Расчет параметров временнóй асимптотики выходящего из полубесконечного слоя поляризованного излучения*

Н. В. Трачева, С. А. Ухинов, А. С. Чимаева
Институт вычислительной математики и математической геофизики, Новосибирск, Россия
e-mail: tnv@osmf.sscc.ru, sau@sscc.ru, chimaevaa@gmail.com

Based on the method of parametric differentiation of a special representation for a solution of the nonstationary vector transfer equation, the constants of exponential and power temporal asymptotes are estimated using the Monte Carlo method.

Введение

Существует ряд задач теории переноса, при решении которых исследователей интересует асимптотическое поведение потоков излучения на больших временах в светорассеивающих и поглощающих средах. Известно, что для неполяризованного излучения эта асимптотика при выполнении довольно общих условий экспоненциальная. Параметром экспоненциальной асимптотики при этом является ведущее характеристическое число λ^* соответствующего однородного стационарного уравнения переноса [1].

В работе [2] решаются вопросы, связанные с распространением этого утверждения на случай поляризованного излучения. Для однородной бесконечной среды, т. е. для полного пространства, это достигается довольно просто на основе теории весового моделирования процесса переноса, причем оказывается, что $\lambda^* = -\sigma_c v$ независимо от типа поляризации. Здесь σ_c — сечение поглощения, v — скорость частиц (“фотонов”).

Специалистам хорошо известно также, что $\lambda^* = -\sigma_c v$ и для полупространства. Эвристически это достаточно ясно из соображений непрерывности величины λ^* как функции оптической толщины плоского слоя.

Для ограниченной среды теоретически нерешенным оказался вопрос о связи значений λ^*_S и λ^*_V, т. е. значений параметра асимптотики соответственно для скалярного и векторного вариантов с одинаковой индикатрисой рассеяния $R_{11}(\omega, \omega')$. Это фактически вопрос о соотношении скоростей деполяризации потока частиц и его перехода к экспоненциальной асимптотике.

В работе [2] с помощью расчетов методом Монте-Карло показано, что для ограниченных сред в случае молекулярного и аэрозольного рассеяния $\lambda^*_S \neq \lambda^*_V$, т. е. деполяризация потока частиц несколько запаздывает относительно перехода к асимптотике.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 06.01-00046-а, № 07.01-00673-а, № 09.01-00035-а) и INTAS (Ref. N 05-1000008-8024).

В настоящей работе рассматривается задача определения параметров временнóй асимптотики потока $J(t)$ поляризованного излучения, выходящего из полубесконечного слоя рассеивающего и поглощающего вещества при освещении его внешним плоскопараллельным источником. По аналогии со скалярным вариантом задачи [3] в предположении, что

$$J(t) \asymp t^{-\alpha} e^{\lambda^* t}, \tag{0.1}$$

строится алгоритм метода Монте-Карло для нахождения параметров степенной α и экспоненциальной λ^* асимптотик в векторном случае.

1. Система уравнений переноса с учетом поляризации. Временнáя постоянная

Для описания поляризационных свойств света используется вектор Стокса $\mathbf{I} = \big(I, Q, U, V\big)^T$, компоненты которого определяют интенсивность, степень и плоскость поляризации, а также степень эллиптичности излучения. Математическая модель переноса поляризованного излучения строится на основе феноменологического предположения о том, что в результате рассеяния ассоциируемый с "фотоном" вектор Стокса преобразуется заданной матрицей рассеяния.

Рассматривается интегродифференциальное уравнение переноса излучения с поляризацией:

$$\omega \nabla \boldsymbol{\Phi} + \sigma \boldsymbol{\Phi} = \int\limits_{\Omega} \sigma_s(r) P(\omega', \omega, r) \boldsymbol{\Phi}(r, \omega')\, d\omega' + \mathbf{f_0}(r, \omega), \tag{1.1}$$

где $\boldsymbol{\Phi} = (\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \Phi_4)^T$ — вектор-функция плотности потока частиц ("фотонов"); Ω — пространство единичных векторов направления; $\omega \in \Omega$, $r \in D \subset \mathbb{R}^3$; $P(\omega', \omega, r)$ — матричная функция рассеяния; $\sigma = \sigma(r)$ — полное сечение, $\sigma = \sigma_s + \sigma_c$, σ_c — сечение поглощения, σ_s — сечение рассеяния; $\mathbf{f_0} = (f_0^{(1)}, f_0^{(2)}, f_0^{(3)}, f_0^{(4)})^T$ — вектор-функция плотности распределения источника частиц.

