

С. М. ЕРМАКОВ, А. С. СИПИН

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО
И ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ
РАЗДЕЛИМОСТЬ АЛГОРИТМОВ



УДК 519.21

ББК 517.8

Е72

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук, проф. *В. Б. Невзоров* (С.-Петерб. гос. ун-т); д-р физ.-мат. наук, вед. научн. сотр. *Н. А. Симонов* (Новосибирский технол. центр, Бейкер Хьюз Б.В.)

*Печатается по постановлению
Редакционно-издательского совета
математико-механического факультета
С.-Петербургского государственного университета*

Ермаков С. М., Сипин А. С.

Е72 Метод Монте-Карло и параметрическая раздели-
мость алгоритмов. — СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2014. —
248 с. ISBN 978-5-288-05577-5

В книге излагаются в основном результаты авторов, развивающие методы Монте-Карло и полученные в последние годы при поддержке грантов РФФИ. Необходимость связанного изложения при этом потребовала также помещения в книгу ряда известных результатов, которые были подвергнуты авторами серьезной методической переработке. Во всех случаях алгоритмы рассматривались с точки зрения их использования на современных компьютерах с большим числом процессоров (ПР-алгоритмы). Среди новых, вошедших в книгу результатов, можно особо отметить:

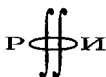
— обоснование и развитие стохастических методов решения параболических уравнений.

— применение метода Монте-Карло к решению сложных экстремальных задач и вычислению коэффициентов характеристического многочлена оператора.

— исследование стохастической устойчивости алгоритмов, связь с параллелизмом (знакопеременный случай) и ряд других.

Книга будет полезна для широкого круга исследователей, использующих многопроцессорную вычислительную технику для решения прикладных задач и развивающих теорию параллельных алгоритмов.

ББК 517.8



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту № 14-01-07007, не подлежит продаже.

© С. М. Ермаков,
А. С. Сипин, 2014

© Санкт-Петербургский
государственный
университет, 2014

ISBN 978-5-288-05577-5

ПРЕДИСЛОВИЕ

Книга посвящена стохастическим вычислительным методам (методам Монте-Карло). В ней излагаются результаты, полученные авторами и с их участием в течение последних лет в процессе выполнения исследовательских работ при поддержке грантов РФФИ № 11-01-00769-а; № 14-01-00271-а. Известные ранее результаты приводятся для обеспечения связности изложения. Как правило они методически переработаны в нужном для основной темы направлении.

О важности метода Монте-Карло свидетельствуют многочисленные приложения. Наиболее удачные примеры его использования относятся, как правило, к задачам, допускающим теоретико-вероятностную трактовку. Вопрос о том, насколько целесообразно использовать метод в других случаях, мало изучен. Вместе с тем привлечение рандомизации оказывается важным средством создания алгоритмов с естественным параллелизмом. Тенденция, направленная на создание компьютеров с большим числом процессоров (ядер), обуславливает, таким образом, важность исследования рандомизованных алгоритмов.

Книга состоит из двух частей. Первая из них написана С. М. Ермаковым, а вторая — А. С. Сипиным. Обе части идейно тесно связаны, и авторы имели ряд дискуссий в процессе их написания. Общее руководство работами осуществлялось С. М. Ермаковым. В книге также освещён вклад участвующих в работах, поддержанных грантами РФФИ, аспирантов: Мисова Т. И., Видяевой К. О., Антонова А. А., Дмитриева А. В., Кузнецова А. Н.

В первой части основное внимание сосредоточено на проблеме параллелизма. Указано, что метод Монте-Карло принадлежит к классу параметрически разделимых алгоритмов, удобных при вычислениях с многими (очень многими) процессорами. Основой метода является моделирование распределений, и автор пользуется случаем лишний раз указать подход к строгому обоснованию одного из методов моделирования равномерного распределения. Показано, каким образом методы моделирования распределений можно применять к решению сложной экстремальной задачи.

Далее центральное место занимает вопрос о представимости решения широкого круга задач (не обязательно допускающих вероят-

ностную трактовку) в виде интеграла по траекториям случайных процессов. Указаны классы линейных и нелинейных задач, для которых можно получить такое представление. Рассматриваются особенности возникающих параллельных алгоритмов и приводятся примеры решения некоторых нелинейных прикладных задач.

Вторая часть посвящена методам Монте-Карло для решения параболических и эллиптических уравнений в частных производных с переменными коэффициентами. Полученные результаты призваны указать широкий класс бессеточных алгоритмов с параллельной структурой, основанных на представлении решения в виде интеграла по траекториям. Получаемые оценки являются, вообще говоря, ε -смещёнными, но для ряда важных в прикладном отношении областей возможно построение несмещённых оценок, что позволяет в процессе решения оценивать погрешность.

Таким образом, предлагаемая читателю книга представляет собой вклад в обширную область исследования стохастических алгоритмов с параллельной структурой вообще.

Определённое влияние на результаты авторов оказали исследования В. Вагнера, С. Хайнриха (Германия), Г. А. Михайлова и его сотрудников (Новосибирск).

В некоторых случаях результаты, изложенные в книге, дополняют соответствующие результаты упомянутых учёных.

Авторы благодарны рецензентам, которые взяли на себя труд внимательно прочитать рукопись. Сделанные ими замечания устранили ряд погрешностей и улучшили изложение.

ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что эффективное использование современных суперкомпьютеров налагает определенные требования на выбор алгоритмов решения задач. Разумеется, возможен подход, при котором любой алгоритм анализируется программистом или транслятором, и имеющиеся параллельные структуры используются при вычислениях. Такой подход, однако, в большинстве случаев приводит к недостаточно эффективному использованию оборудования. При этом часто оказывается, что алгоритм, обладающий худшими свойствами в рамках концепции последовательных вычислений Дж. фон Неймана, оказывается более эффективным при использовании многопроцессорной техники. Очевидно представляет интерес изучение «плохих» (в указанном выше смысле) алгоритмов, способных эффективно загрузить многопроцессорное оборудование, и разработка новых алгоритмов такого сорта. При этом, очевидно, наиболее интересны «не очень плохие» алгоритмы.

Далее мы рассмотрим один из классов алгоритмов, способных эффективно загрузить систему с распределенной памятью, состоящую из центрального (управляющего) процессора и k процессоров, обладающих автономной памятью. Кластеры и облака могут служить примерами таких систем. Предполагается, что время обмена между процессорами существенно больше (на несколько порядков) времени выполнения операций каждым процессором. В связи с этим последним предположением заметим следующее.

Пусть оптимальный последовательный (требующий минимального среднего числа арифметических операций) алгоритм решения некоторой задачи требует времени T_0 . В качестве альтернативы мы можем использовать алгоритм, требующий для исполнения в последовательном варианте времени T , $T > T_0$, и привлечь k процессоров, каждый из которых будет занят время T/k . При этом потребуются дополнительное время t на обмен информацией в процессе решения задачи; t может быть значительным.

Очевидным требованием является выполнение неравенства

$$T_0 \geq \frac{T}{k} + t,$$

то есть альтернативный алгоритм должен обладать свойством

$$T \leq k(T_0 - t). \quad (1)$$

Ясно, что должно быть $t < T_0$. В противном случае многопроцессорность не улучшает дело. Мы видим также, что рост k и уменьшение t позволяет привлечь к решению задачи широкий круг алгоритмов со свойствами, далекими от оптимальности в традиционном смысле, алгоритмы могут быть «плохими», но должны иметь параллельную структуру и быть оптимальными или близкими к оптимальным в смысле Воеводина (граф алгоритма близок к графу оборудования).

К числу алгоритмов с параллельной структурой и редкими обменами между процессорами относятся параметрически разделимые ПР-алгоритмы [1].

ПР-алгоритм состоит из трёх частей, выполняемых последовательно

$$B_1 \rightarrow A(\theta) \rightarrow B_2,$$

и обладает следующими свойствами:

- 1) алгоритм $A(\theta)$ зависит от параметра θ (имеет θ в качестве входных данных); θ принимает значения из дискретного множества Θ достаточно общей природы;
- 2) выполнение алгоритмов $A(\theta_i)$, $\theta_i \in \Theta$, $i = 1, \dots, K$ может быть поручено k независимым процессорам;
- 3) алгоритм B_1 сообщает задания алгоритму A , а B_2 вычисляет решение исходной задачи, имея результаты, полученные $A(\theta_i)$, $i = 1, \dots, K$.

Если времена выполнения алгоритмов $A(\theta_i)$ при различных i разнятся незначительно, то ПР-алгоритм называется *однородным*.

В качестве одного из простейших примеров ПР-алгоритмов можно сослаться на ВВР-алгоритмы [2]. Алгоритм такого типа вычисляет (например) независимо каждый из разрядов числа π . Здесь $\Theta = \mathbb{N}$ — множество натуральных чисел. Вычислительная система из k процессоров вычисляет k разрядов или k групп разрядов независимо, результаты поступают в один из процессоров (обмен), и формируется приближенное с заданной точностью значение числа π .

Многие алгоритмы вычислительной математики являются ПР-алгоритмами. Так, если вычисление значений $f(X)$, где $X \in D \subset \mathbf{R}^s$ связано со значительными трудностями, то алгоритм построения интерполяционного многочлена $P(X) = \sum_{i=1}^n l_i(X)f(X_i)$, $l_i(X)$ — многочлены, $X_i \in D$, и вычисления интеграла с помощью кубатурной суммы

$$K_n[f] = \sum_{i=1}^n A_i f(X_i) \quad (2)$$

являются ПР-алгоритмами, где совокупность точек X_i составляют параметрическое множество Θ .

Очевидно, изучение ПР-алгоритмов представляет значительный интерес в свете основных тенденций развития современной вычислительной техники. Таковыми являются — создание компьютеров с параллельной структурой на базе большого числа процессоров, использование дополнительных вычислительных устройств типа SIMD (видеокарты, например) и другие.

Далее мы рассмотрим некоторые типы ПР-алгоритмов, тесно связанные с методами численного интегрирования. Оказывается, что класс таких алгоритмов очень широк. Это, в первую очередь, алгоритмы решения задач, приводимых к вычислению интегралов по траекториям. Представление решения в виде интеграла часто требует специальных исследований. Поскольку математические ожидания случайных величин являются интегралами по вероятностным мерам, аппарат теории вероятностей находит естественное применение в этих исследованиях. Вычислительным аппаратом являются метод Монте-Карло и кубатурные формулы для интегрирования функций малой гладкости (методы квази Монте-Карло).

Рассматриваемые далее в книге алгоритмы являются ПР-алгоритмами. Если в I части основное внимание уделено расширению класса ПР-алгоритмов на случай, когда невозможно непосредственное представление решения в виде интеграла по траекториям, то II часть, напротив, рассматривает конкретный класс задач, где такое представление строится. Авторам казалось полезным развить строгий теоретико-вероятностный аппарат в качестве примера обоснования одного из важных классов ПР-алгоритмов.

Глава 1

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

1.1. ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ МНОЖЕСТВО МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Как мы уже отмечали, параметрическим множеством метода Монте-Карло является совокупность псевдослучайных чисел (как правило, физические датчики случайных чисел при решении задач вычислительной математики не используются). Элементы множества могут быть вычислены с помощью одной из рекуррентных процедур. Наиболее исследованной является процедура вида

$$Z_{n+1} \equiv MZ_n + C \pmod{P}, \quad \alpha_n = \frac{Z_n}{P}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.1.1)$$

где M , C и Z_0 — заданные целые положительные числа.

Последовательность Z_n очевидным образом периодична. Если L — длина периода, то это означает, что

$$Z_0 \equiv MZ_L + C \pmod{P}.$$

Параметрическое множество, таким образом, состоит из $L + 1$ числа $\alpha_0, \dots, \alpha_L$. Числа α_n являются рациональными P -ичными дробями.

Понятно, что последовательность (1.1.1) вполне детерминирована, но при $P \rightarrow \infty$ оказывается, что при условии максимальной длины периода она становится последовательностью дробных долей показательной функции

$$\alpha_{n+1} = \{M\alpha_n + C\}, \quad (1.1.2)$$

а эта последовательность обладает рядом свойств, присущих реализациям равномерно распределённых на отрезке $(0, 1)$ случайных величин. Здесь $\{a\}$ обозначает дробную долю числа a , а C и все α_n являются вещественными числами.

Напомним, что для независимых реализаций случайной величины $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$, равномерно распределённой на промежутке $[0, 1]$, имеет место усиленный закон больших чисел:

$$\frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} f(Y_l) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} \int_{D_s} f(X) dX, \quad (1.1.3)$$

$$X = (x_1, \dots, x_s), \quad Y_l = (\varepsilon_{sl+1}, \dots, \varepsilon_{(s+1)l}),$$

f — любая интегрируемая функция s переменных, D_s — единичный гиперкуб, $s = 1, 2, \dots$ — любое, и сходимость к пределу происходит с вероятностью 1.

Для интегрируемой с квадратом функции имеет место частный случай Центральной предельной теоремы:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left(\frac{\sqrt{N}}{\sigma} \left| \int_0^1 f(X) dX - \frac{1}{N} \sum_{l=0}^N f(Y_l) \right| < y \right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^y e^{-\frac{u^2}{2}} du. \quad (1.1.4)$$

Очевидно, мы не можем найти детерминированную последовательность $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, удовлетворяющую аналогичным соотношениям. Достаточно заметить, что измеримая f может быть не определена на множестве меры нуль, а всякая счётная последовательность имеет лебегову меру нуль. То есть наверняка существует f , для которой (1.1.3) не выполнимо при любом выборе $\alpha_1, \dots, \alpha_n$.

Обоснование вероятностных свойств последовательности (1.1.1) возможно с помощью метрических теорем теории чисел. Мы воспользуемся теоремой [3], которая гласит:

Теорема 1. Пусть $a_1, a_2, \dots$ — последовательность различных целых чисел, $x \in (0, 1)$ и

$$\varepsilon_n = \{a_n x\}, \quad n = 1, 2, \dots; \quad (1.1.5)$$

тогда для любой интегрируемой по Риману на $[0, 1]$ функции $f(x)$ и почти всех x из $(0, 1)$ справедливо равенство

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\varepsilon_n) = \int_0^1 f(x) dx. \quad (1.1.6)$$

□

Последовательности, для которых выполняется (1.1.6), называют равномерно распределёнными в смысле Вейля.

Также приведем без доказательства следующую теорему.

Теорема 2. (Лемма Сю [4]). Пусть $x \in (0, 1)$,

$$\alpha_n = \{M^n x\}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (1.1.7)$$

$f(X)$, $X = (x_1, \dots, x_s)$ — интегрируемая по Риману в единичном гиперкубе D_s функция и

$$\varphi_M(x) = f(x, \{Mx\}, \dots, \{M^{s-1}x\});$$

тогда

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \int_0^1 \varphi_M(x) dx = \int_{D_s} f(X) dX. \quad (1.1.8)$$

□

Последовательность α_n , определяемую формулой (1.1.7), называют последовательностью дробных долей показательной функции.

Составим из элементов последовательности (1.1.7) векторы

$$Y_l = (\alpha_{sl+1}, \dots, \alpha_{(s+1)l}). \quad (1.1.9)$$

Из (1.1.6) и (1.1.8) легко получить следующее утверждение [5].

