В нашем случае естественно предположить, что $K \in [L_1 \to L_1]$. Легко показать, что

$$\|K\|_{L_1} \leqslant \sup_{j, x'} \sum_{i=1}^{n} \int_X |k_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x})| \, d\mathbf{x}.$$

Известно (см., например, монографию Л. В. Канторовича и Г. П. Акилова, 1959), что если $\lim\limits_{n \to \infty} \|K^{n_0}\|_{L_1} < 1$, то решение системы (3.10) представимо рядом Неймана:

$$\boldsymbol{\varphi} = \sum_{n=0}^{\infty} K^n \mathbf{f}, \quad K^0 \mathbf{f} \equiv \mathbf{f}. \qquad (3.13)$$

Пусть необходимо вычислить функционал

$$I_h = (\varphi, h) = \sum_{i=1}^{n} \int_X \varphi_i(\mathbf{x}) h_i(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} (K^n f, h) \qquad (3.14)$$

от решения системы интегральных уравнений (3.10—3.11). Здесь $h$ — вектор-функция с ограниченными компонентами. Как и в п. 1, введем вспомогательный случайный вектор «весов» $\mathbf{Q}$ по формулам:

$$Q_0^{(i)} = \frac{f_i(\mathbf{x}_0)}{r_0(\mathbf{x}_0)}; \quad Q_n^{(i)} = \sum_{j=1}^{n} Q_{n-1}^{(j)} \frac{k_{ij}(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_n)}{p(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_n)}. \qquad (3.15)$$

Аналогично тому, как это делается для одного интегрального уравнения (3.1), можно показать, что

$$M \sum_{k=0}^{N} \left[ \sum_{i=1}^{n} Q_k^{(i)} h_i(\mathbf{x}_k) \right] = (\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h}) = (\mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi}^*).$$

Равенству (3.9) соответствует следующее соотношение:

$$\varphi_i^*(\mathbf{x}) = h_i(\mathbf{x}) + M \sum_{k=0}^{N} \left[ \sum_{i=1}^{n} Q_k^{(i)} h_i(\mathbf{x}_k) \right]. \qquad (3.16)$$

V

## § 3.2. Построение и обоснование алгоритма «блужданий по сферам» для решения первой краевой задачи для уравнения Гельмгольца

1. Для ограниченной области $D$ с границей $\Gamma$ трехмерного евклидова пространства $X$ рассмотрим задачу

$$\Delta u - cu = -g, \quad u|_\Gamma = \psi(x, y, z), \qquad (3.17)$$



где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, $c \geqslant 0$. Относительно формы границы и функций $g$, $\psi$ предполагаем, что они удовлетворяют условиям, обеспечивающим необходимую нам в дальнейшем гладкость решения.

Настоящий параграф посвящен вопросам построения и обоснования метода Монте-Карло для оценки решения задачи (3.17) в произвольной точке $P_0 \in D$. Для решения задачи

$$\Delta u = 0, \quad u|_\Gamma = \psi(x, y, z) \qquad (3.18)$$

был предложен Дж. Брауном (1953) и затем обоснован М. Мюллером (1956) алгоритм «блужданий по сферам», основанный на представлении решения исходной задачи в произвольной точке $P \in D$ интегралом по мере Винера.

Обобщим процесс «блужданий по сферам» на случай уравнения Гельмгольца. Для этого используем специальное интегральное уравнение Фредгольма 2-го рода с вырожденным ядром, форма которого определяется «шаровой» функцией Грина задачи (3.17). Обозначим через $G(r, P_0)$ функцию Грина оператора $\Delta - c$ для шара радиуса $d_0$ с центром в точке $P_0$. Тогда решение задачи (3.17) в точке $P_0$ можно представить в виде

$$u(P_0) = \int_{S(P_0)} - \frac{\partial G(\mathbf{r}, P_0)}{\partial \vec{n}} \bigg|_{|\mathbf{r}| = d_0} u(s) \, ds + \int_{|\mathbf{r} - P_0| \leqslant d_0} G(\mathbf{r}, P_0) \cdot g(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r}, \qquad (3.19)$$

где

$$G(\mathbf{r}, P_0) = \frac{\operatorname{sh}\left[(d_0 - |\mathbf{r} - P_0|)\sqrt{c}\right]}{4\pi \cdot |\mathbf{r} - P_0| \operatorname{sh}(d_0 \sqrt{c})},$$
$$\frac{\partial G}{\partial \mathbf{n}} \bigg|_{|\mathbf{r}| = d_0} = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{r}} \bigg|_{|\mathbf{r}| = d_0} = - \frac{d_0 \sqrt{c}}{4\pi d_0^2 \operatorname{sh}(d_0 \sqrt{c})}, \qquad (3.20)$$

$d_0 = d(P_0)$. Первый интеграл в (3.19) — это интеграл по поверхности сферы $S(P_0)$, второй — по всему шару $|\mathbf{r} - P_0| \leqslant d_0$.

