ИЗВЕСТИЯ
ТОМСКОГО ОРДЕНА ОКТЯБРЬСКОЙ РЕВОЛЮЦИИ
И ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА ИМ. С. М. КИРОВА

Том 277 1977

ПРЕОБРАЗОВАНИЯ МАРКОВСКИХ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И МОДИФИКАЦИИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЙ

Г. П. ТАРАСОВ

(Представлена кафедрой инженерной и вычислительной математики)

1. Введение

1.1. Если перенос излучения описывают заданием плотности столкновений $\Psi(x)$, удовлетворяющей интегральному уравнению

$$\Psi(x)=K\Psi(x)+\Psi^1(x), \tag{1.1}$$

то для линейного функционала $I_\varphi=(\Psi, \varphi)$ от решения (1.1) хорошо известно следующее утверждение (счетно-аддитивные функции $\Psi(dx)$ и их плотности $\Psi(x)$ не различаются).

Предложение. Если $\Psi^1\in M^+(X, A)$, $K\in N^+(M)$, $\|K\|<1$, то

$$I_\varphi=(G\Psi^1, \varphi), \tag{1.2}$$

где $M^+(X, A)$ — неотрицательный конус в B-пространстве $M(X, A)$ счетно-аддитивных функций на X; $N^+(M)$ — неотрицательный конус в пространстве эндоморфизмов M; G — оператор Грина уравнения (1.1), принадлежит слабому замыканию $G(N)$ алгебры Неймана в N, порожденной оператором K, т. е.

$$G=\lim_{m\to\infty}\sum_{r=0}^{m}K^{(r)}. \tag{1.3}$$

1.2. Вычислению функционала (1.2) методом Монте-Карло (ММК) посвящена обширная литература [2, 3, 5, 7]. В основе разработанных модификаций ММК, преследующих цель улучшения эффективности расчетов, лежат различные идейные предпосылки [2]. В данной заметке предлагается рассматривать эти модификации ММК с позиции преобразований над марковским случайным процессом (МСП) блужданий. Будучи по своей природе статистическим, ММК имеет стандартные три аспекта: 1) организация блужданий (организация наблюдений), 2) построение оценочных функционалов от траекторий блужданий (выбор наблюдаемых величин), 3) построение оценки $\widehat{I}_\varphi$ искомого функционала (обработка результатов наблюдений). Последний пункт неинтересен, так как в качестве $\widehat{I}_\varphi$ почти всегда берут выборочное среднее (и выборочную дисперсию); принципиальное значение имеют первые два пункта. Сначала речь идет о конструкции МСП, далее рассматриваются модификации. Доказательства кратки или вовсе опущены. Их можно найти в цитируемой литературе.

2. Конструкция МСП и общие предложения ММК

2.1. Рассмотрим конструкцию МСП [1] для скачкообразного процесса блужданий при переносе [4]. Пусть (U, σ, P) основное вероятностное пространство, $X=X^*UO$, $X^*=V\times\Omega\times E$, $O=O_1UO_2$, (X^* — множество существования, O_1—естественное поглощающее и O_2—искусственное поглощающее множества), (X, A) — фазовое пространство, $Z=\overline{O, \infty}$ ($m\in Z$ — порядок столкновения), $x[k, u]$ — траектория процесса (для каждого $u\in U$ на $k\in Z$ принимает значение в (X, A). Функция $n: U\to Z$, определяемая соотношением

$$n(u)=\sup(k: x[k, u]\in X^*), \tag{2.1}$$

устанавливает обрыв траектории (которая при $k>n$ доопределяется $x[k, u]\in O)$. $\tau_m=\{x_m^{-1}\Gamma \subset U: \Gamma\in A, m\leqslant n\}\tau=\{x_k^{-1}\Gamma \subset U: \Gamma\in A\}$ σ — алгебра событий, которые наблюдаются за m столкновений, и σ — алгебра, порожденная процессом. Соотношение

$$p(x_{k-1}\to\Gamma_k)=P_{x_{k-1}}\{x^{-1}\Gamma_k, \tau_{k-1}\}=P_{x_{k-1}}\{x_k\in\Gamma_k, k<n\} \tag{2.2}$$

