

Моделирование ветвящихся случайных блужданий по многомерной решётке

Е. М. ЕРМИШКИНА

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
e-mail: k.ermishkina@gmail.com

Е. Б. ЯРОВАЯ

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
e-mail: yarovaya@mech.math.msu.su

УДК 519.21+519.245

Ключевые слова: ветвящиеся процессы, случайные блуждания, ветвящиеся случайные блуждания, моделирование, метод Монте-Карло.

Аннотация

На многомерной решётке рассматриваются непрерывные по времени ветвящиеся случайные блуждания с размножением и гибелью частиц в конечном числе выделенных узлов. Такие процессы используются в многочисленных приложениях, в частности в статистической физике, популяционной динамике, химической кинетике. В последнее десятилетие для различных моделей ветвящихся случайных блужданий получен ряд предельных теорем о поведении процесса при больших временах. Однако исследование ветвящихся случайных блужданий практически невозможно провести аналитически на конечных временных интервалах, поэтому в настоящей работе будет представлен алгоритм моделирования ветвящихся случайных блужданий и примеры его численной реализации.

Abstract

E. M. Ermishkina, E. B. Yarovaya, Simulation of branching random walks on a multidimensional lattice, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 22 (2018), no. 3, pp. 37–56.

We consider continuous-time branching random walks on multidimensional lattices with birth and death of particles at a finite number of lattice points. Such processes are used in numerous applications, in particular, in statistical physics, population dynamics, and chemical kinetics. In the last decade, for various models of branching random walks, a series of limit theorems about the behavior of the process for large times has been obtained. However, it is almost impossible to analyze analytically branching random walks on finite time intervals; so in this paper we present an algorithm for simulating branching random walks and examples of its numerical realization.

1. Введение

Стохастические процессы с генерацией и транспортом частиц принято описывать в терминах так называемых *ветвящихся случайных блужданий* (ВСБ). Мы будем рассматривать ВСБ по d -мерной целочисленной решётке \mathbf{Z}^d , $d \geq 1$, с размножением и гибелью частиц в конечном числе выделенных узлов решётки — источниках ветвления. Недавние исследования [6, 22, 23] показали, что ВСБ с непрерывным временем на \mathbf{Z}^d представляют собой важный пример стохастических процессов, для которых поведение зависит от структуры среды и пространственной динамики. Структура среды определяется количеством, интенсивностью и расположением источников ветвления на \mathbf{Z}^d , а пространственная динамика существенно зависит от свойств лежащего в основе процесса случайного блуждания, например таких, как симметричность или нарушение симметрии блуждания, конечность или бесконечность дисперсии скачков.

Ветвящиеся случайные блуждания стали находить широкое применение в статистической физике, популяционной динамике, химической кинетике, генетике и других областях науки достаточно давно (см., например, [10, 13, 16, 17, 24]). Развитие теории ветвящихся случайных блужданий в последнее десятилетие показало, что при изучении эволюции численностей частиц и распространения их фронтов по многомерным решёткам (см., например, [3]) продуктивным оказывается сочетание стохастических и функционально-аналитических подходов. В ряде моделей ВСБ с конечным числом источников ветвления эволюционные уравнения моментов численностей частиц можно трактовать как операторные уравнения в банаховых пространствах (детали см., например, в [4, 6]) и сводить к исследованию спектра операторов, возникающих в правых частях этих уравнений. Спектральный анализ операторных моделей ВСБ существенно зависит от свойств случайного блуждания, таких, как симметричность или отсутствие симметрии блуждания, конечность или бесконечность дисперсии скачков. При этом многоточечные возмущения оператора, генерирующего случайное блуждание, зависят от количества, интенсивности и конфигурации источников ветвления на решётке. Такой подход предлагает единую точку зрения на модели ВСБ различных типов: как с нарушением, так и без нарушения симметрии блуждания в источниках с разнообразными типами возмущений (см., например, раздел 2, касающийся описания некоторых моделей ВСБ, введённых в [6, 22]). В последнее десятилетие для различных моделей ВСБ получен ряд предельных теорем о поведении процесса. Однако исследование ВСБ на конечных временных интервалах практически невозможно провести аналитически, поэтому в настоящей работе будет представлен алгоритм моделирования ВСБ и примеры его реализации.

Упомянутые выше методы анализа ВСБ позволяют получить разнообразные факты о поведении соответствующих процессов. Здесь, однако, возникает существенная проблема, присущая многим математическим исследованиям. Часто удаётся теоретически вычислить некоторые предельные характеристики процесса, например асимптотики численностей частиц, но гораздо труднее оказывается

установить так называемые «переходные» характеристики. В связи с этим целью настоящей работы является попытка с помощью, может быть, достаточно простых и несовершенных в вычислительном плане подходов дать возможность представить, как выглядят реальные кривые распределения численностей частиц при «небольших» временах.

Отметим здесь одну трудность. Ниже будут приведены два описания ВСБ: первое из них более вероятностно-наглядное, но не дающее возможности детального теоретического исследования процессов, а второе — в терминах дифференциальных уравнений — более пригодное для теоретического анализа. Кажется бы, именно второе описание более пригодно и для численного моделирования. Однако это не так! Основная проблема здесь заключается в том, что мы имеем дело с ВСБ на бесконечной решётке, что и приводит к существенным трудностям теоретического плана по численному моделированию. Это вторая причина, по которой мы предпочли в данной работе использовать подход в духе «имитационного моделирования», основанный на простейшей реализации метода Монте-Карло.

В настоящее время существует значительное количество публикаций по моделированию стохастических процессов различных типов (см., например, [2, 9, 12, 14, 15, 18–20] и библиографию в этих работах). Отметим, что подавляющее большинство из них посвящено моделированию либо ветвящихся процессов, либо случайных блужданий; при этом работы, в которых одновременно имеет место как случайное блуждание, так и ветвление, встречаются значительно реже. Этим также может быть объяснена актуальность предлагаемой работы. Наиболее распространёнными, по-видимому, можно считать два подхода к моделированию: численное решение эволюционных уравнений, описывающих соответствующие стохастические процессы, и та или иная модификация традиционного метода Монте-Карло. В принципе, первый из этих методов позволяет точнее вычислить соответствующие характеристики, однако он требует более изощренного математического аппарата и вычислительных затрат. Моделирование, основанное на методе Монте-Карло, существенно проще в реализации, хотя и обладает тем недостатком, что достаточно медленно сходится. В настоящей работе мы предпочли развить для наших целей одну из модификаций метода Монте-Карло, детальное описание которой приводится в разделе 3. Там же даны примеры моделирования ВСБ и проводится их обсуждение.

2. Описание модели

Начнём с неформального описания ВСБ на \mathbf{Z}^d , $d \geq 1$. В начальный момент времени $t = 0$ на решётке находится одна частица. Частица совершает случайное блуждание с непрерывным временем на \mathbf{Z}^d , пока не достигнет какого-либо источника. В источнике частица проводит случайное время, распределённое по экспоненциальному закону, после этого либо переходит в другой узел целочисленной решётки, либо погибает, либо оставляет n потомков, где n — случайная

величина, $n > 1$. Без ограничения общности будем считать, что, совершая переход в другой узел решётки, частица погибает и одновременно с этим рождается частица в другом узле. Новые частицы эволюционируют независимо друг от друга и от всей предыстории.

Нас интересует описание поведения частиц на \mathbf{Z}^d в терминах численностей частиц $n(t, x, y)$ в произвольной точке $y \in \mathbf{Z}^d$, а также общего числа частиц на решётке $n(t, x) = \sum_{y \in \mathbf{Z}^d} n(t, x, y)$ на решётке и их моментов: $m_k(t, x, y) = \mathbb{E}_x n^k(t, x, y)$ и $m_k(t, x) = \mathbb{E}_x n^k(t, x)$, где \mathbb{E}_x обозначает математическое ожидание при условии $n(0, x, y) = \delta_y(x)$ и $n(0, x) \equiv 1$ соответственно.