Соотношение (3.19) можно рассматривать как сопряженное (соответственно принятой в теории методов Монте-Карло терминологии) интегральное уравнение Фредгольма 2-го рода с обобщенным ядром, представляющим равномерное распределение вероятностей на сфере $S(P_0)$; после введения этого ядра первый интеграл в (3.19) становится трехмерным. Вернемся к уравнению (3.19). Нетрудно понять, что стандартные алгоритмы метода Монте-Карло распространяются на такие интегральные уравнения, если особенности 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 мы и называем «блужданием по сферам». Соотношение (3.19) необходимо дополнить следующим равенством:

$$u(P_0) = \psi(P_0); \quad P_0 \in \Gamma, \tag{3.21}$$

которое означает, что ядро интегрального 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 несмещенной вероятностной оценке решения в точке $P_0$, которая нереализуема, 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 рассматриваемом нами пространстве $L_1$ равна 1. Далее мы построим «смещенную», но реализуемую оценку решения задачи (3.17) и оценим величину смещения.

Предположим, что решение задачи Дирихле известно в каждой точке множества $\Gamma_\varepsilon$. Тогда для функции $u(\vec{r})$ можно записать следующее интегральное уравнение:

$$u(\mathbf{r}) = \int_D k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\, u(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' + \varphi(\mathbf{r}), \tag{3.22}$$

(152)
(153)

где $k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{cases} \dfrac{d\sqrt{c}}{\operatorname{sh}(d\sqrt{c})}\, \delta_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}'), & \text{если } \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon, \\ 0, & \text{если } \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon, \end{cases}$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{4\pi} \displaystyle\int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \leqslant d} \dfrac{\operatorname{sh}[(d - |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\sqrt{c}]\, g(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\, \operatorname{sh}(d\sqrt{c})}, & \text{если } \mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon, \\ u(\mathbf{r}), \quad \psi(r) & \text{если } \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases} \tag{3.23}$$

Здесь $d = d(\mathbf{r})$, $\delta_\mu(\mathbf{r}')$ — обобщенная плотность, соответствующая равномерному распределению вероятностей на сфере $S(\mathbf{r})$.



Чтобы исследовать сходимость ряда Неймана для уравнения (3.22), вычислим норму оператора $K$ в естественном для данной задачи пространстве $L_1$. Поскольку при $c > 0$ $d\sqrt{c}/\operatorname{sh}(d\sqrt{c}) \leqslant 1$, то

$$\iint_D k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\, k(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')\, d\mathbf{r}'\, d\mathbf{r}'' \leqslant$$

$$\leqslant \int_{D-\Gamma_\varepsilon} \delta_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}') \left( \int_D \delta_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}'')\, d\mathbf{r}'' \right) d\mathbf{r}' =$$

$$= \int_{D-\Gamma_\varepsilon} \delta_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' \leqslant 1 - \nu(\varepsilon).$$

Здесь использовано условие (2.1) и тот факт, что $k(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = 0$ при $\mathbf{r}' \in \Gamma_\varepsilon$. Отсюда получаем

$$\| K^2 \|_{L_1} \leqslant 1 - \nu(\varepsilon) < 1. \tag{3.24}$$

Следовательно, соотношение (3.24) обеспечивает сходимость ряда Неймана и, тем самым, возможность применения метода Монте-Карло для уравнения (3.22). Еще раз заметим, что (3.22) имеет вид сопряженного интегрального уравнения. Поэтому для оценки $u(P_0)$ можно применить соотношение

$$u(P_0) = M\xi, \quad \xi = \varphi(P_0) + \sum_{n=1}^{N} Q_n\, \varphi(P_n), \tag{3.25}$$

где $\varphi(P_n)$ — определяется из (3.23). Здесь $\{P_n\}$ — цепь Маркова, которую целесообразно определить следующим образом:

$r_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - P_0)$ — плотность начального распределения; $r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}')$ — плотность перехода из $\mathbf{r}$ в $\mathbf{r}'$; $p(\mathbf{r})$ — вероятность обрыва цепи, определяемая выражением:

$$p(r) = \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon, \\ 1, & \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