определяет переходную вероятность из состояния x_{k-1} множество $\Gamma_k\in A$ за один шаг; она удовлетворяет рекуррентности

$$p^{(m)}(x\to\Gamma)=\int_X p^{(m-1)}(x\to dy)p(y\to\Gamma), \tag{2.3}$$

причем

$$p(x_{k-1}\to\Gamma_k)=\begin{cases}\int_{\Gamma_k} c_k e^{-\tau_k} d\tau_k h(x'_{k-1}\to dx'_k), & \text{если } \begin{cases}x_{k-1}\notin O,\\ O\cap\Gamma_k=\varnothing\end{cases}\\ (1-c_k), & \text{если } \begin{cases}x_{k-1}\notin O,\\ \Gamma_k=O,\end{cases}\\ 0, & \text{если } x_{k-1}\in O;\end{cases}$$

$$h(x'_{k-1}\to dx'_k)=\begin{cases}\delta(x'_{k-1}-x'_k)dx'_k & \text{если } k=1,\\ \text{индикатриса}, & \text{если } k>1.\end{cases}$$

2.2. Пусть (X, B) — выборочное пространство процесса, $D=\{D_m, m=\overline{1, \infty}\}$ — разбиение X на дизъюнктные подмножества (D_m — включает только m-звенные траектории) $C=\{C_m, m=\overline{1, \infty}\}$, $C_m=x\setminus\bigcup_{k=1}^{m} D_m$ — примитивный класс цилиндрических множеств (C_m — включает траектории, содержащие не менее m звеньев), $\{\Gamma_k\in A, k=\overline{1, m}\}$ — основание цилиндрического множества B_m, то

$$P^{[m]}(B_m)=P(B_m\cap C_m)=\int\pi(dx_0)\left[\prod_{k=1}^{m}p(x_{k=1}\to dx_k)\right]-X\times\prod_{r=1}^{m}\Gamma_r. \tag{2.4}$$

задает распределение вероятностей на цилиндрических множествах, а

$$P^{(m)}(\widetilde{B}_m)=P(B_m\cap D_m)=\int\pi(dx_0)\left[\prod_{k=1}^{m}p(x_{k=1}\to dx_k)g(x_m)-X\times\prod_{k=1}^{m}\Gamma_r.\right. \quad (2.5)$$

определяет вероятности на дизъюнктных разбиениях. Здесь $\pi(dx)$ — начальное распределение $(\pi(X^*)=1)$, $g(x_m)=p(x_m\to O)$ — вероятность обрыва в x_m.

Распределения (2.4) и (2.5) порождают одну и ту же вероятностную меру P на B, что позволяет рассматривать непосредственно-заданное вероятностное пространство (X, B, P). Сконструированный МСП будем обозначать $m=(U, X, p, n)$. Если р естественно определяется ядром оператора К (1.1), то m называют согласованным с уравнением переноса (1.1). Если $m=(\widetilde{U}, \widetilde{X}, \widetilde{p}, \widetilde{n})$ другой МСП, то значение производной Радона-Никодима определим на траектории $x[k]\in C_m$.

$$\frac{dP}{d\widetilde{P}}(x[k])=\frac{\pi(dx_0)}{\widetilde{\pi}(dx_0)}\left[\prod_{k=1}^{m}\frac{p(x_{k-1}dx_k)}{\widetilde{p}(x_{k-1}\to dx_k)}\right]. \quad (2.6)$$

Если $x[k]\in D_m$, то

$$\frac{dP}{d\widetilde{P}}(x[k])=\frac{\pi(dx_0)}{\widetilde{\pi}(dx_0)}\left[\prod_{k=1}^{m}\frac{p(x_{k-1}\to dx_k)}{\widetilde{p}(x_{k-1}\to dx_k)}\right]\frac{g(x_m)}{\widetilde{g}(x_m)}. \quad (2.7)$$

