УДК 518.6

Н.А. Абиев

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МОНТЕ-КАРЛО К НЕСТАЦИОНАРНЫМ ЗАДАЧАМ ОНТИЧЕСКОГО ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

В статье получены приближенные расчетные формулы для оценки значений функционалов, имеющих физический смысл интенсивности излучения и ее производной, от решения интегрального уравнения переноса.

В экологических исследованиях одной из важнейших является задача оптического дистанционного зондирования параметров сплошной среды. При решении таких задач широко и эффективно применяются методы Монте-Карло [1], [2], [3], основанные на вероятностной интерпретации ядра интегрального уравнения переноса излучений

$$f(\vec{x}) = \int\limits_X k(\vec{x}',\vec{x}) f(\vec{x}') d\vec{x}' + \psi(\vec{x}), \qquad (1)$$

где $X = D \times \Omega \times [0,T]$ - фазовое пространство координат $\vec{r} = (x,y,z) \in D \subset R^3$, направлений $\vec{\omega} = (\mu,\beta) \in \Omega = [-1,1] \times [0,2\pi]$, $\mu = \cos\theta$, $\theta \in [0,\pi]$, и времени $t \in [0,T]$; $\vec{x} = (\vec{r},\vec{\omega},t) \in X$, $\vec{x}' = (\vec{r}',\vec{\omega}',t') \in X$; $f(\vec{r},\vec{\omega},t)$ - плотность столкновений фотонов с элементами среды; $\psi(\vec{r},\vec{\omega},t)$ - плотность распределения источников; $k(\vec{x}',\vec{x})$ - плотность перехода из «состояния» $\vec{x}'$ в «состояние» $\vec{x}$.

В приложениях важное значение имеют функционалы вида

$$I_\varphi = (f,\varphi) = \int_X f(x)\varphi(x)dx \tag{2}$$

от решения $f(x)$ уравнения (1).

Известно [4], что $\sup_{x\in X}\int_X |k(x',x)|dx' < 1$ и при выполнении условий $\psi,\varphi \in L_1(X)$, уравнение (1) имеет единственное решение в классе функций $L_1(X)$, представляемое сходящимся рядом Неймана:

$$f(\vec{x}) = \sum_{i=0}^{\infty} K^i\psi = \psi(\vec{x}) + \sum_{i=1}^{\infty}\int_X\ldots\int_X \psi(\vec{x}_0)k(\vec{x}_0,\vec{x}_1)..k(\vec{x}_{i-1},\vec{x})d\vec{x}_0..d\vec{x}_{i-1}.$$

Всюду в дальнейшем знак вектора над переменными $\vec{x},\vec{x}_i,\quad i\geq 0$, будем опускать. Опишем теперь основную идею метода Монте-Карло. Пусть точки $x_0,x_1,\ldots,x_n,\ldots$ - случайные и образуют однородную цепь Маркова с плотностью вероятности распределения $\psi(x)$ «начального состояния» x_0 и плотностью вероятности «перехода» $k(x_{i-1},x_i)$ из «состояния» x_{i-1} в «состояние» x_i. Тогда линейный функционал (2) от решения уравнения (1) представляет собой $\mathrm{M}\xi$ - математическое ожидание случайной величины $\xi = \sum_{i=0}^{\infty}\varphi(x_i)$. Поскольку $I_\varphi = (f,\varphi) = \mathrm{M}\xi$, то задача состоит теперь в том, чтобы вычислить $\mathrm{M}\xi$. Для этого на ЭВМ по специальным формулам моделируются выборочные значения $\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_N$ случайной величины ξ и вычисляется сумма $S_N = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\xi_j$. По закону больших чисел, $\mathrm{M}\xi \approx S_N$ при достаточно больших значениях N.

В реальных физических задачах такими марковскими цепями можно отождествлять процесс распространения элементарных частиц в некоторой среде и за $x_0,x_1,\ldots,x_n,\ldots$ принять точки столкновения этих частиц с элементами среды. Пусть среда однородная, то есть имеет постоянные значения коэффициентов рассеяния σ_s^*, поглощения σ_a^* и полного ослабления $\sigma^* = \sigma_s^* + \sigma_a^*$. Требуется определить σ_s^* при известном и фиксированном σ_a^*. Не интересуясь конкретным видом и физическим смыслом функций $\varphi_k(x,\sigma) = \sigma\exp(-\sigma|\vec{r}_{пов.} - \vec{r}|)F_1$, где $\sigma = \sigma_s + \sigma_a^*$, $\vec{r}_{пов.}$ - радиус-вектор точки столкновения на поверхности среды, F_1 - не зависит от σ_s, $k = 1,\ldots,m$, рассмотрим функционалы вида

$$I_k(\sigma)=\sum_{j=0}^{\infty}\int_X\ldots\int_X\psi(x_0)\prod_{i=0}^{j-1}k(x_i,x_{i+1},\sigma)\varphi_k(x_j,\sigma)dx_0\ldots dx_{j-1}dx_j\ , \qquad (3)$$

где $k(x_i,x_{i+1},\sigma)=\sigma\exp(-\sigma|\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i|)F_2$, F_2 также не зависит от σ_s.

