

оказаться слишком затруднительным. Однако в этом случае может существовать удобная для численного моделирования формула вида

$$\xi = \varphi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n). \quad (3.44)$$

В этом параграфе приводятся алгоритмы численного моделирования случайных величин, используемых при построении алгоритмов метода Монте-Карло для решения краевых задач для уравнения эллиптического типа. Все они основаны на применении формул вида (3.44).

Ранее было показано, что интеграл, выражающий функцию $\varphi(r)$ при $r \notin \Gamma_\epsilon$, можно оценивать по одному случайному узлу (см. (3.23)), распределенному с плотностью

$$G(\rho, d)/F_R = \frac{1}{4\pi} \frac{\sin((d - |\rho|)\sqrt{c})}{|\rho| \cdot \operatorname{sh}(d\sqrt{c}) F_R},$$

где $F_R = \int_{x^2+y^2+z^2 \leq d^2} G(\rho, d) dx dy dz = \frac{1}{\sqrt{c}} \left(-\frac{d}{\operatorname{sh}(d\sqrt{c})} + \frac{1}{\sqrt{c}} \right)$, $|\rho| = |r - r'|$. После перехода к полярной системе координат получим

$$f_{\rho, \theta, \psi}(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sin \theta x \cdot \operatorname{sh}[(d-x)\sqrt{c}]}{F_R \operatorname{sh}(d\sqrt{c})}, \quad (3.45)$$

$$0 \leq \psi \leq 2\pi, 0 \leq \theta \leq \pi, x < d.$$

Выражение (3.45) представляет совместную плотность распределения независимых случайных величин ρ, θ, ψ , причем $f_{\rho, \theta, \psi}(x) = f_\rho(x) \cdot f_\theta \cdot f_\psi$.

Рассмотрим отдельно

$$f_\rho(x) = \frac{cx \operatorname{sh}[(d-x)\sqrt{c}]}{\operatorname{sh}(d\sqrt{c}) - \operatorname{sh}(x\sqrt{c})}. \quad (3.46)$$

Сделав замену переменных $y = x/d$ и обозначив \sqrt{c} через a , будем иметь

$$f_\rho(y) = \frac{(ad)^2 y \operatorname{sh}[d \cdot a(1-y)]}{\operatorname{sh}(ad) - \operatorname{sh}(a)}. \quad ?$$

Разложим функцию $f_\rho(y)$ в степенный ряд и преобразуем его так, чтобы он представлял собой формулу полной плотности вероятности:

$$f_\rho(y) = \frac{a^2 d^2}{\operatorname{sh}(ad) - ad} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+2)(2n+3)y(1-y)^{2n+1} \times \frac{(ad)^{2n+1}}{(2n+3)!}, \quad 0 \leq y \leq 1. \quad (3.47)$$

Легко показать, что

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^2 d^2}{\operatorname{sh}(ad) - ad} \cdot \frac{(ad)^{2n+1}}{(2n+3)!} = 1,$$

$$\int_0^1 (2n+2)(2n+3)y(1-y)^{2n+1} dy = 1 \text{ при любом } n.$$

Случайная величина с плотностью (3.47) моделируется в два этапа:

1) соответственно вероятностям

$$[a^2 d^2 / (\operatorname{sh} ad - ad)] (ad)^{2n+1} / (2n+3)!$$

выбирается номер n ; среднее число проб на первом этапе равно сумме ряда

$$q = \frac{a^2 d^2}{\operatorname{sh} ad - ad} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(ad)^{2k+1}}{(2k+3)!} (k+1) = \frac{1}{2} \cdot \frac{ad (\operatorname{ch}(ad) - 1)}{\operatorname{sh} ad - 1} - 1;$$

2) моделируется случайная величина η_m с плотностью

$$f_{\eta_m}(x) = (2n+2)(2n+3)x(1-x)^{2n+1}. \quad (3.48)$$

Предлагается следующий алгоритм. Из теории порядковых статистик известно, что если взять m выборочных значений $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ случайной величины α , равномерно распределенной в интервале $[0, 1]$, и расставить их в порядке возрастания: $\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_m^*$, то плотность распределения α_k^* имеет вид $c_k x^{k-1} (1-x)^{m-k}$. Отсюда получаем, что можно положить $\eta_m = \alpha_2^*$, $m = 2n+3$, и η_m распределено с плотностью (3.48). Нетрудно заметить, что выбор значений η_m можно производить в одном цикле с выбором значения n . Для этого на первом шаге выбираются α_1^* и α_2^* , соответствующие $m = 3$. Затем при каждом увеличении n на единицу выбираются значения $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_1^*, \alpha_2^*$; первые

$$\times \left(\frac{(d - |r' - r|) \operatorname{ch}[(d - |r' - r|)\sqrt{c}]}{\operatorname{sh}[(d - |r' - r|)\sqrt{c}]} - \frac{a \operatorname{ch}(d\sqrt{c})}{\operatorname{sh}(d\sqrt{c})} \right) dr, \quad (3.40)$$

если же $r \in \Gamma_\epsilon$, то $\frac{\partial \varphi(r)}{\partial c} = 0$. Подставив эти выражения в (3.39), найдем

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(P_0)}{\partial c} \Big|_{c=c_0} &= M \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{1}{2} \varphi(P_n) Q_n \left(\frac{n}{c} - \right. \right. \\ &\left. \left. - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i \operatorname{ch}(d_i \sqrt{c})}{\sqrt{c} \operatorname{sh}(d_i \sqrt{c})} \right) \right\} \Big|_{c=c_0} + Q_n \tilde{\psi}(P_n) \Bigg\} \Big|_{c=c_0}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Здесь $\tilde{\psi}(P_n)$ определяется выражением (3.40) и

$$\sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i \operatorname{ch}(d_i \sqrt{c})}{\sqrt{c} \operatorname{sh}(d_i \sqrt{c})} = 0 \quad \text{при } n = 0.$$

Легко заметить, что вычисления производных не требуют существенного числа дополнительных арифметических операций.

2. В настоящем разделе речь пойдет о применении методов Монте-Карло для восстановления неизвестных параметров задачи (3.17) или (3.18), если известно решение $\tilde{u}(P_k)$ в некоторых точках области $D(k = 1, 2, \dots, m)$. В частности, такими неизвестными параметрами могут быть коэффициент c , параметры правой части g и граничной функции ψ . Метод Монте-Карло в рамках такой постановки можно применять для вычисления производных от решения по искомым параметрам. Заметим, что оценивать такие производные можно одновременно с оценкой решения, т. е. использовать одни и те же «выборочные траектории».

