

УДК 519.6

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ НАПРАВЛЕНИЯ ПОЛЕТА ЧАСТИЦ. ФОРМУЛЫ Н. Н. ЧЕНЦОВА И ИХ ОБОБЩЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. Н. Субботин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Обосновывается применимость метода Монте-Карло к расчету поляризованного излучения. Доказывается, что векторное уравнение Чандрасекара для параметров Стокса поляризованного излучения представляет собой систему уравнений для четырех линейных функционалов от решения скалярного кинетического уравнения с расширенным фазовым пространством частиц и специальным видом интеграла столкновений. Согласование систем координат для отсчета параметров Стокса поляризованного излучения и моделирования нового направления полета частиц приводит к экономичным алгоритмам расчета задач переноса поляризованного излучения.

Введение

Достаточно изученной областью теории методов Монте-Карло является решение линейного кинетического уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)}{\partial t} + V\vec{\omega} \cdot \nabla n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) + V\Sigma(\vec{r}, V) n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) = \\ = \int V' \Sigma(\vec{r}, V') n(t, \vec{r}, \vec{\omega}', V') C(\vec{r}; \vec{\omega}', V' \rightarrow \vec{\omega}, V) d\vec{\omega}' dV' + n_0(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь используются следующие обозначения:

(\vec{r}, \vec{V}) — фазовые координаты частицы в пространстве $R^3 \times R^3$ — прямом произведении конфигурационного пространства и пространства скоростей;

$\vec{r} = \{x, y, z\}$ — точка конфигурационного пространства R^3 с координатами x, y, z ;

$\vec{V} = V \cdot \vec{\omega} = (\vec{\omega}, V)$ — скорость частицы в пространстве R^3 скоростей; V — модуль скорости частицы; $\vec{\omega}' = \{u', v', w'\}$ и $\vec{\omega} = \{u, v, w\}$ — единичные векторы направления полета частицы соответственно до и после рассеяния в точке \vec{r} ;

$n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) \geq 0$ — плотность частиц, имеющих в момент времени t состояние $(\vec{r}, \vec{\omega}, V)$;

$\nabla n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) = \frac{dn}{d\vec{r}}$ — градиент плотности по конфигурационным переменным;

$\Sigma(\vec{r}, V)$ — полное макроскопическое сечение;

$C(\vec{r}; \vec{\omega}', V' \rightarrow \vec{\omega}, V)$ — плотность распределения новых параметров $(\vec{\omega}, V)$ состояния частицы при условии, что акт столкновения произошел в точке $(\vec{r}, \vec{\omega}', V')$;

$n_0(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)$ — плотность частиц, испущенных независимыми источниками.

Традиционно теория решения методом Монте-Карло уравнения (1) строится на переходе от этого уравнения для плотности частиц к интегральному уравнению для плотности столкновений и трактовке движения частиц в виде марковской цепи счетного числа столкновений. В монографии Ю. К. Кочубея [1] развит современный подход к обоснованию применения метода Монте-Карло

непосредственно для решения интегродифференциального уравнения (1), основанный на его интерпретации как обратного уравнения А. Н. Колмогорова для переходных вероятностей однородного сепарабельного феллеровского скачкообразного строго марковского процесса переноса отдельной частицы. Впервые идея использования теории марковских процессов для обоснования и конструирования схем метода Монте-Карло была четко сформулирована в докладе И. М. Гельфанда, С. М. Фейнберга, А. С. Фролова, Н. Н. Ченцова (Женева, 1958 г.) [2]. В настоящей работе подход, развитый Ю. К. Кочубеем, используется для того, чтобы с помощью преобразований векторного уравнения Чандрасекара к уравнению для марковского процесса обосновать применимость метода Монте-Карло к расчету переноса поляризованного излучения.

В руководствах по методу Монте-Карло для вычисления нового направления полета частиц обычно приводятся формулы

$$\vec{\omega} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \mu^2 \cos \varphi} \\ \sqrt{1 - \mu^2 \sin \varphi} \\ \frac{\mu w'}{|w'|} \end{pmatrix}, & \text{если } |w'| \cong 1; \\ \begin{pmatrix} u' \mu + (u' w' \cos \varphi - v' \sin \varphi) \frac{\sqrt{1 - \mu^2}}{\sqrt{1 - (w')^2}} \\ v' \mu + (v' w' \cos \varphi + u' \sin \varphi) \frac{\sqrt{1 - \mu^2}}{\sqrt{1 - (w')^2}} \\ w' \mu - \cos \varphi \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - (w')^2} \end{pmatrix}, & \text{если } 1 - (w')^2 > \varepsilon. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь θ и φ — полярный и азимутальный углы, определяемые законами анизотропного рассеяния в системе координат, связанной с направлением $\vec{\omega}'$ полета до столкновения; $\mu = \vec{\omega}' \cdot \vec{\omega} = \cos \theta$.

Часть соотношений (2) для случая $1 - (w')^2 > \varepsilon$ (далее будем называть их "длинными" формулами) Кашвелл и Эверетт [3] получили двумя поворотами сферы. Для определения матрицы перехода от одной системы координат к другой можно воспользоваться средствами векторного анализа, построив ортонормированную подвижную систему векторов, связанную с $\vec{\omega}'$ [4]. Достаточно первый из двух векторов, ортогональных направлению $\vec{\omega}'$, выбрать перпендикулярным плоскости, образованной направлением $\vec{\omega}'$ и ортом $\{0,0,1\}$, чтобы матрица преобразований координат привела к тем же соотношениям (2). Во избежание деления на ноль в окрестности особых точек $|w'| = 1$ алгоритм пересчета нового направления содержит скачок перехода к "коротким" формулам соотношений (2).

Еще в 1958 г. Н. Н. Ченцов [5] указал на неустранимую причину разрывного характера алгоритма пересчета, сформулированную в теореме Пуанкаре—Брауэра, согласно которой на сфере четной размерности не существует непрерывного поля касательных направлений [6]. Построение ортогональной системы координат, связанной с направляющим вектором полета частицы, требует построения двух касательных полей к единичной сфере в пространстве R^3 . Попытка решить эту задачу в классе непрерывных функций приводит к особенностям в формулах моделирования рассеяния.

Решение проблемы избавления от особенностей дает развитый в работе [4] подход, названный Н. Н. Ченцовым *геометрическим*. Принципиальным моментом этого подхода является поиск разрывных функций для безаварийного построения ортогональной системы координат, связанной с вектором $\vec{\omega}'$. Для задач с азимутальной анизотропией развитая техника геометрического подхода позволяет естественным образом получить экономичные алгоритмы расчета.