Теорема 3. Для любого конечного s и $f(X)$, интегрируемой по Риману в D_s (и почти всех x из $(0, 1)$), справедливо предельное равенство

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N f(Y_l) \right] = \int_{D_s} f(X) dX. \quad (1.1.10)$$

□

Таким образом, последовательность (1.1.9) асимптотически равномерно распределена в смысле Вейля при любом s . Формулы (1.1.5) сходятся с (1.1.1) и являются их предельным вариантом при $P \rightarrow \infty$. Однако при конечном P , когда α_0 — рациональная дробь, существуют функции f , для которых (1.1.10) не выполняется.

Действительно, пусть $P = 2^m$, $\alpha = \bar{\alpha}$ рационально и $f(X) = \tilde{f}(X) = \exp 2\pi i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + \dots + k_s x_s)$, где $k_1, \dots, k_s$ — заданные числа, не равные нулю одновременно. Интеграл в правой части (1.1.3) для этой f равен нулю, а l -е слагаемое суммы в левой части есть

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\bar{\alpha}_{sl+1}, \dots, \bar{\alpha}_{(s+1)l}) &= \\ &= \exp 2\pi i(k_1 M^{sl+1} + k_2 M^{sl+2} + \dots + k_s M^{(s+1)l}) \alpha_0 = \\ &= \exp 2\pi i M^{sl+1} (k_1 + k_2 M + \dots + k_s M^{s-l}) \frac{Z_0}{P} \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

(здесь $\bar{\alpha}_{n+1} = \{M\bar{\alpha}_n\}$), и, если окажется, что

$$k_1 + k_2M + \dots + k_sM^{s-l} \equiv 0 \pmod{P}, \quad (1.1.12)$$

то сумма $\frac{1}{N} \sum_{l=1}^N f(Y_l)$ будет равна единице.

При каждом конечном P легко указать такие наборы $(k_1, \dots, k_s)$, что сравнение (1.1.12) будет иметь место, но с ростом P класс «плохих» функций будет сужаться.

Обозначим $\mathcal{K} = \{\vec{k} : \|\vec{k}\| \leq L\}$, где $\vec{k} = (k_1, \dots, k_s)$ удовлетворяет (1.1.12), $\|\vec{k}\|$ обозначает некоторую норму $\vec{k}$, L — заданная константа. Множество $\tilde{f}(X)$ при $k \in \mathcal{K}$ есть множество тригонометрических многочленов степени L от s переменных.

Справедлива следующая лемма.

Лемма 1. *Для заданного $L > 0$ существуют такие M и P , что множество $\mathcal{K}$ пусто.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Сравнение

$$k_1 + k_2M + \dots + k_sM^{s-1} \equiv 0 \pmod{P}$$

равносильно множеству равенств

$$k_1 + k_2M + \dots + k_sM^{s-1} = lP, \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.1.13)$$

В силу эквивалентности норм конечномерных векторов существует константа $L' > 0$, такая что $\max_i |k_i| \leq L'$, и при достаточно больших M значение многочлена относительно M в левой части (1.1.13) определяется членом k_sM^{s-1} . Таким образом, при $l = 0$ найдется такое $M_0 > 0$, что при $M > M_0$ многочлен не будет менять знак. С другой стороны, этот член ограничен величиной $L'M^{s-1}$, и при заданном s найдется такое достаточно большое $P = P(M)$, что многочлен

$$k_sM^{s-1} + \dots + k_2M + k_1 - lP$$

не имеет вещественных корней при любом значении $l = \pm 1, \dots$ (напомним, что все $|k_i|$ ограничены!). Лемма доказана. ■

Таким образом, для любого фиксированного s существуют столь большие L , M и P , $M < P$, что равенство (1.1.10) выполняется для любой непрерывной функции $f(X)$. Последнее утверждение следует из теоремы Вейерштрасса о приближении непрерывных функций тригонометрическими многочленами.

Это означает также, что совместные распределения последовательностей векторов $(\bar{\alpha}_{sl+1}, \dots, \bar{\alpha}_{(s+1)l})$, $l = 0, 1, \dots$, становятся близкими к распределениям дробных долей показательной функции при соответствующем M и некоторых начальных значениях Z_0 , обеспечивающих максимальность периода последовательности (1.1.1). Подробнее об этом сказано в [6].

Из сказанного следует важность изучения поведения последовательностей дробных долей показательной функции при больших M .

Равенство (1.1.10) является детерминистским аналогом Закона больших чисел. Известен [7] аналог Центральной предельной теоремы для дробных долей показательной функции. Имеет место

Теорема 4. *Для любой интегрируемой по Риману в D_s функции $f(X)$ имеет место равенство*

$$\begin{aligned} \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \text{mes} \left\{ \alpha_0 : \left| \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N f(Y_l) - \int_{D_s} f(X) dX \right| \cdot \frac{\sqrt{N}}{\sigma_f} < y \right\} \right) = \\ = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^y e^{-\frac{u^2}{2}} du, \end{aligned} \quad (1.1.14)$$

$$\text{где } \sigma_f = \left[\int_{D_s} f^2(X) dX - \left(\int_{D_s} f(X) dX \right)^2 \right]^{1/2}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Доказательство основано на теореме 3.

Рассмотрим остаток (погрешность)

$$R_N(f, \alpha_0) = \int_{D_s} f(X) dX - \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N f(Y_l(\alpha_0)) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \tilde{f}(Y_l(\alpha_0)),$$

где $\tilde{f}(X) = \int_{D_s} f(X) dX - f(X)$, и изучим предельное поведение $R_N(f, \alpha_0)$ при $N \rightarrow \infty$, $M \rightarrow \infty$. Заметим, что $\text{mes} \{x : R_N(f, x) < y\}$ есть функция распределения случайной величины $R_N(f, x)$ при равномерно распределённом на $(0, 1)$ случайном x . Тогда для моментов $R_N(f, x)$ справедливы равенства

$$\begin{aligned} I_p(R_N(f, \alpha_0)) &= \frac{1}{N^p} \int_0^1 \left(\sum_{l=1}^N \tilde{f}(Y_l(\varepsilon)) \right)^p d\varepsilon = \\ &= \sum_{m_1+m_2+\dots+m_k=p} C_N^k \frac{p!}{m_1! \dots m_k!} \int_0^1 \tilde{f}^{m_1}(Y_{l_1}(\varepsilon)) \dots \tilde{f}^{m_k}(Y_{l_k}(\varepsilon)) d\varepsilon, \end{aligned} \quad (1.1.15)$$

где $l_1 \neq l_2 \neq \dots \neq l_k$, $0 < i_r \leq N$, $r = 1, \dots, k$ (обобщенная формула бинома).

На основании (1.1.10) имеем

$$\begin{aligned} & \lim_{M \rightarrow \infty} I_p \left(R_N(f, \alpha_0) \right) = \\ &= \sum_{m_1 + \dots + m_k = P} C_N^k \frac{p!}{m_1! \dots m_k!} \int_{D_s} \tilde{f}^{m_1}(X) dX \dots \int_{D_s} \tilde{f}^{m_k}(X) dX = \\ &= E \left(\frac{1}{N} \sum_{l=1}^N f(\tilde{\alpha}_l) \right)^p, \end{aligned}$$

где $\tilde{\alpha}_l$ — независимые реализации s -мерного вектора с равномерно распределёнными и независимыми в D_s компонентами. Но при наших предположениях относительно f

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} P \left(\frac{1}{\sqrt{N} \sigma_f} \left| \sum_{l=1}^N f(\tilde{\alpha}_l) \right| < y \right) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^y e^{-\frac{u^2}{2}} du, \\ \sigma_f^2 &= \int_{D_s} \tilde{f}^2(X) dX = \int_{D_s} \tilde{f}^2(X) dX - \left(\int_{D_s} \tilde{f}(X) dX \right)^2. \end{aligned}$$

■

Таким образом, при больших $M < P$ мультипликативный датчик порождает последовательность, близкую в указанном выше смысле (близость распределений) к последовательностям независимых равномерно распределённых случайных величин.

Литература по выбору приемлемых значений M при данных P весьма обширна. Мы сошлёмся лишь на работы [8] и [9].

Далее мы рассмотрим в необходимом для наших целей объёме вопросы моделирования случайных величин с заданным законом распределения. Эффект конечности M и P не будет анализироваться. Нужно отметить, что анализ этого эффекта практически не исследовался.

1.2. МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОМЕРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

Мультипликативный датчик (псевдо) случайных чисел порождает последовательности, близкие по своим свойствам к последовательностям независимых реализаций равномерно распределённых случайных чисел. Мы видели, что некоторые, и именно какие, свойства имеют место. Известно, что проверка последовательностей такого рода с помощью статистических тестов также даёт удовлетворительные результаты.

В настоящее время построены и частично исследованы другие датчики ([10] и [11]) с очень большим периодом, но период мультипликативного датчика при $P \geq 2^{64}$ и соответствующим образом выбранном M удовлетворителен для прикладных целей.

Таким образом обосновывается подход к численному интегрированию широкого класса интегрируемых по Риману функций. При этом одна и та же последовательность обслуживает любую размерность s области интегрирования в виде единичного гиперкуба с погрешностью $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$. Это одна из сторон метода Монте-Карло. Другой, не менее важной, стороной является возможность получать ответ в виде распределения (шкалы). Во многих случаях алгоритм получения распределения оказывается значительно менее трудоёмким, чем алгоритм получения ответа в виде числа или таблицы чисел со значительным числом значащих цифр.

В данном разделе рассматриваются отдельные вопросы моделирования распределений в предположении, что имеется качественный алгоритм моделирования равномерно распределённых случайных величин. При этом мы остановимся лишь на некоторых принципиально важных вопросах. Проблемы влияния конечности числа разрядов и выбора числа M на качество моделирования отдельных распределений мало изучены и нами практически не рассматриваются, если не считать обсуждения влияния равномерности распределения на методы отбора. Во всех случаях предполагается, что приближённая в смысле предыдущего s реализация α случайной величины, равномерно распределённой на промежутке $[0, 1]$, может быть получена в виде r -ичной дроби с необходимым числом разрядов.

Рассмотрим моделирование дискретных распределений. Следующая лемма устанавливает связь между равномерным непрерывным и дискретным распределениями.

Лемма 2. *Для того, чтобы случайная величина α , имеющая представление в виде r -ичной дроби*

$$\alpha = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_j}{r^j}, \quad 0 \leq \varepsilon_j < r,$$

была равномерно распределённой на промежутке $[0, 1]$, необходимо и достаточно, чтобы ε_j были независимыми в совокупности случайными величинами с распределением

$$P(\varepsilon_j = l) = 1/r, \quad l = 0, \dots, r-1.$$

Доказательство.

По определению $\alpha \in (\frac{k}{r}, \frac{k+1}{r})$, $k=0, \dots, r-1$, с вероятностью $1/r$, то есть $P(\varepsilon_1 = k) = 1/r$ и не зависит от $\varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots$. Предположим, что наше утверждение доказано для совокупности $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$; тогда, поскольку $\alpha \in (a + \frac{k}{r^{n+1}}, a + \frac{k+1}{r^{n+1}})$, $a = \sum_{l=1}^n \frac{\varepsilon_l}{r^l}$, по аналогии с предыдущим рассужде-

нием имеем $P(\varepsilon_{n+1}=k)=1/r$ и не зависит от $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$, что и доказывает необходимость.

Достаточность. Пусть теперь ε_k независимы в совокупности и $P(\varepsilon_k = l) = 1/r, l = 0, \dots, r-1$. Покажем, что

$$P(\alpha < x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ x, & x \in [0, 1], \\ 1, & x > 1. \end{cases}$$

Пусть $x = \sum_{j=1}^{\infty} x_j/r^j$ — r -ичное представление числа x при $0 \leq x \leq 1$. В силу независимости ε_k имеем

$$P(\alpha < x) = \sum_{j=1}^{\infty} P\left(\frac{\varepsilon_j}{r^j} \in \delta_j\right), \quad \text{где} \quad \delta_j = \left(\sum_{l=1}^{j-1} \frac{x_l}{r^l}, \sum_{l=1}^j \frac{x_l}{r^l}\right).$$

Очевидно

$$P\left(\frac{\varepsilon_j}{r^j} \in \delta_j\right) = \frac{x_j}{r^j} \quad \text{и} \quad P(\alpha < x) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{x_j}{r^j} = x.$$

■

Отметим, что результат легко обобщается на случай представления числа α в смешанной системе счисления.

Лемма позволяет рассматривать последовательность случайных испытаний с конечным числом исходов в качестве последовательности значащих цифр случайной величины, равномерно распределённой на $[0, 1]$ в соответствующей системе счисления. Также позволяет моделировать равномерное распределение на множестве n объектов путём использования операции выделения целой части числа $n\alpha$.

Основные принципы моделирования случайной величины ξ , распределение которой задано таблицей (n — конечно)

k	1	2	$\dots$	n
$P(\xi = k)$	p_1	p_2	$\dots$	p_n

хорошо известны. Мы остановимся на этом вопросе кратко с целью выяснения некоторых общих тенденций моделирования распределений.

Первая группа методов основана на проверке неравенства

$$\sum_{i=1}^{j-1} p_i \leq \alpha < \sum_{i=1}^j p_i. \quad (1.2.1)$$

Если это неравенство выполняется, то j есть нужное значение ξ . Суммы $S_j = \sum_{i=1}^j p_i$, $S_0 = 0$, могут быть вычислены заранее или последовательно вычисляться для $j = 1, 2, \dots$ до выполнения неравенства. В первом случае возможно использование бисекции, и трудоёмкость алгоритма оценивается величиной $\log_2 n$. Во втором трудоёмкость зависит от нумерации p_i и их конкретных значений и должна оцениваться в каждом конкретном случае. В худшем случае среднее число операций может достигнуть величины $\frac{n+1}{2}$.

Формула (1.2.1) определяет одно значение ξ по одной реализации α . Алгоритм с меньшей трудоёмкостью может быть построен, если реализация ξ будет находиться по двум или более реализациям α . Действительно, если область S площади $|S| > 1$ будет содержать фигуры S_i , имеющие площади $p_1, p_2, \dots, p_n$ соответственно, так что $\sum_{i=1}^n p_i = 1$, и мы будем «бросать» внутрь S точку β, β' , равномерно распределённую в S , то возможны следующие исходы:

- а) β, β' попадает в одну из S_i (вероятность события $p_i/|S|$);
- б) β, β' не попадает ни в одну из S_i (вероятность события $q = 1 - 1/|S|$).

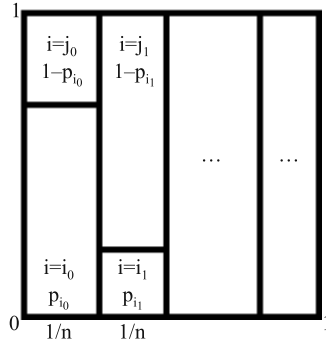
В случае а мы полагаем $\xi = i$. В случае б считаем, что произошло «непредусмотренное» событие и его нужно пропустить (метод отбора).

Очевидно, эффективность такого алгоритма тем выше, чем меньше q (формально эффективность определяют как $1/|S|$), и хотелось бы иметь алгоритм моделирования такой, чтобы каждое испытание было полезным. Можно попытаться расположить в единичном квадрате фигуры S_i с площадью p_i так, чтобы они полностью заполнили квадрат, и тогда каждая пробная точка, «брошенная» в квадрат, будет давать нужную реализацию, но сам алгоритм определения номера фигуры S_i может оказаться достаточно сложным, и всё обстоит не так просто.

Наиболее эффективный алгоритм, позволяющий избежать «холостных» проб, принадлежит Уолкеру [12]. Конструкция покрытия единичного квадрата прямоугольниками с площадью p_i состоит в следующем. При $n = 2$ алгоритм очевиден. Достаточно отложить на одной из сторон отрезок длины p_1 , как это сделано на рисунке.