Как уже было указано, эта цепь называется «блужданием по сферам». Для такой цепи $Q_0 = 1, Q_i = Q_{i-1} \dfrac{d_{i-1}\sqrt{c}}{\operatorname{sh}(d_{i-1}\sqrt{c})}$, $d_i = d(P_i)$, $i = 1, 2, 3 \ldots$

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

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

В результате получим смещенную оценку $\xi_\varepsilon$, среднее значение которой отличается от $u(P_0)$ на величину порядка $\varepsilon$. Действительно, если рассмотреть выражение для разности оценок $\xi$ и $\xi_\varepsilon$, то будем иметь

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

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

Описанный способ переноса граничных условий в полосу $\Gamma_\varepsilon$ М. Мюллер назвал «$\delta$-усечением» первого порядка. Можно предложить различные способы учета граничных условий: использование кривизны $\Gamma(D)$, осреднение по телесному углу, под которым видна часть $\Gamma(D)$ из точки $\vec{r} \in \Gamma_\varepsilon$. Точность $\varepsilon$-приближения можно существенно увеличить с помощью экстраполяции по $\varepsilon$ (см. § 7.1). Расчеты для различных значений $\varepsilon$ можно производить одновременно, т. е. получать результат для любого $\varepsilon_1 > \varepsilon$ без дополнительных затрат времени ЭВМ; при этом ввиду сильной зависимости оценок разность $u_\varepsilon - u_{\varepsilon_1}$ вычисляется достаточно хорошо. Эффективность такой методики подтверждается расчетами.

Дисперсия полученной оценки конечна, так как $\xi_\varepsilon$ убывает с ростом $c$, а при $c = 0$ веса равны 1, и «блуждание по сферам» представляет «прямое моделирование», для которого дисперсия конечна.

Далее, интеграл, выражающий $\varphi(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \notin \Gamma$, можно оценивать методом Монте-Карло по одному случайному «узлу» (см. приложение 2). Выражение для функции $\varphi(r)$, как уже указывалось, имеет вид

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int\limits_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|<d} G(\mathbf{r}, d)\, g(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}',$$

где $G(\mathbf{r}, d)$ — функция Грина оператора $\Delta - c$ для шара

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < d, \ G(\mathbf{r}, d) = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{\operatorname{sh}[(d - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\sqrt{c}]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \operatorname{sh}(d\sqrt{c})}, \ d = d(\mathbf{r}).$$



Таким образом, универсальная плотность распределения «узла» пропорциональна функции Грина $G(\mathbf{r}, d)$. Вычисляя интеграл от функции Грина $G(\mathbf{r}, d)$

$$F_R = \int\limits_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\leqslant d} G(\mathbf{r}, d)\, d\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{c}}\left(\frac{1}{\sqrt{c}} - \frac{d}{\operatorname{sh}(d\sqrt{c})}\right)$$

и переходя к полярной системе координат, для расстояния $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ случайного узла от $\mathbf{r}$ будем иметь следующую плотность распределения случайного узла:

$$f_{\rho,\theta,\psi}(x) = \frac{x \operatorname{sh}[(d - x)\sqrt{c}]}{F_R \operatorname{sh}(d\sqrt{c})} \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\sin\theta}{2}. \tag{3.26}$$

Эффективный алгоритм моделирования для такой плотности рассмотрен в § 3.4. Соответствующая случайная оценка $\varphi(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \frac{1}{\sqrt{c}}\left(\frac{1}{\sqrt{c}} - \frac{d}{\operatorname{sh}(d\sqrt{c})}\right) g(\mathbf{r} + \rho \cdot \omega),$$

где $\omega$ — изотропный случайный вектор. Легко видеть, что $M\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \varphi(\mathbf{r})$. Таким образом, если для оценки $\varphi(\mathbf{r})$ использовать приведенное соотношение для $\varphi_1$, то математическое ожидание случайной величины

$$\xi_{\varepsilon,1} = \varphi_1(P_0, \rho_0, \omega_0) + \sum_{n=1}^{N-1} Q_n \varphi_1(P_n, \rho_n, \omega_n) + Q_N \psi(P_N^*)$$

дает оценку решения задачи (3.17) в точке $P_0$. Если в уравнении (3.17) положить $c = 0$, то мы получим задачу Дирихле для уравнения Пуассона. В этом случае функция Грина $G(\mathbf{r}, d)$ примет вид

$$G(\mathbf{r}, d) = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{d}\right), \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \leqslant d(\mathbf{r}) \equiv d,$$

а функция

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{4\pi} \displaystyle\int\limits_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\leqslant d} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{d}\right) g(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}', & \text{если } \mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon, \\ u(\mathbf{r}), & \text{если } \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона будет определяться соотношением, аналогичным соотношению (3.25), т. е.