Асимптотическое поведение ВСБ с одним источником было исследовано многими авторами (см. детали в [4, 8, 21]). В данной работе нас интересует моделирование более общего случая ВСБ с конечным числом источников ветвления различных типов: источниками ветвления в точках $\{z_1, \dots, z_r\}$, с псевдоисточниками в точках $\{y_1, \dots, y_m\}$, где может нарушаться симметрия блуждания, но не происходит ветвления, и, наконец, с несколькими точками $\{x_1, \dots, x_k\}$, в которых происходит процесс ветвления и нарушается симметрия блуждания (см. [6, 22]). Точки $\{x_i\}$, $\{y_j\}$ и $\{z_s\}$ предполагаются попарно различными.

Поведение частицы в такой модели ВСБ определяется следующими четырьмя правилами.

1. Находясь в точке x вне источников $\{x_i\} \cup \{y_j\} \cup \{z_s\}$ частица совершает случайное блуждание, определяемое матрицей $A = (a(x, y))_{x, y \in \mathbf{Z}^d}$ переходных вероятностей: $a(x, y) \geq 0$ для $x \neq y$, $a(x, x) < 0$; $a(x, y) = a(y, x) = a(0, y - x) = a(y - x)$;

$$\sigma^2 = -\frac{1}{a(0, 0)} \sum_{x \in \mathbf{Z}^d} |x|^2 a(0, x) < \infty$$

(где $|\cdot|$ есть евклидова норма вектора) и $\sum_z a(0, z) = 0$. Таким образом, в этом случае частица находится в узле x некоторое случайное экспоненциально распределённое время с параметром $|a(0, 0)|$, затем совершает прыжок в точку $y \neq x$ с вероятностью $a(x, y)/|a(0, 0)|$.

2. В точке $x = y_j \in \{y_j\}$ частица также осуществляет случайное блуждание, однако симметричность блуждания нарушается изменением матрицы переходных вероятностей A домножением каждой её y_j -й строки, где $j = 1, 2, \dots, m$, на множитель $1 + \chi_j$, $\chi_j > -1$ при всех j , что меняет y_j -ю строчку $\{a(y_j, y)\}_{y \in \mathbf{Z}^d}$ матрицы A следующим образом: $\{(1 + \chi_j)a(y_j, y)\}_{y \in \mathbf{Z}^d}$.

В этом случае время, проведённое частицей в точке $x = y_j$, имеет экспоненциальное распределение с параметром $(1 + \chi_j)|a(0, 0)|$, после частица переходит в точку $y \neq y_j$ с вероятностью $a(y_j, y)/|a(0, 0)|$. Нетрудно видеть, что этот случай отличается от случая 1 только законом распределения времени, которое частица проводит в точке $x = y_j$. Так как в этом случае поведение частицы в точке $x = y_j$ не подчиняется законам симметричного случайного блуждания, точки $x \in \{y_j\}$ в [6, 22] называются *псевдоисточниками*.

3. В точке $x = z_s \in \{z_s\}$ частица может совершать симметричное случайное блуждание или ветвление, являющееся процессом Гальтона—Ватсона с инфинитезимальной производящей функцией $f_s(u) := \sum_{n=0}^{\infty} b_{s,n} u^n$, где $b_{s,n} \geq 0$ для $n \neq 1$, $b_{s,1} < 0$ и $\sum_n b_{s,n} = 0$. Полагаем $\beta_{s,r} := f_s^{(r)}(1) < \infty$, $r \in \mathbf{N}$, и обозначаем $\beta_s := \beta_{s,1}$.

В этом случае поведение частицы описывается следующим образом: частица находится в точке x случайное экспоненциально распределённое время с параметром $|a(0,0) + b_{s,1}|$, после чего либо переходит в точку $y \neq x$ с вероятностью $a(x,y)/|a(0,0) + b_{s,1}|$, либо оставляет $n \neq 1$ потомков с вероятностью $b_{s,n}/|a(0,0) + b_{s,1}|$. Заметим, в случае $n = 0$ частица не оставляет потомков и «погибает».

4. Последний случай, когда частица находится в точке $x = x_i \in \{x_i\}$, является комбинацией двух предыдущих случаев.

Частица может прыгнуть в точку $y \neq x$ с интенсивностью, домноженной на $1 + \zeta_i$ с $\zeta_i > -1$, как в случае 2, либо оставить потомков, как в случае 3. Ветвление является процессом Гальтона—Ватсона с инфинитезимальной производящей функцией

$$\bar{f}_i(u) := \sum_{n=0}^{\infty} \bar{b}_{i,n} u^n,$$

где $\bar{b}_{i,n} \geq 0$ для $n \neq 1$, $\bar{b}_{i,1} < 0$ и $\sum_n \bar{b}_{i,n} = 0$. Считаем $\eta_{i,r} := \bar{f}_i^{(r)}(1) < \infty$, $r \in \mathbf{N}$, и обозначаем $\eta_i := \eta_{i,1}$.

Таким образом, частица проводит в точке $x = x_i$ экспоненциально распределённое время с параметром $|(1 + \zeta_i)a(0,0) + \bar{b}_{i,1}|$, затем либо переходит в точку $y \neq x_i$ с вероятностью

$$\frac{(1 + \zeta_i)a(x_i, y)}{|(1 + \zeta_i)a(0,0) + \bar{b}_{i,1}|},$$

либо оставляет $n \neq 1$ потомков с вероятностью

$$\frac{\bar{b}_{i,n}}{|(1 + \zeta_i)a(0,0) + \bar{b}_{i,1}|}.$$

Описание ВСБ с несколькими источниками и псевдоисточниками, данное выше, удобно для численного моделирования, в то время как для теоретического исследования процесса предпочтительнее следующее «инфинитезимальное» описание в терминах эволюции уравнений в банаховом пространстве.

Как было показано, например, в [6, 22], эволюция переходных вероятностей в этом случае может быть описана следующими дифференциальными уравнениями:

$$\frac{dp}{dt} = Ap + \sum_{i=1}^k \zeta_i \Delta_{x_i} Ap + \sum_{j=1}^m \chi_j \Delta_{y_j} Ap, \quad p(0) = \delta_y, \quad (1)$$

где $\mathcal{A}: l^q(\mathbf{Z}^d) \rightarrow l^q(\mathbf{Z}^d)$, $q \in [1, \infty]$, — симметричный оператор, порождённый матрицей A переходных интенсивностей и действующий по формуле

$$(\mathcal{A}u)(z) := \sum_{z' \in \mathbf{Z}^d} a(z - z')u(z'),$$

$\Delta_x = \delta_x \delta_x^\top$, $\delta_x = \delta_x(\cdot)$, обозначает вектор-столбец на решётке, равный 1 в точке x и 0 в остальных точках. При этом среднее число частиц $m_1(t) = m_1(t, \cdot, y)$ в точке $y \in \mathbf{Z}^d$ удовлетворяет уравнениям

$$\frac{dm_1}{dt} = \mathcal{H}m_1, \quad m_1(0) = \delta_y, \quad (2)$$

где

$$\mathcal{H} = \mathcal{A} + \left(\sum_{s=1}^r \beta_s \Delta_{z_s} \right) + \left(\sum_{i=1}^k \zeta_i \Delta_{x_i} \mathcal{A} + \sum_{i=1}^k \eta_i \Delta_{x_i} \right) + \left(\sum_{j=1}^m \chi_j \Delta_{y_j} \mathcal{A} \right). \quad (3)$$

В уравнениях (2), (3) линейный оператор \mathcal{A} описывает симметричное блуждание вне источников (случай 1, описанный выше). Второе слагаемое в (3) соответствует источнику ветвления, где сохраняется симметрия блуждания (случай 2, описанный выше), а третье слагаемое соответствует источнику ветвления с нарушением симметричности блуждания (случай 3, описанный выше). Наконец, четвёртое слагаемое соответствует узлам (псевдоисточникам), где нарушается симметрия блуждания, но нет ветвления (случай 3, описанный выше).