Рассмотрим варианты при $n > 2$.

- а) Находим i_0 , для которого $p_{i_0} < \frac{1}{n}$. Такое i_0 существует, если не все $p_i = 1/n$ (в последнем случае задача тривиальна).



- б) Находим p_{j_0} , $i_0 \neq j_0$ такое, что $p_{i_0} + p_{j_0} > 1/n$. Такое j_0 существует. Если для всех $j \neq i_0$, $p_{i_0} + p_j < 1/n$, то

$$\sum_{j \neq i_0} (p_{i_0} + p_j) < \frac{n-1}{n} < 1,$$

но

$$\sum_{j \neq i_0} (p_{i_0} + p_j) = (n-1)p_{i_0} + \sum_{j \neq i_0} p_j = (n-1)p_{i_0} + 1 - p_{i_0} = 1 + (n-2)p_{i_0} > 1.$$

- в) Первую полосу квадрата заполняем прямоугольниками $(1/n \times p_{i_0}) + (1/n \times 1/n - p_{i_0})$. Таким образом, p_{i_0} оказывается полностью использованным, и для покрытия остальной части остаются прямоугольники со сторонами

$$(p_{i_0} + p_{j_0} - 1/n, \text{ и все } p_i, \text{ кроме } p_{i_0} \text{ и } p_{j_0}) \times 1/n.$$

Обозначив $p_{i_0} + p_{j_0} - 1/n = p'_1$ и аналогично остальные $p'_2, \dots, p'_{n-1}$, мы вернулись к исходной ситуации, но $\sum_{i=1}^{n-1} p'_i = 1 - 1/n$, а у исходного квадрата должна быть исключена первая полоса. Изменяя масштаб вдоль оси x , мы можем найти нужные i_1 и j_1 для покрытия 2-й полосы, и так далее. Каждый шаг уменьшает n на единицу. Случай $n = 2$ обсуждался выше (очевиден), найдены $(i_0, j_0) \dots (i_{n-1}, j_{n-1})$.

Если покрытие сконструировано, то алгоритм моделирования исходного распределения состоит в следующем:

- 1) выбираем α -равномерно распределённую псевдослучайную величину и полагаем $k = \lfloor n\alpha \rfloor$;

2) выбираем α' ; если $\alpha' \leq p_{i_k}$, то $\xi = i_k$, в противном случае $\xi = j_k$.

Таким образом, после соответствующей подготовки, имея две независимые реализации равномерно распределённой случайной величины α и α' , мы находим реализацию ξ за $O(1)$ операций. Подготовка, однако, может в общем случае потребовать до $O(n^2)$ операций.

О случае бесконечного n будет упомянуто позже.

В непрерывном случае, как известно, если случайная величина ξ задана своей функцией распределения $F(x)$, задача моделирования принципиально решается с помощью формулы обращения $\xi = F^{-1}(\alpha)$,

или $\int_{-\infty}^{\xi} \varphi(x) dx = \alpha$, где $\varphi(x)$ — плотность распределения. Для условных функций распределения случайного вектора $\Xi = (\xi_1, \dots, \xi_s)$ задача моделирования также решается с помощью цепочки формул обращения. Реализация Ξ выражается через вектор $(\alpha_1, \dots, \alpha_s)$, составленный из независимых реализаций случайных величин, равномерно распределённых на $(0, 1]$. Однако, как правило, алгоритмы вычисления реализаций случайной величины с помощью формул обращения излишне сложны. Упрощение возможно за счёт увеличения размерности (использования большего числа равномерно распределённых случайных величин).

Основными методами, использующими этот приём, являются метод отбора и метод композиции. Остановимся кратко на этих методах, считая, что моделируемый случайный вектор Ξ задан своей плотностью $\varphi(x_1, \dots, x_s)$.

Лемма 3. Если $D \subset \mathbf{R}^{s+1}$, $D = \{0 \leq x_{s+1} \leq c\varphi(x_1, \dots, x_s)\}$, $c > 0$, то для того, чтобы точка (Ξ, ξ_{s+1}) , $\Xi = (\xi_1, \dots, \xi_s)$ была равномерно распределена в области D , необходимо и достаточно, чтобы вектор Ξ был распределён с плотностью $\varphi(x)$ и условное распределение ξ_{s+1} при фиксированном Ξ было равномерным на промежутке $[0, \varphi(\Xi)]$.

Доказательство сразу становится очевидным, если учесть, что плотность $\psi(x_1, \dots, x_{s+1})$ распределения (Ξ, ξ_{s+1}) в D постоянна (равна 1). Тогда плотность распределения Ξ есть $\int \psi(x_1, \dots, x_s, x_{s+1}) dx_{s+1} = \varphi(X)$, а условная плотность распределения ξ_{s+1} при фиксированном Ξ есть константа (подробнее см. [6]).

На основе этой леммы конструируются следующие алгоритмы.

А. Моделирование равномерного распределения в области $D = \{0 \leq x_{s+1} \leq f(x_1, \dots, x_s)\}$, где f — интегрируемая в $\mathbf{R}^s$ функция.

Если $C = \left(\int_{\mathbf{R}^s} f(X) dX \right)^{-1}$ — константа нормировки, то алгоритм

полностью определяется леммой в предположении, что существует удобный алгоритм моделирования Ξ с плотностью $Cf(x)$, затем моделируется равномерное распределение на $[0, f(\Xi)]$. Требуется не менее $s + 1$ случайных чисел.

- Б. Если D ограничена и может быть помещена в $(s + 1)$ -мерный параллелепипед с рёбрами, параллельными координатным осям, то точка, равномерно распределённая в D , может быть получена методом отбора. Получаем точку внутри параллелепипеда с равномерно распределёнными координатами $(\beta_1, \dots, \beta_{s+1})$. Проверяем её принадлежность D . Если «да», то эта точка и является нужной реализацией, если «нет», то вычисляется новая реализация равномерно распределённого случайного вектора в параллелепипеде.

Из леммы следует также, что отобранные $(\beta_1, \dots, \beta_s)$ распределены с плотностью $Cf(X)$.

- В. Метод мажорант. Если моделирование плотности $\varphi(X)$ — очень трудоёмкая задача, но мы умеем хорошо моделировать плотность $\psi(X)$, причём $\varphi(X) \leq C\psi(X)$, то алгоритм A позволяет строить равномерное распределение в области $D = \{0 \leq X_{s+1} \leq C\psi(X)\}$. Если среди точек, равномерно распределённых в D , отобрать точки $(\beta_1^i, \dots, \beta_{s+1}^i)$, $i = 1, 2, \dots$, попадающие в $D' = \{0 \leq X_{s+1} \leq \varphi(X)\}$, то $(\beta_1^i, \dots, \beta_s^i)$ будут векторами, распределёнными с плотностью $\varphi(X)$. Окончательно алгоритм, использующий A , выглядит следующим образом:

В1 находим реализацию Ξ плотности $\psi(X)$;

В2 проверяем условие $\varphi(\Xi)/C\psi(\Xi) < \alpha$, где α — реализация равномерно распределённой случайной величины;

В3 если «да», то Ξ — нужная реализация, если «нет», то В1.

Замечание (о дискретных распределениях). Метод мажорант очевидным образом применим к дискретным распределениям (в том числе при $n = \infty$), если они представлены в виде набора плоских фигур площади p_i (увеличение размерности). Мажорантой может быть любая $C\psi(X)$.

Метод композиции в простейшей форме предполагает представление плотности в виде (смеси)

$$\varphi(X) = \sum_{i=1}^n p_i \varphi_i(X), \quad p_i > 0, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1,$$

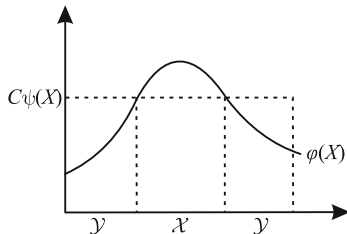
$\varphi_i(X)$ являются плотностями. Моделирование состоит из двух этапов.

А. Моделирование распределения $p_1, \dots, p_n$. Определяем $i = i_0$.

Б. Моделирование плотности $\varphi_{i_0}(X)$. Находим реализацию Ξ . В более общей форме предполагается представление $\varphi(X)$ в виде $\varphi(X) = \int p(X, y) dF(y)$, где $p(X, y)$ — плотность по X при любом фиксированном y , а $F(y)$ — функция распределения.

Легко видеть, что метод композиции также предполагает увеличение размерности в понятном смысле. Приведённые приёмы позволяют строить алгоритмы, существенно менее трудоёмкие по сравнению с формулами обращения. Однако для ряда задач моделирования плотностей, многомерных в особенности, перечисленных приёмов может быть недостаточно. Во-первых, вычисление константы нормировки при больших s может быть очень трудной задачей. Во-вторых, если даже эта константа известна, бывает трудно подобрать мажоранту, обеспечивающую приемлемую эффективность алгоритма моделирования.

Возможен *адаптивный метод подбора мажоранты*. Обсудим сначала вопрос о ситуации, возникающей при ошибке в выборе мажоранты. Если мы выберем константу C неоправданно большой, то это, строго говоря, ошибкой не будет, но сильно уменьшит эффективность алгоритма. Ошибка имеет место в случае, указанном на рисунке.



Введем обозначения

$$\begin{aligned} \mathcal{X} &= \{X : \varphi(X) > C\psi(X)\}, \\ \mathcal{Y} &= \{X : \varphi(X) \leq C\psi(X)\} \end{aligned}$$

и построим следующую адаптивную процедуру выбора $C = C_t$. Выберем C_0 , которое, по-нашему мнению, удовлетворяет условию мажорирования, и X_0 из области определения $\varphi(X)$ ($\varphi(X_0) \neq 0$). Далее, если имеется X_t , $t = 0, 1, \dots$, полагаем $C_{t+1} = \frac{\varphi(X_t)}{\psi(X_t)}$, находим X' , распределённую с плотностью $\varphi(X)$, и вычисляем величину

$$\omega = \frac{\psi(X_t)\varphi(X')}{\psi(X')\varphi(X_t)} = \frac{\varphi(X')}{C_t\psi(X')}.$$

Если $\omega < 1$, то с вероятностью ω полагаем $X_{t+1} = X'$ и с вероятностью $1 - \omega$ полагаем $X_{t+1} = X_t$. Если $\omega > 1$, то полагаем $X_{t+1} = X'$.

Алгоритм «исправляет» константу нормировки, и при некотором T , достаточно большом для всех $t > T$, X_t будут независимыми реализациями случайного вектора, распределённого с плотностью $\varphi(X)$.

Этот простой динамический алгоритм мало эффективен, поскольку изменяется константа, но не форма мажоранты.

Ниже описан сходный по форме и широко используемый *алгоритм Метрополиса—Хастингса* [13], [14]. Алгоритм служит основой так называемого метода Монте-Карло на марковских цепях, которому посвящена обширная литература (например, [15]).

Приведем формальное описание метода.

1. Выбираем X_0 и некую переходную плотность $\psi(X, Y)$, удовлетворяющую условию

$$\psi(X, Y) > 0, \quad \text{если} \quad \psi(Y, X) > 0.$$

2. Если известно X_t , $t = 0, 1, \dots$, то моделируем $\psi(X_t, X')$, находим X' .

3. Вычисляем

$$\omega = \frac{\varphi(X')}{\varphi(X_t)} \frac{\psi(X', X_t)}{\psi(X_t, X')}.$$

4. Если $\omega \geq 1$, то $X_{t+1} = X'$.
5. Если $\omega < 1$, то $X_{t+1} = X'$ с вероятностью ω , а $X_{t+1} = X_t$ с вероятностью $1 - \omega$ (без изменений).

Очевидно, случайный процесс с X_t с дискретным временем $t = 0, 1, \dots$ является марковским. Справедливо следующее утверждение.

Теорема 5. *Если случайный процесс, формально описанный выше, является эргодическим, то его стационарное распределение имеет плотность $\varphi(X)$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Отметим следующее.

- а) Если цепь Маркова с переходной плотностью $p(X, Y)$ для некоторой функции $\varphi(X)$ удовлетворяет соотношению

$$p(X, Y)\varphi(Y) = p(Y, X)\varphi(X) \quad (1.2.2)$$

для всех X и Y (уравнение детального баланса), то $\varphi(X)$ является плотностью стационарного распределения для $p(X, Y)$. Действительно, интегрирование (1.2.2) по Y даёт $\int p(X, Y)\varphi(Y) dY = \varphi(X)$, поскольку $\int p(Y, X) dY = 1$.

б) Переходная плотность случайного процесса 1–5 есть

$$A(X, Y) = \psi(X, Y) \cdot \min \left(1, \frac{\varphi(Y)\psi(Y, X)}{\varphi(X)\psi(X, Y)} \right),$$

что следует из описания процесса.

в) Но

$$\begin{aligned} \varphi(X)A(X, Y) &= \varphi(X)\psi(X, Y) \cdot \min \left(1, \frac{\varphi(Y)\psi(Y, X)}{\varphi(X)\psi(X, Y)} \right) = \\ &= \min (\varphi(X)\psi(X, Y), \varphi(Y)\psi(Y, X)). \end{aligned}$$

Последнее выражение не изменяется при замене X на Y . Отсюда

$$A(X, Y)\varphi(Y) = A(Y, X)\varphi(X),$$

что и доказывает, с учётом пункта а нашу теорему. ■

Метод Метрополиса—Хастингса относится к числу адаптивных и обладает высокой степенью универсальности. Он может быть особенно эффективным при моделировании многомерных плотностей, для которых трудно подобрать мажоранту.

Отдельный интерес может представлять специальный выбор плотности $\psi(X, Y)$. Так, если $\psi(X, Y) = f_1(X)f_2(Y)$, где f_1 и f_2 — плотности, то f_2 является стационарным распределением процесса с переходной плотностью $\psi(X, Y)$, а величина ω есть

$$\omega = \frac{\varphi(X')}{\varphi(X_t)} \frac{f_1(X')f_2(X_t)}{f_1(X_t)f_2(X')}.$$

Очевидно, мы имеем достаточно простое обобщение метода мажорант.

В общем случае вопросы обоснования эргодичности и ускорения сходимости к стационарному распределению, а также выбора переходной плотности, породили обширную литературу.

1.3. ПРИМЕРЫ

Строго говоря, речь идёт об одном примере, связанном с интересными приложениями. Ряд других примеров содержит 2-я часть книги. Таким примером, использующим методы моделирования, описанные в §1.2, является решение одной из важных экспериментальных задач планирования эксперимента, состоящая в нахождении глобального экстремума функции большого числа переменных. Методы случайного поиска глобального экстремума функции широко применяются и

подробно описаны. Заметим только, что возможность эффективного моделирования плотности $\varphi(X) = Cf(X)$, ($f(X) \geq 0$ (C — константа нормировки)) может существенно облегчить задачу определения глобального максимума функции $f(X)$. Искомая точка максимума является модой распределения с плотностью $\varphi(X)$, и можно использовать методы оценки моды (см. например, [16], [17]).

