающего” кванта [5] в число фазовых координат точки столкновения. При этом векторная функция ценности  $\Phi^*(x', S)$  совпадает с показанием детектора  $J$  при условии, что источник определяется векторной плотностью  $\delta(x - x')S$ . Расчеты, проведенные при выполнении работы [12], показали, что данная в лемме 10.1 оценка имеет практически достаточную точность.

Таким образом, справедливо следующее практически важное утверждение: *относительное смещение локальной оценки  $\xi_\rho$  для всех элементов гистограммы по времени оценивается величиной  $2\sigma_s \rho$  как в скалярном [12], так и векторном случаях.*

## 11. Распределительный способ использования базовых псевдослучайных чисел

Целесообразно определять различные подпоследовательности базовых псевдослучайных чисел для реализации соответствующих статистических испытаний — траекторий исследуемого случайного процесса. Такой способ можно назвать распределительным, так как он особенно удобен для распределенных вычислений [13]. Как указано, например в последнем замечании из текста монографии [2], для реализации этого способа можно использовать вспомогательный генератор, который дает начальные числа указанных выше базовых подпоследовательностей, вполне их определяя. Если в качестве базового используется мультипликативный конгруэнтный генератор (см., напр., [2]) с множителем  $M$ , то в качестве вспомогательного целесообразно использовать аналогичный генератор с множителем  $M^\mu$ , где  $\mu$  — длина базовой подпоследовательности. Фактически при этом осуществляется разбиение базовой последовательности на части длины  $\mu$ , которая должна быть достаточно большой.

Распределительный способ коррелирует статистические оценки для различных вариантов задачи, улучшая параметрический анализ результатов. Кроме того, в рамках этого подхода особенно эффективно тестирование равномерности распределения соответствующих начальных  $k$ -мерных векторов, так как такое тестирование соответствует задаче оценки интегралов.

Возможны и дополнительные приемы коррелирования результатов при использовании распределительного способа. Пусть, например, для первого варианта задачи в некоторой малой подобласти значение параметра модели случайно, а во втором варианте — фиксировано. Это фиксированное значение для коррелирования результатов следует рассматривать как случайное, искусственно используя на его реализацию столько же базовых чисел, сколько и на случайное значение для первого варианта задачи.

С точки зрения автора рассмотренный здесь распределительный способ совершенно необходимо использовать в практических серийных вычислениях, в частности, для дальнейшего совершенствования контроля используемого базового генератора псевдослучайных чисел.

*Благодарности.* Автор благодарен своим соавторам, а также коллегам за критические замечания и директору ИВМиМГ СО РАН академику Б.Г. Михайленко за благожелательные обсуждения и помощь в работе.

Автор отмечает также, что его становление как научного работника в области методов Монте-Карло, как и успешное развитие этого научного направления в СССР и РФ, в значительной степени обязаны творческому и административному руководству и участию академика Г.И. Марчука.

## Литература

1. **Mikhailov G.A., Rogazinskii S.V.** Probabilistic model of many-particle evolution and estimation of solutions to a nonlinear kinetic equation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2012. — Vol. 27, № 3. — P. 229–242.
2. **Михайлов Г.А.** Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. — Новосибирск: Наука, 1974.
3. **Аверина Т.А., Михайлов Г.А.** Алгоритмы точного и приближенного статистического моделирования пуассоновских ансамблей // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2010. — Т. 50, № 6. — С. 1005–1016.
4. **Михайлов Г.А., Рогазинский С.В.** Модифицированный метод мажорантной частоты для численного моделирования обобщенного экспоненциального распределения // Докл. РАН. — 2012. — Т. 444, № 1. — С. 28–30.
5. **Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А., Каргин Б.А., Елепов Б.С.** Методы Монте-Карло в атмосферной оптике. — Новосибирск: Наука, 1976. — (Engl. transl.: Springer-Verlag, 1980).
6. **Михайлов Г.А.** О методе “повторения” для моделирования случайных векторов и процессов (рандомизация корреляционных матриц) // Теория вероятностей и ее применения. — 1974. — Т. 19, № 4. — С. 873–878.
7. **Бреднихин С.А., Медведев И.Н., Михайлов Г.А.** Оценка параметров критичности ветвящихся процессов методом Монте-Карло // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2010. — Т. 49, № 2. — С. 21–31.
8. **Михайлов Г.А., Роженко С.А.** Минимаксная оптимизация численно-статистического “метода подобных траекторий” // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2013. — (В печати).
9. **Korda A.S., Mikhailov G.A., and Ukhinov S.A.** Mathematical problems of statistical simulation of the polarized radiation transfer // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2013. — Vol. 28, № 3. — P. 213–230.
10. **Ambos A.Ju., Mikhailov G.A.** Statistical simulation of an exponentially correlated many-dimensional random field // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. — 2011. — Vol. 26, № 3. — P. 263–273.
11. **Михайлов Г.А.** Асимптотические оценки средней вероятности прохождения излучения через экспоненциально коррелированную стохастическую среду // Изв. РАН. Серия “Физика атмосферы и океана”. — 2012. — Т. 48, № 6. — С. 691–697.
12. **Михайлов Г.А., Лотова Г.З.** Численно-статистическая оценка потока частиц с конечной дисперсией // Докл. РАН. — 2012. — Т. 447, № 1. — С. 18–21.
13. **Марченко М.А., Михайлов Г.А.** Распределенные вычисления по методу Монте-Карло // Автоматика и телемеханика. — 2007. — № 5. — С. 157–170.

Поступила в редакцию 2 июля 2013 г.