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

где $Q_n = 1$, $n = 1, 2, \ldots$ Рассуждая аналогично приведенному, легко получить соотношение $u(P_0) = M\xi_{\varepsilon, 1}$,

$$\xi_{\varepsilon,1} = \varphi_1(P_0, \rho, \omega_0) + \sum_{n=1}^{N-1} \varphi_1(P_n, \rho_n, \omega_n) + \psi(P_N^*),$$

где $\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \frac{d^2}{6} g(\mathbf{r} + \rho\cdot\omega)$, причем $M\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega) = \varphi(\mathbf{r})$. Интеграл, выражающий $\varphi(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon$, можно оценивать по одному случайному узлу, распределенному с плотностью

$$f_{\rho,\theta,\psi}(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sin\theta}{2} \frac{6x(1 - x/d)}{d^2}, \quad 0 \leqslant x \leqslant d.$$

Исходя из формул (3.22), (3.25), (3.20), сформулируем алгоритм метода Монте-Карло для оценки решения задачи (3.17) в заданной точке $P_0$:

1) из точки $P_0$ моделируется цепь $\{P_n\}$ до первого попадания в $\varepsilon$-окрестность границы $\Gamma_\varepsilon$, определяется точка $P^* \in \Gamma(P^*$ — ближайшая к последнему состоянию $P_N$ точка границы, $N$ — номер последнего состояния);

2) соответственно плотности (3.26) в каждой сфере $S(P)$ вычисляется значение функции $\varphi_1(\mathbf{r}, \rho, \omega)$; подсчитываются веса $Q_n$, $n = 0, 1, 2, \ldots$;

3) искомая оценка получается осреднением по всем траекториям величины

$$\xi_{\varepsilon,1} = \varphi_1(P_0, \rho_0, \omega_0) + \sum_{n=1}^{N-1} Q_n\varphi_1(P_n, \rho_n, \omega_n) + \psi(P_N^*). \quad (3.27)$$

Для практических расчетов важна

**Теорема 3.2.** *Дисперсия случайной величины $\xi_\varepsilon$ равномерно ограничена по $\varepsilon$, т. е. $D\xi < c < \infty$, $c = \mathrm{const}$.*

**Доказательство.** Ввиду ограниченности функции $\psi(x, y, z)$ достаточно предположить, что $\psi = 0$. При $c = 0$ функция

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \int\limits_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|<d} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{d}\right) g(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}', & \text{если } \mathbf{r} \notin \Gamma_\varepsilon, \\ u(\mathbf{r}), & \text{если } \mathbf{r} \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases} \quad (3.28)$$



Далее, поскольку $Q_N \leqslant 1$ и $\varphi|_{c\neq 0} \leqslant \varphi|_{c=0}$, достаточно рассмотреть случай $c = 0$, при котором $Q_N \equiv 1$. В этом случае изучаемый алгоритм представляет собой прямое моделирование (см., например, Ермаков, 1971) для уравнения (3.22), и соответствующая дисперсия выражается следующей формулой Ермакова, Золотухина (1963):

$$D\xi_\varepsilon = \left(f_\varepsilon, \varphi\left[2f_\varepsilon^* - \varphi\right]\right), \quad (3.29)$$

где $f_\varepsilon$ — плотность центров сфер, а $f_\varepsilon^*$ — решение задачи для данного значения $\varepsilon$. В § 3.4 показано, что $f_\varepsilon(d) \leqslant c_1/d$. В то же время

$$f_\varepsilon^* < c_2, \quad \varphi(d) \leqslant c_3 d^2, \quad (3.30)$$

в силу (3.28). Отсюда получаем утверждение теоремы путем интегрирования (3.29) по достаточно узкому «приграничному слою».

Алгоритмы метода Монте-Карло для решения интегральных уравнений можно улучшить, используя априорную информацию при решении сопряженного уравнения. В данном случае дисперсия оценки $u(P_0)$ будет равна нулю, если плотности распределения на поверхности сфер брать пропорциональными решению $u(r)$, вводя соответствующие весовые множители. Это непосредственно следует из результатов работы Михайлова (1969), которые также показывают, что дисперсию оценки $u(P_0)$ можно сделать достаточно малой, если плотность перехода определяется достаточно хорошим приближением к решению с точностью до постоянного множителя.

Приведенный алгоритм метода Монте-Карло позволяет решать краевые задачи для уравнения Гельмгольца, Пуассона и Лапласа в областях с практически произвольной границей. Особенно эффективен алгоритм такого типа для задач большой размерности. Заметим, что нетрудно получить конкретный вид алгоритма для различного числа измерений (см. § 3.5).

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