В рассматриваемом случае речь идёт о распределении Δ^2 , плотность которого по отношению к заданной вероятностной мере $\mu^n(dQ) = \bigotimes_{i=1}^n \mu(dX_i)$, $X_i \in D$ есть

$$\Delta_{m,n}^2 = C \det \left\| \sum_{j=1}^n \varphi_i(X_j) \varphi_k(X_j) \right\|_{i,k=1}^m, \quad (1.3.1)$$

где $\varphi_i(X_j)$ линейно независимы на носителе меры μ . Здесь $\Delta_{m,n}^2$ является функцией ns переменных, а точки её экстремума имеют важное значение в теории планирования эксперимента и носят название точного D -оптимального плана регрессионного эксперимента. Кроме того, реализации случайного вектора с Δ^2 -распределением могут использоваться для повышения эффективности метода Монте-Карло при вычислении многократных интегралов.

Использование Δ^2 -распределения требует его моделирования, а это, как правило, непростая задача. Самым простым представляется метод отбора. Он требует, однако, при каждом испытании вычисления определителя, а эффективность в общем случае определяется оценкой максимума $\Delta^2(Q)$. При этом неравенство Адамара даёт грубую оценку.

Если X есть отрезок, а функции φ_i , $i = 1, \dots, n$ — многочлены одной переменной [19], то

$$\Delta_{n,m}^2(Q) = c \prod_{i < j} (x_i - x_j)^2. \quad (1.3.2)$$

Константа c служит очевидной оценкой сверху для $\Delta^2(Q)$, но при $n > 2$ довольно грубой. В этом простейшем случае до $n = 12$ вычисления по методу отбора были достаточно эффективными.

Что касается других функций φ_i , $i = 1, \dots, n$, и больших значений n , то до недавнего времени считалось, что моделирование Δ^2 -распределения — задача безнадежно трудная.

Далее, в случае $n = m$ и ортонормированных (что не умаляет общности) по отношению к μ функций, мы покажем, как различные методы моделирования могут повысить эффективность алгоритма.

В нашем случае $\Delta_{m,n}^2$ имеет вид

$$\Delta_{m,n}^2 = p_n(X_1, \dots, X_n) = \left(\det \|\varphi_i(X_k)\|_{i,k=1}^n \right)^2 \frac{1}{n!}.$$

Справедливы следующие леммы.

Лемма 4. (*Разложение Лапласа*). Пусть D — определитель n -го порядка. Фиксируем любые m его строк $i_1, \dots, i_m$, $m < n$. Тогда

$$D = \sum_{(j_1, \dots, j_m) \in (1, \dots, n)} M_{i_1, \dots, i_m; j_1, \dots, j_m} M'_{i_1, \dots, i_m; j_1, \dots, j_m},$$

где $M_{i_1, \dots, i_m; j_1, \dots, j_m}$ — минор D , получающийся при пересечении строк с номерами $i_1, \dots, i_m$ и столбцов с номерами $j_1, \dots, j_m$, а $M'_{i_1, \dots, i_m; j_1, \dots, j_m}$ — алгебраическое дополнение $M_{i_1, \dots, i_m; j_1, \dots, j_m}$.

Утверждение леммы верно, если вместо m строк фиксировать m столбцов.

Лемма 5. Пусть функции $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ образуют ортонормированную систему в пространстве $\mathbf{L}^2(X, \mu)$, где X — измеримое множество, а μ — мера Лебега. Обозначим

$$p_n(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n!} \left| \begin{array}{ccc} \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_1(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(x_1) & \dots & \varphi_n(x_n) \end{array} \right|^2,$$

а

$$p_{n-k}(x_1, \dots, x_{n-k}) = \int_X p_n(x_1, \dots, x_n) dx_{n-k+1} \dots dx_n.$$

Тогда

$$p_{n-k}(x_1, \dots, x_{n-k}) = \frac{k!}{n!} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_{n-k} \leq n} \left| \begin{array}{ccc} \varphi_{i_1}(x_1) & \dots & \varphi_{i_1}(x_{n-k}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{i_{n-k}}(x_1) & \dots & \varphi_{i_{n-k}}(x_{n-k}) \end{array} \right|^2.$$

Доказательство.

Воспользуемся разложением Лапласа для определителя $p_n(x_1 \dots x_n)$, фиксируя первых $n - k$ его столбцов:

$$p_n(x_1 \dots x_n) = \frac{1}{n!} \left| \begin{array}{ccc} \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_1(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(x_1) & \dots & \varphi_n(x_n) \end{array} \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{n!} \left(\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_{n-k} \leq n} \begin{vmatrix} \varphi_{i_1}(x_1) & \dots & \varphi_{i_1}(x_{n-k}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{i_{n-k}}(x_1) & \dots & \varphi_{i_{n-k}}(x_{n-k}) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \varphi_{j_1}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_1}(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{j_k}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_k}(x_n) \end{vmatrix} \right)^2,$$

где $j_1, \dots, j_k$ — дополнение набора индексов $\{i_1 \dots i_{n-k}\}$ до $\{1, 2, \dots, n\}$.

$$\text{Пусть } \begin{vmatrix} \varphi_{i_1}(x_1) & \dots & \varphi_{i_1}(x_{n-k}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{i_{n-k}}(x_1) & \dots & \varphi_{i_{n-k}}(x_{n-k}) \end{vmatrix} =: \Delta_{i_1 \dots i_{n-k}}.$$

Имеем

$$\begin{aligned} p_{n-k}(x_1, \dots, x_{n-k}) &= \int_X p_n(x_1, \dots, x_n) dx_{n-k+1} \dots dx_n = \\ &= \frac{1}{n!} \int_X \left(\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_{n-k} \leq n} \Delta_{i_1 \dots i_{n-k}} \begin{vmatrix} \varphi_{j_1}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_1}(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{j_k}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_k}(x_n) \end{vmatrix} \right)^2 \times \\ &\times dx_{n-k+1} \dots dx_n = \frac{1}{n!} \int_X \left(\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_{n-k} \leq n} \Delta_{i_1 \dots i_{n-k}} \times \right. \\ &\times \left. \left(\sum_{l=1}^k (-1)^{n+l} \varphi_{j_l}(x_n) \Delta'_{j_1 \dots j_{l-1} j_{l+1} \dots j_k} \right) \right)^2 dx_{n-k+1} \dots dx_n, \end{aligned}$$

$$\text{где } \Delta'_{j_1 \dots j_{l-1} j_{l+1} \dots j_k} = \begin{vmatrix} \varphi_{j_1}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_1}(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{j_{l-1}}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_{l-1}}(x_n) \\ \varphi_{j_{l+1}}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_{l+1}}(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{j_k}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{j_k}(x_n) \end{vmatrix}.$$

Проинтегрируем сначала по x_n . Возведем в квадрат подынтегральное выражение и воспользуемся тем, что функции $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ образуют ортонормированную систему в пространстве $\mathbf{L}^2(X)$. Благодаря этому попарные произведения в подынтегральном выражении, содержащие множители $\varphi_i(x_n) \varphi_j(x_n)$, $i \neq j$, обратятся в ноль. Более того, определитель $\Delta_{i_1 \dots i_{n-k}}$ под знаком внешней суммы не зависит от x_n . Поэтому его можно вынести за знак интеграла.

Наборов $(j_1, \dots, j_k)$ C_n^k штук. Каждому из них соответствует k слагаемых, состоящих из членов с элементами $(s_1, \dots, s_{k-1}) \subset (j_1, \dots, j_k)$ в подынтегральном выражении. Следовательно, общее количество членов становится равным kC_n^k . Из них ровно C_n^k различных. Таким образом, используя ортогональность функций $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ в $\mathbf{L}^2(X)$, получим

$$p_{n-k}(x_1, \dots, x_{n-k}) = \frac{k}{n!} \times \\ \times \int_X \left(\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_{n-k} \leq n} \Delta_{i_1 \dots i_{n-k}} \begin{vmatrix} \varphi_{s_1}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{s_1}(x_{n-1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{s_{k-1}}(x_{n-k+1}) & \dots & \varphi_{s_{k-1}}(x_{n-1}) \end{vmatrix} \right)^2 \times \\ \times dx_{n-k+1} \dots dx_{n-1}.$$

Интегрируя по остальным переменным и используя аналогичные рассуждения, приходим к утверждению леммы. ■

Укажем теперь вид условных плотностей $p_k(x_k | x_1 \dots x_{k-1})$, $k = 1, \dots, n$.

Следствие 1. Для условных плотностей $p_k(x_k | x_1 \dots x_{k-1})$, $k = 1, \dots, n$, справедливы формулы

$$p_k(x_k | x_1 \dots x_{k-1}) = \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} \frac{\Delta_{i_1 \dots i_k}^2}{(n-k+1) \sum_{1 \leq j_1 < \dots < j_{k-1} \leq n} \Delta_{j_1 \dots j_{k-1}}^2},$$

где

$$\Delta_{i_1 \dots i_s}^2 = \begin{vmatrix} \varphi_{l_1}(x_1) & \dots & \varphi_{l_1}(x_s) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{l_s}(x_1) & \dots & \varphi_{l_s}(x_s) \end{vmatrix}^2.$$

Доказательство.

Действительно, для любого $k = 1, \dots, n$ имеем

$$p_k(x_k | x_1 \dots x_{k-1}) = \frac{p_k(x_1 \dots x_k)}{p_{k-1}(x_1 \dots x_{k-1})}.$$

Осталось лишь воспользоваться леммой 5. ■

Согласно следствию 1 условные плотности $p_k(x_k | x_1 \dots x_{k-1})$, $k = 1, \dots, n$, представимы в виде линейной комбинации определителей k -ого порядка. Однако это еще не композиция распределений, поскольку

$$\int_X \Delta_{i_1 \dots i_k}^2 dx_k = \sum_{(m_1 < \dots < m_{k-1}) \subset (i_1 \dots i_k)} \Delta_{m_1 \dots m_{k-1}}^2.$$

Введя нормировку в соответствии с этим соотношением, мы получим представление условных плотностей в виде смеси

$$\begin{aligned} p_k(x_k | x_1 \dots x_{k-1}) &= \\ &= \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} \frac{\sum_{(m_1 < \dots < m_{k-1}) \subset (i_1 \dots i_k)} \Delta_{m_1 \dots m_{k-1}}^2}{(n-k+1) \sum_{1 \leq j_1 < \dots < j_{k-1} \leq n} \Delta_{j_1 \dots j_{k-1}}^2} \times \\ &\quad \times \frac{\Delta_{i_1 \dots i_k}^2}{\sum_{(m_1 < \dots < m_{k-1}) \subset (i_1 \dots i_k)} \Delta_{m_1 \dots m_{k-1}}^2}. \end{aligned}$$

Далее вместо «простого» метода, в котором применяется оценка максимального значения определителя и она же выбирается в качестве мажоранты, мы можем использовать комбинации различных методов, а именно:

а) метод обращения: представляем

$$\begin{aligned} &\Delta^2(x_1, x_2, \dots, x_n) = \\ &= p_1(x_1) p_2(x_2 | x_1) p_3(x_3 | x_1 x_2) \dots p_n(x_n | x_1 x_2 \dots x_{n-1}); \end{aligned}$$

б) метод композиций: каждая из плотностей

$$p_1(x_1), p_2(x_2 | x_1), p_3(x_3 | x_1 x_2), \dots, p_n(x_n | x_1 x_2 \dots x_{n-1})$$

моделируется как смесь распределений с плотностями

$$\frac{\Delta_{i_1 i_2 \dots i_k}^2}{\sum_{(m_1 < \dots < m_{k-1}) \subset (i_1 \dots i_k)} \Delta_{m_1 \dots m_{k-1}}^2}, \quad k = (1, \dots, n),$$

которые имеют вид

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sum_{(m_1 < \dots < m_{k-1}) \subset (i_1 \dots i_k)} \Delta_{m_1 \dots m_{k-1}}^2} \times \\ &\quad \times \left(\sum_{i \in \{i_1, i_2, \dots, i_k\}, 1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} c_{\{i_1, i_2, \dots, i_k\} / \{i\}}^{(k)} \varphi_i(x_k) \right)^2, \\ &k = (1, \dots, n); \end{aligned}$$

- в) метод отбора: каждая из последних плотностей моделируется методом отбора, поэтому сложность их моделирования равна $\left(\max_{x_k \in X, i=\overline{1, k}} |\varphi_i(x_k)|\right)^2 C_k$, где C_k — сложность нахождения коэффициентов $c_{\{i_1, i_2, \dots, i_k\}/\{i\}}^{(k)}$.

Замечание. В некоторых случаях более удобным может быть моделирование последних плотностей методом обращения.

С подробной оценкой указанных алгоритмов двух типов, в зависимости от размерности определителя, можно ознакомиться в работе [18]. Мы приведём лишь таблицу отношений $T_{\text{комб.}} / T_{\text{отб.}}$, где $T_{\text{отб.}}$ — трудоёмкость метода простого отбора, а $T_{\text{комб.}}$ — трудоёмкость описанного комбинированного метода.

n	2	3	4	5	6	7	8	9	...
$T_{\text{комб.}} / T_{\text{отб.}}$	1,7388	1,4685	1,0082	0,6563	0,4230	0,2743	0,1798	0,1194	...
...	10	20	30	40	50	100	200	...	...
...	0,0801	0,0021	$7,50 \cdot 10^{-5}$	$2,89 \cdot 10^{-6}$	$1,17 \cdot 10^{-7}$	$1,70 \cdot 10^{-14}$	$5,52 \cdot 10^{-28}$	...	...

Если моделирование $\varphi(X) = Cf(X)$ позволяет определять наибольшее значение $f(X)$, то, очевидно, что возможность моделирования плотности $\varphi_m(X) = C_m f^m(X)$ могло бы сильно упростить задачу.

Действительно, имеет место следующий факт. Плотность распределения

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \left(f^m(X) / \int f^m(X) dX \right)$$

сосредоточена на множестве глобальных экстремумов $f(X)$.

Для случая единственного экстремума впервые вопрос обсуждался в [7]. Общий случай можно свести к задаче о минимуме $\exp(-f(X)/T)$ при $T \rightarrow \infty$ (см., например, [20]).

Моделирование плотности $f^m(X) / \int f^m(X) dX$ при больших m и оценивание её моды может дать хорошие результаты. Проблема — в вычислении константы нормировки $(\int f^m(X) dX)^{-1}$. К счастью, описанный нами ранее метод Метрополиса не требует знания константы нормировки.

Имеются многочисленные связи описанного метода с другими методами случайного поиска (см., например, [21]). Вопрос о сравнении качества различных модификаций случайного поиска находится в процессе изучения. Однако в многоэкстремальном случае метод Метрополиса вне конкуренции, так как позволяет получить выборку из распределения на множестве экстремумов.

Вернёмся к задаче о точных D -оптимальных планах.

Простейший двумерный случай приводит нас к случаю бесконечного множества экстремумов. При определении коэффициентов линейной регрессии в единичном квадрате с минимальным числом измерений D -оптимальный план есть множество из трёх точек (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , (x_3, y_3) , доставляющих наибольшее значение квадрату определителя:

$$\Delta^2(x_1, y_1; x_2, y_2; x_3, y_3) = \left(\det \|1, x_i, y_i\|_{i=1}^3 \right)^2, \quad 0 \leq x_i \leq 1;$$

$$0 \leq y_i \leq 1; \quad i = 1, 2, 3.$$

Несложные исследования показывают, что наибольшие значения достигаются при

$$x_1 = y_1 = 0, \quad x_2 = 0, \quad y_2 = 1 \quad \text{и при} \quad x_3 = 1, \quad 0 \leq y_3 \leq 1,$$

а также при других конфигурациях, получаемых поворотами квадрата на $\frac{\pi}{2}$, π , $3/2\pi$. Применение метода Метрополиса для моделирования плотности $C_m \left(\det \|1, x_i, y_i\|_{i=1}^3 \right)^{2m}$ может с хорошим приближением давать реализации точек, равномерно распределённых на множестве D -оптимальных планов. Это позволяет выделить подмножество D -оптимальных планов, удовлетворяющих дополнительным условиям.