**Линейное кинетическое уравнение для поляризованного излучения.
Обоснование применимости метода Монте-Карло
к расчету векторного уравнения переноса поляризованного излучения**

Как известно [7—9], при фотометрических наблюдениях интенсивность и состояние поляризации поля излучения в точке $(\vec{r}, \vec{\omega})$ полностью определяются четырехмерным вектором $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}) =$

$= \{I_1(\vec{r}, \vec{\omega}), I_2(\vec{r}, \vec{\omega}), I_3(\vec{r}, \vec{\omega}), I_4(\vec{r}, \vec{\omega})\}$, компоненты которого являются линейными комбинациями параметров Стокса, имеют размерность интенсивности и отражают в совокупности интенсивность, степень поляризации, плоскость поляризации и степень эллиптичности излучения. В приближении лучевой оптики для оптически изотропной среды процесс переноса квазимонохроматического поляризованного излучения описывается векторным уравнением, полученным в 1946 г. феноменологически С. Чандрасекаром как уравнение баланса энергии [7]:

$$(\vec{\omega} \cdot \text{grad}) \mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}) + \Sigma(\vec{r}) \mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}) = \Sigma(\vec{r}) \int_{\Omega} A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) \mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' + \mathbf{S}(\vec{r}, \vec{\omega}). \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}) = \{I_1(\vec{r}, \vec{\omega}), I_2(\vec{r}, \vec{\omega}), I_3(\vec{r}, \vec{\omega}), I_4(\vec{r}, \vec{\omega})\}$ — вектор-параметр Стокса; $\text{grad } I_i(\vec{r}, \vec{\omega}) = \frac{\partial I_i}{\partial \vec{r}}$; $\Sigma^{-1}(\vec{r})$ — длина свободного пробега излучения; $A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ — полная матрица рассеяния; $\mathbf{S}(\vec{r}, \vec{\omega})$ — независимые источники излучения.

Компоненты вектора $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega})$ задаются в некоторой фиксированной системе координат, связанной с $\vec{\omega}$. При повороте этой системы координат на угол ψ по часовой стрелке в плоскости, перпендикулярной $\vec{\omega}$, вектор $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega})$ преобразуется матрицей

$$L(\psi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\psi & \sin 2\psi & 0 \\ 0 & -\sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Если \vec{n}_0 — единичный вектор, определяющий некоторое заданное направление в среде в точке \vec{r} , то рассеяние светового пучка с вектором-параметром Стокса $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}')$ определяется следующим образом [7–9]:

$$\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}) = A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) \mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}'), \quad A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) = L(\pi - \psi_2) \Gamma(\vec{r}, \mu) L(-\psi_1), \quad (5)$$

где $\vec{\omega}$ — новое направление полета частиц после рассеяния; $\Gamma(\vec{r}, \mu)$ — угловая матрица, определяемая моделью среды и задающая закон преобразования $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}')$ в акте рассеяния при отнесении значений $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega}')$ к системе координат, связанной с плоскостью рассеяния; $\mu = \vec{\omega}' \cdot \vec{\omega} = \cos \theta$, θ — угол рассеяния; $L(\psi_1)$ и $L(\pi - \psi_2)$ — матрицы поворота, определяемые формулой (4) и задающие закон преобразования компонент вектора Стокса при повороте фиксированной системы координат на азимутальный угол, образуемый плоскостью рассеяния в этой фиксированной системе.

Углы поворота ψ_1 и ψ_2 определяются формулами

$$\begin{aligned} \cos \psi_1 &= \frac{\vec{n}_0 \cdot \vec{\omega} - \mu (\vec{n}_0 \cdot \vec{\omega}')}{|\vec{\omega}' \times \vec{\omega}| \cdot |\vec{n}_0 \times \vec{\omega}'|}; & \sin \psi_1 &= \frac{\vec{n}_0 \cdot \vec{\omega}' \cdot \vec{\omega}}{|\vec{\omega}' \times \vec{\omega}| \cdot |\vec{n}_0 \times \vec{\omega}'|}; \\ \cos \psi_2 &= \frac{-\vec{n}_0 \cdot \vec{\omega} + \mu (\vec{n}_0 \cdot \vec{\omega}')}{|\vec{\omega}' \times \vec{\omega}| \cdot |\vec{n}_0 \times \vec{\omega}'|}; & \sin \psi_2 &= \frac{-\vec{n}_0 \cdot \vec{\omega}' \cdot \vec{\omega}}{|\vec{\omega}' \times \vec{\omega}| \cdot |\vec{n}_0 \times \vec{\omega}'|}. \end{aligned} \quad (6)$$

Смысл углов ψ_1 и ψ_2 понятен из рис. 1.

Система уравнений (3) для компонент вектора-параметра Стокса $\mathbf{I}(\vec{r}, \vec{\omega})$ не является системой связанных кинетических уравнений для нескольких типов частиц. Отдельные компоненты вектора-параметра Стокса инвариантны относительно выбора системы отсчета, могут принимать отрицательные значения, и их нельзя трактовать как число или плотность каких-либо частиц. По тем же причинам матрицу $A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ невозможно интерпретировать как матрицу переходных вероятностей процесса переноса. Следовательно, теория Монте-Карло, развитая для уравнения (1), для решения уравнения (3) непосредственно не применима.

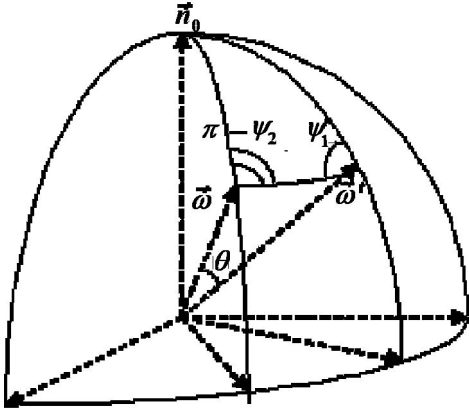


Рис. 1. Геометрия рассеяния поляризованных частиц

ра-параметра Стокса: $I_1(\vec{r}, \vec{\omega}) \geq 0$; $(I_1(\vec{r}, \vec{\omega}))^2 \geq (I_2(\vec{r}, \vec{\omega}))^2 + (I_3(\vec{r}, \vec{\omega}))^2 + (I_4(\vec{r}, \vec{\omega}))^2$. Однако в работах [9, 10] не приводится аналитических или теоретико-вероятностных обоснований перехода от уравнения (3) к системе интегральных уравнений. Хотя указано, что "система интегральных уравнений переноса с учетом поляризации может быть получена путем достаточно сложных преобразований" системы интегродифференциальных уравнений (3), получена она на основе физических соображений и аналогий, основанных на замене индикатрисы рассеяния неполяризованного излучения матрицей рассеяния. При этом матрицу с отрицательными элементами приходится интерпретировать как матрицу перехода, что также можно сделать лишь условно.

Преодолеть трудности вероятностной интерпретации системы уравнений (3) позволяет доказанная ниже теорема. Прежде чем ее сформулировать, рассмотрим уравнение

$$\vec{\omega} \cdot \text{grad} f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) + \Sigma(\vec{r}) f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) = \Sigma(\vec{r}) \int_{\Omega} K(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}' \rightarrow \vec{\omega}, \vec{p}) f(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}') d\vec{\omega}' d\vec{p}' + f_0(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}). \quad (7)$$

По сравнению с уравнением (1) в этом кинетическом уравнении, записанном для плотности частиц $f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p})$, фазовое пространство расширено, и теперь частица в точке \vec{r} характеризуется, кроме направления скорости $\vec{\omega}$, еще четырехмерным вектором $\vec{p} = \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$, компоненты которого имеют смысл параметров Стокса. Расширение фазового пространства с физической точки зрения означает, что "частицей" в уравнении переноса (7) является пучок фотонов, образующих световой пуч с вектором-параметром Стокса, причем между столкновениями для такой частицы сохраняются и система отсчета, и значения параметров Стокса.