Пусть нам заданы значения решения задачи (3.17) в некоторых точках P_k , $k = 1, 2, \dots, m$, обозначим их через \tilde{u}_k , а через Σ — вектор неизвестных параметров, т. е. $\Sigma = \Sigma(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$. Рассмотрим систему уравнений $u_k(\Sigma) = \tilde{u}_k$, $k = 1, 2, \dots, m$. Далее, пусть нам известно некоторое приближение $\Sigma^0 = (\sigma_1^0, \dots, \sigma_n^0)$. Вычитая из обеих частей последнего уравнения величину $u_k(\Sigma^0)$, придем к следующей системе:

$$\delta u_k(\Sigma) = \tilde{u}_k - u_k(\Sigma^0), \quad k = 1, 2, \dots, m,$$

где $\delta u_k(\Sigma) = u_k(\Sigma) - u_k(\Sigma^0)$. Разложим функцию $u_k(\Sigma)$ в ряд Тейлора в точке $\Sigma = \Sigma^0$ и, отбросив члены, содержащие производные выше первого порядка, получаем линеаризованную систему:

$$\sum_{i=1}^n a_{i,k} \delta \sigma_i = \tilde{u}_k - u_k(\Sigma^0), \quad k = 1, m. \quad (3.42)$$

Здесь $a_{i,k} = \partial u_k / \partial \sigma_i$ в точке $(\sigma_1^0, \dots, \sigma_n^0)$.

Система (3.42) — система линейных уравнений относительно неизвестных $\delta \sigma_i$, причем она будет переопределенной, если $m > n$. В этом случае решение можно получить методом наименьших квадратов, используя веса, соответствующие точности измерений. Если система (3.42) плохо определена, то ее решение сильно зависит от ошибок измерений. В таких случаях можно использовать какой-либо метод регуляризации, если есть априорная информация о решении, например, статистического характера.

В заключение отметим, что $\partial u_k / \partial \sigma_i(\Sigma^0)$, $u_k(\Sigma^0)$ можно оценивать по одним и тем же траекториям, причем вычисление производных почти не требует дополнительных затрат времени ЭВМ.

§ 3.4. Моделирование некоторых случайных величин

1. В расчетах по методу статистических испытаний (метод Монте-Карло) необходимо моделировать случайные величины с заданными законами распределения. Для этого обычно используются преобразования над одной или несколькими независимыми случайными величинами, каждая из которых равномерно распределена в интервале $[0, 1]$. Стандартные случайные величины будем обозначать α (с индексами или без них).

Пусть задана плотность распределения вероятностей $f(x)$, и $F(x)$ — соответствующая ей функция распределения. Известно, что случайная величина

$$\xi = F^{-1}(\alpha) \quad (3.43)$$

распределена по закону с плотностью $f(x)$. В тех случаях, когда функция $F^{-1}(\alpha)$ не выражается через элементарные, моделирование с помощью формулы (3.43) может

$$f_x(\mathbf{r}) = \frac{x_1(d_0^3 - |\mathbf{r} - P_0|^3)}{d_0^3 |\mathbf{r} - P_0|^3}, \quad |\mathbf{r} - P_0| < d_0.$$

В практических задачах, как правило, необходимо оценивать все три производные: по x , y , z . Если качество алгоритма оценивать по величине суммы дисперсий оценок соответствующих интегралов, то целесообразно использовать такую плотность:

$$\begin{aligned} [f_x^2(\mathbf{r}) + f_y^2(\mathbf{r}) + f_z^2(\mathbf{r})]^{1/2} &= \frac{d_0^3 - |\mathbf{r} - P_0|^3}{d_0^3 |\mathbf{r} - P_0|^3}, \quad (3.35) \\ |\mathbf{r} - P_0| &< d_0, \quad (x_1^2 + y_1^2 + z_1^2)^{1/2} = |\mathbf{r} - P_0|. \end{aligned}$$

Интегралы, стоящие под знаком математического ожидания в (3.34), можно также оценивать по одному случайному «узлу», распределенному с плотностью

$$f(\mathbf{r}) \sim \frac{d_i - |\mathbf{r} - P_i|}{\mathbf{r} - P_i}. \quad (3.36)$$

Алгоритмы моделирования случайных величин с плотностями (3.35), (3.36) рассмотрены в следующем параграфе.

При решении ряда практических задач и особенно при решении обратных задач для эллиптических уравнений полезно оценивать производные от решения задачи (3.17) по параметру c в точке $P_0 = R_0 = (x_0, y_0, z_0)$. Далее будет построен алгоритм метода Монте-Карло для оценки производной по c в точке $R_0 = (x_0, y_0, z_0)$ при $c = c_0$ от решения задачи

$$\Delta u - cu = -g(x, y, z), \quad u|_{\Gamma} = \psi(x, y, z), \quad (3.37)$$

где g , ψ и Γ удовлетворяют приведенным выше условиям.

Ранее было показано, что решение задачи (3.37) в точке R_0 определяется соотношением

$$u(P_0) = M \left\{ \sum_{n=0}^N Q_n \varphi(P_n) \right\}, \quad (3.38)$$

$$\text{где } Q_n = Q_{n-1} \cdot \frac{d_{n-1} V^c}{\sinh(d_{n-1} V^c)}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad Q_0 = 1,$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{\sinh[(d - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) V^c]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \sinh(d V^c)} g(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \mathbf{r} \notin \Gamma_e,$$

Продифференцируем соотношение (3.38) по c :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(P_0)}{\partial c} \Big|_{c=c_0} &= M \left\{ \sum_0^N \left[\frac{\partial Q_n}{\partial c} \varphi(P_n) + Q_n \frac{\partial \varphi(P_n)}{\partial c} \right] \right\} \Big|_{c=c_0} = \\ &= M \left\{ \sum_0^N \varphi(P_n) Q_n \frac{\partial \ln Q_n}{\partial c} + Q_n \frac{\partial \varphi(P_n)}{\partial c} \right\} \Big|_{c=c_0}. \quad (3.39) \end{aligned}$$

Рассмотрим отдельно первый член:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln Q_n}{\partial c} &= \frac{\partial \ln}{\partial c} \left(Q_{n-1} \frac{d_{n-1} V^c}{\sinh(d_{n-1} V^c)} \right) = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{\partial}{\partial c} \ln d_{n-1} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial c} \ln V^c - \frac{\partial}{\partial c} \ln \sinh(d_{n-1} V^c) = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{c} - \\ &- \frac{1}{2} \frac{\cosh(d_{n-1} V^c) d_{n-1}}{\sinh(d_{n-1} V^c) V^c} = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - \frac{d_{n-1} \cosh(d_{n-1} V^c)}{V^c \sinh(d_{n-1} V^c)} \right). \end{aligned}$$

