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, $X = X^* U O$, $X^* = V \times \Omega \times E$, $O = O_1 U O_2$, (X^* — множество существования, O_1—естественное поглощающее и O_2—искусственное поглощающее множества), (X, A) — фазовое пространство, $Z = \overline{0, \infty}$ ($m \in Z$ — 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

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

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

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

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

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

$$P^{[m]}(B_m) = P(B_m \cap C_m) = \int \pi(d x_0) \left[\prod_{k=1}^{m} p(x_{k=1} \to dx_k) \right] - X \times \prod_{r=1}^{m} \Gamma_r. \tag{2.4}$$

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 p естественно определяется ядром оператора K (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 $(k\text{-}1)$ -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) $\left|\int_X T(x, dy)\,\varphi(y)\right| < \infty\,(\mathrm{mo}\,P)$,

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

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

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

(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: $S\colon(X,\,B,\,P) \longrightarrow (X,\,\widetilde{B},\,\widetilde{P})$, 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

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

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 $\mathfrak{m}$ — МСП, полученный преобразованием $\mathfrak{m}$ без изменения «Карты траекторий» $(\widetilde{x} = \widetilde{X})$, тогда $\mathfrak{m}$ можно использовать для несмещенного оценивания I_{φ}, если мера P непрерывна относительно $\widetilde{\widetilde{P}}$, т. е. существует производная (2,6).

Доказательство.

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

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 U, соответствующего части процесса $\mathfrak{m}$ на отмеченном множестве $\widetilde{X} \subset X$. Новый МСП $\mathfrak{m} = (U, X, p, n)$ имеет переходную функцию

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

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

$$p(x_k \to \widetilde{X}) = c_k (1 - \exp\left[-\int\limits_{0}^{L_k} \mu(\vec{r}_k + t\vec{\Omega}_k, E_k) dt, \right.$$

где

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

Если $x[k] \in C_m$, то

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

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 мера P 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.