

УДК 519.676

ИССЛЕДОВАНИЕ СМЕЩЕНИЯ N -ЧАСТИЧНЫХ ОЦЕНОК МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО В ЗАДАЧАХ СО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ЧАСТИЦ© 2024 г. Член-корреспондент РАН Г. А. Михайлов^{1,2,*}, Г. З. Лотова^{1,2,**}, С. В. Рогазинский^{1,2,***}

Получено 02.07.2024 г.

После доработки 09.09.2024 г.

Принято к публикации 19.07.2024 г.

В статье дано теоретическое и численное обоснование порядка $O(1/N)$ смещения N -частичных статистических оценок функционалов от решения нелинейных кинетических уравнений для модели со взаимодействием траекторий частиц. Получена оценка коэффициента в соответствующей формуле смещения.

Ключевые слова: гипотеза о переносе хаоса, метод Монте-Карло, уравнение Больцмана, теория разреженных газов, SEIR модель эпидемии, одночастичная плотность распределения, N -частичный ансамбль, δ -непрерывность, цепь Маркова.

DOI: 10.31857/S2686954324050076, EDN: XDYTXW

1. Метод Монте-Карло традиционно используется для исследования многомерных неоднородных процессов переноса частиц различной природы путем численного моделирования их случайных траекторий, взаимодействующих с элементами среды. Алгоритмы моделирования и оценки требуемых функционалов существенно усложняются, если необходимо также учитывать взаимодействия частиц, влияющих на ансамбль траекторий. В частности, такая необходимость существенна для решения задач теории разреженных газов и задач о развитии эпидемий на основе SEIR моделей, которые будут рассматриваться далее в качестве тестовых для проверки получаемых оценок искомого смещения. Эти задачи описываются нелинейными интегро-дифференциальными (для разреженных газов, см. раздел 4) и системами дифференциальных уравнений (SEIR модель, см. раздел 5), которые получаются в предположении асимптотической (по начальной численности) с сохранением по времени хаотизации процесса (chaos propagation hypothesis), то есть ослабления корреляции взаимодействующих частиц.

С физической точки зрения процесс такого типа можно рассматривать как “нелинейный” марковский процесс с переходной плотностью, определяемой состоянием системы, т.е. решением нелинейной задачи в исходный момент времени t . Такие процессы можно моделировать приближенно дискретно шагами Δt с соответствующей оптимизацией. Для разреженных газов это метод Бёрда [1], для SEIR модели, например, дискретная по времени стохастическая схема, аналогичная дифференциальной схеме Рунге—Кутты. Однако существенно более эффективными могут быть развивающиеся в последнее время алгоритмы, в которых моделируется N -частичный ансамбль парно взаимодействующих частиц и вычисляется одночастичная плотность распределения, которая при выполнении определенных условий дает решение рассматриваемой нелинейной задачи при $N \rightarrow \infty$. Отметим, что такой алгоритм, сформулированный ранее для приближенного решения уравнения Больцмана, реализуется в частном случае сравнительно недавно сформулированного подхода “игра среднего поля” (mean field game). Возникающую при этом погрешность можно рассматривать как смещение статистических оценок решения. Целью настоящей работы является исследование такого смещения для нелинейных кинетических уравнений.

2. Численные эксперименты, проведенные в работах [2, 3] авторов настоящей статьи, показали, что в указанных выше тестовых задачах смещение N -частичной оценки функционала от решения базового уравнения имеет порядок

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

*E-mail: gam@sscc.ru

**E-mail: lot@osmf.sssc.ru

***E-mail: svr@osmf.sssc.ru

величины $1/N$ и, по-видимому, связано с тем, что реализуется осреднение коррелированных значений вследствие взаимодействия траекторий. Это можно пояснить тем, что стандартная статистическая оценка дисперсии $\mathbf{D}_N = \sum_{i=1}^N (\xi_i - \bar{x}_N)^2 / N$ смещена на величину σ^2/N вследствие того, что $\sum_{i=1}^N (\xi_i - \bar{x}_N) = 0$.