Аналогично

$$\frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} = \frac{\partial \ln Q_{n-2}}{\partial c} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - \frac{d_{n-2} \cosh(d_{n-2} V^c)}{V^c \sinh(d_{n-2} V^c)} \right),$$

$$\frac{\partial \ln Q_1}{\partial c} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - \frac{d_0 \cosh(d_0 V^c)}{V^c \sinh(d_0 V^c)} \right).$$

Окончательно имеем

$$\frac{\partial Q_n}{\partial c} = Q_n \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{n}{c} - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i \cosh(d_i V^c)}{V^c \sinh(d_i V^c)} \right).$$

Далее, если $r \notin \Gamma_e$, то

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi(\mathbf{r})}{\partial c} \Big|_{c=c_0} &= \frac{\partial}{\partial c} \int \frac{1}{4\pi} \frac{\sinh[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) V^c]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \sinh(d V^c)} g(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \\ &= \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi} g(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial c} \frac{\sinh[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) V^c]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \sinh(d V^c)} d\mathbf{r}' = \\ &= \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi} \frac{\sinh[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) V^c]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \sinh(d V^c)} g(\mathbf{r}') \frac{\partial \ln \sinh[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) V^c]}{\partial c} \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \sinh(d V^c)} \times \\ &\quad \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi} \frac{\sinh[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) V^c]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \sinh(d V^c)} g(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \sinh(d V^c)} \times \end{aligned}$$

§ 3.3. Оценка производных от решения методом Монте-Карло. Возможности решения обратных задач

1. Для решения некоторых прикладных задач (например, задач электронно-ионной оптики о пробое электролиторов) необходимо вычислять производные от решения по координатам. В работе Дядькина, Старикова (1965) получено выражение «весового множителя» для оценки решения уравнения Лапласа в двух точках по одному и тому же выборочным траекториям. Используя этот вид метода «зависимых испытаний», построим алгоритм метода Монте-Карло для непосредственной оценки производных от решения задачи

$$\Delta u = -g, \quad u|_{\Gamma} = \psi(x, y, z). \quad (3.31)$$

Здесь функции $g(x, y, z)$, $\psi(x, y, z)$ и граница Γ удовлетворяют условиям, упомянутым в § 3.2.

Пусть необходимо вычислить значение производной по x от решения задачи (3.31) в точке $P_0 = (x_0, y_0, z_0)$. Через $P_{0,x}$ обозначим точку $(x_0 + x, y_0, z_0)$. Тогда решение задачи (3.31) в точке $P_{0,x}$ для шара радиуса $d(P_0)$ имеет вид

$$u(P_{0,x}) = \int_{S(P_0)} p(\omega, x) u(s) ds + \int_{|\mathbf{r}-P_0| < d} G_x(\mathbf{r}, d_0) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.32)$$

«Шаровая» функция Грина $G_x(\mathbf{r}, d_0)$ и ее нормальная производная $p(\omega, x)$ выражаются формулами:

$$G_x(\mathbf{r}, d_0) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{|\mathbf{r}-P_{0,x}|} - \frac{d_0}{\sqrt{x^2 r_{+}^2 d_0^2 - 2d_0 x \cdot x_1}} \right),$$

$$p(\omega, x) = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{d_0 (d_0^2 - x^2)}{(d_0^2 + x^2 - 2d_0 x \cdot a)^{3/2}}, \quad (3.33)$$

где ω — единичный вектор направления из P_0 в P_1 , $a = a(x, \omega)$ — косинус угла между ω и осью x , x_1 есть величина проекции вектора $\mathbf{r} - P_0$ на ось x (P_0 — радиус-вектор точки P_0), $x < d(P_0) = d_0$.

Продифференцируем соотношение (3.32) по x , учитывая, что $p(\omega, x)$ и $G_x(\mathbf{r}, d_0)$ определяются выражениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0, z_0) &= \int_{|\mathbf{r}-P_0| < d_0} g(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x} G_x(\mathbf{r}, d_0) d\mathbf{r} |_{x=0} + \\ &+ 4\pi M_\omega \left\{ \frac{\partial p(\omega, x)}{\partial x} u(P_1) \right\} = \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{r}-P_0| < d_0} \frac{x_1 (d_0^3 - |\mathbf{r} - P_0|^3)}{d_0^3 |\mathbf{r} - P_0|^3} \times \\ &\times g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + M \left\{ 3a/d_0 \left[\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{4\pi d_i} \int_{|\mathbf{r}-P_i| < d_i} \frac{d_i - |\mathbf{r} - P_i|}{|\mathbf{r} - P_i|} \times \right. \right. \\ &\left. \left. \times g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \psi(P_N^*) \right] \right\} \end{aligned}$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial y}(x_0, y_0, z_0) &= \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{r}-P_0| < d_0} \frac{x_1 (d_0^3 - |\mathbf{r} - P_0|^3)}{d_0^3 |\mathbf{r} - P_0|^3} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\ &+ M \left\{ 3b/d_0 \left[\sum_{i=1}^N \frac{1}{4\pi d_i} \int_{|\mathbf{r}-P_i| < d_i} \frac{d_i - |\mathbf{r} - P_i|}{|\mathbf{r} - P_i|} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \psi(P_N^*) \right] \right\}; \quad (3.34) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial z}(x_0, y_0, z_0) &= \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{r}-P_0| < d_0} \frac{z_1 (d_0^3 - |\mathbf{r} - P_0|^3)}{d_0^3 |\mathbf{r} - P_0|^3} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\ &+ M \left\{ 3c/d_0 \left[\sum_{i=1}^N \frac{1}{4\pi d_i} \int_{|\mathbf{r}-P_i| < d_i} \frac{d_i - |\mathbf{r} - P_i|}{|\mathbf{r} - P_i|} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \psi(P_N) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Соотношение (3.34) дает возможность построить алгоритм метода Монте-Карло для оценки производных в заданной точке P_0 по x, y, z . Рассмотренным способом можно определить оценки и для производных высших порядков. Важно отметить, что соотношение (3.32) позволяет оценивать решение во всех точках шара $|\mathbf{r} - P_0| < d_0$. Это полезно по двум причинам: во-первых, экономится время ЭВМ; во-вторых, статистические оценки значений $u(\mathbf{r})$ получаются зависимыми, что обеспечивает более точную оценку функции в целом.