Асимптотическое поведение решения уравнения (2) определяется спектром линейного оператора в правой части соответствующих уравнений [1]. Подробный спектральный анализ оператора \mathcal{H} проведён в [6, 22].

Существование старшего положительного собственного значения в спектре эволюционного оператора влечёт экспоненциальный рост размера популяции частиц как в произвольной точке, так и на всей решётке. В этом случае ВСБ называют надкритическим. В связи с этим в предыдущих работах для надкритических ВСБ обычно ограничивались нахождением только старшего собственного значения, определяющего экспоненциальный рост. В то же время, как отмечено, например, в [3], при пространственно-временном анализе ВСБ существенную роль играет информация о единственности или неединственности положительного собственного значения оператора \mathcal{H} , а также о его расположении относительно других собственных значений. В связи с этим в [7, 23] был исследован спектр оператора \mathcal{H} и установлено, что число его положительных собственных значений и их кратность зависят не только от интенсивности, но и от пространственной конфигурации источников.

В модели симметричного ВСБ с конечным числом источников одинаковой интенсивности $\beta := \beta_1$, изученной в [7, 23], оператор \mathcal{H} принимает вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\beta := \mathcal{A} + \beta \sum_{i=1}^N \Delta_{x_i}, \quad (4)$$

где $x_i \in \mathbf{Z}^d$. Наличие «возмущающего» слагаемого $\beta \sum_{i=1}^N \Delta_{x_i}$ в (4) может привести к появлению положительных собственных значений оператора \mathcal{H}_β , число которых с учётом кратности не превосходит N (количество слагаемых в сумме).

Как показано, например, в [4, 8], эволюция величин $m_1(t, x, y)$ и $m_1(t, x)$ симметричного ВСБ с одним источником ветвления, порождённого оператором (4) в форме

$$\mathcal{H}_\beta = \mathcal{A} + \beta \Delta_{x_1}, \quad (5)$$

качественно меняется, когда параметр β превосходит некоторое критическое значение β_c , где

$$\phi(\theta) = \sum_{x \in \mathbf{Z}^d} a(x, 0) e^{i(x, \theta)}, \quad \theta \in [-\pi, \pi]^d, \quad (6)$$

$$G_\lambda(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[-\pi, \pi]^d} \frac{e^{i(\theta, y-x)}}{\lambda - \phi(\theta)} d\theta, \quad (7)$$

$$\beta_c = (G_0(0, 0))^{-1}. \quad (8)$$

В случае конечной дисперсии прыжков случайного блуждания, т. е. если

$$\sum_{z \in \mathbf{Z}^d} a(z) |z|^2 < \infty,$$

где $|\cdot|$ — евклидова норма вектора z , имеют место соотношения $\beta_c = 0$ для $d = 1$ и $d = 2$ и $\beta_c > 0$ для $d \geq 3$. Исчерпывающая классификация предельного поведения с точностью до числового множителя средней численности частицы в источнике $u(t)$ и среднего общего числа частиц $v(t)$ представлена в табл. 1, где λ — положительное собственное значение оператора (5).

Таблица 1. Предельное поведение по t при $t \rightarrow \infty$ математических ожиданий численности частиц в источнике и общего числа частиц на решётке для случая одного источника

Ветвящийся процесс в источнике	Случайное блуждание	Ветвящееся случайное блуждание	$u(t)$	$v(t)$
надкритический $\beta > 0$	возвратное $d = 1, 2, \beta_c = 0$	надкритическое $\beta > \beta_c$	$e^{\lambda t}$	$e^{\lambda t}$
надкритический $\beta > 0$	невозвратное $d \geq 3, \beta_c > 0$	надкритическое $\beta > \beta_c$	$e^{\lambda t}$	$e^{\lambda t}$
надкритический $\beta > 0$	невозвратное $d = 3, \beta_c > 0$	критическое $\beta = \beta_c$	$1/\sqrt{t}$	\sqrt{t}
надкритический $\beta > 0$	невозвратное $d = 4, \beta_c > 0$	критическое $\beta = \beta_c$	$1/\ln t$	$t/\ln t$
надкритический $\beta > 0$	невозвратное $d \geq 5, \beta_c > 0$	критическое $\beta = \beta_c$	1	t
надкритический $\beta > 0$	невозвратное $d \geq 3, \beta_c > 0$	докритическое $\beta_c > \beta > 0$	$t^{-d/2}$	1
критический $\beta = 0$	возвратное $d = 1, \beta_c = 0$	критическое $\beta = \beta_c$	$1/\sqrt{t}$	1
критический $\beta = 0$	возвратное $d = 2, \beta_c = 0$	критическое $\beta = \beta_c$	$1/t$	1
критический $\beta = 0$	невозвратное $d \geq 3, \beta_c > 0$	докритическое $\beta_c > \beta = 0$	$t^{-d/2}$	1
докритический $\beta < 0$	возвратное $d = 1, \beta_c = 0$	докритическое $\beta < \beta_c$	$t^{-3/2}$	$1/\sqrt{t}$
докритический $\beta < 0$	возвратное $d = 2, \beta_c = 0$	докритическое $\beta < \beta_c$	$(t \ln^2 t)^{-1}$	$1/\ln t$
докритический $\beta < 0$	невозвратное $d \geq 3, \beta_c > 0$	докритическое $\beta < \beta_c$	$t^{-d/2}$	1

Заметим, что в случае простого симметричного случайного блуждания оператор \mathcal{A} имеет форму лапласиана: $\kappa\Delta$ с параметром диффузии κ (см., например, [3]).

3. Описание алгоритма

Описание модели ВСБ, приведённое в правилах 1–4 раздела 2, удобно для построения алгоритма, моделирующего случайный процесс.

3.1. Алгоритм

Назовём состоянием системы ВСБ множество троек (x, t_1, t_2) , каждая из которых соответствует частице, находящейся в точке $x \in \mathbf{Z}^d$ на протяжении временного интервала $[t_1, t_2)$, рождающейся в точке x в момент t_1 и «эволюционирующей» в момент t_2 . Напомним, что мы считаем переход частицы в другой узел гибелью частицы в точке и рождением новой частицы в другой точке. Под «эволюцией» мы имеем ввиду прыжок в другую точку, ветвление или смерть частицы. В процессе моделирования переход из одного состояния системы ВСБ в другое будет осуществляться исключением одной тройки из множества состояний системы и добавлением к множеству состояний одной или нескольких троек, соответствующих результату смоделированной эволюции частицы.

Инициализация. Сначала задаём характеристики моделируемого ВСБ: выбираем размерность целочисленной решётки, конечное число точек $\{x_i\}_{i=1}^k$, $\{y_j\}_{j=1}^m$ и $\{z_s\}_{s=1}^r$ и задаём все значения или функции, определяющие матрицу переходных вероятностей A , инфинитезимальные производящие функции $f_s(u)$, $s = 1, 2, \dots, r$, и $\bar{f}_i(u)$, $i = 1, 2, \dots, k$, а также значения $\chi_j > -1$, $\zeta_i > -1$, характеризующие источники (см. правила 1–4 раздела 2).

Затем задаём длину моделируемого промежутка времени $[0, T_{\max}]$ и начальную координату x , выбирая начальным состоянием системы множество, состоящее из одной тройки $(x, 0, 0)$ (без ограничения общности начальное время будем считать нулевым: $t_0 = 0$).