В монографии [4] (п. 27.7) приведено более общее утверждение о порядке $O(1/N)$ смещения достаточно гладкой функции $H(m_N)$ от центрального выборочного момента m_N относительно значения $H(\mu)$, где $\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} m_N$ в смысле сходимости по распределению. В п.27.8 этой же монографии указано на обобщения этого утверждения для векторной выборки. При этом требуется условие $|H| < CN^p$, $p > 0$.

Однако, для задач теории разреженных газов последнее условие не выполняется вследствие неограниченности модуля $|\mathbf{v}|$ скорости частицы. Однако, имея ввиду достаточно быстрое убывание “хвоста” $\delta(v_\delta) = P(|\mathbf{v}| > v_\delta)$ распределения переменной $|\mathbf{v}|$, можно предположить непрерывную зависимость изучаемых функционалов (включая искомый $\bar{x}$) от δ в точке $\delta = 0$ при использовании ограничения: если $|\mathbf{v}| > v_\delta$, то $|\mathbf{v}| := v_\delta$. Это свойство задачи, легко проверяемое (см. далее раздел 4) с помощью зависимых испытаний, назовем “ δ -непрерывностью”. Оно (при выполнении неравенства $|H| < CN^p$ для достаточно малого значения δ) согласно [4], как показано далее, дает порядок $O(1/N)$ изучаемого смещения, однако, это не достаточно для оценки соответствующего коэффициента γ в выражении γ/N для искомого смещения. Значение функционала для δ -ограниченного распределения назовем δ -значением. Полуэмвристические оценки коэффициента γ получаются далее с помощью конечного ряда Тейлора.

Рассмотрим для $N = 1, 2, \dots$ семейство векторных случайных процессов

$$\xi_i = \xi_i(t) > 0, \quad i = 1, \dots, N, \quad t \geq 0. \quad (1)$$

Предполагается, что для фиксированных t и N случайные величины $\xi_i(t)$ одинаково распределены с $E\xi_i(t) < +\infty$, $\sigma_N^2 = \sigma_N^2(t) = \mathbf{D}\xi_i(t) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sigma^2(t) < +\infty$ и в смысле сходимости по распределению

$$\bar{x}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \bar{x} < +\infty, \quad E\bar{x}_N \neq \bar{x}, \quad (2)$$

где $\bar{x} = \bar{x}(t)$ — некоторая искомая средняя характеристика бесконечного ансамбля взаимодействующих траекторий (1). Случайные величины $\xi_i(0)$

предполагаются независимыми. Справедливы соотношения

$$\mathbf{D}\bar{x}_N = \frac{1}{N^2} \mathbf{D} \sum_{i=1}^N \xi_i = \frac{\sigma_N^2}{N^2} \sum_{i,j=1}^N r_{i,j}, \quad |r_{i,j}| \leq 1, \quad r_{i,i} = 1,$$

и

$$\mathbf{D}\bar{x}_N = \frac{\sigma_N^2 + \varepsilon_N}{N}, \quad |\varepsilon_N| < +\infty. \quad (3)$$

Здесь σ_N^2 — “одночастичная” дисперсия и $\varepsilon_N = N \times \mathbf{D}\bar{x}_N - \sigma_N^2$; предполагается, что

$$\frac{\varepsilon_N}{\sigma_N^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad (4)$$

вследствие хаотизации процесса (см. раздел 1).

Теорема. Если для семейства (1) выполняется условие δ -непрерывности, то соответственно [4] (п. 27.8) асимптотически при $N \rightarrow \infty$ выполняется соотношение

$$E\bar{x}_N \sim \bar{x} + O\left(\frac{1}{N}\right). \quad (5)$$

Доказательство теоремы следует из того, что согласно указанному в [4] (п. 27.8) обобщению теоремы из [4] (п. 27.7) имеем: $E\bar{x}_{\delta,N} - \bar{x}_\delta = 0 + O(1/N)$ и вследствие δ -непрерывности существует такое δ , что выполняются соотношения: $\bar{x} - \bar{x}_\delta = o(1/N)$ и $E\bar{x}_N - E\bar{x}_{\delta,N} = o(1/N)$.

