§ 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 «весового 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

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

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

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

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

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

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

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 (3.33) и, положив $x = 0$, получим:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0, z_0) = \int\limits_{|\mathbf{r}-P_0|<d_0} g(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x} G_x(\mathbf{r}, d_0)\, d\mathbf{r}\,\Big|_{x=0} +$$

$$+ 4\pi M_\omega\left\{\frac{\partial p(\omega, x)}{\partial x} u(P_1)\right\} = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{|\mathbf{r}-P_0|<d_0} \frac{x_1\left(d_0^3 - |\mathbf{r} - P_0|^3\right)}{d_0^3\, |\mathbf{r} - P_0|^3} \times$$

$$\times g(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} + M\left\{3a/d_0\left[\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{4\pi d_i} \int\limits_{|\mathbf{r}-P_i|<d_i} \frac{d_i - |\mathbf{r} - P_i|}{|\mathbf{r} - P_i|} \times\right.\right.$$

$$\left.\left.\times g(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} + \psi\left(P_N^*\right)\right]\right\}$$

Аналогично

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_0, y_0, z_0) = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{|\mathbf{r}-P_0|<d_0} \frac{y_1\left(d_0^3 - |\mathbf{r} - P_0|^3\right)}{d_0^3\, |\mathbf{r} - P_0|^3} g(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} +$$

$$+ M\left\{3b/d_0\left[\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{4\pi d_i} \int\limits_{|\mathbf{r}-P_i|<d_i} \frac{d_i - |\mathbf{r} - P_i|}{|\mathbf{r} - P_i|} g(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} + \psi\left(P_N^*\right)\right]\right\}; \tag{3.34}$$

$$\frac{\partial u}{\partial z}(x_0, y_0, z_0) = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{|\mathbf{r}-P_0|<d_0} \frac{z_1\left(d_0^3 - |r - P_0|^3\right)}{d_0^3 \cdot |\mathbf{r} - P_0|^3} g(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} +$$

$$+ M\left\{3c/d_0\left[\sum \frac{1}{4\pi d_i} \int\limits_{|\mathbf{r}-P_i|<d_i} \frac{d_i - |\mathbf{r} - P_i|}{|\mathbf{r} - P_i|} g(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} + \psi(P_N)\right]\right\}.$$

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

где g, ψ и Γ удовлетворяют приведенным выше условиям.

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

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

где $Q_n = Q_{n-1} \cdot \dfrac{d_{n-1}\sqrt{c}}{\operatorname{sh}\left(d_{n-1}\sqrt{c}\right)}$, $\quad n = 1,\ 2,\ \ldots,\ Q_0 = 1$,

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{4\pi} \displaystyle\int\limits_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < d} \dfrac{\operatorname{sh}\left[(d - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\sqrt{c}\right]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\operatorname{sh}(d\sqrt{c})}\, g(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}', & \mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon, \\ \psi(\mathbf{r}^*), & \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

Продифференцируем соотношение (3.38) по c:

$$\left.\frac{\partial u(P_0)}{\partial c}\right|_{c=c_0} = M\left\{\sum_0^N \left[\frac{\partial Q_n}{\partial c}\varphi(P_n) + Q_n \frac{\partial \varphi(P_n)}{\partial c}\right]\right\}\Bigg|_{c=c_0} =$$

$$= M\left\{\sum_0^N \varphi(P_n)\, Q_n \frac{\partial \ln Q_n}{\partial c} + Q_n \frac{\partial \varphi(P_n)}{\partial c}\right\}\Bigg|_{c=c_0}. \tag{3.39}$$

Рассмотрим отдельно первый член:

$$\frac{\partial \ln Q_n}{\partial c} = \frac{\partial \ln}{\partial c}\left(Q_{n-1}\frac{d_{n-1}\sqrt{c}}{\operatorname{sh}\left(d_{n-1}\sqrt{c}\right)}\right) = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{\partial}{\partial c}\ln d_{n-1} +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial c}\ln\sqrt{c} - \frac{\partial}{\partial c}\ln \operatorname{sh}\left(d_{n-1}\sqrt{c}\right) = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{c} -$$

$$- \frac{1}{2}\frac{\operatorname{ch}\left(d_{r-1}\sqrt{c}\right) d_{n-1}}{\operatorname{sh}\left(d_{n-1}\sqrt{c}\right)\sqrt{c}} = \frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{c} - \frac{d_{n-1}\operatorname{ch}\left(d_{n-1}\sqrt{c}\right)}{\sqrt{c}\operatorname{sh}\left(d_{n-1}\sqrt{c}\right)}\right).$$

Аналогично

$$\frac{\partial \ln Q_{n-1}}{\partial c} = \frac{\partial \ln Q_{n-2}}{\partial c} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{c} - \frac{\partial_{n-2}\operatorname{ch}\left(d_{n-2}\sqrt{c}\right)}{\sqrt{c}\operatorname{sh}\left(d_{n-2}\sqrt{c}\right)}\right),$$

$$\frac{\partial \ln Q_1}{\partial c} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{c} - \frac{d_0\operatorname{ch}\left(d_0\sqrt{c}\right)}{\sqrt{c}\operatorname{ch}\left(d_{n-1}\sqrt{c}\right)}\right).$$

sh

Окончательно имеем

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

Далее, если $r \notin \Gamma_\varepsilon$, то

$$\left.\frac{\partial \varphi(\mathbf{r})}{\partial x}\right|_{c=c_0} = \frac{\partial}{\partial c}\int \frac{1}{4\pi}\frac{\operatorname{sh}\left[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\sqrt{c}\right]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|\operatorname{sh}(d\sqrt{c})}\, g(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' =$$

$$= \int\limits_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi}\, g(\mathbf{r}')\, \frac{\partial}{\partial c}\frac{\operatorname{sh}\left[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\sqrt{c}\right]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|\operatorname{sh}(d\sqrt{c})}\, d\mathbf{r}' =$$

$$= \int\limits_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi}\frac{\operatorname{sh}\left[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\sqrt{c}\right]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|\operatorname{sh}(d\sqrt{c})}\, g(\mathbf{r})\, \frac{\partial \ln}{\partial c}\frac{\operatorname{sh}\left[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\sqrt{c}\right]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|\operatorname{sh}(d\sqrt{c})} \times$$

$$\times\, \partial\mathbf{r} = \int\limits_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| < d} \frac{1}{4\pi}\frac{\operatorname{sh}\left[(d - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\sqrt{c}\right]}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|\operatorname{sh}(b\sqrt{c})}\, g(\mathbf{r}')\,\frac{1}{2\sqrt{c}} \times$$

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

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

$$\frac{\partial u(P_0)}{\partial c}\Big|_{c=c_0} = M \left\{ \sum_{n=0}^{N} \frac{1}{2} \varphi(P_n) Q_n \left(\frac{n}{c} - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i \operatorname{ch}(d_i \sqrt{c})}{\sqrt{c} \operatorname{sh}(d_i \sqrt{c})} \right) \Big|_{c=c_0} + Q_n \widetilde{\psi}(P_n) \right\} \Big|_{c=c_0}. \tag{3.41}$$

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

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

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

$$\delta u_k(\Sigma) = \widetilde{u}_k - u_k(\Sigma^0), \; k = 1, 2, \ldots, m,$$

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:

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

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

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

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

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