Ядро $K(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}' \rightarrow \vec{\omega}, \vec{p})$ запишем в виде

$$K(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}' \rightarrow \vec{\omega}, \vec{p}) = P(\vec{r}; \vec{p}' \rightarrow \vec{p} | \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) g(\vec{r}; \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}), \quad (8)$$

где $g(\vec{r}; \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ — индикатриса рассеяния — вероятность того, что частица, имеющая состояние $\vec{r}; \vec{p}'$; $\vec{\omega}'$, рассеется из $\vec{\omega}'$ в $\vec{\omega}$; $P(\vec{r}; \vec{p}' \rightarrow \vec{p} | \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ — условная вероятность того, что частица, испытавшая столкновение в точке \vec{r} , при изменении направления $\vec{\omega}'$ на $\vec{\omega}$ перейдет из состояния \vec{p}' в состояние \vec{p} . Положим

$$P(\vec{r}; \vec{p}' \rightarrow \vec{p} | \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) = \delta\left(\vec{p} - \frac{1}{g} A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) \vec{p}'\right) = \prod_i \delta\left(p_i - \sum_j \frac{a_{ij}}{g} p'_j\right), \quad (9)$$

где $A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) = \{a_{ij}\}$ — матрица из уравнения (3); δ — дельта-функция Дирака.

В монографии [9] приведено обоснование метода Монте-Карло для решения системы интегральных уравнений, записанной относительно так называемой "вектор-функции плотности столкновений". Вектор (5) называется "условной векторной плотностью распределения "вторичных" столкновений при условии, что частица испытала "первичное" столкновение в точке $(\vec{r}, \vec{\omega}')$, имея вектор Стокса" [9]. Обоснование (впервые оно было опубликовано в [10]) основано на представлении решения системы интегральных уравнений рядом Неймана с последующим строгим доказательством сходимости ряда. Строгое доказательство сходимости использует "простые физические соображения, связанные с быстрым убыванием интенсивности многократного рассеянного излучения" [9], и свойства вектора

Теорема. Векторное уравнение (3) является системой уравнений для следующих четырех функционалов от решения уравнения (7):

$$\begin{aligned} I_1(\vec{r}, \vec{\omega}) &= \int p_1 f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) d\vec{p}; & I_2(\vec{r}, \vec{\omega}) &= \int p_2 f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) d\vec{p}; \\ I_3(\vec{r}, \vec{\omega}) &= \int p_3 f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) d\vec{p}; & I_4(\vec{r}, \vec{\omega}) &= \int p_4 f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) d\vec{p}. \end{aligned} \quad (10)$$

Доказательство. Умножим поочередно обе части уравнения (3) на p_i ($i = \overline{1,4}$) и проинтегрируем по всей области изменения $\vec{p} = \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$, понимая интегрирование в смысле интеграла Лебега и предполагая выполнение всех необходимых условий, позволяющих менять порядок интегрирования и дифференцирования (компактность пространства, измеримость функций и т. п.). Пользуясь при интегрировании по определению δ -функции равенством

$$\int p_i \delta\left(\vec{p} - \frac{1}{g} A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) \vec{p}'\right) dp = \int p_i \delta\left(p_i - \sum_j \frac{a_{ij}}{g} p'_j dp_i\right) = \sum_j \frac{a_{ij}}{g} p'_j$$

и вводя обозначение

$$\mathbf{S}(\vec{r}, \vec{\omega}) = \begin{pmatrix} \int p_1 f_0 d\vec{p} \\ \int p_2 f_0 d\vec{p} \\ \int p_3 f_0 d\vec{p} \\ \int p_4 f_0 d\vec{p} \end{pmatrix},$$

приходим к уравнению (1)¹.

Линейность функционалов (10) отражает известный физический факт — аддитивность параметров Стокса. (При суперпозиции некогерентных световых пучков, имеющих одно направление распространения, но различную поляризацию, параметры Стокса просто складываются.)

Корректность и простота выкладок в доказательстве теоремы обеспечиваются главным образом тем, что $\Sigma(\vec{r})$ и индикатриса $g(\vec{r}; \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ не зависят от поляризации. Может показаться, что выполнение этих требований существенно ограничивает применимость уравнения (7) случаем оптической изотропности среды. Однако уравнение (7) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} &\vec{\omega} \cdot \text{grad} f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) + \left(\Sigma_1(\vec{r}) + \Sigma_2(\vec{r})\right) f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) = \\ &= \int_{\Omega} \left[\Sigma_1(\vec{r}) \delta(\vec{\omega} - \vec{\omega}') \delta(\vec{p} - B\vec{p}') + \Sigma_2(\vec{r}) g \delta\left(p - \frac{1}{g} A\vec{p}'\right) \right] f(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}') d\vec{\omega}' d\vec{p}' + f_0(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}), \end{aligned}$$

где B — некоторая матрица размером 4×4 . Для этого уравнения функционалы $I_i(\vec{r}, \vec{\omega}) = \int p_i f(\vec{r}, \vec{\omega}, \vec{p}) d\vec{p}$ ($i = \overline{1,4}$) формально удовлетворяют упомянутой в [9] системе уравнений Чандра-секара—Розенберга переноса поляризованного излучения в анизотропной среде.

Уравнение (7) является обычным обратным уравнением Колмогорова для скачкообразного процесса, переходные вероятности которого определяются функциями $\Sigma(\vec{r})$ и $K(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}' \rightarrow \vec{\omega}, \vec{p})$ [1]. Нетрудно видеть, что в монографии [9] по существу речь идет о моделировании именно этого процесса.

Индикатриса $g(\vec{r}; \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ может быть достаточно произвольной. При $g(\vec{r}; \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega}) = 1$ (изотропный выбор нового направления полета частицы) параметры Стокса преобразуются матри-

¹Подобным же образом в работе [11] (Лос-Аламос, 1964 г.) из кинетического уравнения выводится система моментных уравнений для расчета переноса нейтронов с учетом поляризационных эффектов.

цей $A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$. В [9] замечено, что наиболее *физическим*, обеспечивающим наименьшие флуктуации *весов*, является выбор нового направления по распределениям процесса без учета поляризации. При таком моделировании полярный угол θ выбирается по индикатрисе процесса переноса без поляризации, а азимут φ — изотропно. По определениям (8), (9) ядра $K(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}' \rightarrow \vec{\omega}, \vec{p})$ выбор функции $g(\vec{r}; \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$, отличной от 1, приводит к соответствующей перенормировке элементов матрицы рассеяния, что для оценки функционалов (10) эквивалентно стандартному пересчету веса частицы на траектории. При любом выборе $g(\vec{r}; \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ всю физическую азимутальную анизотропию рассеяния поляризованного излучения отражает зависимость матрицы $A(\vec{r}, \vec{\omega}' \rightarrow \vec{\omega})$ от азимута.

Уравнение переноса (7) отличается от линейного кинетического уравнения (1) только законами акта рассеяния. Очевидна аналогия между пересчетом параметров Стокса в акте рассеяния и пересчетом энергии при упругом взаимодействии нейтрона с ядрами вещества: после столкновения новые параметры частицы определяются однозначно ее новым направлением полета. Несложно ввести в уравнение (7) поглощение, несколько типов рассеяния, временную зависимость. Можно, не обращаясь к теории марковских процессов, использовать традиционный для теории методов Монте-Карло переход от уравнения (7) к интегральному уравнению для плотности столкновений частиц и исследовать условия сходимости ряда Неймана для различных оценок функционалов от решения интегрального уравнения. Естественно, что выполнение условий сходимости в реальных расчетах возможно лишь при определенных ограничениях на схемы моделирования и условия конкретных прикладных задач. Например, траектория частицы с вероятностью 1 должна иметь конечное число скачков, что обеспечивается наличием поглощения, конечностью размеров системы или ограничением рассматриваемого интервала времени для нестационарных задач.