Проверка принадлежности узла решётки к множествам $\{x_i\}$, $\{y_j\}$, $\{z_s\}$ и хранение самих элементов множеств может осуществляться несколькими способами. Например, можно хранить все элементы множеств $\{x_i\}$, $\{y_j\}$, $\{z_s\}$ явно, проверяя их принадлежность требуемому множеству полным перебором по всем элементам. Такой подход удобен, когда эти множества малы, и подходит для ВСБ с конечным числом источников. Также допустимо задавать координаты точек множеств функционально. Таким образом допустимо моделировать ВСБ с бесконечным числом источников. В дальнейшем описании алгоритма мы не будем уточнять, каким образом осуществляется проверка.

ШАГ АЛГОРИТМА. Мы имеем множество троек (x, t_1, t_2) , ожидающих обработки. Выбирается любая (из-за независимости частиц) тройка $X = (x, t_1, t_2)$ и

моделируется «эволюция» соответствующей частицы в момент $t = t_2$ по правилам 1—4, определяемым типом точки x . Тройки, соответствующие новым частицам, появившимся в результате прыжка частицы в точку $y \neq x$, или множество потомков в источнике x добавляются в множество ожидающих обработки троек, а тройка $X = (x, t_1, t_2)$ удаляется из этого множества, и система ВСБ переходит в новое состояние. При этом вся требуемая информации о новых частицах сохраняется для дальнейшей обработки.

Для каждой новой частицы в точке x_{new} вычисляем время эволюции новой частицы $t_{2,\text{new}}$ согласно соответствующему закону распределения времени (см. правила 1—4) и получаем тройку $(x_{\text{new}}, t_{1,\text{new}}, t_{2,\text{new}})$, где $t_{1,\text{new}} = t_2$.

УСЛОВИЕ ОСТАНОВКИ. Алгоритм завершает работу, когда все значения t_1 всех троек в системе превосходят заданное время T_{max} или когда система пуста (процесс выродился).

ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ. После некоторого достаточного числа запусков (определяемого из статистических соображений) моделирующей программы с одинаковыми параметрами ВСБ, применяя метод Монте-Карло, обрабатываем собранную информацию. После этого можно моделировать ВСБ со скорректированными параметрами.

3.2. Реализация алгоритма

Предлагаемый нами алгоритм, блок-схема которого представлена на рис. 1, естественным образом рандомизирован, так как его поведение определяется входными характеристиками ВСБ и значениями, полученными с помощью генераторов случайных чисел. Для алгоритма используются генераторы случайных чисел двух типов:

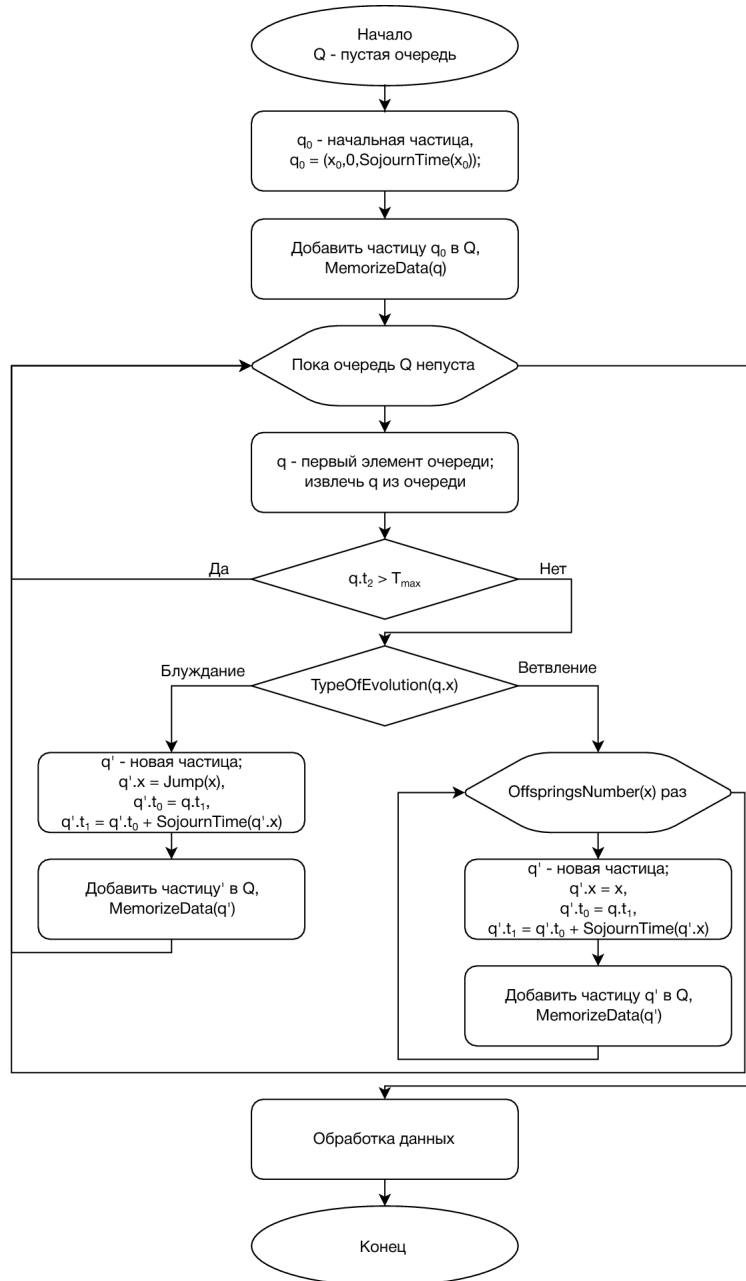
- генератор $\text{Exp}(a)$ псевдослучайных величин, распределённых по экспоненциальному закону с параметром a ;
- генератор $\text{Discr}(\{(a_1, w_1), \dots, (a_n, w_n)\})$, $w_i \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, возвращающий значение a_i с вероятностью $P(a_i) = \frac{w_i}{\sum_{k=1}^n w_k}$.

Для того чтобы моделируемые при разных запусках программы процессы различались, необходимо инициализировать датчики случайных чисел различными числами, например текущим временем.

В рассматриваемой модели частица может осуществлять блуждание или ветвление, поэтому обработку эволюции разделяем на два этапа: выбор типа эволюции и моделирование выбранного действия. Поведение функций, симулирующих эти этапы, зависит от того, принадлежит ли точка x одному из множеств $\{x_i\}$, $\{y_j\}$, $\{z_s\}$ или не принадлежит ни одному из них.

Функция $\text{TypeOfEvolution}(x)$ определяет тип эволюции частицы (блуждание или ветвление) согласно правилам 1—4 из раздела 2:

- $\text{Discr}\left(\left\{\left(\text{блуждание}, \frac{a(x,y)}{|a(0,0)+b_{s,1}|}\right), \left(\text{ветвление}, \frac{|b_{s,1}|}{|a(0,0)+b_{s,1}|}\right)\right\}\right)$
в случае $x = z_s \in \{z_s\}$;

Рис. 1. Блок-схема основного цикла моделирования ВСБ на временном промежутке $[0, T_{\max}]$

- $Discr\left(\left\{\left(\text{блуждание}, \frac{(1+\zeta_i)a(x_i, y)}{|(1+\zeta_i)a(0,0)+\bar{b}_{i,1}}\right), \left(\text{ветвление}, \frac{|\bar{b}_{i,1}|}{|(1+\zeta_i)a(0,0)+\bar{b}_{i,1}}\right)\right\}\right)$
в случае $x = x_i \in \{x_i\}$;
- блуждание в остальных случаях.