Нужно заметить, что применение [22] методов численного определения непрерывных D -оптимальных планов (которые можно считать приближением к точным планам) в случае неединственности решения сталкивается со значительными трудностями.

Глава 2

ИНТЕГРАЛЫ И ЛИНЕЙНЫЕ УРАВНЕНИЯ

2.1. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ

Если решение нужной задачи представлено в виде $J = \int f(x) \mu(dx)$, где μ — σ -конечная мера, то, не умаляя общности, можно считать μ вероятностной мерой, а J — математическим ожиданием случайной величины $\xi = f(\eta)$, где η — случайная величина, распределённая в соответствии с мерой μ . Функция f естественным образом предполагается μ -интегрируемой, что равносильно предположению о существовании и конечности интеграла

$$\int |f(x)| \mu(dx) < +\infty.$$

Наиболее распространённая вычислительная схема метода Монте-Карло состоит в получении независимых реализаций $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N$ случайной величины η средствами, описанными в предыдущей главе и вычислении

$$S_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\eta_i). \quad (2.1.1)$$

Усиленный закон больших чисел гарантирует с вероятностью 1 сходимость $S_N(f)$ к величине J .

Если также конечен интеграл $\int f^2(x) \mu(dx)$ ($f \in \mathbf{L}_2(\mu)$), то Центральная предельная теорема даёт оценку погрешности

$$|J - S_N(f)| \leq \frac{\sigma_f \cdot y}{\sqrt{N}}, \quad (2.1.2)$$

где y определяется из равенства $\int_0^y e^{-u^2/2} du = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot p$, p — доверительная вероятность, с которой (2.1.2) имеет место, а $\sigma_f^2 = \int (f(x) - J)^2 \mu(dx)$.

Возможность моделирования распределений позволяет использовать другие предельные соотношения теории вероятностей, но задача оценки математического ожидания наиболее типична. Другим примером может служить рассмотренная выше задача оценивания моды распределения (оба алгоритма являются ПР-алгоритмами). Оценка (2.1.2) показывает, что погрешность метода Монте-Карло убывает сравнительно медленно с ростом N , но можно попытаться улучшить ситуацию за счёт уменьшения величины σ_f .

Существует много приёмов повышения эффективности метода Монте-Карло, основанных на уменьшении второго момента оценок вычисляемого интеграла. Большинство таких методов достаточно полно описаны в стандартных учебниках, и мы напомним лишь о некоторых из них, представляющих интерес для дальнейшего изложения.

Метод существенной выборки в общей форме основан на представлении интеграла J в форме

$$J = \int f(x) \frac{d\mu}{d\nu}(x) \nu(dx), \quad (2.1.3)$$

где $\frac{d\mu}{d\nu}(x)$ — производная Радона—Никодима меры μ по мере ν (ν предполагается абсолютно непрерывной по отношению к μ). Величина J может оцениваться суммами

$$\kappa_\nu(f) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(Y_j) \frac{d\mu}{d\nu}(Y_j), \quad (2.1.4)$$

где Y_j — независимые случайные величины, распределённые в соответствии с мерой ν . Рассмотрим второй момент случайной величины $\xi_j(\nu) = f(Y_j) \frac{d\mu}{d\nu}(Y_j)$. По неравенству Коши—Буняковского имеем

$$\mathbb{E} \xi_j^2(\nu) = \int f^2(x) \left(\frac{d\mu}{d\nu}(x) \right)^2 \nu(dx) \leq \left(\int |f(x)| \mu(dx) \right)^2.$$

Легко проверить, что знак равенства в полученном неравенстве достигается при

$$\nu(dx) = \nu_0(dx) = \frac{1}{\bar{J}} |f(x)| \mu(dx),$$

где $\bar{J} = \int |f(x)| \mu(dx)$. Отсюда следует, что дисперсия оценки интеграла J имеет нижнюю грань:

$$\mathbb{D} \kappa_{\nu_0}(f) = \frac{1}{N} (\bar{J}^2 - J^2). \quad (2.1.5)$$

Для положительных f дисперсия обращается в нуль, и следует выбирать меру ν , по возможности близкой к ν_0 . Понятно, что моделирование ν_0 — задача не менее трудная, чем задача вычисления интеграла

при моделировании исходной меры μ . Знакопеременный случай связан с дополнительными трудностями, о которых будет далее сказано особо.

Другими важными приёмами построения оценок интеграла J с уменьшенной дисперсией является точное интегрирование по отдельным переменным, осуществляемое предварительно или в процессе вычислений (интегрирование по дискретной составляющей меры), и использование сумм вида

$$\tilde{\varkappa}_m(f) = \sum_{i=1}^m A_i(Q) f(X_i), \quad Q = (X_1, \dots, X_m),$$

где Q — случайный вектор со специально выбранной плотностью $\mathfrak{G}(Q)$ такой, что

$$E \tilde{\varkappa}_m(f) = J.$$

Частным случаем таких сумм являются суммы методов «antithetic variate» и расслоенной выборки.

О расслоении нужно сказать особо. В простейшем случае, когда интеграл $J = \int |f(X)| \mu(dX)$ вычисляется с помощью оценки

$$\varkappa_1 = \frac{1}{2}(f(X_1) + f(X_2)), \quad (2.1.6)$$

где X_1 и X_2 независимы и распределены в соответствии с мерой μ , и оценки

$$\varkappa_2 = \frac{1}{2}(f(Y_1) + f(Y_2)),$$

где Y_1 и Y_2 зависимы. Если Y_1 распределён по закону μ_1 , то Y_2 — по закону μ_2 , и наоборот. Меры μ_1 и μ_2 таковы, что $\int \mu_1(dX) = \int \mu_2(dX) = 1/2$ и $\mu_1(dX) + \mu_2(dX) = \mu(dX)$ (расслоение). Легко показать (см., например, [7]), что

$$D\varkappa_1 \geq D\varkappa_2 \quad \text{для всех } f \text{ из } L_2(\mu).$$

Это обстоятельство служит основанием для конструирования алгоритмов вычисления интеграла, в которых точкам (узлам) интегрирования надлежит быть с вероятностью 1 достаточно удалёнными друг от друга. Мы вернёмся к этому вопросу при обсуждении методов квази Монте-Карло.

2.2. ЛИНЕЙНЫЕ ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Обратимся теперь к уравнениям второго рода:

$$\varphi(X) = \int k(X, Y) \varphi(Y) \mu(dY) + f(X) \pmod{\mu}. \quad (2.2.1)$$

Специальный выбор конструкции меры μ позволяет трактовать это уравнение как систему линейных алгебраических уравнений (дискретная мера) и как систему интегральных уравнений. Возможны различные смешанные конструкции. Общим предположением является предположение о сходимости в некоторой метрике итерационного процесса

$$\begin{aligned}\bar{\varphi}_{m+1}(X) &= \int |k(X, Y)| \bar{\varphi}_m(Y) \mu(dY) + |f(X)|, \\ \bar{\varphi}_0(X) &= |f(X)|, \quad m = 0, 1, \dots,\end{aligned}\tag{2.2.2}$$

который мы будем называть *мажорантным*.

Нашей задачей будет вычисление некоторого множества функционалов $(\varphi, h_l) = \int h_l(X) \varphi(X) \mu(dX)$. Предполагается существование этих интегралов и, по крайней мере, слабая сходимость процесса (2.2.2) на множестве этих функционалов.

Сделанные предположения достаточны для представимости функционалов вида (h, φ) , где φ — решение (2.2.1) в виде интегралов по траекториям. Из (2.2.2) следует сходимость процесса

$$\begin{aligned}\varphi_{m+1}(X) &= \int k(X, Y) \varphi_m(Y) \mu(dY) + f(X) \pmod{\mu}, \\ \varphi_0 &= f, \quad m = 0, 1, \dots,\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}(h, \varphi) &= \sum_{m=0}^{\infty} \int d\mu^m h(X_0) k(X_1, X_2) \cdots k(X_{m-1}, X_m) f(X_m), \\ k(X_{-1}, X_0) &\equiv 1.\end{aligned}$$

Можно заметить, что m -е слагаемое формально связано с набором $X_0, X_1, \dots, X_m$, который называют траекторией. На множестве всех траекторий можно определить меру, соотнося набору $X_0, \dots, X_m$ число

$$\frac{1}{(|h|, \bar{\varphi})} |h(X_0) K(X_0, X_1) \cdots K(X_{m-1}, X_m) \cdot f(X_m)|. \tag{2.2.3}$$

Легко проверить, что введённая таким образом мера является вероятностной. По своей структуре она сходна с мерой, индуцируемой цепью Маркова.

Пусть однородная цепь Маркова с дискретным временем $t = 0, 1, \dots$ задана плотностью $p^0(X)$ начального распределения по отношению к мере μ переходной плотностью $p(X \rightarrow Y)$,

$$\int p(X \rightarrow Y) \mu(dY) = 1 - g(X) \pmod{\mu}, \quad 0 \leq g(X) \leq 1. \tag{2.2.4}$$

Обычно $g(X)$ трактуется как вероятность обрыва траектории. Траектории моделируются средствами, описанными в §2 гл. 1. В результате получаем траекторию $X_0 \rightarrow X_1 \rightarrow \dots \rightarrow X_\tau$, плотность вероятности которой $p_0(X_0)p(X_0 \rightarrow X_1) \dots p(X_{\tau-1} \rightarrow X_\tau)g(X_\tau)$.

Такое представление плотности вероятности по отношению к $\bigotimes_{j=0}^{\tau} \mu(dX_j)$ задаёт вероятностную меру на множестве траекторий. Если мера, задаваемая выражением (2.2.3), абсолютно непрерывна по отношению к этой мере, то может быть определена соответствующая производная Радона—Никодима, и легко проверить, что случайная величина

$$J_a = \frac{h_0 k_{0,1} \dots k_{\tau-1,\tau} f_\tau}{p_0^0 p_{0,1} \dots p_{\tau-1,\tau} g_\tau} \quad (2.2.5)$$

является несмещённой оценкой функционала (h, φ) :

$$\mathbf{E} J_l = (h, \varphi). \quad (2.2.6)$$

Здесь и далее введены очевидные сокращённые обозначения $h_0 = h(X_0)$, $k_{i,j} = K(X_i, X_j)$ и так далее. Оценка (2.2.5) является простейшей и в вычислительном, и в теоретическом отношении. Достаточно простыми являются также оценки

$$J_c = \sum_{l=0}^{\tau} \frac{h_0 k_{0,1} \dots k_{l-1,l}}{p_0^0 p_{0,1} \dots p_{l-1,l}} f_l \quad (2.2.7)$$

и двойственные к ним

$$J_a^* = \frac{f_0 k_{1,0} \dots k_{\tau,\tau-1} h_\tau}{p_0^0 p_{0,1} \dots p_{\tau-1,\tau} g_\tau}, \quad (2.2.8)$$

$$J_c^* = \sum_{l=0}^{\tau} \frac{f_0 k_{1,0} \dots k_{l,l-1}}{p_0^0 p_{0,1} \dots p_{\tau-1,\tau}} f_l, \quad (2.2.9)$$

которые могут быть получены из соотношений

$$(h, \varphi) = (\varphi^*, f), \quad \text{где} \quad \varphi^*(X) = \int k(Y, X) \varphi^*(Y) \mu(dY) + h(X). \quad (2.2.10)$$

Условия абсолютной непрерывности мер, указанные нами для оценки (2.2.5), модифицируются соответствующим образом для других оценок [6], так что для каждого вида оценок выбираются цепи Маркова своего типа.

Другие, более сложные оценки, описаны в монографиях [7], [25]. Мы ограничимся использованием оценок, приведённых выше. Метод

существенной выборки можно применить для конструирования цепи Маркова, минимизирующей дисперсии оценок J_c и J_c^* . В других случаях метод может быть применён, но оптимальная мера не будет марковской. Простое доказательство приведённых ниже результатов можно найти в [6].

Для оценки J_a оптимальная цепь задаётся начальным распределением $p_{\text{опт.}}^0(X)$ и $p_{\text{опт.}}(X \rightarrow Y)$:

$$p_{\text{опт.}}^0(X) = \frac{|\overline{\varphi}(X)h(X)|}{(\varphi, h)}, \quad p_{\text{опт.}}(X \rightarrow Y) = \frac{|K(X, Y)|\overline{\varphi}(Y)}{\overline{\varphi}(X)},$$

$$g_{\text{опт.}}(X) = \frac{|f(X)|}{\overline{\varphi}(X)},$$

где $\overline{\varphi}(X)$ есть решение мажорантного уравнения $(\overline{\varphi}(X) = \int |k(X, Y)|\overline{\varphi}(Y) \mu(dY) + |f(X)|)$. Дисперсия, соответствующая этой цепи, есть

$$D_{\text{опт.}} = (\overline{\varphi}, |h|)^2 - (\varphi, h)^2.$$

Для оценки J_a^* соответствующие выражения имеют вид

$$p_{\text{опт.}}^0(X) = \frac{|f(X)|\overline{\varphi}^*(X)}{(f, \varphi^*)}, \quad p_{\text{опт.}}(X \rightarrow Y) = \frac{|K(Y, X)|\overline{\varphi}^*(Y)}{\overline{\varphi}^*(X)}, \quad (2.2.11)$$

$$g_{\text{опт.}}(X) = \frac{|h(X)|}{\overline{\varphi}^*(X)},$$

где $\overline{\varphi}^*$ — решение двойственного мажорантного уравнения

$$\overline{\varphi}^*(X) = \int |K(Y, X)|\overline{\varphi}^*(Y) \mu(dY) + |h(X)|, \quad (2.2.12)$$

$$D_{\text{опт.}} = (\overline{\varphi}^*, |f|)^2 - (h, \varphi)^2.$$

Зависимость оптимальных цепей Маркова от точного решения исходной задачи не позволяет пользоваться результатами непосредственно, но позволяет судить о форме оптимальных плотностей и учитывать априорную информацию, имеющуюся у исследователя. В случае, когда все функции, входящие в исходное уравнение, и функция $h(X)$ неотрицательны, оптимальные дисперсии оценок J_a и J_a^* обращаются в нуль. Ниже мы покажем, как в общем случае использование дополнительной информации позволяет получить оценки с нулевой дисперсией. Нужно сказать, что большинство задач, решаемых методом Монте-Карло сегодня, имеют неотрицательные параметры (уравнения переноса, уравнение Больцмана и др.), но наше исследование предполагает общий случай.

Как уже отмечалось, знакопеременность не позволяет обращать дисперсию в нуль за счет выбора марковской цепи (см. формулу (2.2.12)).

Ниже мы покажем, как строится цепь, обращающая в нуль дисперсию J_a и J_a^* в знакопеременном случае. Для этого мы используем некоторое преобразование уравнения (2.2.1) к системе уравнений, содержащей лишь неотрицательные функции.

Обозначим

$$\begin{aligned} f_+(X) &= f(1, X) = \begin{cases} f(X), & f > 0, \\ 0, & f \leq 0, \end{cases} \\ f_-(X) &= f(2, X) = \begin{cases} f(X), & f \leq 0, \\ 0, & f > 0, \end{cases} \\ k_+(X, Y) &\equiv k(1, X; 1, Y) = k(2, X; 2, Y) = \begin{cases} k(X, Y), & k(X, Y) > 0, \\ 0, & k(X, Y) \leq 0, \end{cases} \\ k_-(X, Y) &\equiv k(1, X; 2, Y) = k(2, X; 1, Y) = \begin{cases} k(X, Y), & k(X, Y) \leq 0, \\ 0, & k(X, Y) > 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

и через $\mathcal{K}_+$ и $\mathcal{K}_-$ — операторы с соответствующими ядрами $f_l = f(l, X)$, $l = 1, 2$.