Построение в классе непрерывных функций подвижной системы координат, связанной с плоскостью, образованной направлением движения частиц и выделенным направлением в среде

Рассмотрим алгоритмы моделирования акта рассеяния, который описывается ядром $C(\vec{r}; \vec{\omega}', V' \rightarrow \vec{\omega}, V)$ кинетического уравнения (1) или $K(\vec{r}, \vec{\omega}', \vec{p}' \rightarrow \vec{\omega}, \vec{p})$ уравнения (7), обращая внимание на детали геометрического подхода к выводу формул [4], которые, как показывает анализ недавних статей [12, 13], остаются незамеченными.

Пусть $\vec{r} = \{x, y, z\}$ — точка конфигурационного пространства R^3 , в которой произошло рассеяние частицы; $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ — орты лабораторной (неподвижной) декартовой системы координат в пространстве скоростей полета частицы R^3 , выбранные в согласии с ортами осей X, Y, Z конфигурационного пространства; $\vec{\omega}' = \{u', v', w'\}$ — единичный вектор направления полета частицы до рассеяния в точке \vec{r} ; $u' = \cos \alpha, v' = \cos \beta, w' = \cos \gamma$ — направляющие косинусы углов α, β, γ , образуемых вектором $\vec{\omega}'$ с ортами $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$, т. е. $\vec{\omega}' \in \Omega$, где Ω — единичная сфера в пространстве скоростей полета частицы R^3 , $(u')^2 + (v')^2 + (w')^2 = 1$.

Законы анизотропного рассеяния, отражаемые интегральным оператором кинетического уравнения, обычно формулируются относительно подвижной сферической системы координат (θ, φ) , связанной с направлением $\vec{\omega}'$. Для неполяризованных частиц рассеяние считается цилиндрически-симметричным относительно $\vec{\omega}'$, т. е. азимутальный угол φ считается распределенным изотропно. Плотность распределения полярного угла θ задается индикатрисой рассеяния $g(\mu)$ ($\mu = \vec{\omega}' \cdot \vec{\omega} = \cos \theta$). Для независимых случайных величин μ и φ плотность распределения $p(\mu, \varphi)$ представляется в виде произведения: $p(\mu, \varphi) = \frac{1}{2\pi} g(\mu)$, $-1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Это позволяет смоделировать в подвижной системе координаты (θ, φ) нового направления.

Если направление полета частицы до рассеяния совпадает с направлением оси Z , т. е. $\vec{\omega}' = \{0, 0, 1\}$, то в качестве подвижной декартовой системы естественно считать систему $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ (рис. 2). В этом случае декартовы координаты вектора $\vec{\omega} = \{u, v, w\}$ нового направления полета частицы после рассеяния связаны с полярными координатами следующими соотношениями, которые отражают короткие формулы соотношений (2):

$$\vec{\omega} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \theta \\ \sin \varphi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi \\ \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi \\ \mu \end{pmatrix}. \quad (11)$$

В случае, когда $w \neq \pm 1$, лабораторные декартовы координаты $\vec{\omega}$ можно получить преобразованием координат двумя последовательными поворотами сферы Ω . Смоделируем $\vec{\omega}$ по формулам (11) в системе $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ и совместим ось \mathbf{k} с направлением $\vec{\omega}'$ двумя поворотами сферы: первый поворот — на угол γ вокруг оси \mathbf{j} , второй поворот — на угол ϕ ($\cos \phi = \rho u'$, $\sin \phi = \rho v'$, $\rho = 1/\sin \gamma = 1/\sqrt{1 - (w')^2}$) вокруг оси \mathbf{k} (рис. 3). Такой весьма трудоемкий вывод длинных формул (2) приведен в [3].

Более удобным для исследований и прозрачным для понимания является использование средств векторного анализа, или, по выражению Н. Н. Ченцова [4], геометрический подход к получению расчетных формул. Основой геометрического подхода является построение ортогональной подвижной системы координат $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$, связанной с вектором $\vec{\omega}'$ так, что $\vec{q}_3 = \vec{\omega}'$ (рис. 4).

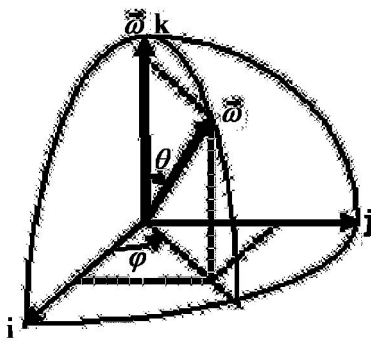


Рис. 2. Рассеяние частицы, летящей вдоль оси Z

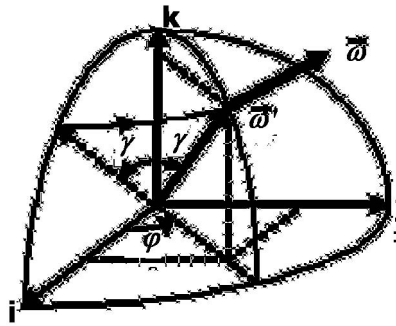


Рис. 3. Повороты сферы для вычисления направляющих косинусов полета частицы в случае $\vec{\omega}' \neq \mathbf{k}$

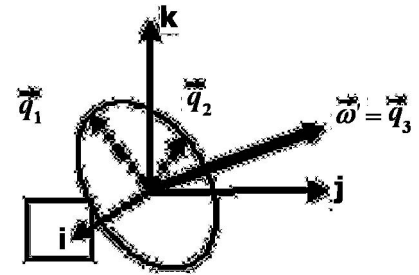


Рис. 4. Построение подвижной системы координат, связанной с направлением полета частицы

Построение подвижной системы координат $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$ неоднозначно. Выделим некоторое направление \vec{n}^0 в пространстве R^3 и построим эту систему следующим образом:

$$\vec{q}_1 = \frac{\vec{\omega}' \times \vec{n}^0}{|\vec{\omega}' \times \vec{n}^0|}; \quad \vec{q}_2 = \vec{\omega}' \times \vec{q}_1. \quad (12)$$

Обозначим через $\vec{\omega}''$ вектор-столбец, имеющий в системе $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$ координаты (11), и заметим, что это искомый вектор $\vec{\omega}$, но заданный в подвижной системе $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$. Обозначим через $B = \{b_{st}(\vec{\omega}', \vec{n}^0)\}$, $s, t = 1, 2, 3$, матрицу, элементами которой являются координаты векторов $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$ в неподвижной системе $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$. Это матрица перехода от системы $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ к системе $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$. Обозначим через B' транспонированную матрицу. Тогда координаты u, v, w вектора $\vec{\omega}$ в неподвижной (лабораторной) системе координат вычисляются по формуле

$$\vec{\omega} = B' \vec{\omega}'' . \quad (13)$$

Вычислим по формулам (12), (13) элементы матрицы B и координаты u, v, w вектора $\vec{\omega}$ для частных случаев выбора выделенного вектора \vec{n}^0 .