Первые интегралы в выражениях (3.34) можно оценивать методом Монте-Карло по одному случайному «узлу»

$$u(P_0) = M\xi, \quad \xi = \varphi(P_0) + \sum_{n=1}^N \varphi(P_n),$$

где $Q_n = 1$, $n = 1, 2, \dots$. Рассуждая аналогично приведенному, легко получить соотношение $u(P_0) = M\xi_{\varepsilon,1}$,

$$\xi_{\varepsilon,1} = \varphi_1(P_0, \rho_0, \omega_0) + \sum_{n=1}^{N-1} \varphi_1(P_n, \rho_n, \omega_n) + \psi(P_N^*),$$

где $\varphi_1(r, \rho, \omega) = \frac{d^2}{6} g(r + \rho \cdot \omega)$, причем $M\varphi_1(r, \rho, \omega) = \varphi(r)$. Интеграл, выражающий $\varphi(r)$ при $r \notin \Gamma_\varepsilon$, можно оценивать по одному случайному узлу, распределенному с плотностью

$$f_{\rho, \theta, \psi}(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sin \theta}{2} \frac{6x(1-x/d)}{d^2}, \quad 0 \leq x \leq d.$$

Исходя из формул (3.22), (3.25), (3.20), сформулируем алгоритм метода Монте-Карло для оценки решения задачи (3.17) в заданной точке P_0 :

1) из точки P_0 моделируется цепь $\{P_n\}$ до первого попадания в ε -окрестность границы Γ_ε , определяется точка $P^* \in \Gamma(P^*)$ — ближайшая к последнему состоянию P_N точка границы, N — номер последнего состояния;

2) соответственно плотности (3.26) в каждой сфере $S(P)$ вычисляется значение функции $\varphi_1(r, \rho, \omega)$; подсчитываются веса Q_n , $n = 0, 1, 2, \dots$;

3) искомая оценка получается осреднением по всем траекториям величины

$$\xi_{\varepsilon,1} = \varphi_1(P_0, \rho_0, \omega_0) + \sum_{n=1}^{N-1} Q_n \varphi_1(P_n, \rho_n, \omega_n) + \psi(P_N^*). \quad (3.27)$$

Для практических расчетов важна

Теорема 3.2. Дисперсия случайной величины ξ_ε равномерно ограничена по ε , т. е. $D\xi < c < \infty$, $c = \text{const}$.

Доказательство. Ввиду ограниченности функции $\psi(x, y, z)$ достаточно предположить, что $\psi = 0$. При $c = 0$ функция

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \int_{|r-r'|< d} \left(\frac{1}{|r-r'|} - \frac{1}{d} \right) g(r') dr', & \text{если } r \notin \Gamma_\varepsilon, \\ u(r), & \text{если } r \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases} \quad (3.28)$$

Далее, поскольку $Q_N \leq 1$ и $\varphi|_{c \neq 0} \leq \varphi|_{c=0}$, достаточно рассмотреть случай $c = 0$, при котором $Q_N = 1$. В этом случае изучаемый алгоритм представляет собой прямое моделирование (см., например, Ермаков, 1971) для уравнения (3.22), и соответствующая дисперсия выражается следующей формулой Ермакова, Золотухина (1963):

$$D\xi_\varepsilon = (f_\varepsilon, \varphi [2f_\varepsilon^* - \varphi]), \quad (3.29)$$

где f_ε — плотность центров сфер, а f_ε^* — решение задачи для данного значения ε . В § 3.4 показано, что $f_\varepsilon(d) \leq c_1/d$. В то же время

$$f_\varepsilon < c_2, \quad \varphi(d) \leq c_3 d^2, \quad (3.30)$$

в силу (3.28). Отсюда получаем утверждение теоремы путем интегрирования (3.29) по достаточно узкому «приграничному слою».

Алгоритмы метода Монте-Карло для решения интегральных уравнений можно улучшить, используя априорную информацию при решении сопряженного уравнения. В данном случае дисперсия оценки $u(P_0)$ будет равна нулю, если плотности распределения на поверхности сфер брать пропорциональными решению $u(r)$, вводя соответствующие весовые множители. Это непосредственно следует из результатов работы Михайлова (1969), которые также показывают, что дисперсию оценки $u(P_0)$ можно сделать достаточно малой, если плотность перехода определяется достаточно хорошим приближением к решению с точностью до постоянного множителя.

Приведенный алгоритм метода Монте-Карло позволяет решать краевые задачи для уравнения Гельмгольца, Пуассона и Лапласа в областях с практически произвольной границей. Особенно эффективен алгоритм такого типа для задач большой размерности. Заметим, что нетрудно получить конкретный вид алгоритма для различного числа измерений (см. § 3.5).

Поскольку «блуждание по сферам» не зависит от g , ψ , c , можно одновременно проводить расчеты для различных значений характеристик задачи. Это дает возможность вычислять вариации решения при небольших вариациях g , ψ , c ; нетрудно выписать алгоритмы вычисления соответствующих производных, которые можно использовать при решении некоторых обратных задач теории потенциала.

ко вместо точных значений $u(\mathbf{r})$ в Γ_ε можно использовать приближенные значения, например, беря их с ближайших точек границы, т. е. полагать:

$$u(\mathbf{r}) \approx \psi(\mathbf{r}^*), \quad \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon, \quad \mathbf{r}^* \in \Gamma, \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}^*| = d(\mathbf{r}) \leq \varepsilon.$$

В результате получим смещенную оценку ξ_ε , среднее значение которой отличается от $u(P_0)$ на величину порядка ε . Действительно, если рассмотреть выражение для разности оценок ξ и ξ_ε , то будем иметь

$$|u - u_\varepsilon| = |M\{Q_N[\phi(\mathbf{r}_N) - \phi(\mathbf{r}_N^*)]\}| \leq A \cdot \varepsilon,$$

где A — некоторая константа, которая конечна вследствие ограниченности в области D' производных от решения. Здесь нами использовано соотношение $Q_N \leq 1$.

Описанный способ переноса граничных условий в поясу Γ_ε М. Мюллер называл «б-усечением» первого порядка. Можно предложить различные способы учета граничных условий: использование кривизны $\Gamma(D)$, осреднение по телесному углу, под которым видна часть $\Gamma(D)$ из точки $\mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon$. Точность ε -приближения можно существенно увеличить с помощью экстраполяции по ε (см. § 7.1). Расчеты для различных значений ε можно производить одновременно, т. е. получать результат для любого $\varepsilon_1 > \varepsilon$ без дополнительных затрат времени ЭВМ; при этом ввиду сильной зависимости оценок разность $u_\varepsilon - u_{\varepsilon_1}$ вычисляется достаточно хорошо. Эффективность такой методики подтверждается расчетами.