Приведенное доказательство показывает, что оценку смещения можно считать удовлетворительной, если ее модуль существенно превосходит величину $\bar{x}_N - \bar{x}_{\delta,N}$ (см. далее раздел 4).

Согласно (5) и (2) имеем

$$E\bar{x}_N = \bar{x} + \frac{\gamma}{N} + o\left(\frac{1}{N}\right). \quad (6)$$

Отсюда получаем оценку

$$\gamma = \frac{N_1 N_2}{N_1 - N_2} \left[E\bar{x}_{N_2} - E\bar{x}_{N_1} + o\left(\max\left(\frac{1}{N_1}, \frac{1}{N_2}\right)\right) \right].$$

Если положить $N_1 = 2N_2$, то получаем

$$\gamma = 2N_2 \left[E\bar{x}_{N_2} - E\bar{x}_{N_1} + o\left(\frac{1}{N_2}\right) \right] = \tilde{\gamma} + o(1). \quad (7)$$

Таким образом, величина N_2 должна быть достаточно большой; она определяется на основе анализа численных результатов.

3. Далее другим полуэмвристическим способом определяется коэффициент γ в оценке $E\bar{x}_N \approx \bar{x} + \gamma/N$, который практически подтверждается результатами расчетов для тестовой задачи, связанной с решением нелинейного уравнения Больцмана (см. раздел 4).

Разлагая $\bar{x}_N^2$ в конечный ряд Тейлора в точке с координатами $\xi_i = \bar{x}$, $i = 1, \dots, N$, получаем равенства:

$$\begin{aligned}\bar{x}_N^2 &= \bar{x}^2 + \frac{2\bar{x}}{N} \sum_{i=1}^N (\xi_i - \bar{x}) + \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N (\xi_i - \bar{x})(\xi_j - \bar{x}) = \\ &= 2\bar{x}\bar{x}_N - \bar{x}^2 + (\bar{x}_N - \bar{x})^2, \\ \mathbf{E}\bar{x}_N^2 &= 2\bar{x}\mathbf{E}\bar{x}_N - \bar{x}^2 + \mathbf{D}\bar{x}_N + (\mathbf{E}\bar{x}_N - \bar{x})^2, \\ \mathbf{E}\bar{x}_N &= \frac{\mathbf{E}\bar{x}_N^2 + \bar{x}^2}{2\bar{x}} - \frac{\sigma_N^2(1 + \varepsilon_N/\sigma_N^2)}{2\bar{x}N} - \frac{(\mathbf{E}\bar{x}_N - \bar{x})^2}{2\bar{x}}. \quad (8)\end{aligned}$$

Для оценки коэффициента γ в первой дроби из (8) на основе соотношений (2), (3), (4) используем приближение: $\mathbf{E}\bar{x}_N^2 \approx \bar{x}^2 + \sigma_N^2/N$. Это дает оценку

$$\mathbf{E}\bar{x}_N \approx \bar{x} - \frac{\varepsilon_N}{2\bar{x}N} + o\left(\frac{1}{N}\right), \quad (9)$$

которая практически удовлетворительно согласуется с результатами расчетов для основной тестовой задачи (см. раздел 4) и соответствует несмещенности оценки $\bar{x}_N$ для независимой выборки (когда $\varepsilon_N = 0$).

4. Далее будет рассматриваться задача об однородной по пространству релаксации простого однокомпонентного газа. В этом случае уравнение Больцмана [5] записывается с использованием условной плотности вероятности w перехода пары скоростей взаимодействующих частиц от $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$ к $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$.