Введем параметр λ в уравнение переноса (1.1) следующим образом:

$$\omega \nabla \boldsymbol{\Phi}_\lambda(r, \omega) + \hat{\sigma} \boldsymbol{\Phi}_\lambda(r, \omega) = \int\limits_{\Omega} \sigma_s(r) P(\omega', \omega, r) \boldsymbol{\Phi}_\lambda(r, \omega')\, d\omega', \tag{1.2}$$

где $\hat{\sigma} = \sigma_s + \hat{\sigma}_c$, $\hat{\sigma}_c = \sigma_c + \lambda / v$.

Вектор-функция плотности столкновений $\boldsymbol{\varphi}(r, \omega)$ с вектор-функцией плотности потока связана соотношением

$$\boldsymbol{\varphi} \equiv (\sigma\Phi_1, \sigma\Phi_2, \sigma\Phi_3, \sigma\Phi_4)^T = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4)^T.$$

Известно, что она удовлетворяет интегральному уравнению переноса с учетом поляризации:

$$\boldsymbol{\varphi}(x) = \int\limits_X K(x', x) \boldsymbol{\varphi}(x')\, dx' + \mathbf{f}(x) \tag{1.3}$$

или

$$\varphi_i(x) = \sum_{j=1}^{4} \int\limits_X k_{ij}(x', x) \varphi_j(x')\, dx' + f_i(x), \quad i = 1, \ldots, 4,$$

где $x = (r, \omega) \in \mathbb{R}^3 \times \Omega$; $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3, f_4)^T$ — вектор-функция плотности распределения начального столкновения.

Здесь
$$K(x', x) = \frac{q(r') \exp(-\tau(r', r))\sigma(r)P(\omega', \omega, r')}{|r - r'|^2} \delta\left(\omega - \frac{r - r'}{|r - r'|}\right), \tag{1.4}$$
где
$$q(r) = \frac{\sigma_s(r)}{\sigma(r)}, \quad \tau(r', r; \omega) = \int\limits_0^{|r'-r|} \sigma(r' + t\omega)\, dt.$$

В нестационарном случае вводится дополнительная фазовая временна́я координата t и ядро (1.4) домножается на $\delta\,(t - (r - r')/v)$.

После подстановки диагональной матрицы $P_R = \mathrm{diag}(R_{11}, 0, 0, 0)$ вместо P в систему уравнений переноса с поляризацией получаем уравнение переноса излучения без поляризации. В этом случае наибольшее вещественное характеристическое значение λ^* задачи (1.2) называется временно́й постоянной, так как она определяет асимптотику потока частиц $I(r, \omega) \sim C(r, \omega) \exp(\lambda^* t)$ [1].

2. Решение системы интегральных уравнений методом Монте-Карло

Методом Монте-Карло обычно оценивают линейные функционалы от решения рассматриваемого интегрального уравнения. Ниже приводится общий алгоритм метода Монте-Карло для оценки таких функционалов в случае системы интегральных уравнений второго рода [4–7].

Для вычисления искомых функционалов используется “оценка по столкновениям”. В случае процесса переноса излучения с учетом поляризации будем оценивать линейные функционалы вида
$$J = (\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h}) = \sum_{i=1}^{4} \int\limits_X \varphi_i(x) h_i(x).$$
Здесь $\mathbf{h}$ — вектор-функция с абсолютно ограниченными компонентами, т. е. $h_i(x) \in L_\infty$ при $i = 1, ..., 4$.

Рассмотрим цепь Маркова с начальной плотностью $\pi(x)$ и субстохастической переходной плотностью $p(x', x)$ такими, что
$$\pi(x) \neq 0, \quad \text{если} \quad \mathbf{f}(x) \neq 0, \quad \text{и} \quad p(x', x) \neq 0, \quad \text{если} \quad K(x', x) \neq 0,$$
для которой N — случайный номер последнего состояния.

Введем также вспомогательный случайный вектор “весов” Q_n:
$$Q_0^{(i)} = \frac{f_i(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n^{(i)} = \sum_{j=1}^{4} Q_{n-1}^{(j)} \frac{k_{ij}(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}.$$

Аналогично тому, как это делается для одного интегрального уравнения, можно показать [5, 6], что
$$\mathsf{E} \sum_{n=0}^{N} \left[\sum_{i=1}^{4} Q_n^{(i)} h_i(x_n)\right] = (\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h}) = J = (\mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi}*). \tag{2.1}$$

Соотношение (2.1) описывает алгоритм метода Монте-Карло для оценки величины J. При обосновании этого соотношения используется разложение решения системы уравнений в ряд Неймана [4, 6]. Почленное осреднение первой компоненты суммы из (2.1) допустимо в силу ее неотрицательности, а остальных компонент — вследствие мажорантного свойства первой компоненты [5, 6]. В (2.1) $\boldsymbol{\varphi}^*$ — это решение сопряженной к (1.3) системы.

