ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2006, том 410, № 2, с. 1–4

МАТЕМАТИКА

УДК 519.245+519.676

МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ, ВКЛЮЧАЮЩИМИ В СЕБЯ НОРМАЛЬНУЮ ПРОИЗВОДНУЮ

© 2006 г. Н. А. Симонов

Представлено академиком А.С. Алексеевым 30.12.2005 г.

Поступило 13.04.2006 г.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим следующую краевую задачу. Полагаем, что функция $u_i(x)$ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\epsilon_i \Delta u_i = -\rho \tag{1}$$

внутри ограниченной односвязной области $G_i \subset \mathbb{R}^3$ с односвязной границей Γ, а во внешности этой области $G_e = \mathbb{R}^3 \setminus \overline{G}_i$ функция $u_e(x)$ удовлетворяет однородному линейному уравнению Пуассона–Больцмана

$$\epsilon_e \Delta u_e - \epsilon_e \kappa^2 u_e = 0, \tag{2}$$

где коэффициент κ, в частности, может быть равен нулю, а $\epsilon_e \geq \epsilon_i$. На границе заданы условия сопряжения, состоящие в том, что и решение, и поток считаются непрерывными при переходе через границу:

$$u_i(g) = u_e(y), \quad \epsilon_i \frac{\partial u_i}{\partial n}(y) = \epsilon_e \frac{\partial u_e}{\partial n}(y), \quad y \in \Gamma. \tag{3}$$

Считаем, что вектор нормали n направлен в G_e.

Задача состоит в том, чтобы найти решение и его первые производные в конечном наборе заранее заданных точек, а также вычислить значение энергии, которая в данном случае представляется в виде линейного функционала от решения. Задачи такого рода возникают в физической химии, когда необходимо вычислять электростатические свойства индивидуальных молекул, находящихся в растворе электролита.

Стандартный подход к построению оценок метода Монте-Карло для решения краевых задач для эллиптических уравнений заключается в применении алгоритма случайного блуждания по сферам [1, 2]. При этом, если в краевое условие входит нормальная производная, то используется конечно-разностное приближение к этой производной, которое затем рандомизируется [3–6]. Как следствие траектория случайного блуждания отражается от границы на расстояние, равное шагу в аппроксимации h. При этом на каждом таком отражении в оценку решения вносится смещение.

В данной работе мы предлагаем новый подход к построению методов статистического моделирования, который позволяет использовать алгоритм блуждания по сферам и после выхода траектории на отражающую границу. Такой подход основан на новом соотношении о среднем для значения функции в точке, находящейся не внутри области, а непосредственно на границе, и позволяет существенно повысить эффективность стохастического вычислительного алгоритма.

2. ИНТЕГРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕШЕНИЯ В ГРАНИЧНОЙ ТОЧКЕ

Построим соотношение о среднем для значения решения в некоторой точке x, находящейся на границе области. Не ограничивая общности, считаем, что x – эллиптическая точка. (Это будет во всяком случае верно, если траектория блуждания по сферам строится с использованием метода блуждания в подобластях [7].)

Рассмотрим шар $B(x, a)$ радиуса a с центром в данной точке. Обозначим через $\Phi_\kappa(y) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{sh}(\kappa(a - |x-y|))}{|x-y|\,\mathrm{sh}(\kappa a)}$ функцию Грина задачи Дирихле для уравнения (2) в шаре $B(x, a)$, записанную для центральной точки x. Выпишем формулу Грина для пары функций u_i, Φ_κ в $B_i(x, a) \setminus B(x, \varepsilon)$, а также для пары функций u_e, Φ_κ в $B_e(x, a) \setminus B(x, \varepsilon)$. Здесь $B_i(x, a) = B(x, a) \cap G_i$, $B_e(x, a) = B(x, a) \cap G_e$, а $S_i(x, a)$ и $S_e(x, a)$ суть соответственно внутренняя и внешняя части поверхности сферы. Перейдем в полученных равенствах к пределу при $\varepsilon \to 0$, умножим их соответственно на ϵ_i и ϵ_e и сложим

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской Академии наук, Новосибирск