Плотность $w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ и дифференциальное сечение рассеяния частиц $\sigma(h, \Omega)$ связаны следующим соотношением (см., например, [5]):

$$\begin{aligned}w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) &= \rho\sigma(h, \Omega) \delta_1\left(\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{v}_1)^2 - (\mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1)^2}{2}\right) \times \\ &\times \delta_3\left(\frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 - (\mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1)}{2}\right),\end{aligned}$$

которое следует из того, что скорости $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$ и $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ удовлетворяют законам сохранения импульса и энергии при столкновении. Здесь $h = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$ — модуль относительной скорости сталкивающихся частиц, Ω — телесный угол поворота относительной скорости при столкновении, δ_1 и δ_3 — одно- и трехмерная дельта-функции, соответственно: $\int \delta_1(h) dh = 1$, $\int \delta_3(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1) d(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1) = 1$, ρ — плотность среды.

Как указано в [5], модельный процесс стохастической кинетики системы из N частиц представляет собой однородную цепь Маркова, переходы в которой осуществляются в результате элементарных парных взаимодействий. Плотность распределения времени между элементарными взаимодействиями в системе определяется состоянием

системы и является экспоненциальным. Участок N -частичной траектории, соответствующей прямолинейному движению всех частиц между двумя последовательными элементарными взаимодействиями, называется *свободным пробегом системы*. Вероятность элементарного взаимодействия в системе N частиц за время dt равна $\nu(V)dt$, где

$$\begin{aligned}\nu(V) &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \int w(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j | \mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) d\mathbf{v}'_i d\mathbf{v}'_j = \\ &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \rho h_{ij} \sigma_i(h_{ij}),\end{aligned}$$

V — $3N$ -мерный вектор, компонентами которого являются скорости частиц ансамбля, а $\sigma_i(h) = \int \sigma(h, \Omega) d\Omega$.

Вероятность того, что столкновение в системе N частиц реализует пара частиц с номерами i и j равна $a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)/\nu(V)$, причем распределение новых скоростей частиц $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$ определяется дифференциальным сечением столкновения пары

$$k(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rightarrow \mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) = w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j | \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) [\rho h_{ij} \sigma_i(h_{ij})]^{-1},$$

а скорости остальных частиц не изменяются. Время свободного пробега системы распределено с экспоненциальной плотностью $p(t) = \nu(V) \exp(-t\nu(V))$. Известно, что предельная при $N \rightarrow \infty$ плотность $f(t, \mathbf{v})$ “одночастичного” распределения скорости удовлетворяет уравнению Больцмана [5]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{v}) &= \int [f(t, \mathbf{v}') f(t, \mathbf{v}'_1) - f(t, \mathbf{v}) f(t, \mathbf{v}_1)] \times \\ &\times w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) d\mathbf{v}' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}_1.\end{aligned}$$

В [2] для простой модельной задачи были впервые получены результаты, позволяющие предположить, что погрешность оценки $f(t, \mathbf{v})$ в N -частичном алгоритме имеет порядок $O(N^{-1})$ (хотя эвристически можно было ожидать порядок $O(N^{-1/2})$).

В качестве теста численно моделировалась (как указано выше) однородная по пространству стохастическая релаксация газа из псевдомаксвелловских молекул [2] для начального распределения скоростей N частиц, при котором известно точное решение $f(t, \mathbf{v})$ уравнения Больцмана (соответствующего $N = \infty$, см. [2, 6]).

Статистически оценивалось значение функционала

$$z(t) = \frac{1}{11!!} \int f(t, \mathbf{v}) |\mathbf{v}|^{10} d\mathbf{v} = (1 - \beta e^{-\lambda t})^4 [1 + 4\beta e^{-\lambda t}]$$

при $\beta = 0.4$, $\lambda = 1/6$. Следовательно, здесь $\xi_i(t) = |\mathbf{v}_i(t)|^{10}/11!!$, $i = 1, \dots, N$. Подробно алгоритм моделирования изложен в [2], где были проведены

предварительные расчеты. Результаты реализованного при выполнении настоящей работы моделирования представлены в таблице 1. Они показывают практическую целесообразность использования здесь формул (7) и (9).