2.3. В качестве оценочных функционалов от траекторий МСП используются аддитивные функционалы [1], т. е. отображения $F_\varphi : X\to R_1$, обладающие свойством:

$$F_\varphi(x[k]_i^l)+F_\varphi(x[k]_{l+1}^j)=F_\varphi(x[k]_i^j),$$

где $x[k]_i^j$ — отрезок траектории от i до j столкновений (включительно). Большой класс аддитивных функционалов $F_\varphi(x[k])$, достаточный для практических целей, можно представить формулой (для $x[k]\in D_n$)

$$\eta=F_\varphi(x[k,u])=\sum_{l=1}^{n(u)}\int_X T(x_i(u),dx)\varphi(x). \quad (2.8)$$

Например, (δ_{ij} — символ Кронекера).

1) Ядро

$$T(x_i,\ dx)=\delta(x_i-x)\,dx \quad (2.9)$$

определяет простую оценку I_1 [2], $F_\varphi(x[k,\ u])=\sum_{i=1}^{n}\varphi(x_i)$.

2) Ядро

$$T(x_i, dx)=\sum_{r=1}^{k}\alpha_{ir}p^{(r)}(x_{i-1}\to dx), \quad (2.10)$$

где

$$\alpha_{ir}=\begin{cases}\delta_{1i}, & \text{если } r\leqslant k-1,\\ 1, & \text{если } r=k,\end{cases}$$

определяет оценку $F_\varphi(x[n, u])$, осуществляющую аналитическое вычисление вкладов до (k-1) -крат рассеянного излучения и статистическое оценивание вкладов (k и более)-крат рассеянного излучения.

3) Ядро

$$T(x_i,dx)=\delta_{in}\left[\frac{\delta(x_i-x)}{g(x)}\right]dx \tag{2.11}$$

определяет простую оценку I_2 [2], $F_\varphi(x[k, u])=\dfrac{\varphi(x_n)}{g(x_n)}$. Имеют место следующие утверждения.

2.4. Теорема. Если $\mathfrak{m}$ — МСП, согласованный с уравнением переноса (1.1), то оценочные функционалы (2.9), (2.10), (2.11) доставляют несмещенную оценку I_φ (1.2).

Доказательство [2, 4]. В соответствии с формулой (2.5)

$$M\eta=\int F_\varphi(x[k])P(dx[k])=\sum_{m=1}^{\infty}\int_{D_m}F_\varphi(x[k])\,P^{(m)}(dx[k])=I_\varphi. \tag{2.12}$$

2.5. Теорема. Если выполняются условия

а) $g(x)>0,\ x\in X^*$,

б) $|\int_X T(x,dy)\,\varphi(y)|<\infty(\text{mo}\,P)$,

то оценка $\widehat{I}_\varphi=\dfrac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\eta_i$ состоятельна.

Доказательство. При справедливости а) цепь скачков $\mathfrak{m}$ $(\text{mod}\,P)$ конечна, а отсюда с учетом б) оценочный функционал $F_\varphi(x[k])$ ограничен $(\text{mod}\,P)$, так что

$$D\eta=\int_X\{F_\varphi(x[k])\}^2P(dx[k])=I_\varphi^2<\infty. \tag{2.13}$$

(2.12); (2.13) удовлетворяют условиям закона больших чисел, что и доказывает теорему.

2.6. Теорема. Пусть $\mathfrak{m}$ и $\widetilde{\mathfrak{m}}$ — два МСП, причем $\mathfrak{m}$ согласован с (1.1). Тогда $\mathfrak{m}$ можно использовать для несмещенного оценивания I_φ, если выполняются следующие условия:

а) существует такое измеримое отображение: $S:(X, B, P)\longrightarrow(X, \widetilde{B}, \widetilde{P})$, что индуцируемая им мера $PS^{-1}(\cdot)$ абсолютно непрерывна относительно меры $\widetilde{P}$, т. е. существует

$$\frac{dPS^{-1}}{d\widetilde{P}}(x[k]).$$

б) существует такая измеримая функция $F_\varphi: x\longrightarrow R_1$, что исходный оценочный функционал (2,8) имеет представление

$$F_\varphi(x[k])=F_\varphi S(x[k]).$$

Доказательство. Согласно «правилу замены переменных» [6] имеем

$$\int\limits_{x} F_\varphi S(x[k]P(dx[k]) = \int\limits_{\tilde{x}} [F_\varphi(\tilde{x}[k])\frac{dPS^{-1}}{d\tilde{P}}(x[k])]\cdot\tilde{P}(dx[k]).$$

