

Б. С. ЕЛЕПОВ, Г. А. МИХАЙЛОВ

АЛГОРИТМ «БЛУЖДЕНИЯ ПО СФЕРАМ» ДЛЯ УРАВНЕНИЯ

$$\Delta u - cu = -g$$

(Представлено академиком Г. И. Марчуком 25 XII 1972)

В работе Мюллера ⁽¹⁾ был предложен процесс «блуждания по сферам» для решения уравнения Лапласа. С помощью довольно сложных рассуждений авторы настоящей работы ранее обобщили ⁽²⁾ этот процесс на случай уравнения $\Delta u - cu = -g$, исходя из вероятностного представления решения задачи Дирихле. В данной работе это сделано значительно проще на основе рассмотрения специального интегрального уравнения, форма которого определяется функцией Грина для задачи Дирихле. Предлагаемый подход позволил улучшить алгоритм «блуждания по сферам» для уравнения $\Delta u - cu = -g$ и оценить его эффективность.

Рассмотрим задачу Дирихле для уравнения $\Delta u - cu = -g$, где $c > 0$. Функция $g(x, y, z)$ удовлетворяет условию Гёльдера в области D , ограниченной регулярной границей Γ , на которой задано граничное условие: $u|_{\Gamma} = \psi(x, y, z)$. Нам потребуются следующие понятия:

D' — замыкание области D ; функция $d(P) = \min_{Q \in \Gamma} |P - Q|$; $\Gamma_{\varepsilon} = \{P \in D' : d(P) < \varepsilon\}$ — ε -окрестность границы Γ ; сфера $S(P) = \{Q \in D' : |Q - P| = d(P)\}$.

Заметим, что $S(P)$ — максимальная из сфер с центром P , целиком лежащих в D' . Обозначим также через $s(P, \varepsilon)$ поверхность той части $S(P)$, которая принадлежит множеству Γ_{ε} . В дальнейшем нам потребуется условие

$$\min_P \left(\frac{s(P, \varepsilon)}{4\pi d^2(P)} \right) \geq v = v(\varepsilon) > 0 \quad \text{при } \varepsilon > 0. \quad (1)$$

Пусть $S(P^*)$ — сфера максимального радиуса, целиком лежащая в D , Q — точка касания границы Γ сферой $S(P^*)$. Проведем сферу S_{ε} радиуса ε с центром в точке Q . Тогда площадь части сферы $S(P^*)$, целиком лежащей внутри S_{ε} , равна $\pi \varepsilon^2$. Следовательно, можно положить

$$v(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{4 d^2(P^*)}.$$

Пусть необходимо оценить решение $u(P_0)$ поставленной задачи в заданной точке $P_0 \in D$. Из теории фундаментальных решений известно ⁽³⁾, что $u(P_0)$ можно представить в виде

$$u(P_0) = \frac{d_0 \sqrt{c}}{4\pi d_0^2 \operatorname{sh}(d_0 \sqrt{c})} \int_{S(P_0)} u(s) ds + \int_{|r-P_0| < d_0} G(r) g(r) dr, \quad (2)$$

$$G(r) = \frac{\operatorname{sh}[(d_0 - |r - P_0|) \sqrt{c}]}{4\pi |r - P_0| \operatorname{sh}(d_0 \sqrt{c})}, \quad d_0 = d(P_0).$$

Первый интеграл в (2) — это интеграл по поверхности сферы $S(P_0)$. Соотношение (2) можно рассматривать как сопряженное (соответственно принятой в теории методов Монте-Карло терминологии) интегральное уравнение с обобщенным ядром, представляющим равномерное распределение на сфере $S(P_0)$; после введения этого ядра первый интеграл стано-

вится трехмерным. Нетрудно понять, что стандартные алгоритмы метода Монте-Карло распространяются на такие интегральные уравнения, если особенность ядра включать в плотность перехода моделируемой цепи Маркова. В данном случае из точки P_0 следует переходить на поверхность сферы $S(P_0)$; такую цепь и называют «блужданием по сферам».