Символом n в таблице 1 обозначено число независимых реализаций N -частичного ансамбля. Отметим, что возможное верхнее приближение $\gamma \approx \sigma_N^2 / (2\bar{x}_N)$, например, для $t = 12$ дает сильно завышенное значение $\tilde{\gamma} \approx 55$.

В первом столбце таблицы 1 приводится оценка δ -значение $\tilde{x} = \tilde{x}_\delta$ для $\delta = P(\max_i |v_i| > 6)$, связанное с тем, что компоненты скорости v_i , $i = 1, 2, 3$ для $t = 0$ и $t = +\infty$ имеют распределение, близкое стандартному нормальному. В соответствующем δ -алгоритме при $|v_i| > 6$ делается замена: $|v_i| \mapsto 6$, $i = 1, 2, 3$. Полученное значение $|\tilde{x} - \tilde{x}_\delta|$ обеспечивает здесь справедливость теоремы из пункта 2, так как оно существенно меньше модуля смещения. Отметим, что этого всегда можно достичь, если выполняется условие δ -непрерывности; при этом в (5) фактически добавляется слагаемое $o(1/N)$. В трех последних столбцах таблицы 1 приведены оценки величины $-\gamma$, обозначенные номерами формул, по которым они вычислялись, то есть в последнем столбце дано “точное” значение $-2000(\bar{x}_{2000} - \tilde{x})$; для реализации формулы (7) были проведены дополнительно расчеты при $N_2 = 1000$.

5. Далее рассматривается смещение оценок в стохастической SEIR модели эпидемиологического процесса (см., например, [3, 7]). Для построения тренда такого процесса обычно используются дифференциальные SEIR модели, в которых индивидуумы (элементы) разбиваются на группы (типы): восприимчивые (S), инфицированные с симптомами (I), инфицированные без симптомов (E), выздоровевшие (R), умершие (D); полная популяция $n = S + I + E + R + D$ (см., например, [7], и указанную там литературу). Таким образом фактически реализуется SEIRD модель. Соответствующие системы дифференциальных уравнений получаются из локального баланса, что вполне обосновано в линейном варианте задачи, когда группы не взаимодействуют, но испытывают превращения с изменением типа. При наличии взаимодействий (например, инфицирования больными) фактически используется эвристическое предположение об асимптотической (по начальной численности) некоррелированности взаимодействующих групп (“каждый с каждым”), которое дает известные системы нелинейных дифференциальных уравнений, в частности, уравнение, определяющее изменение величины $S(t)$

$$\frac{dS}{dt} = - \left(\frac{a_I S(t) I(t)}{n} + \frac{a_E S(t) E(t)}{n} \right),$$

где t — время в днях (см, например, [3, 7] и литературу в этих статьях). Отметим, что в [8] доказана сходимость по распределению при $n \rightarrow \infty$ функциональных характеристик эпидемии к решению дифференциальных SEIR-уравнений в естественном предположении о том, что реализуется случайный марковский пуассоновский процесс рождения и гибели с превращениями и взаимодействием групп. Трудоемкость соответствующего численного моделирования растет как n^2 [3]; построенная в [3] и обоснованная в настоящей работе оценка смещения дает возможность использования стохастической SEIR-модели для больших n .

6. Далее строится смещение для специально сформулированной стохастической N -частичной SEIR-модели. Определим стохастическую модель следующим образом:

$M = nN$ — моделируемая начальная численность, где n — базовая начальная численность с заданным распределением по группам, а $N = 1, 2, \dots$

Соответствующие начальные данные получают из базовых умножением на N , а получаемые результаты делятся на N .