Обозначим через I_k^* значения функционалов, измеряемые экспериментальным путем. Предположим, что $I_k(\sigma^*)=I_k^*$.

Тогда для нахождения точного значения коэффициента рассеяния получаем следующую систему нелинейных уравнений:

$$I_1(\sigma)=I_1^*,\ldots,I_m(\sigma)=I_m^*. \qquad (4)$$

Для решения полученной системы используем метод Ньютона –Канторовича. Запишем линеаризованную систему: $\dfrac{\partial I_k(\sigma^0)}{\partial\sigma_s}(\sigma_s-\sigma_s^0)=I_k^*-I_k(\sigma^0)$, (5)

где σ_s^0 - некоторое прогностическое значение коэффициента рассеяния, $\sigma^0=\sigma_s^0+\sigma_a^*$.

Введем обозначения $a_k=\dfrac{\partial I_k(\sigma^0)}{\partial\sigma_s}$, $\Delta\sigma_s=(\sigma_s-\sigma_s^0)$.

Полученная система в общем случае несовместима, для ее решения привлекаем метод наименьших квадратов и приходим к уравнению $\sum\limits_{k=1}^{m}a_k^2\,\Delta\sigma_s=\sum\limits_{k=1}^{m}a_k\,[I_k^*-I_k(\sigma^0)]$.

Далее строим последовательные приближения. Пусть $\sigma_s^{(p)}$ - текущее приближение коэффициента рассеяния. Тогда следующее приближение $\sigma_s^{(p+1)}$ находится как

$$\sigma_s^{(p+1)}=\sigma_s^{(p)}+\left\{\sum_{k=1}^{m}(a_k^{(p)})^2\right\}^{-1}\sum_{k=1}^{m}a_k^{(p)}\,[I_k^*-I_k(\sigma^{(p)})],\ \text{где}\quad \sigma^{(p)}=\sigma_s^{(p)}+\sigma_a^*.$$

Весь вопрос теперь сводится к тому, чтобы при каждой итерации вычислять значения

$$I_k^{(p)}=I_k(\sigma^{(p)})\quad \text{и}\quad a_k^{(p)}=\frac{\partial I_k(\sigma^{(p)})}{\partial\sigma_s}=\left.\frac{\partial I_k(\sigma)}{\partial\sigma_s}\right|_{\sigma=\sigma^{(p)}}.$$

Для этого перепишем (3) в виде

$$I_k(\sigma)=\sum_{j=0}^{\infty}\int_X\ldots\int_X\psi(x_0)\prod_{i=0}^{j-1}k(x_i,x_{i+1},\sigma^0)R_{jk}(\sigma)dx_0\ldots dx_{j-1}dx_j\ ,$$

где $R_{jk}(\sigma)=\varphi_k(x_j,\sigma)\prod\limits_{i=0}^{j-1}\dfrac{k(x_i,x_{i+1},\sigma)}{k(x_i,x_{i+1},\sigma^0)}$, σ^0-некоторое постоянное значение параметра σ. Нетрудно заметить, что

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_s}R_{jk}(\sigma^0)=\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\varphi_k(x_j,\sigma^0)+\varphi_k(x_j,\sigma^0)\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\prod_{i=0}^{j-1}\left.\frac{k(x_i,x_{i+1},\sigma)}{k(x_i,x_{i+1},\sigma^0)}\right|_{\sigma=\sigma^0}=$$

$$=\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\varphi_k(x_j,\sigma^0)+\varphi_k(x_j,\sigma^0)\sum_{i=0}^{j-1}\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\ln k(x_i,x_{i+1},\sigma^0)=\varphi_k(x_j,\sigma^0)w_j(\sigma^0),$$

где $$w_j(\sigma^0)=\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\ln\varphi_k(x_j,\sigma^0)+\sum_{i=0}^{j-1}\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\ln k(x_i,x_{i+1},\sigma^0). \qquad (6)$$