Таким образом, получаем "оценку по столкновениям" [4–6]

$$\xi = \sum_{n=0}^{N} \left[\sum_{i=1}^{4} Q_n^{(i)} h_i(x_n) \right] = \sum_{n=0}^{N} Q_n^T \mathbf{h}(x_n), \quad \mathsf{E}\xi = J, \tag{2.2}$$

а также оценки параметрических производных функционала J:

$$\xi^{(m)} = \frac{\partial^m \xi}{\partial \lambda^m} = \sum_{n=0}^{N} \left[\sum_{i=1}^{4} \frac{\partial^m Q_n^{(i)}}{\partial \lambda^m} h_i(x_n) \right], \quad \mathsf{E}\xi^{(m)} = J^{(m)}.$$

Здесь предполагается, что $\mathbf{h}$ не зависит от λ.

Для исследования вопроса о дисперсии используемых оценок величину ξ представим в виде $\xi = Q_0^T \boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{x_0}}$, где $\boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{x_0}} = \sum\limits_{n=0}^{N} \widetilde{Q}_n \mathbf{h}$, $\widetilde{Q}_n = \widetilde{Q}_{n-1} \dfrac{\mathbf{K}^T(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}$, $\widetilde{Q}_0 = \{\delta_{ij}\}$ — единичная матрица.

Известно, что $\mathsf{E}\boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{x_0}} = \boldsymbol{\varphi}^*(x_0)$ и при выполнении определенных условий ковариационная матрица $\Psi(x) = \mathsf{E}(\boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{x}}^{\boldsymbol{T}})$ удовлетворяет матричному интегральному уравнению

$$\Psi(x) = A(x) + \int \frac{K^T(x,y)\Psi(y)K(x,y)}{p(x,y)} dy, \tag{2.3}$$

или в операторном виде $\Psi = A + \mathbf{K}_p \Psi$, где $A = \mathbf{h}\boldsymbol{\varphi}^{*T} + \boldsymbol{\varphi}^* \mathbf{h}^T - \mathbf{h}\mathbf{h}^T$. Дисперсия исходной оценки ξ связана с ковариационной матрицей Ψ следующим соотношением:

$$\mathsf{D}\xi = \mathsf{E}_{x_0}(Q_0^T \Psi(x_0) Q_0) - J^2,$$

а следовательно, из ограниченности матрицы $\Psi(x)$ вытекает конечность дисперсии оценки ξ.

В работах [5, 7] доказано, что если спектральный радиус $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$, то для любой вектор-функции $\mathbf{h}(x) \in L_\infty$, ковариационная матрица $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению (2.3), $\mathsf{D}\xi < +\infty$. В [7] также фактически показано, что при выполнении условия $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$ справедливы соотношения $\mathsf{E}\xi^{(m)} = J^{(m)}$ и $\mathsf{D}\xi^{(m)} < +\infty$

В работе [8] на основе теории положительных операторов вычислена величина спектрального радиуса $\rho(S_p)$ для оператора переноса поляризованного излучения в бесконечной однородной среде. Показано, что величина $\rho(\mathbf{K}_p)$ приближенно равна произведению значения $\rho(S_p)$ на спектральный радиус оператора, соответствующего переносу излучения без поляризации, и доказано неравенство

$$\rho(\mathbf{K}_p) \le \rho(S_p) \sup_{r,\omega} \int_0^\infty \frac{q^2(r+\omega l)}{q_1(r+\omega l)} \frac{p_\chi^2(l; r, \omega)}{p_\chi^{(1)}(l; r, \omega)} dl, \tag{2.4}$$

где $p_\chi(l; r, \omega) = \sigma(r + \omega l) \exp(-\sigma(r + \omega l))$ — плотность распределения длины свободного пробега l в точке r в направлении ω; $p_\chi^{(1)}(l; r, \omega)$ — плотность распределения длины пробега в моделируемой цепи Маркова; $q_1(r)$ — вероятность выживания цепи Маркова в точке r.