Дисперсия полученной оценки конечна, так как ξ_ε убывает с ростом c , а при $c = 0$ веса равны 1, и «блуждание по сферам» представляет «прямое моделирование», для которого дисперсия конечна.

Далее, интеграл, выражающий $\phi(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \notin \Gamma$, можно оценивать методом Монте-Карло по одному случайному «узлу» (см. приложение 2). Выражение для функции $\phi(\mathbf{r})$, как уже указывалось, имеет вид

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < d} G(\mathbf{r}, d) g(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

где $G(\mathbf{r}, d)$ — функция Грина оператора $\Delta - c$ для шара

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < d, \quad G(\mathbf{r}, d) = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{\sin[(d - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \sqrt{c}]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \sin(d \sqrt{c})}, \quad d = d(\mathbf{r}).$$

Таким образом, универсальная плотность распределения «узла» пропорциональна функции Грина $G(\mathbf{r}, d)$. Вычисление интеграл от функции Грина $G(\mathbf{r}, d)$

$$F_R = \int_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < d} G(\mathbf{r}, d) d\mathbf{r} = \frac{1}{V^c} \left(\frac{1}{V^c} - \frac{d}{\sin(d \sqrt{c})} \right)$$

п переходя к полярной системе координат, для расстояния $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ случайного узла от \mathbf{r} будем иметь следующую плотность распределения случайного узла:

$$f_{\rho, \theta, \psi}(x) = \frac{x \sin[(d - x) \sqrt{c}]}{F_R \sin(\sqrt{c})} \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\sin \theta}{2}. \quad (3.26)$$

Эффективный алгоритм моделирования для такой плотности рассмотрен в § 3.4. Соответствующая случайная оценка $\phi(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\Phi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \frac{1}{V^c} \left(\frac{1}{V^c} - \frac{d}{\sin(d \sqrt{c})} \right) g(\mathbf{r} + \rho \cdot \omega),$$

где ω — изотропный случайный вектор. Легко видеть, что $M\Phi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \phi(\mathbf{r})$. Таким образом, если для оценки $\phi(\mathbf{r})$ использовать приведенное соотношение для Φ_1 , то математическое ожидание случайной величины

$$\xi_{\varepsilon,1} = \Phi_1(P_0, \rho_0, \omega_0) + \sum_{n=1}^{N-1} Q_n \Phi_1(P_n, \rho_n, \omega_n) + Q_N \psi(P_N^*)$$

дает оценку решения задачи (3.17) в точке P_0 . Если в уравнении (3.17) положить $c = 0$, то мы получим задачу Дирихле для уравнения Пуассона. В этом случае функция Грина $G(\mathbf{r}, d)$ примет вид

$$G(\mathbf{r}, d) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{d} \right), \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \leq d(\mathbf{r}) \equiv d,$$

а функция

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < d} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{d} \right) g(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', & \text{если } \mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon, \\ u(\mathbf{r}), & \text{если } \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона будет определяться соотношением, аналогичным соотношению (3.25), т. е.

равномерное распределение вероятностей на сфере $S(P_0)$; после введения этого ядра первый интеграл в (3.19) становится трехмерным. Вернемся к уравнению (3.19). Нетрудно понять, что стандартные алгоритмы метода Монте-Карло распространяются на такие интегральные уравнения, если особенности ядра включать в плотность перехода моделируемой цепи Маркова. В данном случае из точки P_0 следует переходить на поверхность сферы $S(P_0)$; такую цепь мы и называем «блужданием по сферам». Соотношение (3.19) необходимо дополнить следующим равенством:

$$u(P_0) = \psi(P_0); \quad P_0 \in \Gamma, \quad (3.21)$$

которое означает, что ядро интегрального уравнения обращается в нуль, если первый аргумент $P \in \Gamma$. Таким образом, после выхода на границу цепь следует оборвать, прибавив к оценке величину $\psi(P)$ с соответствующим весом.

Указанные соображения приводят к несмешенной вероятностной оценке решения в точке P_0 , которая нереализуема, так как с вероятностью 1 «блуждания по сферам» не выходят на границу за конечное число шагов. Это связано с тем, что норма интегрального оператора в рассматриваемом нами пространстве L_1 равна 1. Далее мы построим «смешенную», но реализуемую оценку решения задачи (3.17) и оценим величину смешения.

Предположим, что решение задачи Дирихле известно в каждой точке множества Γ_ε . Тогда для функции $u(r)$ можно записать следующее интегральное уравнение:

$$u(r) = \int_D k(r, r') u(r') dr' + \phi(r), \quad (3.22)$$

где $k(r, r') = \begin{cases} \frac{d\sqrt{c}}{\operatorname{sh}(d\sqrt{c})} \delta_r(r'), & \text{если } r \in \Gamma_\varepsilon, \\ 0, & \text{если } r \notin \Gamma_\varepsilon, \end{cases}$

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \int_{|r-r'| \leq d} \frac{\operatorname{sh}[(d - |r - r'|)\sqrt{c}] g(r') dr'}{|r - r'| \operatorname{sh}(d\sqrt{c})}, & \text{если } r \notin \Gamma_\varepsilon, \\ u(r), & \text{если } r \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases} \quad (3.23)$$

Здесь $d = d(r)$, $\delta_u(r')$ — обобщенная плотность, соответствующая равномерному распределению вероятностей на сфере $S(r)$.