1) $\vec{n}^0 = \{0, 0, 1\}$ — орт оси Z . При таком выборе \vec{n}^0 получаем для координат u, v, w нового направления длинные формулы из соотношений (2), которые обычно приводятся в большинстве руководств по методу Монте-Карло. Заметим, что в расчетах переноса частиц с азимутальной изотропией рассеяния (перенос неполяризованного излучения) допустим произвол в выборе левосторонней или правосторонней системы координат. Это позволяет менять местами векторы \vec{q}_1 и \vec{q}_2 , выбирать в качестве \vec{q}_1 вектор $-\vec{q}_1$, а вместо \vec{q}_2 — вектор $-\vec{q}_2$. Такие перестановки приводят к перестановке строк матрицы B , умножению строк на ± 1 . Соответственно эти перестановки могут приводить

к некоторым разночтениям в следующих формулах, которые не сказываются на сути расчетных алгоритмов:

$$B = \begin{pmatrix} \frac{-u'w'}{\sqrt{1-(w')^2}} & \frac{-v'w'}{\sqrt{1-(w')^2}} & \sqrt{1-(w')^2} \\ \frac{-v'}{\sqrt{1-(w')^2}} & \frac{u'}{\sqrt{1-(w')^2}} & 0 \\ u' & v' & w' \end{pmatrix}; \quad (14)$$

$$\Omega = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u'\mu' + (u'w'\cos\varphi - v'\sin\varphi) \frac{\sqrt{1-\mu^2}}{\sqrt{1-(w')^2}} \\ v'\mu' + (v'w'\cos\varphi + u'\sin\varphi) \frac{\sqrt{1-\mu^2}}{\sqrt{1-(w')^2}} \\ w'\mu - \cos\varphi\sqrt{1-\mu^2}\sqrt{1-(w')^2} \end{pmatrix}.$$

2) $\vec{n}^0 = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} = \left\{ \frac{x}{|\vec{r}|}, \frac{y}{|\vec{r}|}, \frac{z}{|\vec{r}|} \right\}$. Выделенное направление совпадает с направлением радиуса-вектора точки столкновения. В этом случае

$$B = \begin{pmatrix} \frac{u'M-x}{\sqrt{r^2-M^2}} & \frac{v'M-y}{\sqrt{r^2-M^2}} & \frac{w'M-z}{\sqrt{r^2-M^2}} \\ \frac{w'y-v'z}{\sqrt{r^2-M^2}} & \frac{u'z-w'x}{\sqrt{r^2-M^2}} & \frac{v'x-u'y}{\sqrt{r^2-M^2}} \\ u' & v' & w' \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Здесь $M = u'x + v'y + w'z = \vec{r} \cdot \vec{\omega}'$; $M/|\vec{r}|$ — косинус угла между радиусом-вектором точки \vec{r} и направлением полета $\vec{\omega}'$ до столкновения в точке \vec{r} . На первый взгляд такой выбор выделенного направления \vec{n}^0 представляется естественным для задач со сферической или осевой симметрией [9]. Однако нетрудно показать, что особых преимуществ этот выбор не имеет.

Матрица (15), несмотря на зависимость ее элементов от координат точки столкновения, остается неизменной вдоль прямой, проходящей через точки двух последовательных столкновений. Это можно проверить непосредственной подстановкой переменных из уравнения прямой. То же самое следует и из простых геометрических соображений, достаточно провести плоскость через три точки — начало координат и две последовательные точки столкновений. Эта плоскость содержит все радиусы-векторы промежуточных точек траектории движения частицы вдоль прямой, а вектор \vec{q}_1 по определению (12) ортогонален к этой плоскости. Неизменность матрицы вдоль всей прямой означает, что между соударениями сохраняется система отсчета для моделирования полярных углов θ и φ , определяемая матрицей (15). Эта система отличается от системы, определяемой матрицей (14), на постоянный угол η поворота в азимутальной плоскости к направляющему вектору $\vec{\omega}' = \{u', v', w'\}$:

$$\cos\eta = \frac{w'M-z}{\sqrt{(1-(w')^2)(r^2-M^2)}}; \quad \sin\eta = \frac{v'x-u'y}{\sqrt{(1-(w')^2)(r^2-M^2)}}. \quad (16)$$

Вид формул (16) свидетельствует, что переход от одной системы координат к другой связан с несложными техническими трудностями. При должной оптимизации расчетных формул оба способа построения подвижной системы координат должны приводить к близким по экономичности алгоритмам.

Теорема Пуанкаре—Брауэра. Построение подвижной системы координат с помощью разрывных функций. Формулы Н. Н. Ченцова

Для обхода деления на нуль в окрестности особых точек $\vec{\omega}' = \pm \vec{n}^0$ приходится переходить к коротким формулам соотношений (2). Переход к этим формулам означает, что моделирование нового направления в некоторой окрестности особых точек терпит разрыв. Фактически короткие формулы моделирования "обслуживают" лишь расчет переноса частиц мононаправленного вдоль оси Z источника. Невозможно найти физическое объяснение, почему в окрестности только одной из осей координат требуются особые формулы. Ведь для любого направления существует континуум связанных с этим направлением подвижных ортогональных систем координат.

Поскольку особенности в соотношениях (2) обязаны своим появлением выбору выделенного направления полета частицы \vec{n}^0 , возникает вопрос: может быть при выводе формул проявлено недостаточно математической изобретательности, чтобы каким-либо образом избавиться от особенностей? В 1958 г. в лекциях, прочитанных по предложению А. Н. Колмогорова на мехмате МГУ², Н. Н. Ченцов отметил, что появление особенностей здесь носит фундаментальный характер и связано с довольно глубоким фактом комбинаторной топологии — теоремой Пуанкаре—Брауэра о том, что на сфере четной размерности не существует непрерывного поля касательных направлений. Эту теорему Гильберт назвал *теоремой о еже*, поскольку по этой теореме "у ежа, свернувшегося в клубок, все иглы не могут лежать гладко, а некоторые непременно будут торчать" [6, стр. 584]. Формулы (12) определяют два поля касательных направлений в каждой точке единичной сферы $(u')^2 + (v')^2 + (w')^2 = 1$. Попытка решить задачу построения этих полей, используя такие непрерывные операции, как векторное произведение или повороты сферы, и приводит к неустранимым особенностям в формулах моделирования рассеяния.

Теорема Пуанкаре—Брауэра доказывает неустранимость разрывов в алгоритме пересчета координат нового направления. Но она не препятствует поиску алгоритма, не имеющего особенностей. К решению проблемы избавления от особенностей приводит подход, развитый в работе [4]. Принципиальным его моментом является переход к классу разрывных функций для безаварийного построения ортогональной системы координат, связанной с вектором $\vec{\omega}'$. Такой переход можно осуществить несколькими не слишком очевидными способами.

Первый способ заключается в следующем. Подберем вектор \vec{q}_1 , ортогональный вектору $\vec{\omega}' = \{u', v', w'\}$, исходя из тождества $u^2 + v^2 + w^2 = 1$. Несколько преобразований этого тождества

$$u^2 - 1 + v^2 + w^2 = 0; \quad u \frac{u^2 - 1}{u} + vv + ww = 0; \quad u(1 - u^2) + v(-uv) + w(-uw) = 0$$

позволяют получить вектор $\{1 - u^2, -uv, -uw\}$, который ортогонален вектору $\vec{\omega} = \{u, v, w\}$. Но полученный вектор вырождается при $u = 1$ ($v = w = 0$) — так здесь "работает" теорема Пуанкаре—Брауэра. Чтобы избавиться от вырождения, достаточно в последнем тождестве положить $\varepsilon/w = \delta =$

$$= \begin{cases} 1, & \text{если } w \geq 0; \\ -1, & \text{если } w < 0 \end{cases}; \quad u(1 - u^2 + \varepsilon) + v(-uv) + w(-uw - u \frac{\varepsilon}{w}) = 0. \quad \text{Тогда } \varepsilon = \delta w = |w| \text{ и,}$$

