
Алгоритмы случайного блуждания по сферам для решения смешанной краевой задачи и задачи Неймана*

Н.А.Симонов

UDC 519.245

Симонов Н.А. Алгоритмы случайного блуждания по сферам для решения смешанной краевой задачи и задачи Неймана //

В работе предлагается новый подход к построению методов Монте-Карло для решения смешанной краевой задачи для эллиптического уравнения с постоянными коэффициентами. Получено соотношение о среднем для значения решения в граничной точке, которое позволяет использовать блуждание по сферам и при выходе траектории на отражающую границу. Это существенно повышает эффективность алгоритма в сравнении со стандартным подходом.

Simonov N.A. Random walk-on-spheres algorithms for solving mixed and Neumann boundary-value problems //

We propose new approach to constructing Monte Carlo methods for solving mixed boundary-value problems for elliptic equations with constant coefficients. We derived mean-value relation for point values of the solution. As a consequence, the walk-on-spheres algorithm still can be used even after trajectory hits the reflecting boundary. Such approach is significantly more efficient than the standard one.

1. Введение и постановка задачи

В данной работе мы будем рассматривать следующую краевую задачу. Пусть требуется найти решение линейного уравнения Пуассона-Больцмана (Гельмгольца):

$$\Delta u - \kappa^2 u = -f, \quad \kappa = \text{const} \geq 0 \quad (1)$$

в ограниченной области $G \subset \mathbb{R}^m$, удовлетворяющее на границе этой области $\Gamma = \partial G$ смешанным краевым условиям

$$\alpha(y) \frac{\partial u}{\partial n}(y) + \beta(y)u(y) = g(y), \quad y \in \Gamma. \quad (2)$$

Здесь $\alpha = 1, \beta = 0$ на Γ_0 и наоборот $\alpha = 0, \beta = 1$ на $\Gamma_1 = \Gamma \setminus \Gamma_0$. Предполагаем, что граница области кусочно гладкая, регулярная и что параметры задачи удовлетворяют условиям, обеспечивающим существование и единственность её решения [6].

Как хорошо известно, стохастические методы решения первой краевой задачи (случай, когда коэффициент α тождественно равен нулю) разработаны и успешно применяются в течение уже достаточно длительного периода времени [15, 3, 1]. Алгоритмы метода Монте-Карло из этого класса (случайное блуждание по сферам, по шарам, кубам, и т.п.) основаны на рандомизации соотношений о среднем и формул Грина и позволяют эффективно моделировать точки выхода диффузионного процесса на границу

*При частичной поддержке Гранта для ведущих научных школ и NATO Linkage Grant

области (или в её окрестность), после чего решение во внутренней точке вычисляется с помощью усреднения известных граничных значений в точках выхода. Другой подход к построению методов статистического моделирования основан на использовании теории потенциала, что позволяет перейти от исходной задачи к интегральному уравнению на плотность, заданную на границе области [5]. Для решения этого уравнения и вычисления искомой функции используется алгоритм случайного блуждания по границе [11, 12]. Подобный приём работает как для задачи Дирихле, так и для задач Неймана и третьей краевой задачи с невырождающимися постоянными коэффициентами: $\alpha \geq \alpha_0 > 0$, $\beta \geq \beta_0 > 0$. Существует ещё один вариант построения стохастического алгоритма решения краевых задач для эллиптических уравнений, основанный на использовании вероятностного представления [14, 13] и прямом моделировании диффузионного процесса с помощью численного решения стохастических дифференциальных уравнений (см., например, [10]). Этот подход универсален, так как позволяет решать краевые задачи для уравнений с коэффициентами, зависящими от пространственной переменной, но, с очевидностью, в сравнении с методами, основанными на непосредственном моделировании точек выхода из подобластей, малоэффективен, так как, во-первых, приводит к необходимости подробного пошагового построения траектории внутри области, а во-вторых, в случае краевых условий второго или третьего рода, требует умения моделировать время жизни на границе [13], что до сих пор является нерешённой алгоритмической проблемой. Аналогичными свойствами (как положительными, так и отрицательными) обладает и алгоритм случайного блуждания по узлам сетки, основанный на рандомизации конечно-разностной аппроксимации дифференциального оператора и краевых условий. Продуктивная идея о применении алгоритма случайного блуждания по сферам внутри области в комбинации с отражением на границе в соответствии с аппроксимацией краевого условия для решения второй и третьей краевых задач высказывалась ещё в 60-х годах (см., в частности, [9]), но в виде работающего алгоритма, сходимость которого подробно исследована, реализована лишь совсем недавно [16]. Следует отметить, однако, что использование конечно-разностной аппроксимации неизбежно вносит дополнительное смещение в оценку, величину которого необходимо согласовывать со статистической ошибкой. При этом, в зависимости от постановки задачи, дисперсия оценки может расти при уменьшении смещения, что приводит к необходимости увеличивать статистику и, как следствие, к возрастанию трудоёмкости вычислений.