Чтобы исследовать сходимость ряда Неймана для уравнения (3.22), вычислим норму оператора K в естественном для данной задачи пространстве L_1 . Поскольку при $c > 0$ $d\sqrt{c}/\operatorname{sh}(d\sqrt{c}) \leq 1$, то

$$\begin{aligned} \iint_D k(r, r') k(r', r'') dr' dr'' &\leq \\ &\leq \int_{D - \Gamma_\varepsilon} \delta_r(r') \left(\int_D \delta_{r'}(r'') dr'' \right) dr' = \\ &= \int_{D - \Gamma_\varepsilon} \delta_r(r') dr' \leq 1 - v(\varepsilon). \end{aligned}$$

Здесь использовано условие (2.1) и тот факт, что $k(r', r) = 0$ при $r' \in \Gamma_\varepsilon$. Отсюда получаем

$$\|K^2\|_{L_1} \leq 1 - v(\varepsilon) < 1. \quad (3.24)$$

Следовательно, соотношение (3.24) обеспечивает сходимость ряда Неймана и, тем самым, возможность применения метода Монте-Карло для уравнения (3.22). Еще раз заметим, что (3.22) имеет вид сопряженного интегрального уравнения. Поэтому для оценки $u(P_0)$ можно применить соотношение

$$u(P_0) = M\xi, \quad \xi = \phi(P_0) + \sum_{n=1}^N Q_n \phi(P_n), \quad (3.25)$$

где $\phi(P_n)$ — определяется из (3.23). Здесь $\{P_n\}$ — цепь Маркова, которую целесообразно определить следующим образом:

$r_0(r) = \delta(r - P_0)$ — плотность начального распределения; $r(r, r') = \delta_r(r')$ — плотность перехода из r в r' ; $p(r)$ — вероятность обрыва цепи, определяемая выражением:

$$p(r) = \begin{cases} 0, & r \notin \Gamma_\varepsilon, \\ 1, & r \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

Как уже было указано, эта цепь называется «блужданием по сферам». Для такой цепи $Q_0 = 1, Q_i = Q_{i-1} \frac{d_{i-1}\sqrt{c}}{\operatorname{sh}(d_{i-1}\sqrt{c})}$, $d_i = d(P_i)$, $i = 1, 2, 3 \dots$

Теперь можно вспомнить, что мы временно ввели неравильное предположение: решение $u(r)$ известно в Γ_ε . Одна-

В нашем случае естественно предположить, что $K \in [L_1 \rightarrow L_1]$. Легко показать, что

$$\|K\|_{L_1} \leq \sup_{j, x'} \sum_{i=1}^n \int_X |k_{ij}(x', x)| dx.$$

Известно (см., например, монографию Л. В. Канторовича и Г. П. Акилова, 1959), что если $\lim_{n \rightarrow \infty} \|K^n\|_{L_1} < 1$, то решение системы (3.10) представимо рядом Неймана:

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} K^n f, \quad K^0 f = f. \quad (3.13)$$

Пусть необходимо вычислить функционал

$$I_h = (\varphi, h) = \sum_{i=1}^n \int_X \varphi_i(x) h_i(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (K^n f, h) \quad (3.14)$$

от решения системы интегральных уравнений (3.10—3.11). Здесь h — вектор-функция с ограниченными компонентами. Как и в п. 1, введем вспомогательный случайный вектор «весов» Q по формуле:

$$Q_0^{(i)} = \frac{f_i(x_0)}{r_0(x_0)}, \quad Q_n^{(i)} = \sum_{j=1}^n Q_{n-1}^{(j)} \frac{k_{ij}(x_{n-1}, x_n)}{P(x_{n-1}, x_n)}. \quad (3.15)$$

Аналогично тому, как это делается для одного интегрального уравнения (3.1), можно показать, что

$$M \sum_{h=0}^N \left[\sum_{i=1}^n Q_h^{(i)} h_i(x_h) \right] = (\varphi, h) = (f, \varphi^*).$$

Равенству (3.9) соответствует следующее соотношение:

$$\varphi_i^*(x) = h_i(x) + M \sum_{h=0}^N \left[\sum_{i=1}^n Q_h^{(i)} h_i(x_h) \right]. \quad (3.16)$$

§ 3.2. Построение и обоснование алгоритма «блужданий по сферам» для решения первой краевой задачи для уравнения Гельмгольца

1. Для ограниченной области D с границей Γ трехмерного евклидова пространства X рассмотрим задачу

$$\Delta u - cu = -g, \quad u|_{\Gamma} = \psi(x, y, z), \quad (3.17)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, $c \geq 0$. Относительно формы границы и функций g , ψ предполагаем, что они удовлетворяют условиям, обеспечивающим необходимую нам в дальнейшем гладкость решения.

Настоящий параграф посвящен вопросам построения и обоснования метода Монте-Карло для оценки решения задачи (3.17) в произвольной точке $P_0 \in D$. Для решения задачи

$$\Delta u = 0, \quad u|_{\Gamma} = \psi(x, y, z) \quad (3.18)$$

был предложен Дж. Брауном (1953) и затем обоснован М. Мюллером (1956) алгоритм «блужданий по сферам», основанный на представлении решения исходной задачи в произвольной точке $P \in D$ интегралом по мере Винера.

Обобщим процесс «блужданий по сферам» на случай уравнения Гельмгольца. Для этого используем специальное интегральное уравнение Фредгольма 2-го рода с вырожденным ядром, форма которого определяется «шаровой» функцией Грина задачи (3.17). Обозначим через $G(r, P_0)$ функцию Грина оператора $\Delta - c$ для шара радиуса d_0 с центром в точке P_0 . Тогда решение задачи (3.17) в точке P_0 можно представить в виде

$$u(P_0) = \int_{S(P_0)} -\frac{\partial G(r, P_0)}{\partial n} \Big|_{|r|=d_0} u(s) ds + \int_{|r-P_0| \leq d_0} G(r, P_0) \cdot g(r) dr, \quad (3.19)$$

$$G(r, P_0) = \frac{\sin[(d_0 - |r - P_0|) \sqrt{c}]}{4\pi \cdot |r - P_0| \sin(d_0 \sqrt{c})}, \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial G}{\partial n} \Big|_{|r|=d_0} = \frac{\partial G}{\partial r} \Big|_{|r|=d_0} = -\frac{d_0 \sqrt{c}}{4\pi d_0^2 \sin(d_0 \sqrt{c})},$$

$d_0 = d(P_0)$. Первый интеграл в (3.19) — это интеграл по поверхности сферы $S(P_0)$, второй — по всему шару $|r - P_0| \leq d_0$.

Соотношение (3.19) можно рассматривать как сопряженное (соответственно принятой в теории методов Монте-Карло терминологии) интегральное уравнение Фредгольма 2-го рода с обобщенным ядром, представляющим

точной оценки $q(P_0, \varepsilon)$ можно использовать оценки плотности $f(\mathbf{r})$ распределения среднего числа центров сфер $S(P_k)$ вблизи границы. Обозначим через x расстояние до границы. Соображения подобия показывают, что плотность $f(x)$ распределения среднего числа центров сфер по x с точностью до постоянного множителя должна быть близкой к x^{-1} . Отсюда вытекает соотношение

$q(P_0, \varepsilon) \leq c |\ln \varepsilon|$, которому в следующем параграфе мы придадим более точный смысл на основе теории восстановления, изучающей свойства последовательностей сумм независимых случайных величин.