следовательно, $u(1 - u^2 + |w|) + v(-uv) + w(-uw - u\delta) = 0$. Исходя из последнего тождества, выберем вектор $\vec{q} = \{1 - (u')^2 + |w'|, -u'v', -u'w' - u'\delta\}$ в качестве вектора, ортогонального $\vec{\omega}' = \{u', v', w'\}$. Нетрудно проверить, что $|\vec{q}|^2 = \vec{q} \cdot \vec{q} = (1 + |w'|)^2 > 0$. Таким образом, с помощью разрывной функции δ (заметим, что δ — это не $\text{sign } w$ и не функция Дирака) удалось построить ненулевой вектор, ортогональный вектору $\vec{\omega}' = \{u', v', w'\}$. Это позволяет для любого $\vec{\omega}'$ построить ортонормированную подвижную систему координат $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$, где $\vec{q}_1 = \vec{q}/|\vec{q}|$, $\vec{q}_2 = \vec{\omega}' \times \vec{q}_1$, $\vec{q}_3 = \vec{\omega}'$. Соответствующая этой системе матрица B перехода к лабораторной системе координат не имеет особенностей, хотя ее элементы терпят разрыв:

²Эти лекции были повторены Н. Н. Ченцовым для сотрудников ВНИИЭФ [5], а позднее (в 1966 г.) в Киеве, в летней школе А. А. Самарского по вычислительной математике.

$$B = \begin{pmatrix} 1 - \frac{(u')^2}{1 + |w'|} & \frac{-u'v'}{1 + |w'|} & -u'\delta \\ \frac{-u'v'\delta}{1 + |w'|} & \delta \left(1 - \frac{(v')^2}{1 + |w'|} \right) & -v' \\ u' & v' & w' \end{pmatrix}. \quad (17)$$

В результате получаем формально не содержащий условных переходов безаварийный алгоритм пересчета координат нового направления полета

$$\Omega = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u' \left(\mu - \frac{u'\sqrt{1-\mu^2} \cos \varphi + v'\sqrt{1-\mu^2} \sin \varphi}{1 + |w'|} \right) + \sqrt{1-\mu^2} \cos \varphi \\ v' \left(\mu - \frac{u'\sqrt{1-\mu^2} \cos \varphi + v'\sqrt{1-\mu^2} \sin \varphi}{1 + |w'|} \right) + \sqrt{1-\mu^2} \sin \varphi \\ w'\mu - \delta \left(u'\sqrt{1-\mu^2} \cos \varphi + v'\sqrt{1-\mu^2} \sin \varphi \right) \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Автором другого способа устранения особенностей является И. Ф. Подливаев. Повернем систему координат, определяемую формулами (12), на угол η в азимутальной плоскости и попытаемся подобрать значение η так, чтобы устранить особенность вида $0/0$. Это можно осуществить подбором дополнительного поворота азимута в длинных формулах соотношений (2). Оказывается, что при $\vec{n}^0 = \{0, 0, 1\}$ для матрицы (14) для четырех значений η , $0 \leq \eta \leq 2\pi$, отличающихся на $\pi/2$, удастся устранить особенность и получить формулы (18).

Третий способ Н. Н. Ченцов считал наиболее конструктивным и именно его называл геометрическим [4]. Если направление полета $\vec{\omega}'$ совпадает с ортом \mathbf{k} оси Z , $\vec{\omega}' = \{0, 0, 1\}$, то, как уже отмечалось, в качестве подвижной системы координат естественно выбрать систему координат $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$. В общем случае можно смоделировать новое направление полета, принимая за старое орт оси Z , а затем преобразовать систему координат так, чтобы орт оси Z совпал с $\vec{\omega}'$. Такое преобразование можно проделать, используя векторные операции и не обращаясь, как в [2], к сферической тригонометрии.

Пусть \vec{n} — единичный вектор биссектрисы угла между векторами \mathbf{k} и вектором $\vec{\omega}'$; \vec{n}_1 — вектор, ортогональный вектору \vec{n} и лежащий в той же плоскости, образованной векторами \mathbf{k} и $\vec{\omega}'$ (рис. 5); $\vec{n}_2 = \vec{n} \times \vec{n}_1$, т. е.

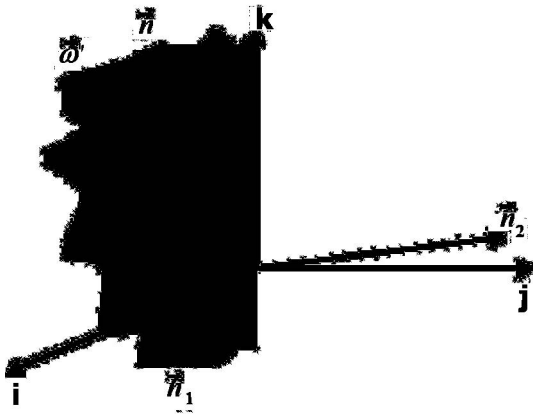


Рис. 5. Геометрия рассеяния поляризованных частиц

$$\vec{n} = \frac{\vec{\omega}' + \mathbf{k}}{|\vec{\omega}' + \mathbf{k}|} = \left\{ \frac{u'}{\sqrt{2(1+w')}}; \frac{v'}{\sqrt{2(1+w')}}; \sqrt{\frac{1+w'}{2}} \right\};$$

$$\vec{n}_1 = \frac{\vec{\omega}' - \mathbf{k}}{|\vec{\omega}' - \mathbf{k}|} = \left\{ \frac{u'}{\sqrt{2(1-w')}}; \frac{v'}{\sqrt{2(1-w')}}; \sqrt{\frac{1-w'}{2}} \right\};$$

$$\vec{n}_2 = \vec{n} \times \vec{n}_1 = \left\{ -\frac{v'}{\sqrt{1-(w')^2}}; \frac{u'}{\sqrt{1-(w')^2}}; 0 \right\}.$$

Ортогональную матрицу пересчета координат можно получить, отразив точки относительно плоскости, образованной векторами \vec{n} и \vec{n}_2 , или повернув точки около \vec{n} на 180° . В случае отражения любой вектор \vec{r} переходит в вектор $\vec{r} - 2(\vec{n}_1 \cdot \vec{r})\vec{n}_1$. В случае поворота вектор \vec{r} переходит в вектор $\vec{r} - 2[(\vec{n}_1 \cdot \vec{r})\vec{n}_1 + (\vec{n}_2 \cdot \vec{r})\vec{n}_2]$. Определив, во что переходят орты \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} , найдем две матрицы преобразований:

$$B_1 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{(u')^2}{1-w'} & \frac{-u'v'}{1-w'} & u' \\ \frac{-u'v'}{1-w'} & 1 - \frac{(v')^2}{1-w'} & v' \\ u' & v' & w' \end{pmatrix}; \quad B_2 = \begin{pmatrix} \frac{(u')^2}{1+w'} - 1 & \frac{-u'v'}{1+w'} & u' \\ \frac{u'v'}{1+w'} & \frac{(v')^2}{1+w'} - 1 & v' \\ u' & v' & w' \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Как и следовало ожидать, обеим матрицам соответствует перевод орта оси Z в вектор $\vec{\omega}'$. Обе матрицы содержат операцию деления, поскольку эти матрицы получены непрерывным движением ортов. В очередной раз демонстрируется справедливость теоремы Пуанкаре—Брауэра. Воспользуемся тем, что каждая из матриц (19) имеет особенность лишь в одной точке, зависящей от знака w' , и выберем в зависимости от знака w' безаварийное преобразование. Нетрудно записать этот выбор в виде матрицы (17) перехода из подвижной в лабораторную систему координат, которой соответствуют формулы (18) для пересчета компонент вектора нового направления.

