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

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

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

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

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 $\tilde{u}(P_k)$ 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 $\tilde{u}_k$, а через Σ — вектор неизвестных параметров, т. е. $\Sigma=\Sigma(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$. Рассмотрим систему уравнений $u_k(\Sigma)=\tilde{u}_k$, $k=1, 2, \ldots, m$. 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:

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

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:

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

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

$$\xi = \varphi(\alpha_1,\ \alpha_2,\ \ldots,\ \alpha_k). \tag{3.44}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Легко показать, что

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

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

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

1) соответственно вероятностям

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

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

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

2) моделируется случайная величина η_m с плотностью

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

Предлагается следующий алгоритм. Из теории порядковых статистик известно, что если взять m выборочных значений $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m$ случайной величины α, равномерно распределенной в интервале [0.1], и расставить их в порядке возрастания: $\overset{*}{\alpha}_1, \overset{*}{\alpha}_2, \ldots, \overset{*}{\alpha}_m$, то плотность распределения $\overset{*}{\alpha}_k$ имеет вид $c_k x^{k-1}(1 - x)^{m-k}$. Отсюда получаем, что можно положить $\eta_m = \overset{*}{\alpha}_2$, $m = 2n + 3$, 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 $\overset{*}{\alpha}_1$ и $\overset{*}{\alpha}_2$, соответствующие $m = 3$. Затем при каждом увеличении n на единицу выбираются значения α_1, α_2; упорядочиваются величины α_1, α_2, $\overset{*}{\alpha}_1, \overset{*}{\alpha}_2$; первые два члена упорядоченного ряда представляют собой новые значения α_1^*, α_2^*.

Таким образом, с точностью до постоянного множителя (порядка 20) среднее число операций, необходимое для выбора значения ρ, здесь можно оценивать величиной q. Приведенный алгоритм эффективен только для достаточно малых ad, так как $q \to \infty$ при $ad \to \infty$. Для больших ad справедливо неравенство

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

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

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

2) если

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

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

Среднее число проб здесь равно

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

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

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

$$f_\rho(y) = 6y(1 - y), \tfrac{1}{d}\ 0 \leqslant y \leqslant 1. \qquad (3.49)$$

Выражение (3.49) соответствует распределению второй порядковой статистики из трех выборочных значений случайной величины, равномерно распределенной в интервале [0,1].

При практической реализации алгоритма метода Монте-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 осями x, y, z. Для моделирования a, b, c можно предложить следующий алгоритм:

$$\mu = 1 - 2 \times \alpha_1;$$

$$A: \xi = 1 - 2 \times \alpha_2; \quad \eta = 1 - 2 \times \alpha_3;$$

$$q = \xi^2 + \eta^2, \text{ если } q < 1, \text{ то}$$

$$a = \mu; \quad b = \xi \times \sqrt{((1 - \mu^2)/q)}; \quad c = \eta \times \sqrt{((1 - \mu^2)/q)};$$

в противном случае снова выполняется пункт A. Здесь α_1, α_2, α_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

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

Переходя к полярной системе координат с центром в точке P и делая замену $y = |\mathbf{r} - \mathbf{P}|/d$, найдем плотность

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

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

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

и рассмотрим вспомогательное уравнение

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

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

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