В данной работе мы предлагаем подход, позволяющий либо полностью избавиться от дополнительного смещения, либо существенно повысить порядок аппроксимации краевых условий за счёт использования соотношения о среднем и, как следствие, алгоритма случайного блуждания по сферам не только во внутренних точках области, но также и на её границе.

2. Соотношение о среднем для граничной точки

Для построения алгоритма нам потребуется соотношение о среднем для значения решения в граничной точке.

Пусть точка x находится на Γ , границе области. Ясно, что для рассматриваемого класса областей мы без потери общности можем считать, что вектор нормали в этой точке определён однозначно, то есть x либо эллиптическая точка, либо внутренняя точка плоской части границы. Если $\alpha(x) = 0$, то из краевых условий следует, что

$$u(x) = g(x), \quad (3)$$

то есть значение решение известно. Поэтому предполагаем, что $x \in \Gamma_0$, и построим соотношение о среднем для $u(x)$. Будем для определённости считать также, что $m = 3$. Обобщение на пространства большей размерности совершенно очевидно.

Рассмотрим шар $B(x, a)$ радиуса a с центром в заданной точке x . Функция Грина задачи Дирихле для линейного уравнения Гельмгольца (1) в этом шаре имеет следующий вид:

$$\Phi_\kappa(y) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\sinh(\kappa(a - |y - x|))}{|y - x| \sinh(\kappa a)},$$

и, следовательно,

$$\nabla_y \Phi_\kappa(y) = \frac{1}{4\pi} \frac{y - x}{|y - x|^3} \frac{\sinh(\kappa(a - |y - x|)) + \kappa|y - x| \cosh(\kappa(a - |y - x|))}{\sinh(\kappa a)}.$$

Всюду, за исключением точки x , $\Delta_y \Phi_\kappa(y) - \kappa^2 \Phi_\kappa(y) = 0$.

Обозначим через $B_i(x, a) = B(x, a) \cap G$ часть шара, лежащую внутри области, $S_i(x, a)$ – часть его поверхности, находящуюся в G , и ΓS – границу $B_i(x, a)$, то есть $S_i(x, a) \cup (\Gamma \cap B(x, a))$. Применим формулу Грина для пары функций u, Φ_κ в $B_i(x, a) \setminus B(x, \varepsilon)$, то есть во внутренней части шара с исключением малой окрестности точки x . В результате получаем:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Gamma S \setminus B(x, \varepsilon)} \frac{\partial \Phi_\kappa}{\partial n} u \, ds \\ &\quad - \int_{(\Gamma \cap B(x, a)) \setminus B(x, \varepsilon)} \Phi_\kappa \frac{\partial u}{\partial n} \, ds \\ &\quad - \int_{S_i(x, \varepsilon)} \frac{1}{4\pi \varepsilon^2} \frac{\sinh(\kappa(a - \varepsilon)) + \kappa \varepsilon \cosh(\kappa(a - \varepsilon))}{\sinh(\kappa a)} u \, ds \\ &\quad + \int_{S_i(x, \varepsilon)} \frac{1}{4\pi \varepsilon} \frac{\sinh(\kappa(a - \varepsilon))}{\sinh(\kappa a)} \frac{\partial u}{\partial n} \, ds. \end{aligned}$$

Здесь мы учли, что по построению $\Phi_\kappa = 0$ на сфере $S(x, a)$, а также, что внешняя по отношению к $B_i(x, a) \setminus B(x, \varepsilon)$ нормаль на $S_i(x, \varepsilon)$ равна $-(y - x)/\varepsilon$. При $y \in S_i(x, \varepsilon)$ имеем, в силу гладкости функции u , что $u(y) = u(x) + O(\varepsilon)$. Кроме того, $\left| \frac{\partial u}{\partial n} \right| \leq \text{const}$ и площадь поверхности $|S_i(x, \varepsilon)| = 2\pi \varepsilon^2(1 + O(\varepsilon))$. Отсюда вытекает, что

$$- \int_{S_i(x, \varepsilon)} \frac{1}{4\pi \varepsilon^2} \frac{\sinh(\kappa(a - \varepsilon)) + \kappa \varepsilon \cosh(\kappa(a - \varepsilon))}{\sinh(\kappa a)} u \, ds = -\frac{1}{2} u(x) + O(\varepsilon)$$

и

$$\int_{S_i(x, \varepsilon)} \frac{1}{4\pi} \frac{\sinh(\kappa(a - \varepsilon))}{\sinh(\kappa a) \varepsilon} \frac{\partial u}{\partial n} \, ds = O(\varepsilon).$$

В силу произвольности ε , мы можем перейти к пределу при $\varepsilon \rightarrow 0$. В результате приходим к следующему равенству:

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_{\Gamma S \setminus \{x\}} 2 \frac{\partial \Phi_\kappa}{\partial n} u \, ds \\ &\quad - \int_{\Gamma \cap B(x, a) \setminus \{x\}} 2 \Phi_\kappa \frac{\partial u}{\partial n} \, ds, \end{aligned} \tag{4}$$

или, после подстановки граничных условий (2),

$$\begin{aligned}
u(x) &= \int_{\Gamma S \setminus \{x\}} 2 \frac{\partial \Phi_\kappa}{\partial n} u \, ds \\
&\quad - \int_{\Gamma \cap B(x,a) \setminus \{x\}} 2 \Phi_\kappa g \, ds .
\end{aligned} \tag{5}$$

Здесь без потери общности мы предположили, что на всей части границы, заключённой внутри шара $B(x, a)$, заданы условия Неймана.