В случае молекулярного рассеяния [4] в работе [8] вычислено значение $\rho(S_p) = 1.178$, а следовательно, дисперсия оценки ξ в реальной среде конечна только при достаточно большом поглощении. Например, для “физического” моделирования из (2.4) легко получить оценку

$$\rho(\mathbf{K}_p) \le (1-p)\rho(S_p), \tag{2.5}$$

где p — нижняя граница вероятности поглощения в среде, а значит, $\rho(\mathbf{K}_p) \le 1$ и дисперсия конечна при $p > 0.151$. Для использованной в [8] модели аэрозольного рассеяния $\rho(S_p) \approx 1.02077$ и $\rho(\mathbf{K}_p) \le 1$ при $p > 0.02034$.

Если же процесс переноса модифицируется путем замены $\sigma \to \ \sigma_s, \ \ \sigma_c \to 0$ с учетом поглощения весовым множителем $e^{-\sigma_c l}$ [4, 6, 9], то из (2.4) следует, что

$$\rho(\mathbf{K}_p) \le \frac{1-p}{1+p}\rho(S_p) \tag{2.6}$$

и $\rho(\mathbf{K}_p) \le 1$ при $p > 0.082$ в случае молекулярного рассеяния и при $p > 0.0103$ в случае аэрозольного рассеяния, т. е. при относительно меньшем поглощении в среде.

Полученные из неравенств (2.4)–(2.6) выводы о конечности дисперсий оценок функционалов и их производных являются основанием для применимости метода Монте-Карло в том или ином случае.

3. Оценка параметров временнóй асимптотики методом Монте-Карло

Величину λ^* можно вычислять, используя специальный итерационный метод [5]:

$$\lim_{m\to\infty} \frac{mJ_\lambda^{(m-1)}(\lambda_0)}{J_\lambda^{(m)}(\lambda_0)} = \lambda^* - \lambda_0. \tag{3.1}$$

Здесь λ_0 — некоторое начальное значение; J_λ — произвольный линейный функционал от плотности потока, соответствующего уравнению (1.2); $J_\lambda^{(m)}(\lambda_0)$ — производная от J по параметру λ в точке $\lambda = \lambda_0$.

Данное в [5] обоснование этого метода для скалярного варианта легко распространяется на векторный случай [2]. Однако этот метод не позволяет находить параметр асимптотики α, и мы будем использовать метод, основанный на вычислении параметрических производных по времени [3, 9].

Рассмотрим нестационарный процесс переноса от источника, вообще говоря, поляризованного излучения, причем $\mathbf{F}(r,\omega,t) = f(r,\omega,t)\mathbf{I_0}$, где $\mathbf{I_0} = (I_0, Q_0, U_0, V_0)$.

Справедливо соотношение

$$J(t) = \int\limits_R \int\limits_\Omega \boldsymbol{\varphi}^T(r,\omega,t)\mathbf{h}(r,\omega)dr d\omega = \int\limits_R \int\limits_\Omega \int\limits_0^t f(r_0,\omega_0,\tau) J_0(r_0,\omega_0,t-\tau) dr_0 d\omega_0 d\tau,$$

где

$$J_0(r_0,\omega_0,t) = \int\limits_R \int\limits_\Omega \boldsymbol{\varphi}_\mathbf{0}^T(r,\omega,t;r_0,\omega_0)\mathbf{h}(r,\omega)dr d\omega.$$

Здесь $\boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{0}}(x; r_0, \omega_0)$ — векторная плотность столкновений (по аргументу x) от одного столкновения в точке $(r_0, \omega_0, 0)$, т. е. для функции источника $\delta(r - r_0)\delta(\omega - \omega_0)\delta(t)\mathbf{I}_0$.

Обозначим через $\eta(r_0, \omega_0)$ "оценку по столкновениям" (см. уравнение (2.2)) для функционала

$$J_h^{(0)}(r_0, \omega_0) = \int\limits_R \int\limits_\Omega \int\limits_0^\infty \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{0}}^T(r, \omega, \tau; r_0, \omega_0)\mathbf{h}(r, \omega) dr d\omega d\tau.$$

Справедливо следующее утверждение.

Теорема. *Пусть точка* (r_0, ω_0) *распределена для* $t_0 \equiv 0$ *с плотностью* $f_1(r, \omega)$, *причем функция* $f_t^{(n-1)}(x)$ *абсолютно непрерывна по* t *во всяком конечном интервале времени* $\forall\ (r, \omega) \in R \times \Omega$ *и* $|f_t^{(m)}(x)| \le C f_1(r, \omega)$ *для почти всех* x, $m = 0, \ldots, n$. *Пусть также* $f_1 \mathsf{E}|\ \eta\ |^2 \in L_1(R \times \Omega)$ *и* $|J_0(x)| < C < +\infty$. *Тогда выполняются соотношения* $J^{(m)}(t) = \mathsf{E}\xi_t^{(m)}$, *где*

$$\xi_t^{(m)} = \sum_{n=0}^{N} \frac{\mathbf{F}^{(m)T}(r_0, \omega_0, t - t_n)}{f_1(r_0, \omega_0)} \widetilde{Q}_n \mathbf{h}(r_n, \omega_n), \tag{3.2}$$

причем $\mathsf{D}\xi_t^{(m)} < +\infty$, *если* $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$.