Вероятность, с которой частица совершает прыжок из точки x в точку y (в случае прыжка), равна $a(x, y)/|a(0, 0)| = a(0, y - x)/|a(0, 0)|$ для всех точек решётки, поэтому функция $Jump(x)$ реализуется соответствующим генератором случайных чисел с дискретным распределением

$$Discr\left(\left\{\left(x + y, \frac{a(0, y)}{|a(0, 0)|}\right) \mid y \in \mathbf{Z}^d, y \neq 0\right\}\right).$$

В случае ветвления функция $OffspringsNumber(x)$, определяющая число потомков, возвращает результат работы генератора случайных чисел с дискретным распределением

- $Discr(\{(n, b_{s,n}) \mid n \neq 1\})$ в случае $x = z_s \in \{z_s\}$;
- $Discr(\{(n, \bar{b}_{i,n}) \mid n \neq 1\})$ в случае $x = x_i \in \{x_i\}$.

Для любой тройки (x, t_1, t_2) момент следующей эволюции t_2 получается суммированием t_1 и времени $SojournTime(x)$, которое частица существует в точке x без изменений. Функция $SojournTime(x)$ реализуется генераторами случайных чисел

- $Exp((1 + \chi_j)|a(0, 0)|)$ в случае $x = y_j \in \{y_j\}$;
- $Exp(|a(0, 0) + b_{s,1}|)$ в случае $x = z_s \in \{z_s\}$;
- $Exp(|(1 + \zeta_i)a(0, 0) + \bar{b}_{i,1}|)$ в случае $x = x_i \in \{x_i\}$.

Функция $MemorizeData(q)$ запоминает все изменения состояние системы (время рождение и гибели частицы и её координату), требуемые для последующего анализа данных (например, для вычисления численности частицы в источнике и общей численности частиц во времени). Для получения статистически значимых данных алгоритм моделирования ВСБ должен вызываться $IterationNumber$ число раз, где значение $IterationNumber$ выбирается из статистических соображений. Для удобства применения предлагается разделить интервал $[0; T_{\max}]$ на K равных меньших интервалов и хранить не точное время t , а порядковый номер отрезка, содержащего t .

Для реализации состояния системы $Q = \{q = (x, t_1, t_2)\}$ удобно использовать структуру *очередь* (см., например, [11]), так как она поддерживает следующие операции: добавление элемента, выборку одного элемента из множества и изъятие его. В начальный момент система состоит из одной частицы, расположенной в узле $x \in \mathbf{Z}^d$.

3.3. Примеры результатов моделирования ВСБ

В этом разделе приведены результаты предложенного алгоритма для моделей с одним источником, с тремя источниками одинаковой интенсивности,

Таблица 2. Инфинитезимальные производящие функции для моделирования

d	β_c	докритический случай, $\beta < \beta_c$	критический случай, $\beta = \beta_c$	надкритический случай, $\beta > \beta_c$
$d = 1, 2$	$\beta_c = 0$	$f(u) = 2 - 3u + u^2,$ $\beta = -1$	$f(u) = 1 - 2u + u^2,$ $\beta = 0$	$f(u) = 1 - 3u + 2u^2,$ $\beta = 1$
$d = 3$	$\beta_c \sim 1,978388$	$f(u) = 1 - 3,9u + 2,9u^2,$ $\beta = 1,9$	$f(u) = 1 - 3,978u + 2,978u^2,$ $\beta = 1,978$	$f(u) = 1 - 4,1u + 3,1u^2,$ $\beta = 2,1$
$d = 4$	$\beta_c \sim 3,227193$	$f(u) = 1 - 5u + 4u^2,$ $\beta = 3$	$f(u) = 1 - 5,227u + 4,227u^2,$ $\beta = 3,227$	$f(u) = 1 - 5,3u + 4,3u^2,$ $\beta = 3,3$
$d = 5$	$\beta_c \sim 4,324107$	$f(u) = 1 - 6u + 5u^2,$ $\beta = 4$	$f(u) = 1 - 6,324u + 5,324u^2,$ $\beta = 4,324$	$f(u) = 1 - 6,5u + 5,5u^2,$ $\beta = 4,5$

расположенными в вершинах симплекса, и описан способ численной оценки порогового значения β_c . В каждом рассматриваемом примере моделирования ВСБ приведены графики математического ожидания популяции частиц и среднего числа частиц в источниках, полученных моделированием и усреднённых согласно методу Монте-Карло. Число итераций в приведённых примерах равно 1000.

Мы проводим моделирование случайного симметричного случайного блуждания, поскольку этот случай имеет особую важность для прикладных исследований (см., например, [13, 17, 24]). Элементы матрицы переходных вероятностей A в этом случае имеют вид $a(x, y) = 1/2$ для $|x - y| = 1$, $a(x, x) = -d$ и $a(x, y) = 0$, в остальных случаях матрица A порождается лапласианом в форме $\kappa\Delta$, $\kappa = 1/2$. Моделирование произвольного блуждания (в том числе асимметричного) также возможно, но более трудоёмко.

Как отмечалось выше, случай симметричного блуждания с одним источником детально изучен в [4]; в табл. 1 приведено асимптотическое поведение по времени математического ожидания средних численностей частиц в источнике ветвления и на всей решётке в зависимости от свойств ветвления и блуждания. Мы промоделировали все случаи поведения ВСБ, чтобы увидеть, как предельные результаты связаны с поведением ВСБ на конечном интервале. Без ограничения общности предполагалось, что источник ветвления находится в начале координат. Описание матрицы переходных вероятностей A приведено выше, $T_{\max} = 1000$. Явный вид инфинитезимальных производящих функций, задающих процесс ветвления в источнике, использованный нами при моделировании, приведён в табл. 2.

На рис. 2–6 видно, что в надкритическом случае как средняя численность популяции частиц, так и среднее число частиц в источнике быстро выходит на экспоненциальный уровень. Такие ВСБ сложно моделировать на больших временных интервалах предложенным методом из-за экспоненциального роста количества частиц в состоянии системы со временем.

В случае когда асимптотика среднего числа частиц описывается убывающей на бесконечности функцией, все частицы моделируемого процесса погибают и среднее число частиц в данной реализации становится тождественно равно ну-

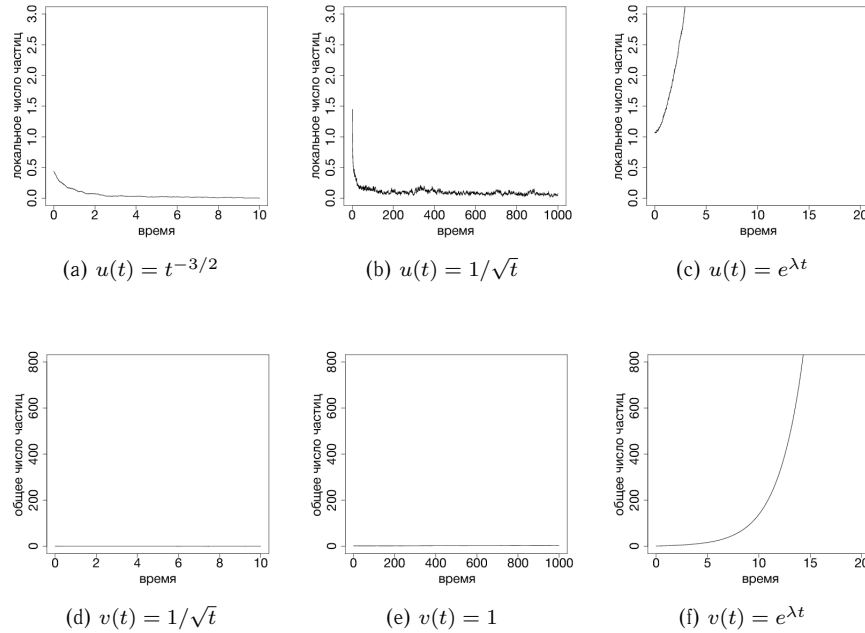


Рис. 2. Численность частиц в источнике и общее число частиц для ВСБ на \mathbf{Z} с одним источником и различными значениями β

лю. На полученных графиках (напомним, число итераций было выбрано равным 1000) сложно различить скорость гибели частиц в таких процессах. Это связано с тем, что в каждый момент времени число частиц в каждом процессе есть целое неотрицательное число и процессы быстро вырождаются. Чтобы получить более показательные графики, число реализаций должно быть значительно больше.