Результативная статистическая (по реализациям модели) оценка числа выявленных инфицированных обозначается $f(i, N)$, где i — номер дня, $i = 0$ для 23.03.20. Достаточно ясно, что таким образом сформулировано многомерное обобщение N -частичной модели, в которой каждая “частица” при $t = 0$ совпадает с базовой совокупностью численности n , а дальнейшая стохастическая эволюция объединенной системы реализуется, как указано выше. Именно для такой модели в [8] фактически доказано, что $Ef(i, N) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} f_{dif}(i)$, где $f_{dif}(i)$ — это сумма соответствующих значений $I(t_i)$ и $E(t_i)$ компонент решения SEIR-системы дифференциальных уравнений (см. [3, 7]), которое строилось в [3] по схеме Рунге—Кутты с достаточно большой точностью. Статистическая оценка величины $Ef(i, N)$ (МК-среднее) далее обозначена через $\tilde{f}(i, N)$. Здесь $\xi_i(t)$ из (1) — это случайное число выявленных инфицированных для i -той “частицы” в момент времени t . Соотношение (5) в данном случае следует непосредственно из указанной в разделе 2 теоремы Крамера, так как здесь $H(m_N) \equiv m_N \leq 1$ вследствие использования схемы Бернулли для построения оценки.

В [3] проверялось, что величина смещения $\delta f(i, N) = \tilde{f}(i, N) - f_{dif}(i)$ оценивается величиной γ_i/N по аналогии с многочастичной статистической оценкой для решения нелинейного уравнения Больцмана (см. пункт 4). С этой целью были проведены расчеты методом Монте-Карло для вариантов задачи с $M = nN_k$, $N_k = 2^{k-1}$, $k = 1, 2, 3, 4, 5$, причем число независимых вычислительных экспериментов для построения МК-среднего при фиксиро-

Таблица 1. Значения оценок функционала $\bar{x}(t) = z(t)$ и статистические погрешности (одна σ)

t	$N_1 = 2000, n = 10^7$, δ -значение	$N_1 = 2000, n = 10^7$	Точное решение	$-\gamma, (7)$	$-\gamma, (9)$	$-\gamma, (6)$
0	0.33696 ± 0.00001	0.33696 ± 0.00001	0.33696	-0.032	0.004	-0.003
1	0.45051 ± 0.00002	0.45051 ± 0.00002	0.45055	0.114	0.206	0.081
2	0.55583 ± 0.00003	0.55583 ± 0.00003	0.55593	0.233	0.517	0.190
3	0.64817 ± 0.00004	0.64817 ± 0.00003	0.64839	0.443	0.893	0.427
4	0.72582 ± 0.00004	0.72582 ± 0.00004	0.72625	0.684	1.258	0.855
5	0.78926 ± 0.00005	0.78927 ± 0.00005	0.78980	1.139	1.589	1.066
6	0.83971 ± 0.00006	0.83971 ± 0.00005	0.84043	1.120	1.931	1.431
7	0.87918 ± 0.00006	0.87919 ± 0.00006	0.88000	1.435	2.249	1.628
8	0.90952 ± 0.00006	0.90952 ± 0.00006	0.91046	1.758	2.460	1.884
9	0.93261 ± 0.00006	0.93262 ± 0.00006	0.93363	1.849	2.673	2.003
10	0.94993 ± 0.00007	0.94994 ± 0.00007	0.95106	1.624	2.819	2.247
11	0.96291 ± 0.00007	0.96292 ± 0.00007	0.96408	2.140	2.956	2.318
12	0.97257 ± 0.00007	0.97258 ± 0.00007	0.97374	2.310	3.022	2.311

рованном значении k равнялось $2^{5-k} \cdot 10^4$. Таким образом полное начальное число “частиц” в каждом варианте равнялось $16 \cdot 10^4$ и, по-видимому, вследствие слабой зависимости “частиц” среднеквадратические погрешности $\sigma(i, k)$ оценок $\tilde{f}(i, N_k)$ оказались весьма близкими, т.е. $\sigma(i, k) \approx \tilde{\sigma}_i$. Это сделало целесообразной следующую безвесовую среднеквадратическую оценку:

$$\gamma_i = \sum_{k=2}^5 (\tilde{f}(i, N_k) - f_{dif}(i)) / N_k \cdot \left(\sum_{k=2}^5 1/N_k^2 \right)^{-1}. \quad (10)$$

При этом было учтено, что функциональная зависимость вида γ/N практически точно реализуется, начиная с $N = 2$. Однако расчеты показали, что удовлетворительна оценка: $\tilde{f}(i, 1) - f_{dif}(i) \approx \gamma_i$.