Полученное соотношение остаётся верным и в том случае, когда рассматривается краевая задача для уравнения Пуассона ($\kappa = 0$). Функция Грина задачи Дирихле в шаре $B(x, a)$ имеет в этом случае следующий вид: $\Phi_0(y) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{|y-x|} - \frac{1}{a} \right)$, а её градиент равен $\nabla_y \Phi_0(y) = \frac{1}{4\pi} \frac{y-x}{|y-x|^3}$. При этом, с очевидностью, все асимптотические и предельные соотношения для малой окрестности точки x остаются в силе.

Перепишем (5) в более удобном виде, явно выделив особенности, соответствующие фундаментальному решению уравнения Лапласа и его нормальной производной. Имеем

$$\begin{aligned}
u(x) &= \int_{\Gamma S \setminus \{x\}} \frac{1}{2\pi} \frac{\cos \varphi_{yx}}{|y-x|^2} W_{\kappa,a} u(y) \, ds(y) \\
&\quad + \int_{\Gamma \cap B(x,a) \setminus \{x\}} \frac{1}{2\pi|y-x|} \left(1 - \frac{|y-x|}{a} \right) W_{\kappa,a}^1 g(y) \, ds(y) .
\end{aligned} \tag{6}$$

Здесь $\cos \varphi_{yx}$ есть угол между внешней по отношению к $B_i(x, a)$ нормалью в точке y и вектором $y-x$, а весовая функция

$$W_{\kappa,a}(|y-x|) = \frac{\sinh(\kappa(a-|y-x|)) + \kappa|y-x| \cosh(\kappa(a-|y-x|))}{\sinh(\kappa a)}$$

уже не содержит особенностей. На поверхности сферы $S(x, a)$ $W_{\kappa,a} = W_{\kappa,a}^0 \equiv \frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)}$. При этом всюду в замкнутом шаре с вырезанным центром $\overline{B}(x, a) \setminus \{x\}$, очевидно, $W_{\kappa,a}$ меньше единицы и положительна. Для $\kappa = 0$ эта функция тождественно равна единице. Весовая функция $W_{\kappa,a}^1$, равная $\frac{\sinh(\kappa(a-|y-x|))}{a-|y-x|} \frac{a}{\sinh(\kappa a)}$, также не содержит особенностей, меньше либо равна единице и больше либо равна $\frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)}$. Очевидно, что при $\kappa = 0$ она тождественно равна единице.

3. Решение интегрального уравнения во всей области и алгоритм блуждания по сферам

Не ограничивая общности, будем рассматривать решение краевой задачи для однородного уравнения (1). Если правая часть уравнения $-f$ не равна нулю, то от исходной постановки всегда можно перейти к рассмотрению задачи для функции $v(x) = u(x) + \int_G \Phi_\kappa f$. При этом в граничные условия войдёт объёмный потенциал, вместо неизвестных точных значений которого можно использовать его несмещённую оценку [3, 1]. Заметим, что подобный подход априори более эффективен, чем рассмотрение исходной задачи с ненулевой правой частью, так как в этом случае оценка интеграла используется

не на каждом шаге траектории, а только в начальной точке и при выходе случайного блуждания на границу.

Пусть $x \in G$. Определим $d(x)$ как расстояние от данной точки до границы области G и запишем в шаре $B(x, d(x))$ интегральную формулу Грина для пары функций u , удовлетворяющей уравнению (1), и функции Грина Φ_κ , построенной для этого шара:

$$u(x) = \int_{S(x, d(x))} \frac{\partial \Phi_\kappa}{\partial n} u \, ds . \quad (7)$$

Для произвольного $\varepsilon > 0$ введём в рассмотрение ε -полосу вблизи границы (ε -окрестность) $\Gamma_\varepsilon = \{x \in G : d(x) < \varepsilon\}$ и обозначим через $x^* \in \Gamma$ ближайшую к x точку на границе.

Пусть теперь $x \in \Gamma_\varepsilon$. В зависимости от величины $\alpha(x^*)$ будем использовать разные соотношения, связывающие значения решения в этой точке и точке x^* . В случае, когда $\alpha(x^*) = 0$, то есть $x^* \in \Gamma_1$, полагаем

$$u(x) = g(x^*) + \phi_1(x, x^*) , \quad (8)$$

где $\phi_1(x, x^*) = O(\varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Если $x^* \in \Gamma_0$, то, используя граничные условия, получаем

$$u(x) = u(x^*) - g(x^*)d(x) + \phi_0(x, x^*) . \quad (9)$$

Здесь $\phi_0(x, x^*) = O(\varepsilon^2)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Указанные асимптотические соотношения верны при выполнении естественного предположения о гладкости решения вблизи границы (по крайней мере, в направлении нормали).