Отсюда получаем искомую оценку для производной интенсивности

$$\frac{\partial I_k(\sigma^0)}{\partial\sigma_s}=\sum_{j=0}^{\infty}\int_X\dots\int_X\psi(x_0)\prod_{i=0}^{j-1}k(x_i,x_{i+1},\sigma^0)\frac{\partial}{\partial\sigma_s}R_{jk}(\sigma^0)dx_0\dots dx_j=$$

$$=\mathrm{M}\left\{\sum_{j=0}^{\infty}\varphi_k(x_j,\sigma^0)w_j(\sigma^0)\right\}. \qquad (7)$$

Для самой интенсивности известна локальная оценка[4]:

$$I_k(\sigma^0)=\mathrm{M}\left\{\sum_{j=0}^{\infty}\varphi_k(x_j,\sigma^0)\right\}. \qquad (8)$$

Так как $\varphi_k(x_j,\sigma)=\sigma\exp(-\sigma|\vec{r}_{пов.}-\vec{r}_j|)F_1$ и F_1 не зависит от σ_s,

то $\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\ln\varphi_k(x_j,\sigma^0)=\frac{1}{\sigma^0}-|\vec{r}_{пов.}-\vec{r}_j|$. Аналогично

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\ln k(x_i,x_{i+1},\sigma^0)=\frac{\partial}{\partial\sigma_s}\ln\{\sigma\exp(-\sigma|\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i|)F_2\}\Big|_{\sigma_s=\sigma_s^0}=\frac{1}{\sigma^0}-|\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i|.$$

Следовательно, $$w_j(\sigma^0)=\frac{j+1}{\sigma^0}-\sum_{i=0}^{j-1}|\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i|-|\vec{r}_{пов.}-\vec{r}_j|. \qquad (9)$$

В работе [4] , в случае сходимости ряда Неймана к решению (1), доказана конечность среднего числа состояний цепи Маркова, другими словами, марковская цепь обрывается с вероятностью 1 через конечное и случайное число переходов γ. Далее согласно законам распределения $\psi(x)$ и $k(x',x)$, моделируем N различных траекторий(марковских цепей): $x_0^{(l)},x_1^{(l)},\dots,x_{\gamma(l)}^{(l)}$, $l=1,2,\dots,N$, где $\gamma(l)$ - случайный номер, на котором обрывается цепь с номером l. Вдоль каждой траектории строим суммы: $$\xi_l^{(p)}(k)=\sum_{j=0}^{\gamma(l)}\varphi_k(x_j^{(l)},\sigma^{(p)}), \qquad (10)$$

$$\eta_l^{(p)}(k)=\sum_{j=0}^{\gamma(l)}\varphi_k(x_j^{(l)},\sigma^{(p)})w_j^{(l)}(\sigma^{(p)}), \qquad (11)$$

где $$w_j^{(l)}(\sigma^{(p)})=\frac{j+1}{\sigma^{(p)}}-\sum_{i=0}^{j-1}|\vec{r}_{i+1}^{(l)}-\vec{r}_i^{(l)}|-|\vec{r}_{пов.}^{(l)}-\vec{r}_j^{(l)}|,$$

$\vec{r}_0^{(l)},\vec{r}_1^{(l)},\dots,\vec{r}_j^{(l)}$ - точки столкновений l-ой моделируемой траектории.

Положим теперь $S_1 = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\xi_l^{(p)}(k)$, $S_2 = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\eta_l^{(p)}(k)$, $D_1 = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\left(\xi_l^{(p)}(k)\right)^2$, $D_2 = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\left(\eta_l^{(p)}(k)\right)^2$.

Тогда получим следующие приближенные расчетные формулы, основанные на законе больших чисел: $I_k(\sigma^{(p)}) \approx S_1$ и $\frac{\partial I_k(\sigma^{(p)})}{\partial \sigma_s} \approx S_2$.

Несмещенные оценки для погрешностей этих приближений конечны и имеют вид $\sqrt{N(D_1 - S_1^2)/(N-1)}$, $\sqrt{N(D_2 - S_2^2)/(N-1)}$ соответственно.

Как видно из (10) и (11) оценки интенсивности и ее производной производятся по одним и тем же траекториям и отличаются только сомножителем $w_j^{(l)}(\sigma^{(p)})$.

Переходим теперь к случаю горизонтально однородной среды, разбитой по вертикали на n слоев с различными постоянными значениями коэффициента рассеяния $\sigma_{s_1}^*, \sigma_{s_2}^*, \ldots, \sigma_{s_n}^*$ внутри них. Значение коэффициента поглощения считается во всех слоях постоянным и равным σ_a^*. Пронумеруем слои сверху вниз. Система (4) в этом случае принимает вид: $I_1(\vec{\sigma}) = I_1^*, \ldots, I_m(\vec{\sigma}) = I_m^*$,

где $\vec{\sigma} = \vec{\sigma}_s + \vec{\sigma}_a^*$, $\vec{\sigma} = (\sigma_1,\ldots,\sigma_n)$, $\vec{\sigma}_s = (\sigma_{s_1},\ldots,\sigma_{s_n})$, $\vec{\sigma}_a^* = (\sigma_a^*,\ldots,\sigma_a^*)$.