Теорема доказывается по аналогии со скалярным вариантом, который изучен в [9].

Рассмотрим теперь оценку параметра экспоненциальной временной асимптотики. Как указано выше, в скалярном случае при выполнении довольно общих условий имеет место асимптотическое соотношение

$$J_0(r, \omega, t) \sim C(r, \omega) e^{\lambda^* t}, \quad t \to +\infty. \tag{3.3}$$

Эти условия, в частности, имеют место для односкоростного процесса переноса в ограниченной среде с функцией источника, достаточно быстро убывающей по времени [1]. Поэтому мы предполагаем, что если $f(r, \omega, t)\exp(-\lambda^* t) \underset{t \to +\infty}{\longrightarrow} 0\ \forall\ (r, \omega)$, то выполняется соотношение (3.3) и

$$J(t) = C e^{\lambda^* t}[1 + \varepsilon(t)], \quad \varepsilon(t) \underset{t \to +\infty}{\longrightarrow} 0, \tag{3.4}$$

также и в случае поляризованного излучения.

Так же как в [9], можно показать, что функция $J'(t)$ обладает аналогичным свойством, т. е. если $f'(r, \omega, t)\exp(-\lambda^* t) \underset{t \to +\infty}{\longrightarrow} 0\ \forall\ (r, \omega)$, то

$$J'(t) = C \lambda^* e^{\lambda^* t}[1 + \varepsilon_1(t)], \quad \varepsilon_1(t) \underset{t \to +\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{3.5}$$

Вследствие соотношений (3.4) и (3.5) величина $J'(t)/J(t)$ для достаточно большого значения t дает оценку временной константы λ^*.

В [2] доказано, что главное характеристическое число λ^* векторного уравнения (1.2) в пространственно-однородной среде равно $-\sigma_c v$. Если сделать очевидное предположение, что в полубесконечном слое это также выполняется, то можно второй параметр α асимптотики (0.1) находить из следующего соотношения:

$$\big(\ln(J(t))\big)' = \frac{J'(t)}{J(t)} \sim -\frac{\alpha}{t} - \sigma_c v, \quad t >> 1.$$

То есть $\alpha \approx (-\bar{\lambda} - \sigma_c v)t$, где $\bar{\lambda} = J'(t)/J(t) = \mathsf{E}\xi_t'/\mathsf{E}\xi_t$ — приближенное значение λ^*, вычисленное в момент времени t.

4. Результаты численных экспериментов

Рассмотрим полупространство $z > 0$, заполненное рассеивающим и поглощающим свет веществом, источник излучения находится в точке с координатами $(0, 0, 0)$ и излучает “фотоны” в направлении $\omega = (0, 0, 1)$, причем $I_0 = (1, 0, 0, 0)^T$. Имеет место односкоростной ($v = 1$) процесс переноса частиц, коэффициенты рассеяния и поглощения заданы, полное сечение ослабления $\sigma = 1$.

В расчетах использовались матрица молекулярного рассеяния и матрица аэрозольного рассеяния, рассчитанная по теории Ми для следующих параметров среды. Коэффициент преломления частиц $n = 1.331 - i1.3 \cdot 10^{-4}$ (вода), распределение частиц по размерам логнормально с функцией распределения

$$f(r) = \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{1}{2s^2} \ln^2\left(\frac{r}{r_g}\right)\right], \quad r \in (0, 10\,\text{мкм}), \quad r_g = 0.12\,\text{мкм}, \quad s = 0.5,$$

длина волны излучения равна 0.65 мкм.

Плоскопараллельный приемник регистрирует поток $J(t)$ излучения, выходящего из полубесконечного слоя (освещенность границы $z = 0$), т. е. определяет среднее значение первой компоненты вектора Стокса для вылетающих “фотонов”.

В расчетах методом Монте-Карло использован стандартный алгоритм моделирования траекторий “векторного фотона” с учетом “веса”. Использовалась модификация локальной оценки по столкновениям в состоянии после рассеяния с моделированием цепи Маркова без поглощения, т. е. с заменой $\sigma \to \sigma_s$, $\sigma_c \to 0$. Также использовалась модификация “моделирования без вылета” [4, 6].