По аналогии с [2, 3, 1] объединим соотношения (7), (8), (9), (5), (3) в виде одного интегрального уравнения в \bar{G} с обобщённым ядром:

$$u(x) = \int_{\bar{G}} k(x, x') u(x') \, dx' + F(x) . \quad (10)$$

Здесь

$$\begin{aligned} k(x, x') &= \chi_{S(x, d)}(x') \frac{1}{4\pi d^2} \frac{\kappa d}{\sinh(\kappa d)} , \text{ при } x \in G \setminus \bar{\Gamma}_\varepsilon ; \\ &= \chi_{\Gamma_0}(x^*) \chi_{\Gamma \setminus \{x^*\}}(x') \frac{1}{2\pi} \frac{\cos \varphi_{x'x^*}}{|x' - x^*|^2} W_{\kappa, a} , \text{ при } x \in \bar{\Gamma}_\varepsilon , \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} F(x) &= 0 , \text{ при } x \in G \setminus \bar{\Gamma}_\varepsilon ; \\ &= \chi_{\Gamma_0}(x^*) \int_{\Gamma \cap B(x^*, a) \setminus \{x^*\}} \frac{1}{2\pi |y - x^*|} \left(1 - \frac{|y - x^*|}{a}\right) W_{\kappa, a}^1 g(y) \, ds(y) \\ &\quad + \chi_{\Gamma_0}(x^*) (-g(x^*) d(x) + \phi_0(x, x^*)) \\ &\quad + (1 - \chi_{\Gamma_0}(x^*)) (g(x^*) + \phi_1(x, x^*)) , \text{ при } x \in \bar{\Gamma}_\varepsilon . \end{aligned} \quad (12)$$

4. Построение вычислительного алгоритма и оценки решения

Для вычисления $u(x)$, удовлетворяющей (10), будем применять стандартный подход к построению монте-карловских оценок для решения интегральных уравнений. Эта методика основана на моделировании марковской цепи $\{x_0, x_1, \dots\}$, переходная плотность

которой, $p(x_i \rightarrow x_{i+1})$, согласована с ядром интегрального оператора k . Практическое применение такого построения, как известно [3], возможно только в тех случаях, когда сходится ряд Неймана для интегрального оператора с ядром, равным $|k|$. Следует заметить, однако, что процедура доказательства сходимости, использованная при обосновании алгоритма случайного блуждания по сферам для решения задачи Дирихле, в рассматриваемой ситуации неприменима. По этой причине несмещённость и конечность дисперсии получаемой оценки мы будем показывать напрямую, в процессе её построения.

Предположим, что Γ_0 – часть границы, на которой задано условие Неймана, состоит из выпуклых поверхностей (в частности, плоскостей). В таком случае ядро интегрального оператора K из (10) всегда неотрицательно. В силу того, что $\int k(x, x') d x' \leq 1$, мы можем положить $p(x_i \rightarrow x_{i+1}) = k(x_i, x_{i+1})$. Подобный подход соответствует так называемому прямому моделированию. Веса в этом случае равны единице, а оценка решения u в точке $x = x_0$ (сопряжённая в терминологии методов Монте-Карло) есть

$$\xi[u](x) = \sum_{i=0}^N \xi[F](x_i) . \quad (13)$$

Здесь N – случайная длина марковской цепи, а под суммой стоят оценки значений функции F в точках x_i .

Алгоритм построения оценки (13) состоит в следующем. Моделируется траектория марковской цепи случайного блуждания по сферам, начинающаяся в точке: $x_0 = x \in \bar{G}$. При этом, если x_i – внутренняя точка области, то

$$x_{i+1} = x_i + d(x_i) \omega_i ,$$

где $\{\omega_0, \omega_1, \dots\}$ – последовательность независимых единичных изотропных векторов. Это означает, что построение цепи происходит рекуррентно: следующая точка цепи выбирается равномерно распределённой по поверхности максимальной сферы $S(x_i, d(x_i))$, вписанной в область G . Полагаем, что на каждом переходе цепь может оборваться с вероятностью $1 - \frac{\kappa d(x_i)}{\sinh(\kappa d(x_i))}$ (здесь возможно применение и весового варианта построения оценки решения, описанного в [2]). При этом вклад в оценку равен нулю, в силу того, что $F(x_i) = 0$ для внутренних точек области.

Как только расстояние до границы становится меньше заданного ε , то есть $x_i \in \bar{\Gamma}_\varepsilon$, определяется ближайшая к x_i точка на границе, x_i^* , и к оценке решения прибавляется $\xi[F](x_i)$. Если $x_i^* \in \Gamma_1$, то марковская цепь обрывается с вероятностью единица. В том случае, когда в точке x_i^* задано граничное условие Неймана, моделирование цепи продолжается и следующая точка выбирается равномерно по телесному углу на выпуклой поверхности ΓS . Вероятность выживания на этом переходе равна $W_{\kappa, a}(|x_{i+1} - x_i^*|)$. Заметим, что если $\Gamma \cap B(x_i^*, a)$ есть круг на плоскости, то x_{i+1} с вероятностью единица попадает внутрь области G (на полусферу $S(x_i^*, a) \cap G$) и вероятность выживания равна $\frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)}$, то есть совпадает с соответствующей вероятностью при построении случайного блуждания по сферам внутри области.