Из условия несмещенности оценивания необходимо для всех $\varphi\in(M^+)^*$

$$I_\varphi = \int\limits_{x} F_\varphi(x[k])P(dx[k]) = \int\limits_{x} F_\varphi S(x[k])P(dx[k]).$$

Это и показывает необходимость а), б).

2.7. Следствие. Пусть $\mathfrak{m}$ — согласованный с (1,1) МСП, а $\tilde{\mathfrak{m}}$ — МСП, полученный преобразованием $\mathfrak{m}$ без изменения «Карты траекторий» ($\tilde{x} = \tilde{X}$), тогда $\tilde{\mathfrak{m}}$ можно использовать для несмещенного оценивания I_φ, если мера P непрерывна относительно $\tilde{P}$, т. е. существует производная (2,6).

Доказательство.

$$I_\varphi = \int\limits_{x} F_\varphi(x[k])P(dx[k]) = \int\limits_{x}\left\{F_\varphi(x[k])\frac{dP}{d\tilde{P}}(x[k])\right\}\tilde{P}(dx[k]).$$

3. Связь модификации ММК с преобразованиями МСП

Преобразования над $\mathfrak{m} = (U, X, p, n)$, не выводящие из класса МСП, связаны с преобразователями над объектами U, X, p, n [1]. К этим преобразованиям над процессом блужданий $\mathfrak{m}$, согласованным с уравнением переноса (1.1), можно свести известные модификации ММК для вычисления I_φ. Остановимся на ряде из них.

3.1 Метод аналитического осреднения (поглощения, обрыва) сводится к преобразованию $\mathfrak{m}$ путем чистки пространства элементарных событий [1] U до множества $\tilde{U}$, соответствующего части процесса $\mathfrak{m}$ на отмеченном множестве $\tilde{X}\subset X$. Новый МСП $\tilde{\mathfrak{m}} = (\tilde{U}, \tilde{X}, \tilde{p}, \tilde{n})$ имеет переходную функцию

$$\tilde{p}(x\to\Gamma) = \frac{p(x\to\Gamma)}{p(x\to\tilde{X})},\ x\in\tilde{X}, \Gamma\in A\cap\tilde{X}. \tag{3.1}$$

Например, если $\tilde{X} = \tilde{V}\times\Omega\times E$, где $\tilde{V}$ — выпуклое множество в R_3, то аналитическое осреднение поглощения и утечки дает

$$p(x_k\to\tilde{X}) = c_k(1-\exp\left[-\int\limits_0^{L_k}\mu(\vec{r}_k + t\vec{\Omega}_k, E_k)dt,\right.$$

где

L_k — расстояние от $\vec{r}_k$ до $d\tilde{V}$ в направлении $\vec{\Omega}_k$.

Если $x[k]\in C_m$, то

$$\frac{dPT^{-1}}{dP} = \prod_{i=1}^{m} p(x_i\to\tilde{X}). \tag{3.2}$$

3.2 Модификация ММК с помощью ветвления сводится к преобразованию $\mathfrak{m}$ путем расщепления элементарных событий $u\in U$ [1] и случайной замены времени.

Если $\gamma^{-1}(u)=\{\widetilde{u}: \gamma(\widetilde{u})=u\}$, то $P_x\ (\gamma^{-1}A)=P_x\ (A)$ и соответственно $(\widetilde{x}=x)$; для $\widetilde{x}[k]\subset C_m$.

$$\frac{dP}{d\widetilde{P}}(\widetilde{x}[k])=\prod_{i=1}^{m}\frac{1}{r(x_i)}, \tag{3.3}$$

где

$r(x_i):X\longrightarrow Z$ показывает, на сколько частей расщепляется траектория-ветвь в точке x_i.