В качестве временно́й составляющей плотности распределения первых столкновений взята функция вида $f(t) = te^{-t}$, $t > 0$. Соответствующие “оценки” (3.2) для вычисления потока и его производной имеют следующий вид:

$$\xi(t) = \sum_{n=0}^{N} \Delta_-(\omega_n)\Delta_t(t_n)(t - t_n)e^{-(t-t_n+l_n^*\sigma)}Q_n^{(1)},$$

$$\xi'(t) = \sum_{n=0}^{N} \Delta_-(\omega_n)\Delta_t(t_n)(1 - (t - t_n))e^{-(t-t_n+l_n^*\sigma)}Q_n^{(1)},$$

где $Q_n^{(i)}$ определяется выражением

$$Q_n^{(i)} = \exp\{-l_n\sigma_c\}(1 - \exp\{-l_n^*\sigma_s\}) \sum_{j=1}^{4} \frac{P_{i,j}}{R_{11}} Q_{n-1}^{(j)}, \quad Q_0 = (1, 0, 0, 0)^T.$$

Здесь l_n^* — расстояние от точки рассеяния до границы слоя в направлении ω_n; l_n — длина n-го пробега между столкновениями; $t_n = (L_n + l_n^*)/v$, L_n — полная длина пробега до n-го столкновения; $\Delta_-(\omega)$ — индикатор пересечения границы слоя направлением ω; $\Delta_t(\tau)$ — индикатор интервала $(0, t)$; R_{11} — индикатриса рассеяния; $P_{i,j}$ — (i, j)-я компонента матрицы рассеяния $P(\omega', \omega, r)$. Траектория обрывается при $L_n/v > t$.

Для проведения расчетов создана параллельная реализация алгоритма. Код программы написан на языке Intel Fortran с использованием MVAPICH на коммуникационной среде InfiniBand [10]. Также использовалась библиотека Intel MKL. Вычисления выполнялись на многопроцессорной системе НКС-160 (ССКЦ) [11]. Число реализованных траекторий с использованием 100 процессоров составило $N = 10^{10}$.

Расчеты проводились с помощью двух различных генераторов псевдослучайных чисел: 128-битного конгруэнтного генератора [12] и генератора MT2203 из библиотеки MKL [13]. Отметим, что результаты расчетов с разными генераторами псевдослучайных чисел статистически не различались.

4.1. Расчет параметров асимптотики

Результаты расчетов параметров асимптотики λ и α для $\sigma_s = 0.9, \sigma_c = 0.1$ и аэрозольной матрицы рассеяния приведены в табл. 1 и 2 соответственно. Также в таблицах приведены значения среднеквадратичной погрешности результатов.

Заметим, что значения параметров временной асимптотики в случаях с учетом поляризации и без ее учета совпадают с точностью до статистической погрешности.

В табл. 3 и 4 приведены результаты расчетов, полученные для сред с параметрами $\sigma_s = 0.95,\ \sigma_c = 0.05$ и $\sigma_s = 1.0,\ \sigma_c = 0.0$ соответственно. Для первой среды погрешности вычисления λ не превосходят 0.22 % при моделировании без учета поляризации, 1 % при моделировании с поляризацией. Для второй среды погрешности вычисления не превышают 2 % при моделировании без учета поляризации и 6.5 % при моделиро-

Т а б л и ц а 1. Параметр $\bar{\lambda}$ экспоненциальной асимптотики освещенности, вычисленный методом параметрических временны́х производных для $\sigma_s = 0.9, \sigma_c = 0.1$

t	Без учета поляризации	С учетом поляризации
21	$-0.14850806 \pm 0.00002813$	$-0.14857793 \pm 0.00002874$
41	$-0.13246373 \pm 0.00004165$	$-0.13239391 \pm 0.00004521$
61	$-0.12291465 \pm 0.00005455$	$-0.12291154 \pm 0.00006531$
81	$-0.11766099 \pm 0.00006639$	$-0.11750441 \pm 0.00009052$
101	$-0.11431486 \pm 0.00007772$	$-0.11447877 \pm 0.00012443$
121	$-0.11185582 \pm 0.00008862$	$-0.11205463 \pm 0.00016620$
141	$-0.11031517 \pm 0.00009888$	$-0.11020254 \pm 0.00021730$
161	$-0.10927209 \pm 0.00010877$	$-0.10903962 \pm 0.00029130$
181	$-0.10822164 \pm 0.00011865$	$-0.10814159 \pm 0.00037220$
201	$-0.10732061 \pm 0.00012816$	$-0.10776328 \pm 0.00048264$