Покажем, что среднее число шагов построенной марковской цепи конечно, а в предположении несмещённости и конечности вторых моментов $\xi[F](x_i)$ получающаяся оценка также является несмещённой и обладает конечной дисперсией.

Рассмотрим решение (с очевидностью, ограниченное) вспомогательной краевой задачи:

$$\Delta p_0 = 0, \quad p_0|_{\Gamma_1} = 0, \quad \frac{\partial p_0}{\partial n}|_{\Gamma_0} = 1. \quad (14)$$

Из определения (12) следует, что для данной задачи, если x_i^* находится на плоской либо сферической части границы, то $F(x_i) = \frac{a}{2} - d(x_i) + \phi_0(x_i, x_i^*) = \frac{a}{2} + O(\varepsilon)$. Для эллиптических точек, с очевидностью, $F(x_i) = \frac{a}{2} \left(1 + O\left(\frac{a}{2R}\right)\right)$ при малых $a/R > c_0\varepsilon^{1/2}$, где R – минимальный радиус кривизны поверхности в данной точке, а c_0 – некоторая постоянная. По построению, вклад в оценку для p_0 происходит только при выходе случайного блуждания на границу Γ_0 , на которой заданы условия Неймана. Следует заметить, однако, что мы не можем напрямую использовать (13) для оценивания числа шагов через отношение значения функции p_0 к радиусу вспомогательной сферы. Дело в том, что применение соотношения о среднем (6) предполагает, что всюду на $\Gamma \cap B(x_i^*, a)$ задано условие Неймана. Следовательно, a не может превосходить расстояние от x_i^* до линии раздела Γ_0 и Γ_1 . Будем брать a_i , радиус вспомогательной сферы на i -том шаге, равным этому расстоянию (точнее, минимуму из двух величин: этого расстояния и расстояния до ближайшего, но не связного с окрестностью x_i^* в пределах $B(x_i^*, a)$, участка границы). При таком выборе a_i могут быть как угодно малы.

Вычислим вероятность обрыва траектории (при $\kappa = 0$) в случае малых расстояний до линии раздела. В этой ситуации границу можно приближённо считать плоскостью, разделённой прямой на поглощающую и отражающую полуплоскости. Плотность распределения точек выхода диффузионной траектории на плоскость выражается аналитически, что позволяет проинтегрировать эту плотность и вычислить усреднённую по полусфере вероятность. Она, с очевидностью, не зависит от a_i и равна приближённо 0.324. Отсюда вытекает, что $N_{0,2}$, среднее число отражений вблизи линии раздела, есть величина, не превышающая c/q , где c – некоторая постоянная, а q – вероятность поглощения, отделённая от нуля.

Зафиксируем некоторое значение a^* и разделим все отражения на две группы: в первую включим те, для которых $a_i > a^*$, а во вторую – все остальные. Пусть $N_{0,1}$ – среднее число отражений из первой группы. Тогда имеем $p_0 \geq N_{0,1}a^*/2$ и, следовательно, среднее общее число отражений, $N_0 = N_{0,1} + N_{0,2}$, не превосходит $C_a = \frac{2p_0}{a^*} + \frac{c}{q}$.

Как известно, среднее число шагов случайного блуждания по сферам до попадания в ε -полосу вблизи границы не превосходит $C|\log(\varepsilon)|$ [1]. Отсюда следует, что общее число переходов построенной нами марковской цепи с отражениями также имеет тот же порядок и не превосходит $C_a C|\log(\varepsilon)|$.

Очевидно, что конечность среднего числа точек марковской цепи равносильна сходимости ряда Неймана для интегрального оператора с неотрицательным ядром, совпадающим с переходной плотностью этой цепи. В данном случае это означает, что сходится ряд Неймана для интегрального уравнения (10). Кроме того, при прямом моделировании ядро интегрального оператора, стоящего в уравнении для второго момента оценки, совпадает с k [3]. Отсюда вытекает конечность дисперсии оценки $\xi[u]$ при известных точных значениях функции F .

В предположении несмещённости оценок $\xi[F](x_i)$ и их условной, при фиксированных x_i , независимости от марковской цепи, оценка решения $\xi[u]$ будет, в силу сходимости ряда Неймана, также несмещённой. Из равномерной по x_i ограниченности дисперсий $\xi[F](x_i)$ будет следовать конечность дисперсии результирующей оценки. Рассмотрим правую часть интегрального уравнения более подробно. При оценивании интеграла по части границы, лежащей внутри вспомогательной сферы, с использованием значения подынтегральной функции в одной случайной точке можно моделировать эту точку в

соответствии с любой гладкой плотностью. Например, если x_i – эллиптическая, выбирать её равномерно по телесному углу, или, если граница плоская, то и угол, и расстояние в локальной полярной системе координат разыгрывать равномерно. Подобный подход позволяет добиться требуемой ограниченности дисперсий.