Как замечено в [4], формулы (18) являются наилучшими в смысле экономичности. По сравнению с формулами (2) в них отсутствует проверка условия выбора формул, сохранено одно деление, вычисление корня заменено вычислением модуля. Однако следует отметить, что экономия эта незначительна и формулы (2) работают хорошо.

Моделирование рассеяния поляризованного излучения

Покажем, как последовательное использование геометрического подхода позволяет добиться экономичности моделирования рассеяния поляризованного излучения. Процедура моделирования акта рассеяния поляризованного излучения включает три группы вычислений: моделирование нового направления полета, вычисление элементов матриц $L(\psi_1)$, $L(\psi_2)$ и $\Gamma(\vec{r}, \mu)$ и пересчет параметров Стокса.

Значительный объем работы связан с вычислением по формулам (6) элементов матриц поворота $L(\psi_1)$ и $L(\psi_2)$, причем эти формулы имеют особенности. С геометрической точки зрения особенности формул (6) отражают построение в точке рассеяния трех подвижных систем координат (см. рис. 1), связанных:

- 1) с плоскостью рассеяния (не определена при $\vec{\omega}' = \vec{\omega}$);
- 2) направлением $\vec{\omega}'$ (не определена при $\vec{\omega}' = \vec{n}_0$);
- 3) направлением $\vec{\omega}$ (не определена при $\vec{\omega} = \vec{n}_0$).

Свяжем с единичным вектором направления полета до столкновения $\vec{\omega}' = \{u', v', w'\}$ систему отсчета вектора-параметра Стокса с ортами $\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1$ так, что $\mathbf{k}_1 = \vec{\omega}'$. Пусть $(\mathbf{i}_2, \mathbf{j}_2, \mathbf{k}_2)$, $\mathbf{k}_2 = \vec{\omega}$, — система отсчета вектора-параметра Стокса для направления $\vec{\omega}$. С плоскостью рассеяния, образованной двумя векторами $\vec{\omega}$ и $\vec{\omega}'$, свяжем две системы координат: $(\vec{m}'_1, \vec{m}'_2, \vec{\omega}')$ и $(\vec{m}_1, \vec{m}_2, \vec{\omega})$, где

$$\vec{m}'_2 = \frac{\vec{\omega}' \times \vec{\omega}}{|\vec{\omega} \times \vec{\omega}'|}; \quad \vec{m}'_1 = \vec{m}'_2 \times \vec{\omega}' = \frac{\vec{\omega}' \times \vec{\omega} \times \vec{\omega}'}{|\vec{\omega} \times \vec{\omega}'|}; \quad \vec{m}_1 = \vec{m}_2 \times \vec{\omega} = \frac{\vec{\omega}' \times \vec{\omega} \times \vec{\omega}}{|\vec{\omega} \times \vec{\omega}'|}. \quad (20)$$

Векторы \vec{m}_1 и \vec{m}'_1 лежат в плоскости рассеяния и перпендикулярны $\vec{\omega}$ и $\vec{\omega}'$ соответственно.

Смысл углов θ , ψ_1 , ψ_2 и матриц L и Γ таков.

Матрица $L(-\psi_1)$ отвечает пересчету вектора-параметра Стокса при переходе из системы $(\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1)$ в систему $(\vec{m}'_1, \vec{m}'_2, \vec{\omega}')$: $\cos \psi_1 = \vec{m}'_1 \cdot \mathbf{i}_1$; $\sin \psi_1 = \vec{m}'_2 \cdot \mathbf{j}_1$.

Матрица $\Gamma(\vec{r}, \mu)$ отвечает пересчету вектора-параметра Стокса при переходе из системы $(\vec{m}'_1, \vec{m}'_2, \vec{\omega}')$ в систему $(\vec{m}_1, \vec{m}_2, \vec{\omega})$: $\mu = \cos \theta = \vec{\omega} \cdot \vec{\omega}'$.

Матрица $L(\pi - \psi_2)$ отвечает пересчету вектора-параметра Стокса при переходе из системы $(\vec{m}_1, \vec{m}_2, \vec{\omega})$ в систему $(\mathbf{i}_2, \mathbf{j}_2, \mathbf{k}_2)$: $\cos \psi_2 = \vec{m}_1 \cdot \mathbf{i}_2$; $\sin \psi_2 = \vec{m}_2 \cdot \mathbf{j}_2$.

Для построения подвижных систем координат $(\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1)$, $\mathbf{k}_1 = \vec{\omega}'$, и $(\mathbf{i}_2, \mathbf{j}_2, \mathbf{k}_2)$, $\mathbf{k}_2 = \vec{\omega}$, "привязанных" к некоторому выделенному в среде направлению \vec{n}_0 , имеем формулы

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \vec{\omega}'; & \mathbf{j}_1 &= \frac{\vec{n}_0 \times \vec{\omega}'}{|\vec{n}_0 \times \vec{\omega}'|}; & \mathbf{i}_1 &= \mathbf{j}_1 \times \vec{\omega}'; \\ \mathbf{k}_2 &= \vec{\omega}; & \mathbf{j}_2 &= \frac{\vec{n}_0 \times \vec{\omega}}{|\vec{n}_0 \times \vec{\omega}|}; & \mathbf{i}_2 &= \mathbf{j}_2 \times \vec{\omega}. \end{aligned} \quad (21)$$

Проделав формальные выкладки по формулам (20), (21), получим для $\cos \psi_1 = \vec{m}'_1 \cdot \mathbf{i}_1$, $\sin \psi_1 = \vec{m}'_2 \cdot \mathbf{j}_1$, $\cos \psi_2 = \vec{m}_1 \cdot \mathbf{i}_2$, $\sin \psi_2 = \vec{m}_2 \cdot \mathbf{j}_2$ формулы (6).

Такой алгоритм с независимым выбором систем координат для моделирования нового направления полета частицы и пересчета параметров Стокса приведен в [9]: направление полета вычисляется по формулам Ченцова, а система координат для отсчета параметров Стокса строится с выбором в качестве выделенного направления радиуса-вектора точки столкновения.

Значительно экономичнее действовать другим путем, согласовывая построение этих систем координат и используя полярные координаты нового направления полета частицы для вычисления компонент матрицы поворота [4]. Положим, что подвижная система координат $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$ для моделирования нового направления полета частицы совпадает с фиксированной системой координат $(\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1)$ для отсчета параметров Стокса. Из этого следует, что полярными координатами вектора $\vec{\omega}$ в системе координат $(\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1)$ являются θ и ψ_1 . Значит, в случае выбора нового направления по плотности $p(\mu, \varphi) = \frac{1}{2\pi}g(\mu)$, $-1 \leq \mu \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, проблема вычисления элементов матрицы $L(-\psi_1)$ решается автоматически: $\psi_1 = \varphi$. Декартовы координаты вектора $\vec{\omega}$ в системе $(\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1)$ следующие: $\vec{\omega} = \{\cos \psi_1 \sin \theta, \sin \psi_1 \sin \theta, \cos \theta\} = \left\{ \sqrt{1 - \mu^2} \cos \psi_1, \sqrt{1 - \mu^2} \sin \psi_1, \mu \right\}$.