Т а б л и ц а 2. Параметр α асимптотики освещенности для $\sigma_s = 0.9, \sigma_c = 0.1$

t	Без учета поляризации	С учетом поляризации
21	$-1.01866919 \pm 0.00059075$	$-1.02013657 \pm 0.00060360$
41	$-1.33101302 \pm 0.00170785$	$-1.32815022 \pm 0.00185356$
61	$-1.39779342 \pm 0.00332768$	$-1.39760411 \pm 0.00398409$
81	$-1.43054017 \pm 0.00537739$	$-1.41785750 \pm 0.00733217$
101	$-1.44580067 \pm 0.00784958$	$-1.46235579 \pm 0.01256675$
121	$-1.43455391 \pm 0.01072290$	$-1.45861005 \pm 0.02011034$
141	$-1.45443942 \pm 0.01394202$	$-1.43855778 \pm 0.03063944$
161	$-1.49280680 \pm 0.01751208$	$-1.45537928 \pm 0.04689971$
181	$-1.48811749 \pm 0.02147555$	$-1.47362783 \pm 0.06736764$
201	$-1.47144283 \pm 0.02575923$	$-1.56041898 \pm 0.09701034$

Т а б л и ц а 3. Параметры $\bar{\lambda}$ и α асимптотики освещенности, вычисленные методом параметрических временны́х производных для $\sigma_s = 0.95, \sigma_c = 0.05$

	Без учета поляризации		С учетом поляризации	
t	$\bar{\lambda}$	α	$\bar{\lambda}$	α
101	−0.0644246	−1.4568894	−0.0645330	−1.4678340
121	−0.0621121	−1.4655645	−0.0620577	−1.4589837
141	−0.0604434	−1.4725182	−0.0605189	−1.4831649
161	−0.0593987	−1.5131866	−0.0596728	−1.5573155
181	−0.0583921	−1.5189743	−0.0587141	−1.5772449

Т а б л и ц а 4. Параметры $\bar{\lambda}$ и α асимптотики освещенности, вычисленные методом параметрических временны́х производных для $\sigma_s = 1, \sigma_c = 0$.

	Без учета поляризации		С учетом поляризации	
t	$\bar{\lambda}$	α	$\bar{\lambda}$	α
101	−0.0142817	−1.4424541	−0.0142357	−1.4378097
121	−0.0118947	−1.4392532	−0.0120252	−1.4550459
141	−0.0105072	−1.4815099	−0.0102723	−1.4484004
161	−0.0091509	−1.4732894	−0.0093292	−1.5019978
181	−0.0080240	−1.4523529	−0.0081027	−1.4665904

вании с поляризацией. Здесь значения параметров λ и α асимптотики освещенности в скалярном и векторном вариантах также совпадают с точностью до статистической погрешности.

Отметим, что полученные в расчетах значения α близки к значению $-3/2$, полученному в работе [14] аналитическими выкладками при соответствующих асимптотических предположениях.

4.2. Исследование дисперсий оценок

Как указывалось в разд. 2, полученные, например, из неравенств (2.4)–(2.6) теоретические выводы о конечности дисперсий оценок функционалов и их производных являются основанием для применимости метода Монте-Карло. Однако, являясь конечными, значения этих дисперсий в задачах с поляризацией могут быть очень велики, что приводит к большим затратам вычислительных ресурсов для решения конкретных задач. Для изучения этой проблемы проведены специальные численные эксперименты по исследованию поведения дисперсий векторных оценок при критических значениях коэффициента поглощения в среде.

В табл. 5 и 6 приведены вычисленные значения средних квадратов оценок функционалов, используемых для нахождения параметров временной асимптотики в момент времени $t = 96$ и при коэффициенте поглощения среды $\sigma_c = 0.1$. Индексы s и v у функционалов в таблицах относятся к скалярному и векторному вариантам соответственно. В табл. 5 приведены результаты при конечной дисперсии векторных функционалов, в табл. 6 — при расходящейся. Дисперсии скалярных функционалов в обеих таблицах — конечны.

