

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 ;

$\Gamma_\varepsilon - \varepsilon$ — 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 . Проведем 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 $\pi\varepsilon^2$. Отсюда получаем следующую оценку снизу для вероят-

ности попадания очередной точки в Γ_ε :

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

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: $r_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - P_0)$ — плотность начального распределения (т. е. цепь «выходит» из точки P_0); $r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta\mathbf{r}(\mathbf{r}')$ — плотность перехода из \mathbf{r} в \mathbf{r}' , представляющая собой обобщенную трехмерную плотность равномерного распределения вероятностей на сфере $S(\mathbf{r})$; $p(\mathbf{r})$ — вероятность обрыва цепи, определяемая выражением:

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

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 $p_1(\mathbf{r})$ обрыва цепи после очередного перехода равна вероятности непосредственного попадания из точки \mathbf{r} в Γ_ε и удовлетворяет неравенству $p_1(\mathbf{r}) \geq v(\varepsilon)$. 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

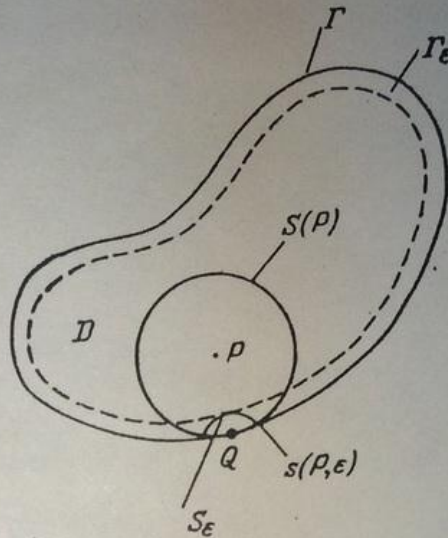


Рис. 1. Иллюстрация основных геометрических понятий, связанных с «блужданием по сферам».

точной оценки $q(P_0, \varepsilon)$ можно использовать оценки плотности $f(r)$ 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

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

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ

§ 3.1. Общая схема решения интегральных уравнений методом Монте-Карло

1. Рассмотрим интегральное уравнение второго рода:

$$\varphi(x) = \int_X k(x', x) \varphi(x') dx' + f(x) \text{ или } \varphi = K\varphi + f, \quad (3.1)$$

где X — n -мерное евклидово пространство, $f, \varphi \in L$, $K \in [L \rightarrow L]$; L — некоторое банахово пространство интегрируемых функций. Будем предполагать, что $K \in [L_1 \rightarrow L_1]$, при этом

$$\|f\| = \int_X |f(x)| dx, \quad \|k\| \leq \sup_x \int_X |k(x, x')| dx'.$$

В дальнейшем будет также использовано сопряженное к (3.1) уравнение

$$\varphi^* = K^* \varphi^* + h, \quad (3.1a)$$

где $h, \varphi^* \in L^*$, $K^* \in [L^* \rightarrow L^*]$; здесь L^* — сопряженное к L пространство функций; K^* — оператор, сопряженный K :

$$[K^* \varphi^*](x) = \int_X k(x, x') \varphi^*(x') dx'.$$

Напомним следующие свойства сопряженных операторов:

$$|(\psi, \varphi)| \leq \|\psi\|_{L^*} \cdot \|\varphi\|_L, \text{ где } (\psi, \varphi) = \int_X \psi(x) \varphi(x) dx;$$

$$\|K\| = \|K^*\|, (K\psi, \varphi) = (\psi, K^* \varphi).$$

Рассматриваемые далее алгоритмы метода Монте-Карло основаны на представлении решения уравнения (3.1) рядом Неймана:

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} K^n \varphi. \quad (3.2)$$

Напомним, что оператор K^n определяется выражением

$$[K^n \varphi](x) = \int_x \dots \int_x^n \varphi(x_0) k(x_0, x_1) \dots k(x_{n-1}, x) dx_0 \dots dx_{n-1}. \quad (3.3)$$

Нетрудно показать, что ряд (3.2) сходится по норме и решение уравнения (3.1) существует, если $\|K\| < 1$. Однако для сходимости ряда Неймана и существования решения достаточно и более слабое условие

$$\|K^{n_0}\| < 1, \quad (3.4)$$

где n_0 — некоторое натуральное число.