Заметим, что кроме интеграла по границе в выражение для правой части входят также неизвестные функции ϕ_0 и ϕ_1 , описывающие ошибку, которая возникает при учёте граничных значений в ε -полосе вблизи границы. Пренебрегая ими, мы приходим к реализуемой, но смещённой оценке, отличающейся от (13) тем, что функция F в ней заменена на \tilde{F} . Оценим получающееся смещение. Оно, с очевидностью, равно $\phi_1 + N_0\phi_0$ и, следовательно, есть величина того же порядка ε , что и при оценке задачи Дирихле с помощью алгоритма блуждания по сферам.

Из вышеизложенного построения вытекает, что верно следующее утверждение.

Предложение 1. *Функция $\xi[u](x)$, построенная на траектории случайного блуждания по сферам, которое используется как внутри области, так и при моделировании отражения от границы, является оценкой для решения смешанной краевой задачи (1), (2). Дисперсия этой оценки конечна, а смещение есть величина того же порядка, что и ширина полосы вблизи границы. Трудоёмкость построенной оценки есть $O(\log(\delta) \delta^{-2})$. Здесь δ , требуемая точность решения, совпадает с шириной приграничной полосы ε .*

Если $\kappa > 0$, то утверждение остаётся верным и для задачи Неймана.

При использовании конечно-разностной (с шагом h) аппроксимации нормальной производной после каждого попадания в окрестность части границы Γ_0 , на которой задано условие Неймана, в оценку вносится смещение порядка $O(\varepsilon + h^2)$ [4, 8]. Отсюда, в частности, вытекает необходимость согласования ширины полосы ε с шагом аппроксимации h . Среднее число отражений в этом алгоритме есть $N_0 = O(h^{-1})$. Поэтому, если $\varepsilon \sim h^2$, то суммарное смещение есть величина порядка h . Отсюда следует, что среднее общее число шагов траектории блуждания по сферам с отражениями равно $O(\log(\varepsilon) h^{-1})$. Таким образом, если δ – требуемая точность, то шаг в конечно-разностной аппроксимации нормальной производной необходимо брать порядка δ , ширину полосы ε – порядка δ^2 . Трудоёмкость этой оценки, следовательно, равна $O(\log(\delta) \delta^{-3})$.

Таким образом, как видим, предложенный в данной работе подход позволяет существенно повысить эффективность алгоритма блуждания по сферам в применении к решению смешанной задачи и задачи Неймана.

Рассмотрим теперь случай, когда G не является выпуклой. С очевидностью, алгоритм случайного блуждания по сферам вполне применим и в этом случае. Он позволяет эффективно моделировать выход диффузионного процесса на любую регулярную границу, в том числе и на кусочно-гладкую. Следует заметить, однако, что при прямом построении траектории блуждания по сферам в процессе нахождения расстояния до границы учитываются рёбра и вершины, направленные внутрь области. Обрыв траектории в ε -полосе вблизи границы может приводить при таком подходе к артефактам, в силу того, что вероятность попасть на имеющие нулевую поверхностную меру части границы будет отлична от нуля.

Наиболее эффективным способом построения марковской цепи блуждания по сферам, не приводящим к выходу с положительной вероятностью траектории на части границы, имеющие размерность меньше, чем $m - 1$, является метод блуждания в подобластях, основанный на представлении G в виде суммы пересекающихся простых областей, в каждой из которых расстояние до границы ищется достаточно просто [7]. При таком

подходе точка выхода траектории на Γ и в случае невыпуклой области G будет с вероятностью единица эллиптической точкой.

Пусть в этой точке $x^* \in \Gamma_0$ задано условие Неймана и находится она на выпуклой внутрь части границы. Тогда, как легко видеть, непосредственное применение для оценивания решения в этой точке метода Монте-Карло, основанного на рандомизации интегрального представления (6), невозможно. Дело в том, что ядро интегрального оператора, выписанного для окрестности x^* , является знакопеременным. Оно равно $\frac{1}{2\pi a^2} \frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)}$ на поверхности сферы $S(x^*, a)$ и (при достаточно малом a) принимает значения меньше нуля на $\Gamma \cap B(x^*, a)$, в силу того, что в этом случае угол φ_{yx} тупой.

Наиболее простой выход в данной ситуации – воспользоваться некоторым приближением к точной формуле (6). Поступим таким образом. Построим касательную плоскость в точке x^* и следующую точку марковской цепи будем выбирать внутри области G в соответствии с равномерным распределением по поверхности полусферы $S^+(x^*, a)$, отсекаемой этой плоскостью. Легко показать, что такая простейшая аппроксимация интегрального оператора вносит, при малых $a/2R$, смещение порядка $(a/2R)^3$, где R – минимальный радиус кривизны в точке x^* . Отсюда следует, что суммарное смещение оценки есть $O((a/2R)^2)$, а трудоёмкость равна $O(\log(\delta) \delta^{-5/2})$.