Графики со средним общего числа частиц более гладкие по сравнению с графиками среднего числа частиц в источнике из-за масштаба: в первом случае по оси с численностью частиц отложено значение 800 частиц против 3 частиц во втором случае.

Из рис. 4 (е), рис. 5 (е) и рис. 6 (е) видно, что полученные нами графики математического ожидания общего числа частиц в критическом случае не соответствуют асимптотическим законам. Нам не удалось подобрать константы так, чтобы «поймать» критический случай, вопрос о реализуемости критического случая можно рассматривать отдельно.

Для целочисленной решётки размерности $d = 4$ имеется асимптотическая оценка математического ожидания общей численности частиц $v(t) = 1/\ln t$, однако мы наблюдаем близкое к постоянному математическое ожидание общего

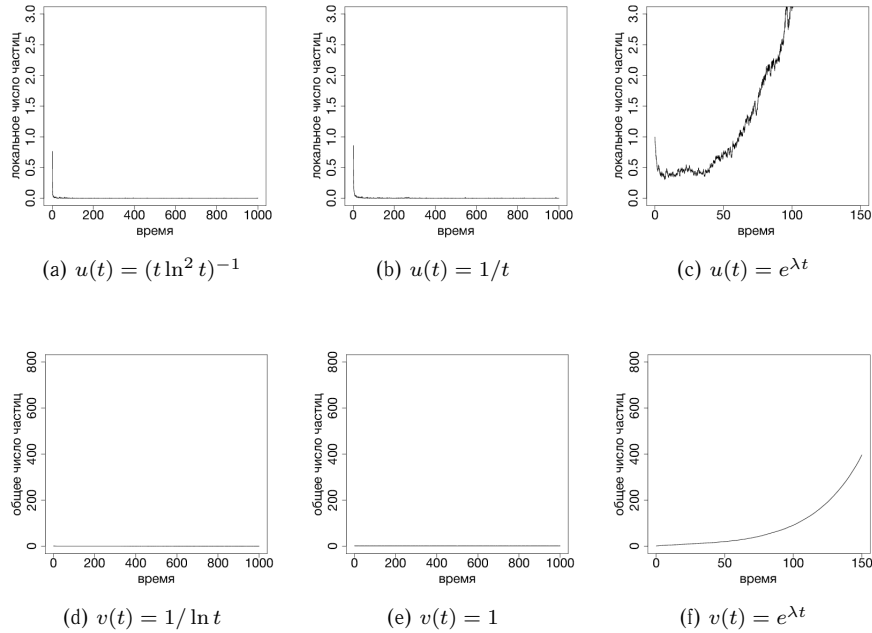


Рис. 3. Численность частиц в источнике и общее число частиц для ВСБ на \mathbf{Z}^2 с одним источником и различными значениями β

числа частиц (см. график на рис. 5 (е)) и отсутствие частиц в источнике (см. график на рис. 5 (б)), т. е. с какого-то момента все выжившие частицы ушли далеко от источника и почти наверное не вернуться (невозвратное блуждание).

Оценить асимптотическое поведение в докритическом и критическом случае визуально труднее, чем в надкритическом. Тем не менее можно сказать, что асимптотическое поведение достигается на конечных интервалах.

Случай симплицальной конфигурации источников равной интенсивности, т. е. когда несколько источников ветвления находятся в вершинах правильного симплекса, интересен тем, что все собственные значения оператора \mathcal{H} оказываются равными (см. [7]).

Мы моделируем ВСБ на \mathbf{Z}^3 для случая трёх источников ветвления типа $\{z_s\}_{s=1}^r$, расположенных в вершинах двумерного симплекса (треугольника)

$$z_1 = (10, 0, 0), \quad z_2 = (0, 10, 0), \quad z_3 = (0, 0, 10).$$

Инфинитезимальные производящие функции $f_s(u)$, $s = 1, 2, 3$, для каждого источника одинаковы и имеют вид

$$f_s(u) = 0,4 - (0,4 + \beta + 0,2)u + \beta u^2 + 0,2u^3,$$

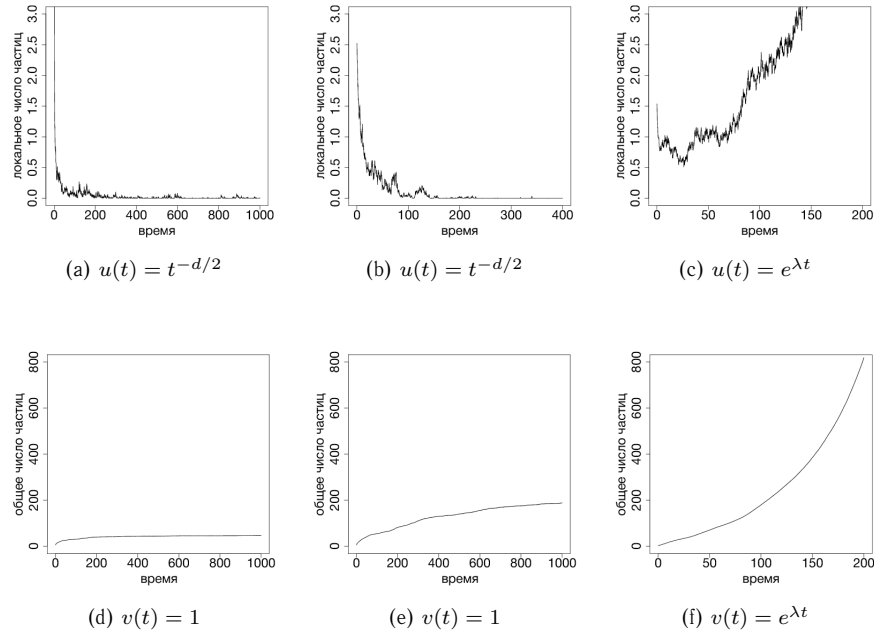


Рис. 4. Численность частиц в источнике и общее число частиц для ВСБ на \mathbf{Z}^3 с одним источником и различными значениями β

т. е. частица может умереть, не оставив потомков, либо оставить число потомков, равное двум или трём. Матрица переходных вероятностей A была описана выше, $T_{\max} = 1000$. Результаты моделирования представлены графиком функции $m_1(t, z_1)$ на рис. 7 (а) и графиками $m_1(t, z_1, z_1)$, $m_1(t, z_1, z_2)$ и $m_1(t, z_1, z_3)$ соответственно на рис. 7 (б).

Также мы смоделировали систему, аналогичную предыдущей и отличающуюся только расположением источников

$$z_1 = (100, 0, 0), \quad z_2 = (0, 100, 0), \quad z_3 = (0, 0, 100),$$

с тем чтобы сравнить поведение этих двух систем.