3.3 Модификация ММК посредством «рулетки» сводится к преобразованию $\mathfrak{m}$ путем построения α-подпроцесса [1]. Это связано с сокращением времени жизни $n(u)$ до $r(u)$.

Здесь

$$\widetilde{p}(x_{k-1}\to\Gamma_k)=P_{x_{k-1}}(x_k\in\Gamma_k,\ k<\tau). \tag{3.4}$$

и соответственно на $\widetilde{x}[k]\subset C_m$.

$$\frac{dP}{d\widetilde{P}}(\widetilde{x}[k])=\prod_{i=1}^{m}\frac{1}{q(x_i)}, \tag{3.5}$$

где

$q(x_i)$ — вероятность (запланированная) обрыва траектории в столкновении x_i.

3.4 Модификация ММК посредством выборки по «ценности» сводится к преобразованию $\mathfrak{m}$ путем ξ-преобразования переходных вероятностей [1].

Здесь

$$\widetilde{P}_{x_{k=1}}(x_k\in\Gamma_k)=\int\limits_{x^{-1}\Gamma_k}\xi(u)P_{x_{k-1}}(du). \tag{3.6}$$

Существует T — измеримая функция $\xi(u)$, что соответствующая мераP на выборочном пространстве $(\widetilde{X},\widetilde{B})$ доставляет нулевую дисперсию оценке η.

При этом на $x[k]\in C_m$:

$$d\widetilde{P}(d\widetilde{x}[k])=\frac{F_\varphi(x[k])}{I_\varphi}P(dx[k]). \tag{3.7}$$

3.5. Замечание. Функция $\xi(u)$ неизмерима ни относительно одной из σ-подалгебр T_k, что сильно затрудняет практическую реализацию такого алгоритма. Различные варианты этой модификации обсуждаются в [2, 5, 7].

3.6 Модификация ММК с помощью «зависимых испытаний» при неизменном X сводится к введению семейства $\{\widetilde{m}\}$ с эквивалентными симых испытаний» при неизменном X сводится к введению семейства мерами $\{\widetilde{P}\}$. Один МСП $\widetilde{m}\subset\{\widetilde{m}\}$ берут ведущим.

При этом на $x[k]\subset C_m$.

$$\frac{dP}{d\widetilde{P}}(\widetilde{x}[k])=\frac{\pi(\partial x_0)}{\widetilde{\pi}(dx_0)}\prod_{i=1}^{m}\frac{p(x_{i-1}\to dx_i)}{\widetilde{p}(x_{i-1}\to dx_i)}. \tag{3.8}$$

3.7 Модификация ММК путем «коррелированной выборки» [5] сводится к преобразованию $\mathfrak{m}$ посредством образования частей процесса [1] над множествами $X_i \subset X$.

Другой класс модификаций связан с применением различных оценочных функционалов от траекторий $\mathfrak{m}$, согласованного с уравнением (1.1).

3.8 Модификация ММК посредством «способа столкновений» [5] сводится к применению для $\mathfrak{m}$ оценочного функционала $F_{\varphi}(x[k])$ в форме (2. 13) при $k=1$.

3.9. Локальная и двойная локальная оценки ММК сводятся к применению для $\mathfrak{m}$ оценочного функционала F_{φ} $(x[k])$ в форме (2, 13) соответственно при $k=2$ и $k=3$.

Заключая, заметим, что теория преобразований МСП может быть использована для обоснования и конструирования модификаций ММК с целью повышения эффективности вычисления функционалов от решения уравнения переноса (1,1).

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. Б. Дынкин. Марковские процессы. М., ФМ, 1963.
2. С. М. Ермаков. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М., «Наука», 1971.
3. Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучений. Под. ред. Г. И. Марчука. М., Атомиздат, 1967.
4. А. И. Хисамутдинов. Выборка по важности в теории переноса излучений. Журнал вычислительной математики и математической физики, 1970, 10, № 2, стр. 999—1005.
5. У. Фано, Л. Спенсер, М. Бергер. Перенос гамма-излучения. М., Атомиздат, 1963.
6. П. Халмош. Теория меры. М., ИЛ, 1953.