Соотношение (2) необходимо дополнить равенством

$$u(P_0) = \psi(P_0), \quad P_0 \in \Gamma, \quad (3)$$

которое означает, что ядро уравнения обращается в нуль, если первый аргумент $P \in \Gamma$. Таким образом, после выхода на границу цепь следует оборвать, прибавив к оценке величину $\psi(P)$ с соответствующим весом. Указанные соображения приводят к вероятностной оценке решения, которая не реализуема, так как с вероятностью 1 «блуждания по сферам» не выходят на границу за конечное число шагов. Это связано с тем, что норма интегрального оператора в естественном для данной задачи пространстве L_1 равна 1. Далее будет построена смещенная, но реализуемая оценка.

Временно предположим, что решение задачи Дирихле известно в каждой точке множества Γ_ε . Тогда для $u(r)$ можно записать следующее интегральное уравнение:

$$u(r) = \int_D k(r, r') u(r') dr' + \varphi(r), \quad (4)$$

где

$$k(r, r') = \begin{cases} \frac{d \sqrt{c}}{\text{sh}(d \sqrt{c})} \delta_r(r'), & \text{если } r \notin \Gamma_\varepsilon, \\ 0, & \text{если } r \in \Gamma_\varepsilon; \end{cases}$$

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \int_{|r'-r|<d} \frac{\text{sh}[(d-|r'-r|)\sqrt{c}]}{|r'-r| \text{sh}(d\sqrt{c})} g(r') dr', & \text{если } r \notin \Gamma_\varepsilon, \\ u(r), & \text{если } r \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

Здесь $d = d(r)$, $\delta_r(r')$ — обобщенная плотность, соответствующая равномерному распределению вероятностей на сфере $S(r)$. Из условия (1), учитывая неравенство $d\sqrt{c} / \text{sh}(d\sqrt{c}) \leq 1$, имеем $\|K^2\|_{L_1} \leq 1 - \nu(\varepsilon) < 1$, что обеспечивает сходимость ряда Неймана для уравнения (4) и тем самым возможность применения метода Монте-Карло. Еще раз заметим, что (4) имеет вид сопряженного интегрального уравнения. Поэтому для оценки $u(P_0)$ можно применить соотношение (см., например, выражение (5) в (5)):

$$u(P_0) = M\xi, \quad \xi = \varphi(P_0) + \sum_{n=1}^N Q_n \varphi(P_n). \quad (5)$$

Здесь $\{P_n\}$ — цепь Маркова, которую целесообразно определить следующим образом:

$r_0(r) = \delta(r - P_0)$ — плотность начального распределения, $r(r, r') = \delta_r(r')$ — плотность перехода из r в r' , $p(r)$ — вероятность обрыва цепи, причем $p(r) = 0$, если $r \notin \Gamma_\varepsilon$ и $p(r) = 1$, если $r \in \Gamma_\varepsilon$.

Как уже было указано выше, эта цепь называется «блужданием по сферам». Для такой цепи веса определяются (4) формулами

$$Q_0 = 1, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{d_{n-1} \sqrt{c}}{\text{sh}(d_{n-1} \sqrt{c})}, \quad d_n = d(P_n), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Нетрудно заметить, что вероятность $p_1(r)$ обрыва цепи после очередного перехода равна вероятности непосредственного попадания из точки $r \in \Gamma_\varepsilon$ и удовлетворяет неравенству $p_1(r) \geq \nu(\varepsilon)$. Отсюда получаем, что среднее число переходов, определяющее среднее время t_ε расчетов на

ЭВМ, не превосходит $\nu^{-1}(\varepsilon)$. Чтобы получить более точную оценку для t_a , необходимо определить плотность $f(\mathbf{r})$ распределения центров сфер $S(P_i)$ вблизи границы, так интеграл от $f(\mathbf{r})$ расходится, если граница области интегрирования приближается к Γ . Из сказанного также ясно, что для реальных задач плотность $f(\mathbf{r})$ достаточно определить вблизи плоской границы.