Аппроксимации более высокого порядка точности можно построить на основе представления интегрального оператора в (6) в виде разности $K^+ - K^-$. При этом ядро K^+ положительно, и этот оператор переводит функции, заданные на $S(x^*, a)$, в функции, заданные на $\Gamma \cap B(x^*, a)$. Ядро K^- неотрицательно, норма его есть величина порядка $a/2R$, а действует этот оператор на функции, заданные на $\Gamma \cap B(x^*, a)$. Такая декомпозиция позволяет переписать интегральное соотношение (6) в следующем виде:

$$u = (I + K^-)^{-1} K^+ u$$

и использовать данное соотношение для построения более точных приближений.

5. Результаты тестовых расчётов

В качестве иллюстрации приведём результаты применения описанного алгоритма к решению двух модельных задач.

5.1. Рассмотрим решение вспомогательной задачи (14) в единичном кубе. Полагаем, что Γ_0 совпадает с одной из граней, а на всей остальной граничной поверхности решение равно нулю.

В качестве начальной точки был выбран центр куба. При использовании блуждания по сферам в граничных точках среднее число отражений (выходов случайного блуждания на Γ_0) не зависит от ε и равно примерно 0.365. Средний радиус вспомогательной сферы равен 0.211. Среднее число переходов в траектории, как видно на Рис.1, линейно зависит от $\log(\varepsilon)$.

Для сравнения эта задача была решена и с использованием конечно-разностной аппроксимации нормальной производной. Результаты расчётов показали, что среднее число отражений линейно зависит от $h^{-1} = \varepsilon^{-1/2}$. Как видно из Рис.2, для среднего числа шагов в траектории сохраняется степенная зависимость. При этом число переходов есть приближённо $O(h^{-1.059})$.

5.2. Для проверки работы алгоритма в невыпуклом случае была решена смешанная задача с известным точным решением в цилиндре с выпуклым внутрь сферическим дном, на котором задано условие Неймана. Для того, чтобы смещение оценки решения было

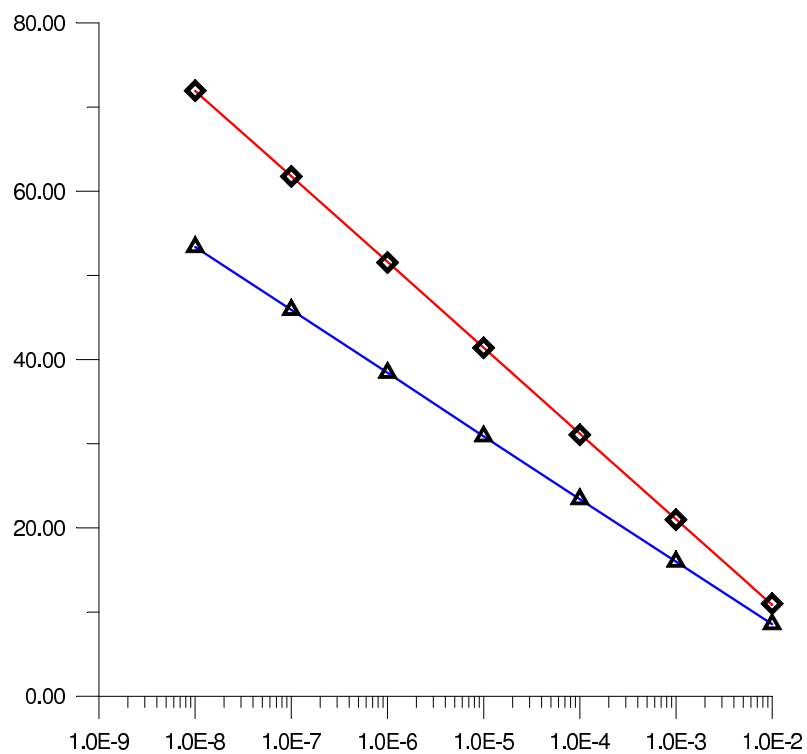


Рис. 1. Сравнение числа шагов в блуждании по сферам в зависимости от ε (в логарифмическом масштабе):

а) до первого достижения границы (треугольники); результаты расчётов укладываются на прямую $\mathbb{E}N = -3.246 \ln \varepsilon - 6.442$;

б) при уходе с грани с условиями Неймана на сферическую поверхность внутрь области (ромбы); результаты расчётов лежат на прямой $\mathbb{E}N = -4.419 \ln \varepsilon - 9.505$.