Определение. Однородной цепью Маркова называется последовательность случайных величин x_0, x_1, \dots, x_n , связанных простейшей зависимостью: распределение величин x_n определяется только лишь значением x_{n-1} при любом $n = 1, 2, \dots$, причем условная плотность распределения x_n при условии $x_{n-1} = x'$ для любого n равна заданной функции $r(x', x)$ и не зависит от номера n .

Функция $r(x', x)$ называется плотностью вероятностей перехода и обозначается иногда еще так: $r(x' \rightarrow x)$. Распределение «начального состояния» x_0 задается «начальной» плотностью $\pi(x)$. Понятие однородной цепи Маркова можно расширить, введя вероятность обрыва $g(x')$ траектории при переходе $x' \rightarrow x$. Случайный номер последнего состояния будем обозначать N .

Решение интегральных уравнений методом Монте-Карло связано с моделированием цепей Маркова, которые, следовательно, должны обрываться с вероятностью 1 через конечное (хотя и случайное) число переходов. Более того, математическое ожидание $M(N)$ должно быть конечным. Можно показать (см., например, Ермаков, Михайлов, 1976), что условие (3.4) будет достаточным для конечности $M(N)$, если в нем положить $K = K_p$, где K_p — интегральный оператор с ядром $p(x', x) = r(x', x)[1 - g(x')]$.

Предположим теперь, что нам необходимо оценить величину $I_h = (\varphi, h)$, где $\varphi = K\varphi + f$, $(\varphi, h) = \int_x \varphi(x) h(x) dx$;

причем выполняется условие (3.4). Определим цепь Маркова начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной плотностью $p(x', x) = r(x', x)[1 - g(x')]$.

Введем

Рассмотрим

Теорема
 $\|K_1^{n_0}\| < 1$

то

$M\xi =$

Заметим,
 венство обо
 $= \delta(x' - x)$

которое дает
 ло решение
 Равенство
 нейшем.

2. Рассм
 ненный

или

Предполагае
 функционал

Введем вспомогательные случайные «веса» Q_n

$$Q_0 = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}. \quad (3.5)$$

Рассмотрим случайную величину

$$\xi = \sum_{n=0}^N Q_n \cdot h(x_n). \quad (3.6)$$

Теорема 3.1. Пусть $K_1(x', x) = |K(x', x)|$. Если $\|K_1^{n_0}\| < 1$ при некотором натуральном n_0 и

$$\begin{aligned} \pi(x) \neq 0 & \quad \text{при } f(x) \neq 0, \\ p(x', x) \neq 0 & \quad \text{при } k(x', x) \neq 0, \end{aligned} \quad (3.7)$$

то

$$M\xi = M \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n) = I_h = (\varphi, h) = (f, \varphi^*) \quad (3.8)$$

Заметим, что, формально подставляя в последнее равенство обобщенные функции $f(x') = \delta(x' - x)$, $\pi(x') = \delta(x' - x)$ и полагая $Q_0 = 1$, приходим к выражению

$$\varphi^*(x) = h(x) + M \sum_{n=1}^N Q_n h(x_n), \quad (3.9)$$

которое дает возможность оценивать методом Монте-Карло решение сопряженного уравнения в заданной точке. Равенство (3.9) будет часто использоваться нами в дальнейшем.

2. Рассмотрим теперь систему интегральных уравнений

$$\varphi(x) = \int_X k(x', x) \varphi(x') dx' + f(x) \quad (3.10)$$

$$\text{или } \varphi_i(x) = \sum_{j=1}^n \int_X k_{ij}(x', x) \varphi_j(x') dx' + f_i(x) \quad (3.11)$$

$$(i = 1, \dots, n).$$

Предполагается, что вектор-функция φ , f принадлежат функциональному пространству L_1 , причем

$$\|f\| = \sum_{i=1}^n \int_X |f_i(x)| dx. \quad (3.12)$$

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 $\lim_{n \rightarrow \infty} \|K^{n_0}\|_{L_1} < 1$, то решение системы (3.10) представимо рядом Неймана:

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

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 формулам:

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

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

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

Равенству (3.9) соответствует следующее соотношение:

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

✓ § 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 «сферовой» 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

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

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

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

$d_0 = d(P_0)$. 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

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 включить 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 «блуждением 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 несмещенной 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 «смещенную», но реализуемую оценку решения задачи (3.17) и оценим величину смещения.