Соответственно, линеаризованная система (5) приводится к виду $Q\Delta\vec{\sigma}_s = \vec{d}$.

Матрица Q и вектор $\vec{d}$ состоят из элементов вида $q_{ij} = \sum_{k=1}^{m} a_{ki}a_{kj}$, $d_i = \sum_{k=1}^{m} a_{ki}b_k$,

где $a_{ki} = \frac{\partial I_k(\vec{\sigma}^0)}{\partial \sigma_{s_i}}$, $a_{kj} = \frac{\partial I_k(\vec{\sigma}^0)}{\partial \sigma_{s_j}}$, $b_k = I_k^* - I_k(\vec{\sigma}^0)$, $i,j = 1,\ldots,n$.

К искомым точным значениям $\sigma_{s_1}^*,\ldots,\sigma_{s_n}^*$ пусть известно начальное приближение $\sigma_{s_1}^0,\ldots,\sigma_{s_n}^0$. Далее, если $\sigma_{s_1}^{(p)},\ldots,\sigma_{s_n}^{(p)}$ - текущее приближение, то следующее приближение $\sigma_{s_1}^{(p+1)},\ldots,\sigma_{s_n}^{(p+1)}$ находится из системы линейных уравнений

$$Q^{(p)}[\vec{\sigma}_s^{(p+1)} - \vec{\sigma}_s^{(p)}] = \vec{d}^{(p)}. \qquad (12)$$

Последнюю систему можно решать итерационными методами, например, методом Зейделя. В случае слоистой среды имеем, что

$$k(x_i, x_{i+1}, \vec{\sigma}) = \sigma(\vec{r}_{i+1})\exp\left\{-\sum_{h=1}^{n}\sigma_h l_h^{(i,i+1)}\right\}F_2,$$

$$\varphi_k(x_j, \vec{\sigma}) = \sigma(\vec{r}_{пов.})\exp\left\{-\sum_{h=1}^{n}\sigma_h l_h^{(j)}\right\}F_1,$$

где $l_h^{(i,i+1)}$, $l_h^{(j)}$ - длины тех частей отрезков $\left|\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i\right|$ и $\left|\vec{r}_{пов.}-\vec{r}_j\right|$, которые приходятся на h-й слой, $\sigma(\vec{r}_i)$ равно $\sigma_h=\sigma_{s_h}+\sigma_a^*$, если $\vec{r}_i$ находится в h-м слое. Тогда формула (9) принимает вид: $w_j(\sigma_h^0)=\dfrac{M_h^{(j+1)}}{\sigma_h^0}-\sum\limits_{i=0}^{j-1}l_h^{(i,i+1)}-l_h^{(j)}$,

где $M_h^{(j+1)}$ - количество точек из множества $\vec{r}_0,\ldots,\vec{r}_j$, попавших в h-й слой. Соответственно, суммы (10) и (11) в этом случае имеют вид :

$$\xi_l^{(p)}(k)=\sum_{j=0}^{\gamma(l)}\varphi_k(x_j^{(l)},\vec{\sigma}^{(p)}), \qquad \eta_l^{(p)}(k,h)=\sum_{j=0}^{\gamma(l)}\varphi_k(x_j^{(l)},\vec{\sigma}^{(p)})w_j^{(l)}(\sigma_h^{(p)}),$$

где $k=1,\ldots,m$, $h=1,\ldots,n$, p - номер итерации, l - номер траектории.
Отсюда получаем искомые оценки :

$$I_k(\vec{\sigma}^{(p)})\approx\frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\xi_l^{(p)}(k), \quad \frac{\partial I_k(\vec{\sigma}^{(p)})}{\partial\sigma_{s_h}}\approx\frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\eta_l^{(p)}(k,h),$$

необходимые для вычисления значений элементов матрицы и правой части системы (12).

ЛИТЕРАТУРА

1. Марчук Г.И., Михайлов Г.А. и др. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике.-Новосибирск: Наука, 1988.
2. Назаралиев М.А. Статистическое моделирование радиационных процессов в атмосфере. –Новосибирск: Наука, 1990.
3. Антюфеев В.С., Назаралиев М.А. Обратные задачи атмосферной оптики. -Новосибирск, 1988.
4. Михайлов Г.А. Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло.-Новосибирск: Наука, 1974.