Справедлива следующая лемма.

Лемма 6. Система уравнений относительно ψ_1 и ψ_2 ,

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \mathcal{K}_{11}\psi_1 + \mathcal{K}_{12}\psi_2 + f_1, \\ \psi_2 &= \mathcal{K}_{21}\psi_2 + \mathcal{K}_{22}\psi_2 - f_2, \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

где $\mathcal{K}_{11} = \mathcal{K}_{22} = \mathcal{K}_+$, $\mathcal{K}_{12} = \mathcal{K}_{21} = -\mathcal{K}_-$, содержит лишь неотрицательные функции, при этом функция φ ,

$$\varphi = \psi_1 - \psi_2, \quad (2.2.15)$$

удовлетворяет исходному уравнению (2.2.1).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Первая часть утверждения очевидна — следует из (2.2.13). Для доказательства второй части вернемся к обозначениям (2.2.13). Система (2.2.14) будет иметь вид

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \mathcal{K}_+\psi_1 - \mathcal{K}_-\psi_2 + f_+, \\ \psi_2 &= -\mathcal{K}_-\psi_2 + \mathcal{K}_+\psi_2 - f_-. \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

Вычтем почленно второе уравнение из первого; получим

$$\psi_1 - \psi_2 = (\mathcal{K}_+ + \mathcal{K}_-)\psi_1 - (\mathcal{K}_+ + \mathcal{K}_-)\psi_2 + f_+ + f_-,$$

что равносильно

$$\psi_1 - \psi_2 = \mathcal{K}(\psi_1 - \psi_2) + f,$$

что и доказывает лемму. ■

Дальнейшие рассуждения проведем для оценки J_a^* . Случай оценки J_a рассматривается по аналогии, он даже проще случая J_a^* .

Очевидно, что все преобразования, проведенные при доказательстве леммы, могут быть осуществлены применительно к уравнению $\varphi^*(X) = \int k(Y, X)\varphi^*(Y)\mu(dY) + h(X)$. Нужно φ , ψ_1 , ψ_2 , $\mathcal{K}_+$, $\mathcal{K}_-$ снабдить звездочками и задать функцию $h(X)$, обозначая

$$h_1(X) = h_+(X) = \begin{cases} h(X), & h(X) > 0, \\ 0, & h(X) \leq 0, \end{cases}$$

$$h_2(X) = -h_-(X) = \begin{cases} -h(X), & h(X) \leq 0, \\ 0, & h(X) > 0. \end{cases}$$

Аналог системы (2.2.14) имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_1^* &= \mathcal{K}_{11}^*\psi_1^* + \mathcal{K}_{12}^*\psi_2^* + h_1, \\ \psi_2^* &= \mathcal{K}_{21}^*\psi_2^* + \mathcal{K}_{22}^*\psi_1^* + h_2, \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

где $\mathcal{K}_{11}^* = \mathcal{K}_{12}^*$ — оператор с ядром $k_+(Y, X)$, $\mathcal{K}_{12}^* = \mathcal{K}_{21}^*$ — оператор с ядром $-k_-(Y, X)$. Нам также удобно будет пользоваться обозначениями

$$h_i(X) = h(X, i), \quad f_j(X) = f(X, j),$$

а для ядер операторов $\mathcal{K}_{i,j}^*$ — обозначениями $k(Y, j; X, i)$, $i, j = 1, 2$. Для решения системы (2.2.17) моделируется цепь Маркова, задаваемая начальной плотностью относительно меры $\lambda(dX, di)$, где λ — прямое произведение меры μ на считающую меру, или, что то же самое, вектор $(p^0(X, 1), p^0(X, 2))$ и плотность перехода $p(X, i \rightarrow Y, j)$, то есть матрица $\|p(X, i \rightarrow Y, j)\|_{i,j=1}^2$. При этом $\int \mu(dY) \sum_{j=1}^2 p(X, i \rightarrow Y, j) = 1 - g(X, i)$, $i = 1, 2$, $0 \leq g(X, i) \leq 1$ и должны выполняться условия согласования, о которых сказано ниже.

Оценка J_a^* функционала $\psi_1^*f_1 + \psi_2^*f_2$, записанная в плотностях по отношению к мере λ , имеет вид

$$J_a^* = \frac{f(X_0, i_0)k(X_0, i_0; X_1, i_1) \dots k(X_{\tau-1}, i_{\tau-1}; X_{\tau}, i_{\tau})h(X_{\tau}, i_{\tau})}{p^0(X_0, i_0)p(X_0, i_0 \rightarrow X_1, i_1) \dots p(X_{\tau-1}, i_{\tau-1} \rightarrow X_{\tau}, i_{\tau})g(X_{\tau}, i_{\tau})} \quad (2.2.18)$$

или

$$J_a^* = \frac{f_0 k_{01} \dots k_{\tau-1, \tau} h_\tau}{p_0^0 p_{01} \dots p_{\tau-1, \tau} g_\tau} \quad (2.2.19)$$

при очевидном упрощении обозначений. Здесь $(X_0, 1) \rightarrow (X_1, i_1) \rightarrow (X_2, i_2) \rightarrow \dots \rightarrow (X_\tau, i_\tau)$ — траектория моделируемой цепи Маркова, а упоминавшиеся условия согласования предполагают такой выбор параметров цепи Маркова, при котором знаменатель положителен для всех траекторий, для которых отличен от нуля числитель.

В нашем случае $k(Y, j; X, i)$ неотрицательны, но функционал, который вычисляется, имеет вид

$$(h, \varphi) = (f, \varphi^*) = ((f_+ + f_-), (\psi_1^* - \psi_2^*)).$$

Здесь присутствует знакопеременность, что препятствует непосредственному применению теоремы о существенной выборке для интегралов по вероятностной мере с целью обращения в нуль дисперсии оценки. Однако мы можем представить (h, φ) в виде разности двух величин, каждая из которых есть сумма двух положительных слагаемых:

$$(h, \varphi) = [(f_+, \psi_1^*) + (-f_-, \psi_2^*)] - [(-f_-, \psi_1^*) + (f_+, \psi_2^*)]$$

Для каждой из этих величин можно построить цепь Маркова, обращающую в нуль дисперсию несмещенной оценки вида (2.2.8).

Действительно, мы можем построить несмещенную оценку $(J_a^*)_1$ для $(f_+, \psi_1^*) + (-f_-, \psi_2^*)$ следующим образом.

Моделируем $p^0(X, i)$; если $i = 1$, то полагаем $f(X_0, 1) = f_+(X_0)$ и требуем, чтобы обрыв траектории происходил с вероятностью $g(X_\tau, 1)$. Соответственно, $h_\tau = h(X_\tau, 1) = h_+(X_\tau)$.

Если же $i = 2$, то $f(X_0, 2) = f_-(X_0)$, обрыв траектории происходит с вероятностью $g(X_\tau, 2)$ и $h_\tau = h_-(X_\tau)$.

Аналогично вычисляется оценка $(J_a^*)_2$ второго слагаемого. Теперь, следуя [6], мы можем строить цепь, обращающую в нуль дисперсию $(J_a^*)_1$. Для этого

(1) полагаем

$$p_{\text{опт}}^0(X, i) = \frac{f(X, i) \psi_i^*(X)}{(f_+, \psi_1^*) + (-f_-, \psi_2^*)};$$

(2) полагаем

$$p(X, i \rightarrow Y, j) = \frac{k(X, i; Y, j) \psi_j^*(Y)}{\psi_i^*(X)}.$$

Легко видеть, что при таком выборе цепи Маркова оценка $(J_a^*)_1$ остается постоянной, равной $[(f_+, \psi_1^*) + (-f_-, \psi_2^*)]$ на всех траекториях, и следовательно её дисперсия равна нулю. Если $(J_a^*)_1$ и $(J_a^*)_2$ вычисляются по независимым траекториям, то $D((J_a^*)_1 + (J_a^*)_2) = D(J_a^*)_1 + D(J_a^*)_2$ и при оптимальном выборе цепей Маркова дисперсия суммарной оценки будет нулевой.

Исследование оценки второго слагаемого и анализ аналога оценки J_a заинтересованный читатель может легко и с удовольствием сделать самостоятельно.

Таким образом, при решении интегральных уравнений второго рода со знакопеременными коэффициентами (оценивании заданного функционала (φ, h) от решения) оказывается возможным использовать известные приемы понижения дисперсии с тем же эффектом, что и в знакопеременном случае, если воспользоваться сведением к системе вида (2.2.14) и разбить функционал на два слагаемых, в каждое из которых войдут функции одного знака. Очевидно, что последнее замечание относится ко всем известным несмещенным оценкам.

Внимательный читатель мог заметить, что при вычислении интеграла $\int f(X) \mu(dX)$ от знакопеременной функции f для получения оценок с нулевой дисперсией достаточно разбить интеграл на два слагаемых,

$$\int f(X) \mu(dX) = \int f(X) \mu_1(dX) - \int f(X) \mu_2(dX),$$

где мера μ_1 совпадает с μ на измеримых подмножествах $\{X : f(X) \geq 0\}$ и равна нулю на его дополнении, а мера μ_2 совпадает с μ на подмножествах $\{X : f(X) < 0\}$, и к каждому слагаемому применить принцип существенной выборки. Однако случай интегральных уравнений обладает определённым своеобразием, что и было продемонстрировано выше.

Оценки J_a и J_c дают возможность получать значение конкретного функционала. Повторные вычисления (частично могут использоваться одни те же траектории для разных функционалов) позволяют получить оценки заданного числа функционалов. Оценки J_a^* и J_c^* дают возможность оценивать заданное число функционалов и получать непараметрические оценки искомой функции φ . Заметим, что многие виды непараметрических оценок также связаны с получением оценок некоторого набора функционалов [23].

Следующая задача состоит в определении значений искомой функции во всех точках носителя μ или на заданном подмножестве этих точек (обобщённая задача интерполяции).

Определение класса Φ_m . Мы будем говорить, что $\varphi(X)$ принадлежит классу функций $\Phi_m = \Phi(\Omega, \delta, \varepsilon_l, h_l; l = 1, \dots, m)$, если знание

функционалов (h_l, φ) с погрешностью ε_l позволяет восстановить $\varphi(X)$, $X \in \Omega$ с погрешностью $\delta(X)$, $\|\delta(X)\| \leq \delta$.

Можно уточнить это определение: погрешности предполагать относительными или абсолютными, детерминированными или случайными и др. Такого рода уточнения мы будем делать по мере необходимости в дальнейшем.

Нужно отметить также сходство сформулированной задачи с непараметрическими подходами в статистике и методами, развиваемыми Войтишеком [25].

СТОХАСТИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ И МЕТОД КВАЗИ МОНТЕ-КАРЛО

3.1. СТОХАСТИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ

Вопросы стохастической устойчивости в данной главе излагаются применительно к дискретному случаю — системам линейных алгебраических уравнений (разностным схемам, в частности). Рассматриваемые алгоритмы, как правило, легко переносятся на общий случай линейных операторов. Вместо дискретных распределений моделируются непрерывные. Однако их обоснование требует в конкретных случаях существенно более развитого функционально-аналитического аппарата. Один из примеров подобных обобщений можно найти в [31].

Системы линейных алгебраических уравнений вида

$$X = AX + F, \quad X = (x_1, \dots, x_n)^T, \quad A = \|a_{i,j}\|_{i,j=1}^n, \quad F = (f_1, \dots, f_n)^T$$

в случае, когда наибольшее собственное число $\lambda_1(|A|)$ меньше единицы, являются наиболее простым объектом, свойства которого могут иллюстрировать общую теорию, изложенную в разделе 2.2.

Использование оценок (2.2.5)–(2.2.9) предполагает задание однородной цепи Маркова с начальным распределением $p^0 = (p_0^0, \dots, p_n^0)$ и переходной матрицей $P = \|p_{i,j}\|_{i,j=1}^n$, удовлетворяющими условиям согласования (абсолютная непрерывность мер).

Для оценки J_c это:

$$\begin{aligned} p_i^0 &> 0, \quad \text{если } h_i \neq 0; \\ p_{i,j} &> 0, \quad \text{если } a_{i,j} \neq 0 \text{ и } g_i > 0; \\ \text{если } h_i \neq 0, i, j &= 1, \dots, n, \quad g_i = 1 - \sum_{j=1}^n p_{i,j}, \quad p_{i,j} \geq 0. \end{aligned}$$

Аналогично выглядят условия согласования для других оценок (подробно см. [6]). Эти условия определяют общую структуру цепи Маркова.

Алгоритм вычисления оценок (2.2.5)–(2.2.9) отличается от описанного ранее общего случая лишь тем, что в данном случае моделируются дискретные распределения. В предположении, что с вероятностью 1 все траектории конечны, мы N раз независимо вычисляем последовательности $i_0 \rightarrow i_1 \rightarrow \dots \rightarrow i_\tau$ номеров состояний, где каждый номер есть результат моделирования дискретного распределения с $(n + 1)$ исходом. Один из исходов (обычно $(n + 1)$ -й) соответствует обрыву траектории.

Оценка J_a , например, имеет вид

$$J_a = \frac{h_{i_0} a_{i_0, i_1} \dots a_{i_{\tau-1}, i_\tau} f_{i_\tau}}{p_{i_0}^0 p_{i_0, i_1} \dots p_{i_{\tau-1}, i_\tau} g_{i_\tau}}. \quad (3.1.1)$$

Остальные оценки читатель легко выпишет самостоятельно (также см. [6], [7], [25]).

В соответствии с общей концепцией, сформулированной в начале книги, мы имеем дело с ПР-алгоритмом, который может быть «хуже» классических алгоритмов решения систем линейных уравнений. Важный вопрос — если хуже, то насколько хуже? Мы проведём прикладную сравнительную оценку трудоёмкости описанных алгоритмов метода Монте-Карло и метода итераций. Будем вычислять функционал

$$(H, X_M) = \left(H, \sum_{j=0}^{M-1} A^j F \right) \quad (3.1.2)$$

при некотором фиксированном M . Несмещённой его оценкой служит

$$J_M = \begin{cases} J_a, J_a^*, J_c, J_c^* & \text{при } \tau \leq M - 1, \\ 0, & \tau \geq M. \end{cases} \quad (3.1.3)$$

Если среднее число ненулевых элементов в строке матрицы A есть K , дисперсия J_M равна σ^2 , и мы хотим вычислить (H, X_M) с погрешностью, не превосходящей $\varepsilon > 0$, то трудоёмкость T (среднее число операций) алгоритма может быть выражена произведением

$$T = N_\varepsilon M t_{\text{mod}}, \quad (3.1.4)$$

где N_ε — число испытаний, $N_\varepsilon \approx C \sigma_n^2 / \varepsilon^2$, σ_n^2 — дисперсия оценки, t_{mod} — трудоёмкость вычисления оценки, состоящая из трудоёмкости моделирования дискретного распределения, равного 2 для метода Уолкера и $\log_2(n + 1)$ — для метода бисекции, и арифметических операций (умножение на $a_{i,j}/p_{i,j}$ и сложение). Константа C определяется уровнем доверия (обычно $C \leq 3$).