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

$$u(\mathbf{r}) = \int_D k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \varphi(\mathbf{r}), \quad (3.22)$$

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

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

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

Чт
урави
венно
при с

Здесь
r) = (

След
мост
ния
замет
ного
нить

где с
Мар
обра
r
ния;
p(r)
нием

Как
ем п
d_i =
альн

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Теперь можно вспомнить, что мы временно ввели нерелевантное предположение: решение $u(\mathbf{r})$ известно в Γ_ε . Одна-

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

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

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

$$|u - u_\varepsilon| = |M\{Q_N[\varphi(r_N) - \varphi(r_N^*)]\}| \leq A \cdot \varepsilon,$$

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 полосу Γ_ε М. Мюллер назвал « δ -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 $r \in \Gamma_\varepsilon$. 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 ε , а при $\varepsilon = 0$ веса равны 1, и «блуждание по сферам» представляет «прямое моделирование», для которого дисперсия конечна.

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

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

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

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

Таким
«узла»
ляя п

и пере
пня р
дующ

Эффек
ности
оценка

где ω
 $M\varphi_1(r)$
исполн
матич

$\xi_{\varepsilon,1}$

дает
уравн
Дири
ция I

G

а фун

$\varphi(r)$

Реше
опред
(3.25)

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

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

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

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

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

$$\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \frac{1}{V\bar{c}} \left(\frac{1}{V\bar{c}} - \frac{d}{\text{sh}(d\sqrt{c})} \right) g(\mathbf{r} + \rho \cdot \omega),$$

где ω — изотропный случайный вектор. Легко видеть, что $M\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \varphi(\mathbf{r})$. Таким образом, если для оценки $\varphi(\mathbf{r})$ использовать приведенное соотношение для φ_1 , то математическое ожидание случайной величины

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

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

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

а функция

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

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

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

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 $\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \frac{d^2}{6} g(\mathbf{r} + \rho \cdot \omega)$, причем $M\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \varphi(\mathbf{r})$. Интеграл, выражающий $\varphi(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon$, 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 $\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega)$; 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

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

Далее, поскольку $Q_N \leq 1$ и $\varphi|_{c \neq 0} \leq \varphi|_{c=0}$, достаточно рассмотреть случай $c = 0$, при котором $Q_N \equiv 1$. 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.

§ 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 электроизоляторов) необходимо вычислять производные от решения по координатам. В работе Дядькина, Старикова (1965) получено выражение «веса множителя» для оценки решения уравнения Лапласа в двух точках по одним и тем 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

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

«Шаровая» функция Грина $G(r, d_0)$ и ее нормальная производная $p(\omega, x)$ выражается формулами:

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

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

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 $r - P_0$ 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 $G_x(r, d_0)$ определяются выражениями (3.33) и, положив $x = 0$, получим:

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

Аналогично

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial y}(x_0, y_0, z_0) = & \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{r}-P_0|<d_0} \frac{y_1(d_0^3 - |\mathbf{r}-P_0|^3)}{d_0^3 |\mathbf{r}-P_0|^3} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\ & + M \left\{ 3b/d_0 \left[\sum_{i=1}^N \frac{1}{4\pi d_i} \int_{|\mathbf{r}-P_i|<d_i} \frac{d_i - |\mathbf{r}-P_i|}{|\mathbf{r}-P_i|} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \psi(P_N^*) \right] \right\}; \end{aligned} \quad (3.34)$$

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

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» с плотностью

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

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:

$$[f_x^2(r) + f_y^2(r) + f_z^2(r)]^{1/2} = \frac{d_0^3 - |r - P_0|^3}{d_0^3 |r - P_0|^3}, \quad (3.35)$$

$$|r - P_0| < d_0, \quad (x_1^2 + y_1^2 + z_1^2)^{1/2} = |r - P_0|.$$

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

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

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

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

где $Q_n = Q_{n-1} \cdot \frac{d_{n-1} \sqrt{c}}{\text{sh}(d_{n-1} \sqrt{c})}$, $n = 1, 2, \dots$, $Q_0 = 1$,