полученные результаты. В силу граничных условий (3) получаем следующее соотношение:

$$\begin{aligned} u(x) = {} & \frac{\epsilon_e}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{S_e(x,a)} \frac{1}{2\pi a^2} \frac{\kappa a}{\operatorname{sh}(\kappa a)} u_e\, ds + \\ & + \frac{\epsilon_i}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{S_i(x,a)} \frac{1}{2\pi a^2} \frac{\kappa a}{\operatorname{sh}(\kappa a)} u_i\, ds - \\ & - \frac{(\epsilon_e - \epsilon_i)}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{\Gamma \cap B(x,a)\setminus\{x\}} 2\frac{\partial \Phi_0}{\partial n} Q_{\kappa,a} u\, ds + \\ & + \frac{\epsilon_i}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{B_i(x,a)} [-2\kappa^2 \Phi_\kappa] u_i\, dy + \\ & + \frac{1}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{B_i(x,a)} [-2\Phi_\kappa] \rho\, dy, \end{aligned} \tag{4}$$

где $Q_{\kappa,a}(r) = \dfrac{\operatorname{sh}(\kappa(a-r)) + \kappa r \operatorname{ch}(\kappa(a-r))}{\operatorname{sh}(\kappa a)} < 1$, $r = |x - y|$. В частном случае, когда $\rho(x) = \sum\limits_{m=1}^{M} q_m \delta(x - x_{c,m})$, мы полагаем $a < \min|x - x_{c,m}|$, что гарантирует отсутствие особенностей внутри шара. Вследствие этого последний интеграл в (4) равен нулю.

В предельном случае, когда $\kappa = 0$, это представление упрощается:

$$\begin{aligned} u(x) = {} & \frac{\epsilon_e}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{S_e(x,a)} \frac{1}{2\pi a^2} u_e\, ds + \\ & + \frac{\epsilon_i}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{S_i(x,a)} \frac{1}{2\pi a^2} u_i\, ds - \\ & - \frac{\epsilon_e - \epsilon_i}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{\Gamma \cap B(x,a)\setminus\{x\}} 2\frac{\partial \Phi_0}{\partial n} u\, ds + \\ & + \frac{1}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int\limits_{B_i(x,a)} [-2\Phi] \rho\, dy. \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь $\Phi(y) = -\dfrac{1}{4\pi}\left(\dfrac{1}{|x-y|} - \dfrac{1}{a}\right)$ и $2\dfrac{\partial \Phi}{\partial n}(y) = \dfrac{1}{2\pi}\dfrac{\cos\phi_{yx}}{|x-y|^2}$, где ϕ_{yx} есть угол между нормалью $n(y)$ и вектором $y - x$. Заметим, что в случае плоской границы $\dfrac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$ и, следовательно, интеграл по Γ в полученном представлении отсутствует.

3. СТОХАСТИЧЕСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Пусть $x_0 \in G_i$ – точка, в которой требуется вычислить решение задачи (1), (2), (3). Будем искать его в виде $u(x) = u^0(x) + g(x)$, где потенциал $g(x)$ равен $\int\limits_{G_i} \frac{1}{4\pi\epsilon_i} \frac{1}{|x-y|} \rho(y) dy$ или в случае точечных зарядов $\sum\limits_{m=1}^{M} \frac{1}{4\pi\epsilon_i} \frac{1}{|x - x_{c,m}|} \rho_m$. Для функции u^0, удовлетворяющей уравнению Лапласа в ограниченной области G_i, строится оценка, являющаяся функционалом от траектории марковской цепи блуждания по сферам: $x_{i+1} = x_i + d(x_i)\omega_i$ [2]. Здесь $\{\omega_0, \omega_1, \dots\}$ – последовательность независимых единичных изотропных векторов, $d(x)$ – расстояние от точки x до границы области (или соответствующей подобласти при использовании метода блуждания в подобластях [7]). С вероятностью единица марковская цепь $\{x_i, i = 0, 1, \dots\}$ сходится к границе Γ. Пусть x_k – первая точка, попавшая в ε-полосу вблизи Γ (ε-окрестность [2]), а $x_k^* \in \Gamma$ – ближайшая к ней. Последовательность $u^0(x_i)$ является, очевидно, мартингалом, и, следовательно, $u^0(x_0) = \mathrm{E}u^0(x_k) = \mathrm{E}(u(x_k) - g(x_k)) = \mathrm{E}(u(x_k^*) - g(x_k^*) + \phi)$, где $\phi = O(\varepsilon)$, в силу предположения, что в точке x_k^* существует нормальная производная.