Графики на рис. 7 и 8 показывают, что увеличение расстояния между вершинами симплекса ведёт к убыванию скорости роста общего числа частиц и численности частицы в источнике. На рис. 8 можно увидеть, что поведение числа частиц в одном из источников идентично поведению числа частиц в одном источнике той же интенсивности на рис. 4 (b), (e) (случай одного источника), в то время как в оставшихся двух источников число частиц тождественно равно нулю. Этот эффект объясняется невозвратностью случайного блуждания на \mathbf{Z}^d ,

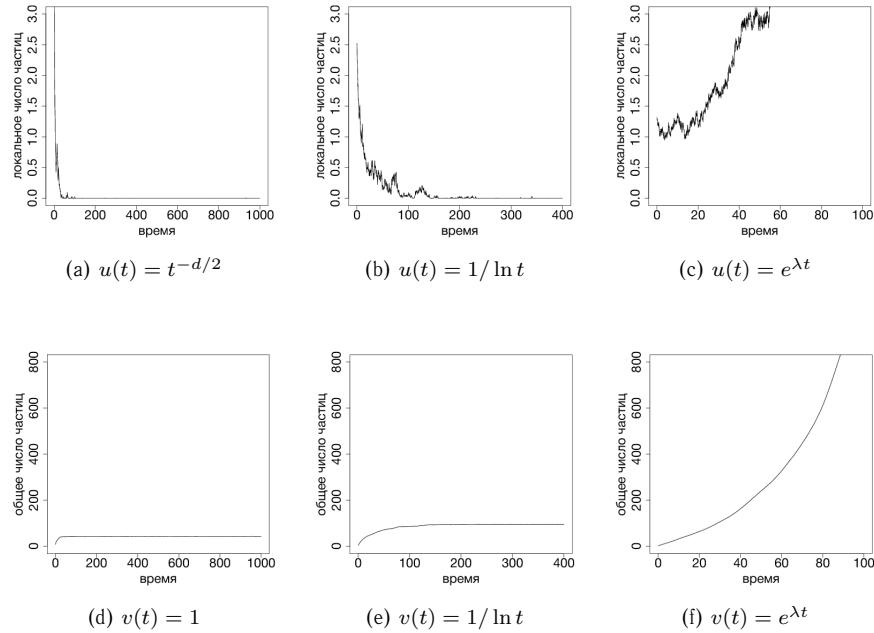


Рис. 5. Численность частиц в источнике и общее число частиц для ВСБ на \mathbf{Z}^4 с одним источником и различными значениями β

$d \geq 3$, и тем фактом, что за конечное время частицы не достигают далеко расположенных узлов с источниками. Поведение среднего размера популяции частиц определяется интенсивностями источников, до которых частицы могут прийти за заданное время.

Таким образом, в случае когда расстояние между вершинами симплекса велико, поведение данной системы на конечном интервале времени идентично поведению системы с одним источником с такой же инфинитезимальной производящей функцией, представленной на рис. 4 (b), (e). Из рис. 8 видно, что ВСБ не достигает никаких источников, кроме начальной точки, и система может считаться системой с одним источником.

3.4. Оценка порогового параметра модели с источниками равной интенсивности

Поведение ВСБ с источниками равной интенсивности β зависит от величины этой интенсивности β . В [5] показано, что при $\beta > \beta_c$ ВСБ с одним источником является надкритическим, и доказано экспоненциальное предельное поведение локальной численности частиц в источнике и общей численности частиц. В

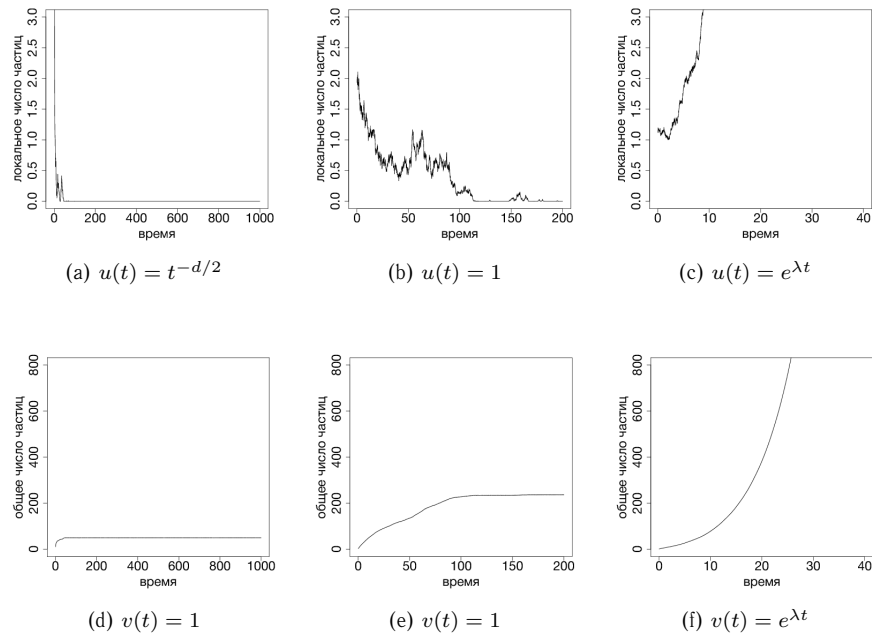


Рис. 6. Численность частиц в источнике и общее число частиц для ВСБ на \mathbf{Z}^5 с одним источником и различными значениями β

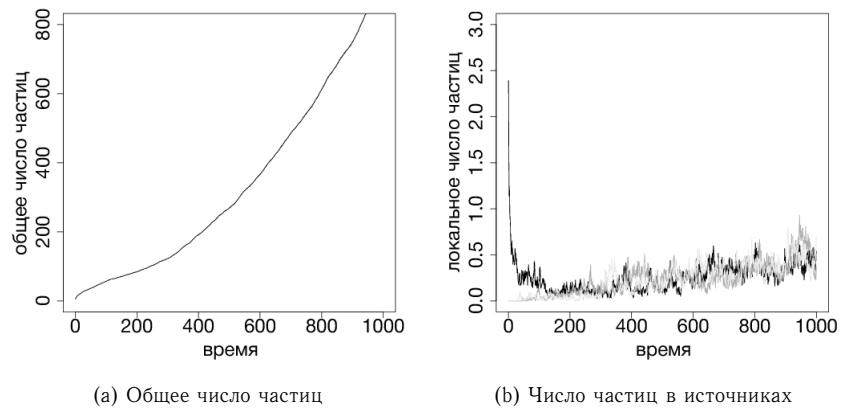


Рис. 7. ВСБ на \mathbf{Z}^3 с источниками интенсивности 1,978 в точках $(10, 0, 0)$, $(0, 10, 0)$, $(0, 0, 10)$

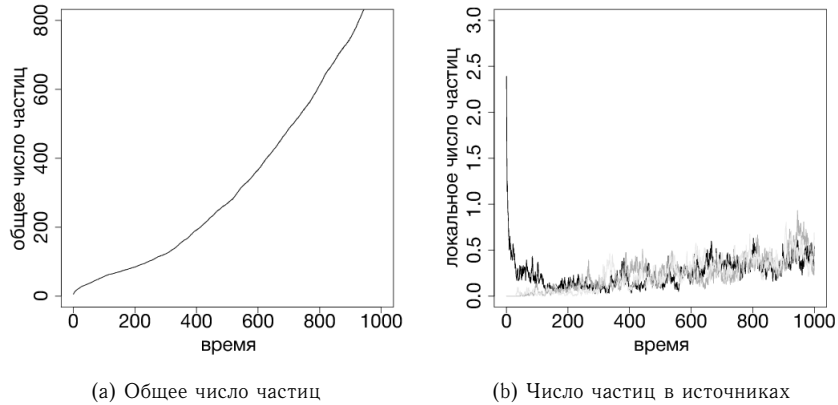


Рис. 8. ВСБ на \mathbf{Z}^3 с источниками интенсивности 1,978 в точках $(100, 0, 0)$, $(0, 100, 0)$, $(0, 0, 100)$

[23] обсуждается аналогичное поведение для ВСБ с несколькими источниками равной интенсивности.

Для ВСБ с одним источником значение β_c может быть вычислено явно численными методами по формулам (6)–(8). При больших размерностях d вычисление значения β_c таким способом затруднено.

Как видно из графиков, описанных выше, при значении β , достаточно близком к β_c , происходит качественное изменение поведения ВСБ в надкритическом случае, которое легко отличить от докритического или критического. Будем считать, что при $\beta > \beta_c$ моделируемое ВСБ показывает экспоненциальный рост средних численностей общего числа частиц и не показывает его при $\beta < \beta_c$. Это позволяет оценивать значение β_c при помощи моделирования, используя метод двоичного (бинарного) поиска (см., например, [11]).