Результаты, полученные для стохастической модели SEIR эпидемии COVID-19 в Новосибирске с 23.03.2020 по 21.06.2020 приведены в таблице 2, где γ — оценка вида (10), $\tilde{\gamma} = -\sigma_N^2 / (2\bar{x}_N)$.

Таблица 2. Оценки для стохастической SEIR модели эпидемии COVID-19

Номер дня	σ_N^2	$\bar{x}_N$	γ	$\tilde{\gamma}$
40	576	40	-0.48	-7.2
50	1312	60	-1.6	-10.9
70	4000	120	-9.5	-16.7
80	5152	150	-18	-17.2
90	5088	176	-27	-14.5

Таким образом показано, что и в стохастической SEIR-модели смещение основной оценки

имеет порядок $O(1/N)$, причем выражение смещения (9) может быть вполне удовлетворительным. В то же время использованная на основе результатов из [3] оценка $\tilde{\gamma} = -\sigma_N^2 / (2\bar{x}_N)$ до $i = 70$ дает существенное завышение модуля коэффициента при $1/N$; дальнейшее уравнивание оценок, по-видимому, связано с относительным ростом величины $I(t) + E(t)$.

В заключение можно констатировать, что проведенные теоретические и численные исследования подтвердили порядок $O(1/N)$ смещения N -частичных статистических оценок решений нелинейных кинетических уравнений и дали оценки соответствующих коэффициентов.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект FWNM-2022-0002).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
2. Иванов М. С., Коротченко М. А., Михайлов Г. А., Рогазинский С. В. Глобально-весовой метод Монте-Карло для нелинейного уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т. 45. № 10. С. 1860–1870.
3. Lotova G. Z., Lukinov V. L., Marchenko M. A., Mikhailov G. A., Smirnov D. D. Numerical-statistical study of the prognostic efficiency of the SEIR model // Rus. J. Numer. Analysis Math. Modelling. 2021. Vol. 36. № 6. P. 337–345.
4. Крамер Г. Математические методы статистики. М: Мир, 1975, 648 с.

5. *Кац М.* Вероятность и смежные вопросы в физике. М.: Мир, 1965. 408 с.
6. *Бобылев А. В.* О точных решениях уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. 1975. Т. 225. № 6. С. 1296–1299.
7. *Pertsev N. V., Loginov K. K., Topchii V. A.* Analysis of a stage-dependent epidemic model based on a non-Markov random process // J. Appl. Industr. Math. 2020. V. 14. № 3. P. 566–580.
8. *Sazonov I., Grebennikov D., Kelbert M., Bocharov G.* Modelling Stochastic and Deterministic Behaviours in Virus Infection Dynamics // Math. Model. Nat. Phenom., V. 12, № 5, 2017, P. 63–77.

STUDY OF THE BIAS OF N-PARTICLE ESTIMATES OF THE MONTE CARLO METHOD IN PROBLEMS WITH PARTICLE INTERACTION

Corresponding member of the RAS *G. A. Mikhailov^{a,b}, G. Z. Lotova^{a,b}, S. V. Rogasinsky^{a,b}*

^a*Institute of computational mathematics and mathematical geophysics SB RAS, Novosibirsk, Russia*

^b*Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia*

The paper gives a theoretical and numerical justification of the bias with the $O(1/N)$ order for the N -particle statistical estimates of the functionals of the solution of nonlinear kinetic equations for the model with interaction of particle trajectories. An estimate of the coefficient in the corresponding bias formula is obtained.

Keywords: chaos propagation hypothesis, Monte Carlo method, Boltzmann equation, rarefied gas theory, SEIR epidemic model, single-particle density distribution, N -particle ensemble, δ -continuity, Markov chain.