Для построения оценки значения решения в граничной точке будем использовать полученные соотношения о среднем. Рассмотрим правую часть этих соотношений как интегральный оператор, который переводит функции, заданные на всем пространстве, в множество функций с областью определения Γ. Ядро этого оператора может быть знакопеременным, и сходимость ряда Неймана после замены ядра на его модуль не может быть гарантирована. Следствием этого является неприменимость прямой рандомизации полученных интегральных равенств для построения оценки метода Монте-Карло [8]. Исключением является случай, когда граница состоит из плоскостей.

Рассмотрим простую вероятностную аппроксимацию соотношения о среднем (5). Построим касательную плоскость к границе в точке x_k^*. С вероятностью $p_e = \dfrac{\epsilon_e}{\epsilon_e + \epsilon_i}$ следующая точка марковской цепи x_{n+1} выбирается равномерно на той полусфере $S^+(x_k^*, a)$, в которую направлен вектор нормали, а с дополнительной вероятностью p_i – на другой полусфере, $S^-(x_k^*, a)$. Значение объемного потенциала с плотностью ρ оценивается по одной случайной точке, которая выбирается с некоторой плотностью, согласованной с Φ. Пусть $\xi[I_\rho](x_k^*)$ – оценка этого потенциала. Тогда верно следующее соотношение.

Лемма 1.

$$\mathrm{E}\{u(x_{k+1}) + \xi[I_\rho](x_k^*) \big| \, x_k^*\} = u(x_k^*) + O\left(\frac{a}{2R}\right)^3$$

при $\frac{a}{2R} \to 0$. *Здесь* R *– минимальный радиус кривизны поверхности* Γ *в точке* x_k^*.

Утверждение леммы легко проверяется непосредственным интегрированием. Аналогичное утверждение верно и при использовании данной аппроксимации для рандомизации соотношения (4). В этом случае коэффициент, стоящий под интегралом, рассматривается при $x_{k+1} \in S^+(x_k^*, a)$ как вероятность выживания. Если же направление вектора выбрано так, что $(x_{k+1} - x_k^*, n(x_k^*)) < 0$, то с вероятностью $\frac{\kappa a}{\mathrm{sh}(\kappa a)}$ следующая точка цепи выбирается на $S^-(x_k^*, a)$, а с дополнительной вероятностью – в соответствующей половине шара.

Если $x_{k+1} \in G_i$, то мы переходим к оцениванию значения функции u^0 в этой точке с помощью уже описанного алгоритма. При выходе во внешнюю область также используется случайное блуждание по сферам. В случае $\kappa = 0$ используется модификация с прямым моделированием ухода диффузионной траектории на бесконечность [9]. Если же $\kappa > 0$, то множитель $\frac{\kappa a}{\mathrm{sh}(\kappa a)}$, стоящий в формуле среднего для уравнения Пуассона–Больцмана, рассматривается как вероятность выживания. При этом вероятность ухода траектории на бесконечность равна нулю.

Аппроксимации более высокого порядка точности можно построить на основе представления интегрального оператора в (4) в виде разности $K^+ - K^-$. При этом ядро K^+ положительно и этот оператор переводит функции, заданные на сфере $S(x, a)$, в функции, заданные на $\Gamma \cap B(x, a)$. Такая декомпозиция позволяет переписать интегральное соотношение (4) в виде $u = (I + K^-)^{-1}K^+u$ и использовать это выражение для построения более точных приближений.

Лемма 2. *Среднее число выходов построенной марковской цепи на границу есть* $\mathrm{E}N^* = \frac{2v}{a}(1 + dv)$. *Здесь* v *– ограниченное решение задачи* (1), (2) *с условием на границе*

$$\epsilon_i \frac{\partial v_i}{\partial n}(y) = \epsilon_e \frac{\partial v_e}{\partial n}(y) + 1,$$

$a\, dv = O(a)$ *при* $a \to 0$.

Утверждение леммы следует из того, что $\int\limits_{\Gamma \cap B(x, a)} [-2\Phi] dy = \frac{a}{2}$ для случаев, когда Γ есть плоскость либо сфера.