Если вычисляются m функционалов, то для «прямых» оценок J_a и J_c при независимых оценках каждого функционала, трудоёмкость увеличивается в m раз. Специальными приёмами, использующими общие участки траекторий, трудоёмкость можно уменьшить.

В случае оценок J_a^* и J_c^* оценить трудоёмкость сложнее. Относительная погрешность оценок каждой из компонент здесь зависит от n (растёт, как $\sqrt{n}$).

Если система линейных уравнений получена в результате дискретизации дифференциального уравнения, то, как правило, решение обладает свойствами гладкости (кусочной гладкости) и может быть восстановлено с достаточной точностью по значениям m функционалов (принадлежит классу Φ_m). В этом случае также обычно A слабо заполнена.

Сравнение с итерационными методами, требующими $\approx Mn^2$ операций, показывает, что в случае слабой заполненности при больших n и фиксированном ε метод Монте-Карло может выигрывать при малых m . Во всяком случае, m должно слабо расти с ростом n .

При $k \approx n$ асимптотически с ростом n при фиксированном ε метод Монте-Карло может оказаться предпочтительнее итерационных методов.

Наше обсуждение имеет весьма предварительный характер, но позволяет наметить границы применимости метода Монте-Карло.

Далее отметим,

- 1) мы не обсуждали возможность использования практически неограниченного числа процессоров без какого либо изменения последовательного варианта программы;
- 2) не обсуждали возможность использования различного вида преобуславливателей в методе итераций: введение преобуславливателя часто ведёт к нарушению условия $\lambda_1(|A|) < 1$.

Рассмотрим случай, когда $\lambda_1(|A|) > 1$, но $|\lambda_1(A)| < 1$. В этом случае функционал (H, X) не может быть представлен в виде интеграла по траекториям, хотя сходится процесс

$$X_{l+1} = AX_l + F, \quad X_0 = F, \quad l = 0, 1, \dots \quad (3.1.5)$$

Если A — очень большая матрица, то может быть выгодным использование метода Монте-Карло для вычисления произведения $Z = AY$ при известном векторе Y . Действительно, $Z = \left\| \sum_{i=1}^n a_{i,j} y_j \right\|_{i=1}^n$, и при больших n каждую компоненту вектора Z можно оценить с помощью выборочного среднего некоторого числа m ($m < n$) слагаемых суммы.

С ростом m ошибка вычисления сумм будет убывать и можно надеяться, что алгоритм, у которого будут последовательно оцениваться X_l с запоминанием результатов, позволит получать решение системы в случае, когда $\lambda_1(|A|) \geq 1$, но $|\lambda_1(A)| < 1$.

Эти соображения нуждаются в строгом исследовании, которое будет выполнено ниже. Мы будем считать, что для решения системы (3.1.5) в рассматриваемом случае будет строиться последовательность случайных векторов

$$\Xi_{l+1} = B\Xi_l + F, \quad \Xi_0 = F, \quad l = 0, 1, \dots, \quad (3.1.6)$$

удовлетворяющих условиям

$$E\Xi_l = X_l \quad \text{и} \quad EB = A. \quad (3.1.7)$$

Предварительно заметим, что при решении разностных схем в задачах, где решение зависит от времени, также применим этот подход, но l ограничено, $l = 0, 1, \dots, T - 1$.

Для неявных схем

$$X^{l+1} = A_1 X^{l+1} + A_2 X^l + F_l, \quad A = A_1 + A_2. \quad (3.1.8)$$

Более общий случай

$$X^{l+1} = \sum_{k=0}^{M-1} A_{k+1} X^{l+1-k} + F_l$$

сводится к упомянутому выше с переходом к большей размерности векторов. Если выполнено достаточное условие устойчивости схемы

$$|\lambda_1((I - A_1)^{-1} A_2)| < 1, \quad (3.1.9)$$

то для получения Ξ_{l+1} в схеме (3.1.8) могут быть использованы методы Монте-Карло решения систем линейных уравнений с оценками J_c , J_c^* , J_a и J_a^* , как это было описано ранее. Этот случай с применениями к волновому уравнению подробно описан в работах [28] и [29].

Алгоритмы другого типа для вычисления оценок X_l основаны на аналоге схемы Неймана—Улама для умножения матрицы на вектор.

Пусть $Y = AX$, $Y = (y_1, \dots, y_n)^T$ и H — заданный вектор, $H = (h_1, \dots, h_n)$. Алгоритм предполагает задание матрицы $\mathcal{P} = \|p_{ij}\|_{i,j=1}^n$, удовлетворяющей условиям согласования

- (а) $p_{i,j} > 0$, если $a_{i,j} \neq 0$ и распределение $\vec{q} = (q_1, \dots, q_n)$ такое, что $q_i > 0$ при $h_i \neq 0$ или

- (б) $p_{i,j} > 0$, если $a_{j,i} \neq 0$ и распределение $\vec{p} = (p_1, \dots, p_n)$ такое, что $p_i > 0$ при $x_i \neq 0$.

Введем случайные величины

$$\xi = \frac{h_\alpha a_{\alpha,\beta} x_\beta}{q_\alpha p_{\alpha\beta}}, \quad (3.1.10)$$

$$\xi^* = \frac{x_\gamma a_{\delta,\gamma} h_\delta}{p_\gamma p_{\gamma\delta}}. \quad (3.1.11)$$

Здесь α распределено по закону $\vec{q}$, γ — по закону $\vec{p}$, β — по закону $(p_{\alpha,1}, \dots, p_{\alpha,n})$ при фиксированном α и δ — по закону $(p_{\gamma,1}, \dots, p_{\gamma,n})$ при фиксированном γ . Легко проверить, что

$$E\xi = E\xi^* = (H, Y).$$

Столь же просто вычисляются дисперсии оценок (3.1.10), (3.1.11), если учесть, что

$$E\xi^2 = \sum_\alpha \sum_\beta \frac{h_\alpha^2 a_{\alpha,\beta}^2 x_\beta^2}{q_\alpha p_{\alpha\beta}}, \quad E(\xi^*)^2 = \sum_\gamma \sum_\delta \frac{x_\gamma^2 a_{\delta,\gamma}^2 h_\delta^2}{p_\gamma p_{\gamma\delta}}.$$

С помощью неравенства Бине—Коши, как при доказательстве теоремы о существенной выборке, легко установить, что оптимальный выбор p , q , $\mathcal{P}$ состоит в следующем:

(а) для оценки ξ —

$$q_\alpha = \frac{|h_\alpha|}{\sum_\alpha |h_\alpha|}, \quad p_{\alpha,\beta} = \frac{|a_{\alpha,\beta}| |x_\beta|}{\sum_{\alpha,\beta} |a_{\alpha,\beta} x_\beta|}; \quad (3.1.12)$$

(б) для оценки ξ^* —

$$p_\gamma = \frac{|x_\gamma|}{\sum_\gamma |x_\gamma|}, \quad p_{\gamma,\delta} = \frac{|a_{\delta,\gamma}| |h_\delta|}{\sum_{\gamma,\delta} |a_{\delta,\gamma} h_\delta|}. \quad (3.1.13)$$

Второй случай интересен тем, что стохастическая матрица $\mathcal{P}$ не зависит от точного решения задачи.

Оценки (3.1.10), (3.1.11) могут служить основой алгоритмов получения решения системы $X = AX + F$ без ограничений $\lambda_1(|A|) < 1$. Алгоритмы состоят в последовательном вычислении оценок векторов X_l по формуле (3.1.6).

Скалярное произведение (H, X_l) может оцениваться также с помощью оценок вида (3.1.10). В этом случае

$$(H, \Xi_l) \sim \frac{h_\alpha a_{\alpha,\beta} \xi_\beta (l-1)}{q_\alpha p_{\alpha\beta}} + f_\alpha, \quad \Xi_l = (\xi_1(l), \dots, \xi_n(l)). \quad (3.1.14)$$

Также можно использовать оценки вида (3.1.11), и в этом случае

$$(H, \Xi_l) \sim \frac{\xi_\gamma(l-1)a_{\delta,\gamma}h_\delta}{p_\gamma p_{\gamma\delta}} + f_\gamma. \quad (3.1.15)$$

В каждом случае берется среднее из некоторого количества N реализаций оценок. Оценка каждой из компонент X_l может быть получена, специальным выбором вектора H : $H = (0, \dots, 1, 0)$.

Как уже отмечалось, схема (3.1.15) интересна тем, что локально оптимальный выбор параметров, участвующих в расчетах переходной матрицы цепи Маркова, не зависит от l . Схема (3.1.14) интересна тем, что она определяет рекуррентную процедуру, приводящую к ветвящейся цепи Маркова (число ветвлений — это число повторных реплик при оценке каждой компоненты Ξ_l). Предположим, что матрица $A = A_l$ может зависеть от номера итерации l , $X_{l+1} = A_l X_l + F_l$, как это бывает при решении разностных схем.

Поведение дисперсии случайных величин Ξ_l определяет следующая лемма.

Лемма 7. Пусть случайные векторы $\Xi_l = (\xi_1(l), \dots, \xi_n(l))^T$, $l = 0, 1, 2, \dots$, связаны соотношением

$$\Xi_l = \mathbb{B}_l \Xi_{l-1} + F_l, \quad (3.1.16)$$

где $\mathbb{B}_l = \|\beta_{i,j}\|_{i,j=1}^n$ — случайные матричные операторы, $F_l = (f_1(l), \dots, f_2(l))^T$ — детерминированные векторы, $\Xi_0 = F_0$. При этом $E\Xi_l = X_l = (x_1(l), \dots, x_n(l))^T$, $E\mathbb{B}_l = A_l = \|a_{i,j}\|_{i,j=1}^n$ и $\mathbb{B}_l$ при каждом фиксированном l не зависит от Ξ_k для $k < l$. Тогда для матрицы ковариации вектора $\varepsilon_l = \Xi_l - X_l$ справедливо соотношение

$$\begin{aligned} \text{vec cov } \varepsilon_l &= \\ &= A_l \otimes A_l^T \text{vec cov } \varepsilon_{l-1} + E(\delta_l \otimes \delta_l^T) \text{vec cov } \varepsilon_{l-1} + E(\delta_l \otimes \delta_l^T) \text{vec}(X_{l-1} X_{l-1}^T), \end{aligned}$$

где $\delta_l = \mathbb{B}_l - A_l$, vec — операция векторизации матрицы, а $\otimes$ — операция кронекеровского произведения матриц.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Подставим в (3.1.16) выражения для $\mathbb{B}_l$ и Ξ_l :

$$X_l + \varepsilon_l = (A_l + \delta_l)(X_{l-1} + \varepsilon_{l-1}) + F_l.$$

Поскольку X_l подчинен (3.1.5), получим выражения для ε_l и ε_l^T :

$$\varepsilon_l = A_l \varepsilon_{l-1} + \delta_l X_{l-1} + \delta_l \varepsilon_{l-1} \quad (3.1.17)$$

и

$$\varepsilon_l^T = \varepsilon_{l-1}^T A_l^T + X_{l-1}^T \delta_l^T + \varepsilon_{l-1}^T \delta_l^T. \quad (3.1.18)$$

После перемножения правых и левых частей равенств (3.1.17) и (3.1.18) получим

$$\begin{aligned} \varepsilon_l \varepsilon_l^T &= A_l \varepsilon_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T A_l^T + A_l \varepsilon_{l-1} X_{l-1}^T \delta_l^T + A_l \varepsilon_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T \delta_l^T + \\ &+ \delta_l X_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T A_l^T + \delta_l X_{l-1} X_{l-1}^T \delta_l^T + \delta_l X_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T \delta_l^T + \\ &\delta_l \varepsilon_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T A_l^T + \delta_l \varepsilon_{l-1} X_{l-1}^T \delta_l^T + \delta_l \varepsilon_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T \delta_l^T. \end{aligned}$$

Далее вычислим математическое ожидание от всех членов получившегося равенства. При этом стоит отметить, что математические ожидания многих слагаемых правой части будут равны нулю. Так, $E \delta_l \varepsilon_{l-1} X_{l-1}^T \delta_l^T = 0$ в силу того, что ε_{l-1}^T не зависит от δ_l и $E \varepsilon^T = 0$. Учитывая эти соображения, получаем

$$E(\varepsilon_l \varepsilon_l^T) = A_l E(\varepsilon_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T) A_l^T + E(\delta_l \varepsilon_{l-1} \varepsilon_{l-1}^T \delta_l^T) + E(\delta_l X_{l-1} X_{l-1}^T \delta_l^T)$$

или, что то же самое,

$$\text{cov} \varepsilon_l = A_l \text{cov} \varepsilon_{l-1} A_l^T + E(\delta_l \text{cov} \varepsilon_{l-1} \delta_l^T) + E(\delta_l X_{l-1} X_{l-1}^T \delta_l^T).$$

Теперь, применяя операцию векторизации к матрицам $\varepsilon_l, \varepsilon_{l-1}$ и $X_{l-1} X_{l-1}^T$, получим

$$\begin{aligned} \text{vec cov} \varepsilon_l &= \\ &= A_l \otimes A_l^T \text{vec cov} \varepsilon_{l-1} + E(\delta_l \otimes \delta_l^T) \text{vec cov} \varepsilon_{l-1} + E(\delta_l \otimes \delta_l^T) \text{vec}(X_{l-1} X_{l-1}^T). \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \text{vec cov} \varepsilon_l &= (A_l \otimes A_l^T + E(\delta_l \otimes \delta_l^T)) \text{vec cov} \varepsilon_{l-1} + \\ &+ E(\delta_l \otimes \delta_l^T) \text{vec}(X_{l-1} X_{l-1}^T). \end{aligned} \quad (3.1.19)$$

■

По поводу равенства (3.1.19) заметим следующее. Поскольку при каждом l Ξ_l вычисляется как среднее N_l независимых оценок, $\|\text{cov} \varepsilon_{l-1}\|$ имеет порядок $O(1/N_l)$. В соответствии со свойствами кронекеровского произведения имеем

$$e_l \leq \|\mathfrak{A}\| e_{l-1} + C/N_l \cdot \|X_l\|^2,$$

где

$$\begin{aligned} e_l &= \|\text{vec cov} \varepsilon_l\|, \quad \mathfrak{A} = A_1 \otimes A_1 + E(\delta_1 \otimes \delta_1^T) \quad \text{и} \\ \|\mathfrak{A}\| &\leq |\lambda_1(A)|^2 + C_1/N_l. \end{aligned}$$

При $N_l = N$, не зависящем от номера итерации, дисперсия ошибки либо растёт экспоненциально, либо стремится с ростом l к постоянному пределу. В первом случае алгоритм называют стохастически неустойчивым и стохастически устойчивым — во втором. Примеры стохастической неустойчивости, возникающей при решении разностного аналога волнового уравнения, описаны в [29].

Рассмотрим вопрос о параллелизме и трудоёмкости алгоритма. Здесь можно различать «внутренний» и «внешний» параллелизм. «Внутренний» — это параллелизм при вычислении произведений X_l при фиксированном l . Поскольку это вычисление состоит из N независимых испытаний, то в вычислении естественным образом могут участвовать $k \leq N$ процессоров. «Внешний» параллелизм основан на равенстве $E\Xi_l = X_l$. Независимые реализации случайного вектора Ξ_l при любом l можно получать на различных процессорах, а затем находить среднее M таких реализаций (ПР-алгоритм). Получение оценки решения вычислением среднего при достаточно большом M позволяет также вычислить эмпирическую дисперсию.