Простые соображения показывают, что плотность $f(x)$ распределения центров сфер по расстоянию x от плоской границы при $x \rightarrow 0$ приближается к решению однородного интегрального уравнения с ядром, равным соответствующей плотности перехода. Далее записано это уравнение для двумерного и трехмерного случаев соответственно:

$$f^{(2)}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{x/2}^{\infty} \frac{f^{(2)}(x') dx'}{\sqrt{x(2x' - x)}}, \quad f^{(3)}(x) = \int_{x/2}^{\infty} \frac{f^{(3)}(x') dx'}{2x'}.$$

Для вывода этих уравнений достаточно убедиться, что плотность перехода из x' в x равна подынтегральному выражению. Прямой подстановкой легко проверить, что обоим уравнениям удовлетворяет $f(x) = cx^{-1}$. Полученный вывод был проверен прямым суммированием плотностей $f_m^{(3)}(x)$ распределений центров сфер кратности m для заданного «источника» в точке $x_0 > 0$. Таким образом,

$$\int_{\varepsilon}^a f(x) dx \sim c |\ln \varepsilon|, \quad a > 0.$$

Следовательно, при обрыве процесса в Γ_ε время расчетов имеет порядок $|\ln \varepsilon|$. Это подтверждают результаты расчетов. Из сказанного выше ясно, что для достаточно «хороших» границ полученный порядок времени расчетов имеет место и в случае любой размерности.

Теперь можно вспомнить, что мы временно ввели нереальное предположение: решение $u(\mathbf{r})$ известно в Γ_ε . Однако вместо точных значений $u(\mathbf{r})$ в Γ_ε можно использовать приближенные значения, например беря их с ближайших точек границы, т. е. полагать

$$u(\mathbf{r}) \approx \psi(\mathbf{r}^*), \quad \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon, \quad \mathbf{r}^* \in \Gamma, \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}^*| = d(\mathbf{r}) \leq \varepsilon.$$

В результате получаем смещенную оценку ξ_ε , среднее значение которой отличается от $u(P_0)$ на величину порядка ε . Действительно, если рассмотреть выражение для разности оценок ξ и ξ_ε , то получим

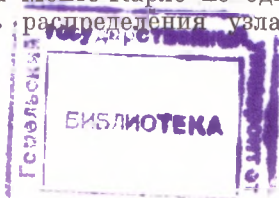
$$|u - u_\varepsilon| = |M\{Q_N[\varphi(\mathbf{r}_N) - \varphi(\mathbf{r}_N^*)]\}| \leq A\varepsilon,$$

где A — некоторая константа, которая конечна вследствие ограниченности в области D производных от решения. Здесь использовано соотношение $Q_N \leq 1$.

Приведенные рассуждения показывают, что точность ε -приближения можно существенно увеличить с помощью экстраполяции по ε . Расчеты для различных значений ε можно проводить одновременно, т. е., проводя расчеты для некоторого ε , можно получать результаты для любого $\varepsilon_1 > \varepsilon$ без дополнительных затрат времени ЭВМ; при этом ввиду сильной зависимости оценок разность $u_\varepsilon - u_{\varepsilon_1}$ вычисляется хорошо. Эффективность такой методики подтверждается расчетами.

Дисперсия полученной оценки конечна, так как ξ_ε убывает с ростом s , а при $s = 0$ веса равны 1 и «блуждание по сферам» представляет прямое моделирование, для которого дисперсия конечна. Легко показать, что $\sigma_{\xi_\varepsilon}/u \rightarrow 0$ при $s \rightarrow \infty$.

Далее, интеграл, выражающий $\varphi(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon$, можно оценивать методом Монте-Карло по одному случайному «узлу». Универсальная плотность распределения узла пропорциональна функции Грина $G(\mathbf{r})$ ⁽²⁾.



Несмещенность такой рандомизированной оценки доказывается тривиально с помощью повторного осреднения.