§ 2.3. Среднее число шагов «блуждания по сферам» до попадания в ε -окрестность плоскости

1. Пусть D — полупространство, ограниченное плоскостью Γ . Обозначим $d_n = d(P_n)$, где $\{P_n\}$ — цепь «блуждания по сферам», начинающаяся в точке $P = P_0$. Величину $\ln d_n$ можно представить следующим образом:

$$\ln d_n = \ln \left(d_0 \prod_{k=1}^n \frac{d_k}{d_{k-1}} \right) = \ln d_0 + \sum_{k=1}^n \ln \left(\frac{d_k}{d_{k-1}} \right). \quad (2.2)$$

Для плоской границы величины $\ln(d_k/d_{k-1})$, очевидно, независимы и одинаково распределены; например, в трехмерном случае

$$d_k = d_{k-1} \cdot 2\alpha_k, \quad (2.3)$$

где α_k — независимые случайные величины, равномерно распределенные в интервале $(0,1)$. Формула (2.3) следует из того, что проекция конечной точки изотропного единичного вектора на фиксированную ось в трехмерном случае распределена равномерно в соответствующем интервале (см., например, Феллер, 1967, с. 48).

Требуемые нам результаты теории восстановления (см., например, Кокс, Смит, 1967) содержатся в следующих утверждениях.

Лемма 1. Пусть $\{\eta_k\}$ — последовательность независимых, одинаково распределенных случайных величин с математическим ожиданием $\mu < 0$, и

$$N_y = \min \left\{ n : \sum_{k=1}^n \eta_k < y \right\}, \quad y < 0.$$

Тогда справедливо следующее асимптотическое соотношение:

$$MN_y = \frac{y}{\mu} + o(|y|) \text{ при } y \rightarrow -\infty. \quad (2.4)$$

Обозначим через $H(y)$ среднее число значений n , для которых выполняется неравенство $\sum_{k=1}^n \eta_k > y$. Принято называть $H(y)$ функцией восстановления.

Лемма 2. Пусть $\eta_k \leq a < +\infty$, $\mu = M\eta_k < 0$ и $M \exp(-c\eta_k) < +\infty$ для некоторого $c > 0$. Тогда при $y < 0$ производная $H'(y)$ существует и $\lim_{y \rightarrow -\infty} H'(y) = |\mu|^{-1}$.

Заметим, что функцию $H'(y)$ обычно называют плотностью восстановления.

2. Далее определяются математические ожидания случайных величин $\eta_k^{(m)} = \ln(d_{k+1}/d_k)$ для различного числа измерений m и их асимптотика при $m \rightarrow \infty$. Будет проверено также выполнение условий леммы 2 для величин $\eta_k^{(m)}$.

Лемма 3. (Мюллер, 1956). Пусть D — m -мерное полупространство, ограниченное $(m-1)$ -мерной гиперплоскостью. Тогда

$$M(\eta_k^{(m)}) = M \left(\ln \frac{d_{k+1}}{d_k} \Big| m \right) = \ln 2 + \psi \left(\frac{m-1}{2} \right) - \psi(m-1) < 0, \quad (2.5)$$

где $\psi(z) = \frac{d \ln \Gamma(z)}{dz}$, $z > 0$; $\Gamma(z)$ — гамма-функция. В частности,

$$M \left(\ln \frac{d_{k+1}}{d_k} \Big| m = 2 \right) = -\ln 2, \quad M \left(\ln \frac{d_{k+1}}{d_k} \Big| m = 3 \right) = \ln 2 - 1,$$

$$M \left(\ln \frac{d_{k+1}}{d_k} \Big| m = \text{нечетн.} \atop m \geq 3 \right) = \ln 2 - \sum_{j=\frac{m-1}{2}}^{m-2} \frac{1}{j}, \quad (2.6)$$

$$M \left(\ln \frac{d_{k+1}}{d_k} \Big| m = \text{нечетн.} \atop m \geq 4 \right) = -\ln 2 + \sum_{j=\frac{m}{2}}^{m-2} \frac{1}{j}.$$

Из сказанного ясно, что вероятностное решение некоторых краевых задач можно связать с цепью Маркова, которую мы будем называть «блужданием по сферам» (иначе ее называют также «сферическим процессом»). Впервые такой процесс ввел, по-видимому, Дж. Браун для решения задачи Дирихле для уравнения Лапласа. В статье (Мюллер, 1956) подробно исследуются свойства процесса «блуждания по сферам» на основе некоторых свойств винеровского процесса.

На первый взгляд кажется, что вероятностное решение краевых задач для уравнения $\Delta u - cu = -g$ нельзя построить, пользуясь только «блужданием по сферам», так как выражение (1.19) зависит от поведения винеровской траектории внутри сфер. Однако это все-таки оказалось возможным благодаря использованию «частичного осреднения» (Елепов, Михайлов, 1969; Кронберг, 1976) и специальных интегральных уравнений второго рода (Елепов, Михайлов, 1973). Поэтому в данной главе рассматривается непосредственно процесс «блуждания по сферам», который значительно проще винеровского.

§ 2.2. Определение и простейшие свойства «блуждания по сферам»

Введем следующие обозначения:

D' — замыкание области D ;

$d(P)$ — расстояние от точки P до границы $\Gamma(D)$ области D ;

Γ_ε — ε -окрестность границы Γ ; $\Gamma_\varepsilon = \{P \in D' : d(P) < \varepsilon\}$;

$S(P) = \{Q \in D' : |Q - P| = d(P)\}$ — максимальная из сфер с центром в точке P , целиком лежащих в D' .

В процессе «блуждания по сферам» очередная точка P_{k+1} выбирается равномерно по поверхности сферы $S(P_k)$; процесс обрывается, если точка попадает в Γ_ε .

Обозначим через $s(P, \varepsilon)$ — поверхность той части сферы $S(P)$, которая принадлежит множеству Γ_ε . Приведем сферу S_ε радиуса ε с центром в точке Q касания границы Γ сферой $S(P)$ (рис. 1). Тогда площадь части сферы $S(P)$, целиком лежащей внутри S_ε , равна $\pi\varepsilon^2$.

ности попадания очередной точки в Γ_ε :

$$\frac{S(P, \varepsilon)}{4\pi d^2(P)} \geq \frac{\pi\varepsilon^2}{4\pi d^2(P)} \geq \frac{\varepsilon^2}{4d_{\max}^2} = v(\varepsilon), \quad (2.1)$$

где d_{\max} — точная верхняя граница радиусов сфер, целиком лежащих в D .