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \int_{|r-r'| < d} \frac{\text{sh}[(d - |r-r'|) \sqrt{c}]}{|r-r'| \text{sh}(d \sqrt{c})} g(r') dr', & r \notin \Gamma_\varepsilon, \\ \psi(r^*), & r \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln Q_n}{\partial c} &= \frac{\partial \ln}{\partial c} \left(Q_{n-1} \frac{d_{n-1} \sqrt{c}}{\operatorname{sh}(d_{n-1} \sqrt{c})} \right) = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{\partial}{\partial c} \ln d_{n-1} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial c} \ln \sqrt{c} - \frac{\partial}{\partial c} \ln \operatorname{sh}(d_{n-1} \sqrt{c}) = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{c} - \\ &- \frac{1}{2} \frac{\operatorname{ch}(d_{n-1} \sqrt{c}) d_{n-1}}{\operatorname{sh}(d_{n-1} \sqrt{c}) \sqrt{c}} = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - \frac{d_{n-1} \operatorname{ch}(d_{n-1} \sqrt{c})}{\sqrt{c} \operatorname{sh}(d_{n-1} \sqrt{c})} \right). \end{aligned}$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} &= \frac{\partial \ln Q_{n-2}}{\partial c} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - \frac{d_{n-2} \operatorname{ch}(d_{n-2} \sqrt{c})}{\sqrt{c} \operatorname{sh}(d_{n-2} \sqrt{c})} \right), \\ \frac{\partial \ln Q_1}{\partial c} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - \frac{d_0 \operatorname{ch}(d_0 \sqrt{c})}{\sqrt{c} \operatorname{ch}(d_{n-1} \sqrt{c})} \right). \end{aligned}$$

Окончательно имеем

$$\frac{\partial Q_n}{\partial c} = Q_n \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{n}{c} - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i \operatorname{ch}(d_i \sqrt{c})}{\sqrt{c} \operatorname{sh}(d_i \sqrt{c})} \right).$$

Далее, если $r \notin \Gamma$, то

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi(r)}{\partial c} \Big|_{c=c_0} &= \frac{\partial}{\partial c} \int \frac{1}{4\pi} \frac{\operatorname{sh}[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \sqrt{c}]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \operatorname{sh}(d \sqrt{c})} g(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \\ &= \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi} g(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial c} \frac{\operatorname{sh}[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \sqrt{c}]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \operatorname{sh}(d \sqrt{c})} d\mathbf{r}' = \\ &= \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi} \frac{\operatorname{sh}[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \sqrt{c}]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \operatorname{sh}(d \sqrt{c})} g(\mathbf{r}') \frac{\partial \ln \operatorname{sh}[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \sqrt{c}]}{\partial c} \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \operatorname{sh}(d \sqrt{c})} \times \\ &\times d\mathbf{r}' = \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi} \frac{\operatorname{sh}[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \sqrt{c}]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \operatorname{sh}(d \sqrt{c})} g(\mathbf{r}') \frac{1}{2 \sqrt{c}} \times \end{aligned}$$

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

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

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

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. $\Sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_n)$. 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 $u_k(\Sigma^0)$, приходим к следующей системе:

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

где δ
ряд T
щие p
аризо

Здесь
Сл
сигел
ленно
чить
ответ
плох
бок
кой-
форм
тера
Е
оцен
числ
затр

(ме
ны
это
нес
ка
[0,
ча

$f(x)$
ни

ра
ко
нь

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:

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

Здесь $a_{i_k} = \partial u_k / \partial \sigma_i$ в точке $(\sigma_{1i}^0, \dots, \sigma_n^0)$.

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

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

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

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 $\varphi(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon$, можно оценивать по одному случайному узлу (см. (3.23)), распределенному с плотностью

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$f_p(y) = \frac{a^2 d^2}{\text{sh}(ad) - ad} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+2)(2n+3)y(1-y)^{2n+1} \times$$

$$\times \frac{(ad)^{2n+1}}{(2n+3)!}, \quad (3.47)$$

$$0 \leq y \leq 1.$$

Легко показать, что

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

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

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

1) соответственно вероятностям

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

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

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

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 α_1, α_2 ; упорядочиваются величины $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_1^*, \alpha_2^*$; первые

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 поло-
жить $c = 0$, 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

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

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