Поскольку «блуждание по сферам» не зависит от $g(x, y, z)$, $\psi(z, y, z)$ и c , то можно одновременно проводить расчеты для различных значений характеристик задач. Это дает возможность вычислять вариации решения при небольших вариациях g , ψ и c ; нетрудно написать алгоритмы вычисления соответствующих производных, которые можно использовать при решении некоторых обратных задач теории потенциала.

Для решения некоторых прикладных задач (например, задач электронно-ионной оптики) необходимо вычислять градиент потенциала, т.е. производные от решения задачи $\Delta u = -g$, $u|_{\Gamma} = \psi(x, y, z)$. В работе ⁽⁶⁾ получено выражение «веса множителя» для оценки решения уравнения Лапласа в двух точках по одним и тем же выборочным траекториям «блуждания по сферам». Используя эту идею, можно построить алгоритм непосредственной оценки производных от решения в точке $P_0 = (x_0, y_0, z_0)$. Для этого достаточно продифференцировать по x следующее выражение в точке $P_{0,x} = (x_0 + x, y_0, z_0)$:

$$u(P_0) = \int_{S(P_0)} p(\omega, x) u(s) ds + \int_{|r-P_0| < d_0} G_x(r, d_0) g(r) dr, \quad (6)$$

$$x < d(P_0) = d_0,$$

где $G_x(r, d_0)$ — «шаровая» функция Грина в точках $P_{0,x}$ и r , а $p(\omega, x)$ — ее нормальная производная ^[7]. Здесь ω — единичный вектор направления из P_0 в P_1 (иначе $\omega = s/|s|$). Требуемый алгоритм определяется выражением

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0, z_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{|r-P_0| < d_0} \frac{x_1(d_0^3 - |r-P_0|^3)}{d_0^3 |r-P_0|^3} g(r) dr + \\ + M \left\{ \frac{3a}{d_0} \left[\sum_{i=1}^N \frac{1}{4\pi d_i} \int_{|r-P_i| < d_i} \frac{d_i - |r-P_i|}{|r-P_i|} g(r) dr + \psi(P_N^*) \right] \right\},$$

где $x_1 = x(r - P_0)$, $a = \omega_x$.

Нетрудно заметить, что соотношение (6) дает возможность по одним и тем же траекториям цепи $P_0, P_1, P_2, \dots$ оценивать решение во всех точках шара $|r - P_0| < d_0$.

Оценим теперь количество R_ϵ арифметических операций, необходимое для достижения заданной погрешности ϵ в оценке решения. Ранее было показано, что число сфер при обрыве траектории в Γ_ϵ имеет порядок величины $|\ln \epsilon|$. С другой стороны, чтобы вероятностная погрешность оценки была порядка ϵ , необходимо моделировать $c\epsilon^{-2}$ траекторий. Отсюда $R_\epsilon \sim c_n |\ln \epsilon| / \epsilon^2$, где c_n — число арифметических операций, приходящееся на одну сферу в пространстве n измерений. При больших n величина c_n зависит от n линейно.

Авторы благодарны акад. Г. И. Марчуку за полезные замечания при обсуждении работы.

Вычислительный центр
Сибирского отделения Академии наук СССР
Новосибирск

Поступило
17 XII 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ М. Е. Muller, Ann. Math. Statistics, 27, № 3, 569 (1956). ² Б. С. Елепов, Г. А. Михайлов, Журн. вычислит. матем. и матем. физ., 9, № 3, 647 (1969).
- ³ А. Фридман, Уравнения с частными производными параболического типа, ИЛ, 1968. ⁴ С. М. Ермаков, Метод Монте-Карло и смежные вопросы, М., 1971.
- ⁵ Г. А. Михайлов, Журн. вычислит. матем. и матем. физ., 9, № 5, 1145 (1969).
- ⁶ И. Г. Дядькин, В. Н. Стариков, там же, 5, № 5, 936 (1965). ⁷ Н. С. Кошляков, Э. Б. Глинер, М. М. Смирнов, Основные дифференциальные уравнения математической физики, М., 1962.