Дадим теперь точное определение процесса «блуждания по сферам». Зададим цепь Маркова $\{P_n\}$ следующими характеристиками: $r_0(r) = \delta(r - P_0)$ — плотность начального распределения (т. е. цепь «выходит» из точки P_0); $r(r, r') = \delta(r - r')$ — плотность перехода из r в r' , представляющая собой обобщенную трехмерную плотность равномерного распределения вероятностей на сфере $S(r)$; $p(r)$ — вероятность обрыва цепи, определяемая выражением:

$$p(r) = \begin{cases} 0, & r \in \Gamma_\varepsilon, \\ 1, & r \notin \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

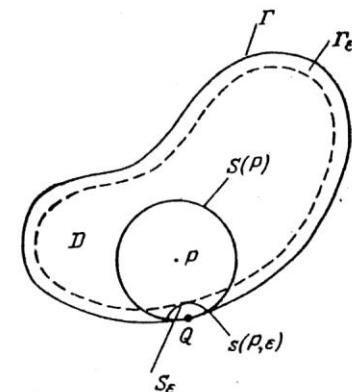


Рис. 1. Иллюстрация основных геометрических понятий, связанных с «блужданием по сферам».

Как уже было указано, эта цепь называется «блужданием по сферам». Ее можно, очевидно, записать следующим образом: $P_n = P_{n-1} + \omega_n d(P_{n-1})$, $n = 1, 2, \dots$, где ω_n — последовательность независимых изотропных векторов единичной длины. Нетрудно заметить, что вероятность $p_1(r)$ обрыва цепи после первого перехода равна вероятности непосредственного попадания из точки r в Γ_ε и удовлетворяет неравенству $p_1(r) \geq v(\varepsilon)$. Отсюда находим, что среднее число переходов $q(P_0, \varepsilon)$, определяющее среднее время расчетов на ЭВМ, не превосходит $v^{-1}(\varepsilon)$.

В работе (Мюллер, 1956) показано, что траектория «блуждания по сферам» с вероятностью 1 сходится к границе области. Следовательно, для получения более

два члена упорядоченного ряда представляют собой по-
вые значения α_1^*, α_2^* .

Таким образом, с точностью до постоянного множи-
теля (порядка 20) среднее число операций, необходимое
для выбора значения ρ , здесь можно оценивать величи-
ной q . Приведенный алгоритм эффективен только для до-
статочно малых ad , так как $q \rightarrow \infty$ при $ad \rightarrow \infty$. Для боль-
ших ad справедливо неравенство

$$x \frac{\operatorname{sh} a(d-x)}{\operatorname{sh} ad} \leq x \exp(-ax),$$

и моделирование целесообразно проводить с помощью
одной из модификаций метода Неймана:

- 1) выбирается значение η_0 случайной величины η с
плотностью $x \exp(-ax)$, $0 \leq x \leq d$, и значение α_0 ;
- 2) если

$$\alpha_0 \leq \frac{\operatorname{sh} a(d-\eta_0)}{\operatorname{sh} ad} \exp(a\eta_0),$$

то η_0 принимается за значение случайной величины η ,
распределенной с плотностью (3.46), иначе снова выпол-
няется 1) и т. д.

Среднее число проб здесь равно

$$q_1 = \left[\frac{1 - ad/\operatorname{sh}(ad)}{1 - ae^{-ad}(d+1/a)} \right]^{-1},$$

$q_1 \rightarrow 1$ при $ad \rightarrow \infty$, т. е. при больших ad данный алгоритм
достаточно эффективен.

Если в исходном дифференциальном уравнении по-
ложить $c = 0$, то мы получим задачу Дирихле для уравне-
ния Пуассона. В этом случае $f_\rho(x) = \frac{6x(1-x/d)}{d^2}$, $0 \leq x \leq d$.
Положив $y = x/d$, найдем

$$f_\rho(y) = 6y(1-y), \quad 0 \leq y \leq 1. \quad (3.49)$$

Выражение (3.49) соответствует распределению второй по-
рядковой статистики из трех выборочных значений слу-
чайной величины, равномерно распределенной в интер-
вале $[0,1]$.

При практической реализации алгоритма метода Мон-
те-Карло для решения уравнений эллиптического типа
удобнее использовать не конкретные значения θ и ψ ,
а направляющие косинусы a, b, c , т. е. косинусы углов

между единичным вектором $\vec{\omega}(\theta, \psi)$ и координатными ося-
ми x, y, z . Для моделирования a, b, c можно предложить
следующий алгоритм:

$$\begin{aligned} \mu &= 1 - 2 \times \alpha_1; \\ A : \xi &= 1 - 2 \times \alpha_2; \quad \eta = 1 - 2 \times \alpha_3; \\ q &= \xi^2 + \eta^2, \text{ если } q < 1, \text{ то} \\ a &= \mu; \quad b = \xi \times \sqrt{(1-\mu^2)/q}; \quad c = \eta \times \sqrt{(1-\mu^2)/q}; \end{aligned}$$

в противном случае снова выполняется пункт A. Здесь
 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ — выборочные значения случайной величины α ,
равномерно распределенной в интервале $[0,1]$.

При оценке производных потенциала методом Монте-
Карло необходимо моделировать случайную величину η ,
распределенную с плотностью

$$f_\eta(r) = \frac{d^3 - |r - P|^3}{d^3 |r - P|^2}, \quad |r - P| < d.$$

Переходя к полярной системе координат с центром в точ-
ке P и делая замену $y = |r - P|/d$, найдем плотность

$$f_\eta(y) = 4(1-y^3)/3, \quad 0 \leq y \leq 1.$$

Используя лемму из § 2 работы Михайлова (1970), для
этой плотности легко получить моделирующую формулу:

$$\eta = \alpha_1 \cdot \sqrt[4]{\alpha_2}.$$

§ 3.5. Решение одной краевой задачи для метагармонического уравнения методом Монте-Карло

Введем оператор усреднения

$$N(u) \equiv Nu(r) = \int_{S(x_0, r)} u(x) ds_x, \quad x \in R^n,$$

и рассмотрим вспомогательное уравнение

$$L(u) - \lambda u = 0, \quad (3.50)$$

где L — произвольный линейный оператор, λ — константа.
Предположим, что операторы $N(u)$ и $L(u)$ переставочны,
тогда

$$L(N(u)) - \lambda N(u) = 0,$$