Пусть $\{x_{k,j}^* \in \Gamma, j = 1, 2, \ldots, N_i^*\}$ – последовательность точек выхода построенной марковской цепи из области G_i на границу, а $\{x_{k+1,j}^* \in G_i, j = 1, 2, \ldots, N_i^* - 1\}$ – последовательность точек возврата цепи в эту область. Очевидно, что $\mathrm{E}N_i^* = p_i \mathrm{E}N^*$. Тогда верно следующее

УТВЕРЖДЕНИЕ.

$$\xi[u](x_0) = g(x_0) + \sum_{j=1}^{N_i^*} [\xi[I_\rho](x_{k,j}^*) - g(x_{k,j}^*) + g(x_{k+1,j}^*)] + \xi[I_\rho](x_{k,N_i^*}^*) - g(x_{k,N_i^*}^*) \tag{6}$$

является оценкой для решения краевой задачи (1), (2), (3). *Для* $\varepsilon = \left(\frac{1}{2R}\right)^3$ *смещение оценки равно* $O(a^2)$ *при* $a \to 0$. *Дисперсия оценки конечна, а трудоемкость равна* $O(\ln(\delta) \cdot \delta^{-5/2})$ *при заданной точности* δ.

Конечность дисперсии следует из того, что построенный алгоритм основан на прямом моделировании [8] преобразованного интегрального уравнения. Логарифм в оценке трудоемкости есть следствие того, что среднее число переходов в марковской цепи блуждания по сферам до первого попадания в ε-полосу вблизи границы есть величина $O(\ln(\varepsilon))$ [2, 9]. Оценка для производных по пространственным переменным $\xi[\nabla u](x_0) = \nabla g(x_0) + Q_0\xi[u_0](x_0)$ строится на тех же траекториях блуждания по сферам, что и оценка решения. Вес Q_0 вычисляется на первом переходе, при моделировании выхода на сферу $S(x_0, d(x_0))$ [2].

Заметим, что при использовании конечно-разностной аппроксимации с шагом h смещение оценки есть $O(h)$, а трудоемкость – $O(\ln(\delta) \cdot \delta^{-3})$ [4, 5]. Таким образом, даже простейшая аппроксимация построенного интегрального равенства позволяет существенно повысить эффективность вычисления решения с использованием алгоритма блуждания по сферам.

4. ДРУГИЕ КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ

Рассмотрим важный для практики случай, когда между G_i и G_e находится промежуточный слой, в котором $\kappa = 0$, а коэффициент при операторе Лапласа равен ϵ_e. На ∂G_i будет верна формула (5), а на ∂G_e – формула (4), в которой отсутствуют как интеграл по границе, так и объемный потенциал. Все утверждения об алгоритме, основанном на рандомизации соотношений о среднем, остаются верными и в этом случае.

Предложенный подход практически без изменений работает также и в случае внешней задачи Неймана. Несколько сложнее обстоит дело при решении смешанной краевой задачи. Радиус вспомогательной сферы a, используемой при построении интегрального соотношения, может быть в этом случае как угодно малым. Вместе с тем можно показать, что вероятность ухода с отражающей границы на поглощающую всегда отделена от нуля. Отсюда вытекает, что алгоритм имеет те же свойства, что и в рассмотренном выше случае. При решении третьей краевой задачи приближения к соотношению о среднем с необходимостью приходится строить на основе декомпозиции интегрального оператора и аппроксимации резольвенты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Müller M.E.* // Ann. Math. Stat. 1956. V.27. № 3. P. 569–589.
2. *Елепов Б.С., Кронберг А.А., Михайлов Г.А., Сабельфельд К.К.* Решение краевых задач методом Монте-Карло. Новосибирск: Наука, 1980.
3. *Haji-Sheikh A., Sparrow E.M.* // SIAM J. Appl. Math. 1966. V.14. № 2. P. 370–389.
4. *Кронберг А.А.* // ЖВМиМФ 1984. Т. 84. № 10. С. 1531–1537.
5. *Михайлов Г.А., Макаров Р.Н.* // Сиб. мат. журн. 1997. Т.38. № 3. С. 603–614.
6. *Mascagni M., Simonov N.A.* // SIAM J. Sci. Comput. 2004. V. 26. № 1. P. 339–357.
7. *Симонов Н.А.* / В кн. Методы и алгоритмы статистического моделирования. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1983. С. 48–58.
8. *Ермаков С.М., Михайлов Г.А.* Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
9. *Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С.* Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. М.: Наука, 1984.