Для двоичного поиска необходимо задать границы интервала $[L, R]$, которому принадлежит оцениваемая величина β_c . Также необходимо уметь определять, является ли ветвящееся случайное блуждание с данной интенсивностью источников β надкритическим, т. е. процессом с экспоненциальным ростом общей численностей частиц, или же нет.

Заметим, что в моделируемых нами ВСБ выход на экспоненциальный уровень происходил на сравнительно небольших промежутках времени. Таким образом, визуально или численными методами мы можем определить, является ли ВСБ с параметром $M = (L + R)/2$ надкритическим. Для надкритического ВСБ продолжим поиск на интервале $[L, M]$; для ВСБ, которое не может быть отнесено к надкритическому, — на интервале $[M, R]$. Закончим поиск оценочного интервала, когда его длина $|R - L|$ будет меньше некоторого ε или когда для данного параметра M невозможно определить, является ли ВСБ надкритическим.

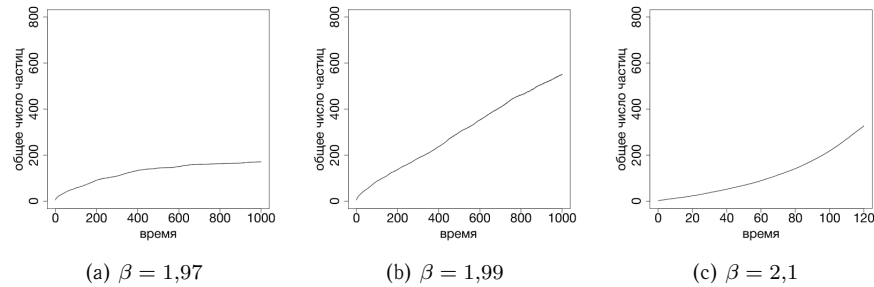


Рис. 9. Общая численность частиц для ВСБ на \mathbf{Z}^3 с одним источником и различными значениями β

На рис. 9 показаны графики средней численности части для ВСБ с одним источником на \mathbf{Z}^3 при $\beta = 1,97$, $\beta = 1,99$ и $\beta = 2,1$. Значение искомой величины $\beta_c \sim 1,978$ вычислено по формуле (8). Получена оценка $\beta_c \in [1,97, 2,01]$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-01-0468а).

Литература

- [1] Далецкий Ю. Л., Крейн М. Г. Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховом пространстве. — М.: Наука, 1970.
- [2] Зенюк Д. А. Моделирование случайных блужданий на регулярных фрактальных множествах // Матем. моделирование. — 2014. — Т. 26, № 11. — С. 101–104.
- [3] Молчанов С. А., Яровая Е. Б. Структура популяции внутри распространяющегося фронта ветвящегося случайного блуждания с конечным числом центров генерации частиц // Докл. РАН. — 2012. — Т. 447, № 3. — С. 265–268.
- [4] Яровая Е. Б. Ветвящиеся случайные блуждания в неоднородной среде. — М.: Центр прикл. исслед. при механико-математическом ф-те МГУ, 2007.
- [5] Яровая Е. Б. Критерии экспоненциального роста числа частиц в моделях ветвящихся случайных блужданий // Теория вероятн. и её примен. — 2010. — Т. 55, № 4. — С. 705–731.
- [6] Яровая Е. Б. Спектральные свойства эволюционных операторов в моделях ветвящихся блужданий с несколькими источниками ветвления // Матем. заметки. — 2012. — Т. 92, № 1. — С. 124–140.
- [7] Яровая Е. Б. Структура положительного дискретного спектра эволюционного оператора ветвящихся случайных блужданий // Докл. РАН. — 2015. — Т. 463, № 6. — С. 646–649.
- [8] Albeverio S., Bogachev L. V., Yarovaya E. B. Asymptotics of branching symmetric random walk on the lattice with a single source // C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math. — 1998. — Vol. 326, no. 8. — P. 975–980.

- [9] Andries E., Umarov S., Steinberg S. Monte Carlo random walk simulations based on distributed order differential equations with applications to cell biology // *Fract. Calc. Appl. Anal.* — 2006. — Vol. 9, no. 4. — P. 351–369.
- [10] Bramson M., Ney P., Tao J. The population composition of a multitype branching random walk // *Ann. Appl. Probab.* — 1992. — Vol. 2, no. 3. — P. 575–596.
- [11] Cormen T. H., Leiserson C. E., Rivest R. L., Stein C. *Introduction to Algorithms.* — Cambridge: MIT Press, 2009.
- [12] Daskalova N. EM algorithm for estimation of the offspring probabilities in some branching models // *Nonlinear Dynamics of Electronic Systems / V. M. Mladenov, P. Ch. Ivanov, eds.* — Cham: Springer, 2014. — P. 181–188.
- [13] J. Gärtner, S. A. Molchanov, “Parabolic problems for the Anderson model. I. Intermittency and related topics // *Comm. Math. Phys.* — 1990. — Vol. 132, no. 3. — P. 613–655.
- [14] Ho L. S. T., Xu J., Crawford F. W., Minin V. N., Suchard M. A. Birth/birth-death processes and their computable transition probabilities with biological applications // *J. Math. Biology.* — 2018. — Vol. 76, no. 4. — P. 911–944.
- [15] Kleinhans D., Friedrich R. Maximum likelihood estimation of drift and diffusion functions // *Phys. Lett. A.* — 2007. — Vol. 368, no. 3-4. — P. 194–198.
- [16] Kolomeisky A. B., Fisher M. E. Periodic sequential kinetic models with jumping, branching and deaths // *Phys. A.* — 2000. — Vol. 279, no. 1-4. — P. 1–20.
- [17] Molchanov S. Reaction-diffusion equations in the random media: localization and intermittency // *Nonlinear Stochastic PDEs / Funaki T., Woyczynski W. A., eds.* — New York: Springer, 1996. — (IMA Vol. Math. Its Appl., Vol. 77). — P. 81–109.
- [18] Moral P. D., Jasra A. Note on random walks with absorbing barriers and sequential Monte Carlo methods. — 2016. — <http://arxiv.org/abs/1611.03177>.
- [19] Murai F., Ribeiro B., Towsley D., Gile K. Characterizing branching processes from sampled data // *WWW '13 Companion Proc. of the 22nd Int. Conf. on World Wide Web.* — New York: ACM, 2013. — P. 805–812.
- [20] Tuerlinckx F., Maris E., Ratcliff R., De Boeck P. A comparison of four methods for simulating the diffusion process // *Behavior Res. Methods, Instruments, & Computers.* — 2001. — Vol. 33, no. 4. — P. 443–456.
- [21] Vatutin V. A., Topchiĭ V. A., Yarovaya E. B. Catalytic branching random walks and queueing systems with a random number of independent servers // *Teor. Ėmovir. Mat. Stat.* — 2003. — No. 69. — P. 1–15.
- [22] Yarovaya E. B. Branching random walks with several sources // *Math. Popul. Stud.* — 2013. — Vol. 20, no. 1. — P. 14–26.
- [23] Yarovaya E. B. Positive discrete spectrum of the evolutionary operator of supercritical branching walks with heavy tails // *Methodology Comput. Appl. Probab.* — 2016. — Vol. 19, no. 4. — P. 1151–1167.
- [24] Zeldovich Ya. B., Molchanov S. A., Ruzmaikin A. A., Sokoloff D. D. *Intermittency, Diffusion and Generation in a Nonstationary Random Medium.* — Cambridge: Cambridge Sci. Publ., 2014. — (Rev. Math. Math. Phys.; Vol. 15/1).