Т а б л и ц а 5. Средние квадраты оценок функционалов для $\sigma_c = 0.1, t = 96$. Аэрозольное рассеяние

Число траекторий	$E(J_s)^2$	$E(J_s{}')^2$	$E(J_v)^2$	$E(J_v{}')^2$
10^4	0.2079e−11	0.3871e−11	0.2026e−11	0.1989e−10
10^5	0.2077e−11	0.4108e−11	0.2325e−11	0.6383e−11
10^6	0.2074e−11	0.3931e−11	0.2215e−11	0.5691e−11
10^7	0.2025e−11	0.3964e−11	0.2062e−11	0.5594e−11
10^8	0.2023e−11	0.3837e−11	0.2050e−11	0.5303e−11
10^9	0.2021e−11	0.3793e−11	0.2047e−11	0.5285e−11
10^{10}	0.2019e−11	0.3787e−11	0.2042e−11	0.5278e−11

Т а б л и ц а 6. Средние квадраты оценок функционалов для $\sigma_c = 0.1, t = 96$. Молекулярное рассеяние

Число траекторий	$E(J_s)^2$	$E(J_s{}')^2$	$E(J_v)^2$	$E(J_v{}')^2$
10^4	0.4970e−12	0.7192e−12	0.5755e−12	0.5202e−12
10^5	0.6205e−12	0.9302e−12	0.2773e−11	0.2287e−11
10^6	0.6075e−12	0.1134e−12	0.2960e−10	0.1245e−11
10^7	0.5939e−12	0.1079e−12	0.2659e−09	0.8205e−10
10^8	0.5935e−12	0.1049e−12	0.1922e−08	0.8695e−08
10^9	0.5938e−12	0.1052e−12	0.9523e−08	0.4131e−10

Т а б л и ц а 7. Средние значения и дисперсии векторной оценки плотности столкновений. Молекулярное рассеяние. Коэффициент поглощения 0.05, точное значение функционала 20

Число траекторий	EJ	DJ
10^4	17.9073	7 728
10^5	19.108	17 129
10^6	19.078	64 638
10^7	19.55	565 938
10^8	19.758	1 202 333

Расчеты показали, что при значениях σ_c, больших критического (см. разд. 2), статистические оценки сходятся к их математическим ожиданиям, а статистические дисперсии остаются постоянными при увеличении числа траекторий. При σ_c, близких к критическому и меньше, наблюдается рост дисперсий с увеличением количества траекторий, хотя оценка вектора Стокса может оставаться достаточно точной. Так, в табл. 7 приведены результаты расчетов среднего значения и дисперсии векторной оценки плотности столкновений в пространственно-однородной задаче, в которой известно точное решение, но дисперсия оценки метода Монте-Карло является бесконечной. Из таблицы видно, что статистическая дисперсия сильно растет, а оценка — быстро сходится. Однако в более сложной задаче об оценке параметров асимптотики при молекулярной матрице рассеяния (см. табл. 6) в расчетах наблюдался не только рост дисперсии, но и очень слабая сходимость оценки к конечному математическому ожиданию, не позволяющая получить результат за приемлемое время.

Список литературы

[1] Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960.

[2] Михайлов Г.А., Трачева Н.В., Ухинов С.А. Исследование временной асимптотики интенсивности поляризованного излучения методом Монте-Карло // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2007. Т. 47, № 7. С. 1264–1275.

[3] Михайлов Г.А. Весовые алгоритмы статистического моделирования. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2003.

[4] Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Г.И. Марчук, Г.А. Михайлов, М.А. Назаралиев и др. Новосибирск: Наука, 1976.

[5] Михайлов Г.А. Весовые методы Монте-Карло. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.

[6] Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. М.: Учебно-изд. центр "Академия", 2006.

[7] Ухинов С.А., Юрков Д.И. Оценки методов Монте-Карло для параметрических производных поляризованного излучения // Сиб. журн. вычисл. математики. 2002. Т. 5, № 1. С. 40–56.

[8] Михайлов Г.А., Ухинов С.А., Чимаева А.С. Дисперсия стандартной векторной оценки метода Монте-Карло в теории перноса поляризованного излучения // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2006. Т. 46, № 11. С. 2199–2212.

[9] Лотова Г.З., Михайлов Г.А. Новые методы Монте-Карло для решения нестационарных задач теории переноса излучения // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2002. Т. 42, № 4. С. 569–579.

[10] MVAPICH: MPI over InfiniBand. http://mvapich.cse.ohio-state.edu/

[11] Сибирский суперкомпьютерный центр. http://www2.sscc.ru

[12] Марченко М.А., Михайлов Г.А. Распределенные вычисления по методу Монте-Карло// Автоматика и телемеханика. 2007. № 5. С. 157–170.

[13] Intel® Math Kernel Library. Vector Statistical Library Notes. http://download.intel.com/software/products/mkl/docs/vslnotes.pdf

[14] Романова Л.М. Предельные случаи функции распределения по пробегам фотонов, выходящих из толстого светорассеивающего слоя // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1965. Т. 1, № 6. С. 599–606.

Поступила в редакцию 20 февраля 2008 г.