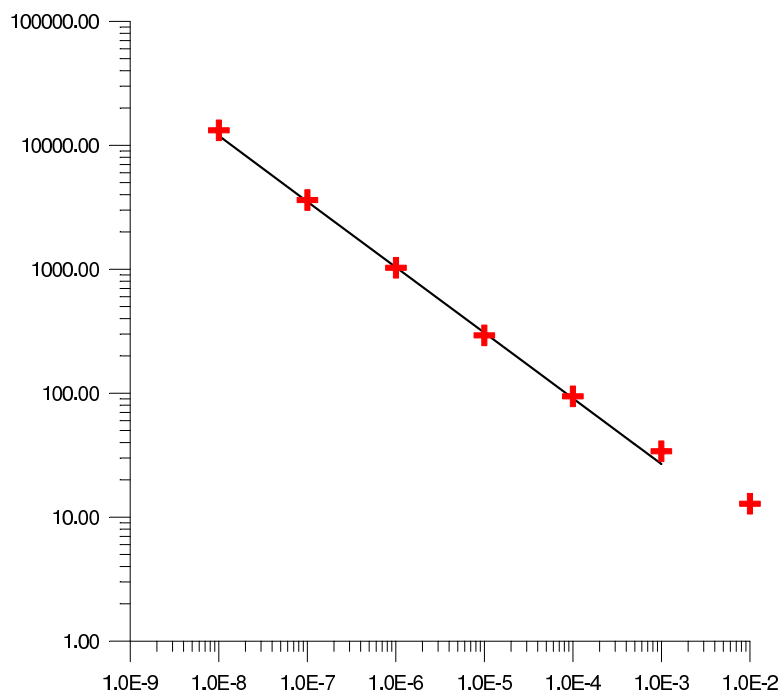


Рис. 2. Зависимость от $\varepsilon = h^2$ числа переходов в блуждании по сферам, в котором отражение от границы с условиями Неймана производилось в соответствии с конечно-разностным приближением к нормальной производной. Результаты расчётов аппроксимируются степенной зависимостью: $EN = 0.691 h^{-1.059}$.

порядка 0.1%, мы положили $\varepsilon = 0.001$ и ограничили сверху радиус вспомогательных сфер: $a \leq 0.1 \times 2R$, где $R = 2$ – радиус сферы, образующей дно цилиндра. В результате моделирования 2.1×10^5 траекторий (что обеспечило статистическую ошибку $2\sigma = 0.1\%$), мы получили оценку решения в точке $(0, 0, 2.5)$, равную 1.601 (точное решение равно 1.6). Для производной $\partial u / \partial z$ с использованием той же статистики получена оценка -0.641 (точное значение равно -0.64 , статистическая ошибка – 0.025).

Среднее число отражений при решении данной задачи составило 0.718 на одну траекторию, а средний радиус вспомогательной сферы – 0.360.

Список литературы

- [1] Елепов Б.С., Кронберг А.А., Михайлов Г.А., Сабельфельд К.К. *Решение краевых задач методом Монте-Карло*. Наука, Новосибирск, 1980.
- [2] Елепов Б.С., Михайлов Г.А. Алгоритмы "блуждания по сферам" для уравнения $\Delta u - cu = -g$. *Доклады АН СССР*, 212(1):15–18, 1973.
- [3] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. *Статистическое моделирование*. Наука, Москва, 1982.
- [4] Михайлов Г.А., Макаров Р.Н. Решение краевых задач второго и третьего рода методом Монте-Карло. *Сиб. Мат. Журн.*, 38(3):603–614, 1997.
- [5] Гюнтер Н.М. *Теория потенциала и её применение к основным задачам математической физики*. Гостехиздат, Москва, 1953.
- [6] Миранда К. *Уравнения с частными производными эллиптического типа*. Наука, Москва, 1957.

- [7] Симонов Н.А. Алгоритмы случайного блуждания для решения краевых задач с разбиением на подобласти. В кн. *Методы и алгоритмы статистического моделирования*: 48–58. ВЦ СО АН СССР, Новосибирск, 1983.
- [8] Кропберг А.А. Об алгоритмах статистического моделирования решения краевых задач эллиптического типа. *Журн. Вычисл. Математ. и Матем. Физ.*, 84(10):1531–1537, 1984.
- [9] Haji-Sheikh A. and Sparrow E.M. The floating random walk and its application to Monte Carlo solutions of heat equations. *SIAM J. Appl. Math.*, 14(2):370–389, 1966.
- [10] Milstein G.N. *Numerical Integration of Stochastic Differential Equations*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1994.
- [11] Sabelfeld K.K. *Monte Carlo methods in boundary value problems*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York, 1991.
- [12] Sabelfeld K.K. and Simonov N.A. *Random Walks on Boundary for solving PDEs*. VSP, Utrecht, The Netherlands, 1994.
- [13] Freidlin M. *Functional integration and partial differential equations*. Princeton University Press, Princeton, 1985.
- [14] Кас М. *Integration in Function Spaces and Some Its Applications*. Lezioni Fermiane. Scuola Normale Superiore, Pisa, 1980.
- [15] Müller M.E. Some continuous Monte Carlo methods for the Dirichlet problem. *Ann. Math. Statistics*, 27(3):569–589, 1956.
- [16] Makarov R.N. Monte Carlo methods for solving boundary value problems of second and third kinds. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 13(2):117–132, 1998.