Воспользуемся тем, что вектор \vec{m}'_1 , лежащий в плоскости, перпендикулярной $\vec{\omega}'$, фактически был построен при моделировании азимута ψ_1 нового направления полета частицы, и найдем декартовы координаты векторов \vec{m}_2, \vec{m}_1 , и \vec{m}'_1 , в системе $(\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1)$ [4]:

$$\vec{m}'_1 = \{\cos \psi_1, \sin \psi_1, 0\}; \quad \vec{m}_2 = \{-\sin \psi_1, \cos \psi_1, 0\}; \quad \vec{m}_1 = \left\{ \mu \cos \psi_1, \mu \sin \psi_1, -\sqrt{1 - \mu^2} \right\}.$$

Обозначим через $B_1 = \{b_{st}^1(\vec{\omega}')\}$, $1 \leq s, t \leq 3$, матрицу перехода от системы $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ к системе $(\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1)$. Элементами этой матрицы являются координаты векторов $\mathbf{i}_1, \mathbf{j}_1, \mathbf{k}_1$ в неподвижной системе координат $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$. $B_2 = \{b_{st}^2(\vec{\omega})\}$ — соответствующая матрица для системы $(\mathbf{i}_2, \mathbf{j}_2, \mathbf{k}_2)$. B'_1, B'_2 — транспонированные матрицы. Обозначим через m_x, m_y, m_z декартовы координаты вектора \vec{m}_1 в неподвижной системе $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$. Тогда получим следующие формулы для моделирования рассеяния:

$$\vec{\omega} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = B'_1 \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi \\ \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi \\ \mu \end{pmatrix}; \quad \vec{m}_1 = \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix} = B'_1 \begin{pmatrix} \mu \cos \psi_1 \\ \mu \sin \psi_1 \\ -\sqrt{1 - \mu^2} \end{pmatrix};$$

$$\cos \psi_2 = m_x b_{11}^2 + m_y b_{12}^2 + m_z b_{13}^2; \quad \sin \psi_2 = m_x b_{21}^2 + m_y b_{22}^2 + m_z b_{23}^2.$$

Если при вычислении элементов матриц B_1 и B_2 воспользоваться безаварийным построением систем координат в соответствии с формулой (17), алгоритм вычислений окажется освобожденным от особенностей.

Как уже отмечалось, система отсчета параметров вектора Стокса сохраняется между столкновениями. Следовательно, можно воспользоваться матрицей B_2 , необходимой для вычисления элементов матрицы $L(\pi - \psi_2)$, на следующем столкновении. Это приводит к заметному выигрышу при моделировании очередного столкновения, поскольку не требуется части наиболее трудоемких вычислений.

Конечно, необходимым и достаточным условием применимости такого алгоритма является согласованность систем координат для моделирования направления полета частицы и для отсчета параметров Стокса.

"Стандартный" выбор $\vec{n}^0 = \vec{n}_0 = \{0, 0, 1\}$ для построения систем координат позволил авторам работ [13, 14] использовать θ и ψ_1 и для моделирования $\vec{\omega}$, и для вычисления элементов матрицы $L(-\psi_1)$. При этом в работе [14] Каттавар и Пласс численно обосновывают возможность такого

использования в "первом приближении" и не говорят о согласованности выбора систем координат, отсылая читателя к уравнениям сферической тригонометрии для вывода формул.

Преимущества геометрического подхода и эффективность согласования выбора системы отсчета параметров поляризованного излучения с системой координат для моделирования направления полета частицы явно отмечены в работе [12]. Используя для получения алгоритмов векторный анализ, Дуглас Пеплов называет свой подход новым (с чем трудно согласиться) и считает его более физическим, более ясным для понимания и естественным для применения по сравнению с традиционным использованием средств сферической тригонометрии. К сожалению, из текста статьи [12] нет возможности узнать, какое именно уравнение решает Д. Пеплов. Видно, что не в полной мере использованы возможности геометрического подхода [4], и в результате не удалось получить экономичные и безаварийные алгоритмы. В статье [12] утверждается, что, по сравнению с традиционными полученными алгоритмы примерно на 8% более дорогостоящи в случае неполяризованных частиц и несколько более экономичны в случае расчетов поляризованного излучения. Отмечены особенности, возникающие в алгоритмах моделирования, но не названа порождающая эти особенности топологическая природа. Увы, но от теоремы Пуанкаре—Брауэра уйти невозможно. И поскольку все построения проводятся в классе непрерывных функций, предложенные в статье [12] меры не позволили полностью решить проблему безаварийности.

В заключение отметим, что задача распространения геометрического подхода и получения безаварийных алгоритмов моделирования акта рассеяния поляризованного излучения была поставлена Н. Н. Ченцовым. Отсутствие удовлетворительной вероятностной трактовки векторного уравнения переноса поляризованного излучения заметил Ю. К. Кочубей. Автор всегда будет с благодарностью помнить о своем многолетнем общении с этими двумя безвременно ушедшими выдающимися математиками.

Список литературы

1. *Кочубей Ю. К.* Статистическое моделирование кинетических процессов. Саров: РФЯЦ—ВНИИЭФ, 2004.
2. *Гельфанд И. М., Фейнберг С. М., Фролов А. С., Ченцов Н. Н.* О применении метода случайных испытаний (метода Монте-Карло) для решения кинетического уравнения. // Тр. Второй межд. конф. ООН по мирному использованию атомной энергии, Женева, 1958 г. Доклады советских ученых. Т. 2. Ядерные реакторы и ядерная энергетика. М.: Атомиздат, 1959. С. 628—633; *Ченцов Н. Н.* Избранные труды. Математика. М.: Физматлит, 2001. С. 67—72.
3. *Cashwell E. D., Everett C. J.* A Practical Manual on the Monte Carlo Method for Random Walk Problems. Pergamon Press, 1959.
4. *Субботин А. Н., Ченцов Н. Н.* Моделирование процесса рассеяния частиц в методе Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1982. Вып. 1(9). С. 3—9; *Ченцов Н. Н.* Избранные труды. Математика. М.: Физматлит, 2001. С. 134—144.
5. Николай Николаевич Ченцов (19.II.1930—05.VII.1992) // Теория вероятностей и ее применения. 1993. Т. 38. Вып. 3. С. 613—623.
6. *Александров П. С.* Комбинаторная топология. М.: Гостехиздат, 1947.
7. *Чандрасекар С.* Перенос лучистой энергии. М.: Иностран. литература, 1953.
8. *Кузьмина М. Г.* Уравнение переноса поляризованного излучения в анизотропных средах: Препринт № 68. М.: ИПМ, 1976.
9. *Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А., Дарбинян Р. А., Каргин Б. А., Елепов Б. С.* Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Под общей ред. Г. И. Марчука. Новосибирск: Наука, 1976.

10. Михайлов Г. А., Назаралиев М. А. Расчет поляризации света в сферической атмосфере методом Монте-Карло // Изв. АН СССР. Сер. Физика атмосферы и океана. 1971. Т. 7, № 4. С. 385—395.
 11. Bell G. I., Goad W. B. Polarization effects on neutron transport // Nucl. Science and Eng. 1965. Vol. 233. P. 360—391.
 12. Peplow D. E. Direction cosines and polarization vectors for Monte Carlo photon scattering // Ibid. 1999. Vol. 131. P. 132—136.
 13. Depaola G. O. New Monte Carlo method for Compton and Rayleigh scattering by polarized gamma rays // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 2003. Vol. A 512. P. 619—630.
 14. Kattawar G. W., Plass G. N. Radiance and polarization of multiple scattered light from haze and clouds // Appl. Optics. 1968. Vol. 7, No 8. P. 1519—1527.
-