Мы, таким образом, построили ПР-алгоритм для решения систем линейных алгебраических уравнений и в случае $\lambda_1(|A|) > 1$ и указали его особенности в связи с величиной $\lambda_1(A)$ и числом испытаний N при каждом l .

Рассмотрим в общих чертах вопрос о трудоёмкости метода. В рамках выбранной модели (N не зависит от l) мы полагаем, что N удовлетворяет условиям стохастической устойчивости. Здесь, как отмечалось ранее, возможно использование «прямых» оценок (2.2.5), (2.2.7) или двойственных (2.2.8), (2.2.9). В общем случае N зависит от n — растёт с ростом n , и для больших n алгоритм может быть непомерно трудоёмким. Особый интерес представляет случай, когда решение может быть восстановлено по некоторому числу m функционалов, m слабо растёт с ростом n , и используются эффективные методы понижения дисперсии.

Пусть $\max_l \|\mathcal{F}_l\| \leq F$ и наибольшее собственное число матрицы $\mathfrak{A}$ есть Λ , тогда для l , достаточно больших, $e_l \leq L \frac{\sigma^2}{N} \cdot \frac{\|X_l\|^2}{1-\Lambda}$, где L — константа, а σ^2 — максимальная дисперсия оценок X_l . При N_1 , достаточно большом, $\Lambda \approx |\lambda_1(A)|^2$. Трудоёмкость T оценивается при N_1 независимых испытаниях группами по N испытаний при переходе от l -й к $(l+1)$ -й итерации:

$$T = N_1 \cdot N M t_{\text{mod}}, \quad t_{\text{mod}} \leq \begin{cases} 2 & (\text{метод Уолкера}), \\ 2 \log_2 k + 4 & (\text{метод бисекции}). \end{cases} \quad (3.1.20)$$

Можно утверждать, что наличие множителя $\mu = \frac{1}{1-\Lambda}$ ухудшает ситуацию в μ раз по сравнению со случаем $\lambda_1(|A|) < 1$.

В работе [1] для разностного аналога уравнения Лапласа оценивалась трудоёмкость метода Монте-Карло в случае вычисления интеграла по траекториям (аналог метода простых итераций) и метода Монте-Карло при введении предобуславливателя (метод верхней релаксации). В последнем случае оказывается $\lambda_1(|A_1|) > 1$. Результат сравнения оценок показывает, что введение предобуславливателя в этом случае практически не уменьшает трудоёмкость алгоритма. Вероятно, введение предобуславливателя целесообразно тогда, когда для исходной системы $\lambda_1(|A|) > 1$.

Обратимся далее к примерам применения описанной теории для конкретных алгоритмов. В предположении необходимой гладкости решения $U(x, t)$ начально-краевой задачи для волнового уравнения

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (3.1.21)$$

в области $[0, 1] \times [0, T]$ при начальных условиях $\frac{\partial U}{\partial t}(x, 0) = \varphi_1(x)$, $U(x, 0) = \varphi_0(x)$ и граничных условиях $U(0, t) = \psi_0(t)$, $U(1, t) = \psi_1(t)$ рассмотрим некоторые разностные схемы, приближённо решающие эту задачу, а именно, на сетке с шагом $h = 1/n$ и $\Delta t = T/m$ явную схему — «крест» ($h = \Delta t$)

$$U_{k,j+1} = U_{k+1,j} + U_{k-1,j} - U_{k,j-1}, \quad k = 1, \dots, n-1 \text{ и } j = 1, 2, \dots, m-1 \quad (3.1.22)$$

и неявную схему

$$U_{j+1,k} = \frac{1}{2 + \mu^2} (U_{j+1,k+1} + U_{j+1,k-1}) + \frac{\mu^2}{2 + \mu^2} (2U_{j,k} - U_{j-1,k}), \quad (3.1.23)$$

где $\mu^2 = \frac{h^2}{(\Delta t)^2}$.

Обе схемы устойчивы относительно ошибок округления (вторая при любом значении μ). Но в обоих случаях мы имеем дело с системами, для которых наибольшее собственное число модуля матрицы будет больше единицы, и попытки использования схемы Неймана—Улама приводят к стохастически неустойчивым алгоритмам. Тем не менее можно построить как в случае (3.1.22), так и в случае (3.1.23) последовательность случайных векторов Ξ_j таких, что выполняется равенство

$$E\Xi_j = (U_{j,1}, \dots, U_{j,n-1})^T, \quad j = 2, 3, \dots$$

Для этого достаточно в случае (3.1.22) воспользоваться оценками (3.1.3), вычисляя их на каждом слое N_j раз независимо, и оценками

для решения систем линейных уравнений в случае (3.1.23). Результаты для последнего случая подробно описаны в [29]. Там же показано, что для достаточно больших N_j алгоритм вычисления Ξ_j стохастически устойчив.

Будем считать, что N_j от j не зависит, $N_j = N$, и остановимся подробно на схеме (3.1.22).

Пусть вычислены несмещённые оценки $\xi_{j,k}$ и $\xi_{j-1,k}$, $k = 1, \dots, n-1$ для $U_{j,k}$ и $U_{j-1,k}$ соответственно. В оценках (J_c) и (J_c^*) выберем $\mathcal{P}$ с нулевыми элементами, соответствующими нулевым элементам матрицы системы, и равными для простоты $1/3$ для ненулевых.

«Прямой» алгоритм состоит в том, что для выбранного k полагаем

$$\xi_{j+1,k} \text{ равным } (3/N) \sum_{i=1}^N \xi_{j+1,k}^{(i)}, \text{ где}$$

$$\xi_{j+1,k}^{(i)} = \begin{cases} \xi_{j,k+1} & \text{с вероятностью } 1/3, \\ \xi_{j,k-1}, & \\ \xi_{j-1,k}. & \end{cases} \quad (3.1.24)$$

Таким образом, структура алгоритма представляет собой случайный граф, в котором при каждом переходе из точек с номерами $(j, k+1)$, $(j, k-1)$, $(j-1, k)$ в точку $(j+1, k)$ три ветви сливаются в одну. Переход от начальных данных к данным на линии $j = T$ может быть описан как траектория столкновительного процесса движения «частиц», при котором три частицы могут сливаться в одну при переходе со слоя на слой. Процессы такого рода являются двойственными к ветвящимся, и, действительно, легко указать алгоритм моделирования процесса, двойственного к столкновительному.

Алгоритм («сопряжённый») для вычисления U_{T,k_0} связан со следующим ветвящимся процессом. Частица блуждает по сетке (j, k) . С равными вероятностями $p = 1/3$ она переходит из (j, k) в одну из точек $(j-1, k-1)$, $(j-1, k+1)$, $(j-2, k)$. После перехода в соответствующей точке рождается N аналогичных частиц, если точка не принадлежит границе области. В граничной точке траектория обрывается.

Оценка ξ_{T,k_0} решения U_{T,k_0} вычисляется следующим образом. Начальная частица (в точке (T, k_0)) имеет вес $\vartheta = 1$. При каждом переходе вес умножается на $3/N$. При достижении частицей границы имеем вклад $(3/N)^r U(r)$, где r — число переходов до границы, а $U(r)$ — граничное (начальное) значение решения U , которое известно. Оценкой для U_{T,k_0} служит сумма вкладов всех образовавшихся частиц:

$$\xi_{T,k_0} = \sum_{\text{всех вкладов}} Q_r^{(i)} U^{(i)}(r). \quad (3.1.25)$$

Обработка траекторий ветвящегося процесса может, как обычно, вестись либо по поколениям (j), либо лексикографически. В последнем случае требуется $T/\Delta t$ ячеек для хранения сведений о траектории. Если N выбрано так, что обеспечивается стохастическая устойчивость, то оба алгоритма (прямой и сопряжённый) являются ПР-алгоритмами.

Легко заметить, что суммирование в (3.1.25) нужно проводить «по слоям», то есть по поколениям — при каждом j находить общие веса для каждой точки, а затем продолжать ветвление. Вычислительная работа для каждого j будет пропорциональна $N \cdot n$ — произведению числа ветвей на число точек на каждом слое. При обработке траекторий ветвящегося процесса иными методами работа может расти экспоненциально с ростом j .

Подробное исследование связей прямых и двойственных процессов с ветвлением для решения уравнений выходит за рамки данной книги. Отметим только, что формула вида (3.1.19) для ковариаций двойственных оценок может быть получена аналогично тому, как это сделано в рассмотренном нами случае. Обобщение на случай операторов существенно более трудоёмкий процесс. По этому поводу см. [31], а также некоторые работы Г. А. Михайлова [32].

3.2. МЕТОД КВАЗИ МОНТЕ-КАРЛО

В отличие от метода Монте-Карло метод квази Монте-Карло (КМК-метод) имеет отдалённое отношение к теории вероятностей и основан на результатах теории чисел и вычислительной математики, и, в частности, теории *кубатурных формул*.

Коротко об этих результатах.

Кубатурной формулой принято называть формулу приближённого вычисления интеграла

$$\int_D p(X)f(X) dX \approx \sum_{i=1}^N f(X_i)A_i, \quad (3.2.1)$$

где $D \subset \mathbf{R}^s$; $X_i \in D$, $i = 1, \dots, N$, $p(X) > 0$ — заданная функция (весовая функция). Числа A_i называют коэффициентами, а $X_i = (x_1^{(i)}, \dots, x_s^{(i)})$ — узлами формулы. Функционал

$$R_N(f) = \int_D p(X)f(X) dX - \sum_{i=1}^N A_i f(X_i) \quad (3.2.2)$$

называют остатком кубатурной формулы.

Для выбора параметров A_i и X_i кубатурной формулы обычно используют два подхода:

- (1) из условия $R_N(\varphi_j) = 0$, где $\varphi_j(X)$, $(j = 1, 2, \dots, m)$ — заданные функции;
- (2) для заданного линейного нормированного пространства $\mathbf{F}$ из условия минимума нормы функционала $R_N(f)$.

В одномерном случае ($s = 1$) широко известные квадратурные формулы Гаусса обеспечивают обращение в нуль остатка для алгебраических многочленов степени не больше $\leq (2N - 1)$. К сожалению, распространить теорию этих формул на многомерный случай удаётся лишь в отдельных частных случаях. Наиболее успешной в этом отношении является знаменитая работа И. Радона [33], где полностью исследован случай полиномов двух переменных суммарной пятой степени ($N = 5$). И это, как это ни странно, единственный случай, когда для $s > 1$, $N > 1$ строится почти полный аналог гауссовских квадратур, но и в этом случае вещественность параметров формулы гарантируется лишь для областей, обладающих центром симметрии.

Свойство симметрии (инвариантность относительно групп преобразований) вообще, служит источником большинства удачных примеров формул, точных для большого числа функций φ_i . Большое разнообразие конфигураций областей интегрирования в многомерном случае объясняет недостаточную универсальность подхода (1), что не умаляет его значения при решении отдельных задач. Из весьма обширной литературы, посвящённой теории вопроса, сошлёмся на [31] и [34].

Подход (2) наиболее полно отражён в монографии [36], где изучены свойства нормы функционала $R_N(f)$ для класса функций W , имеющих частные производные заданного порядка. Построение оптимальных формул для этих классов с учётом свойств границы области оказывается достаточно сложной задачей, требующей специальных исследований в конкретных случаях.

Достаточно общий подход к вычислению многократных интегралов был впервые развит в работах Н. М. Коробова [37]. Используя мощный теоретико-числовой аппарат, он для случая s -мерного гиперкуба впервые указал методы численного интегрирования, близкие к оптимальным в классах дифференцируемых функций. При этом использовались оценки снизу для $R_N[f]$ в классах дифференцируемых функций, полученные Н. Бахваловым, и предположение (явное или неявное) о сводимости с помощью замены переменных любой области с гладкой границей к гиперкубу. Формулы Н. М. Коробова также точны для тригонометрических многочленов.

Эти краткие и совершенно неполные (дилетантские) упоминания о результатах в области теории кубатурных формул приводятся здесь лишь для того, чтобы указать место методов квази Монте-Карло в

этой теории. Формально методы квази Монте-Карло состоят в том, что в вычислительной схеме метода Монте-Карло вместо равномерно распределённых на промежутке $(0, 1)$ чисел используются компоненты X_i — узлов некоторой кубатурной формулы. Точнее, речь идёт о последовательности кубатурных формул

$$\int_{D_s} f(X) dX \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i), \quad (3.2.3)$$

где D_s — единичный s -мерный гиперкуб, $X_i \in D_s$. При увеличении N предыдущие узлы сохраняются!

Легко видеть из § 2 гл.1, что методы моделирования случайных величин определяют замену переменных, переводящую в единичный гиперкуб область интегрирования. Однако s может быть достаточно большим.

Характер этой замены полезно проиллюстрировать на простом примере. Пусть $s = 2$ и $D = \{0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq C\varphi(x)\}$, где $\varphi(x)$ является плотностью распределения, а $C > 0$ — константа. При вычислении интеграла

$$I = \int_D f(x, y) dx dy$$

методом Монте-Карло можно использовать оценку

$$\xi_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\xi_i, \eta_i),$$

где (ξ_i, η_i) — точка, равномерно распределённая в D . Если использовать описанный в лемме 3 метод получения (ξ_i, η_i) , то нужно взять два равномерно распределённых случайных числа $\alpha_1^{(i)}$ и $\alpha_2^{(i)}$, и $\xi_i = F^{-1}(\alpha_1^{(i)})$, $\eta_i = \alpha_2^{(i)} C\varphi(\xi_i)$, где $F(X)$ — функция распределения, имеющая плотность φ . Очевидно, мы имеем дело с заменой переменных $x = F^{-1}(u)$, $y = vC\varphi(F^{-1}(u))$.

Возможны другие замены переменной, в том числе учитывающие свойства f (существенная выборка), но метод квази Монте-Карло связан, как правило, с заменами, имеющими вероятностный смысл. Конечно, можно было бы использовать для моделирования плотность $\varphi(x)$ (метод отбора), но именно тогда s является случайной (сколь угодно большой).

Это очень важное замечание: *кратность вычисляемого методом квази Монте-Карло интеграла зависит от конструкции соответствующего монте-карловского алгоритма.*

Указанную кратность мы будем называть, следуя И. М. Соболю, конструктивной размерностью интеграла.

Выбор узлов формулы (3.2.3) осуществляется на основе подхода (2). Строятся последовательности X_i , $i = 1, 2, \dots$, доставляющие оптимальный порядок убывания норм остатка $R_N(f)$ в классе функций ограниченной вариации (в смысле Харди—Краузе). Соответствующее неравенство норм носит название неравенства Коксмы—Хлавки (подробное его доказательство, не использующее средства функционального анализа, см., например, в [38]).

Далее мы в двумерном случае поясним основные идеи, лежащие в основе выбора критерия оптимизации для выбора последовательности узлов $X_1, X_2, \dots$.

Пусть в единичном квадрате $D_2 = \{0 \leq x, y \leq 1\}$ задана функция $f(x, y)$, имеющая первые интегрируемые производные f'_x и f'_y и смешанную производную f''_{xy} в этом квадрате. Тогда, используя разложение в ряд Тейлора, имеем для любой точки (u, v) из D_2

$$\begin{aligned} f(x, y) = f(u, v) + \int_u^x f'_x(t_1, v) dt_1 + \int_v^y f'_y(u, t_2) dt_2 + \\ + \int_u^x \int_v^y f''_{xy}(t_1, t_2) dt_1 dt_2. \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Полагая $u = v = 1$ и подставляя полученное выражение для $f(x, y)$ в (3.2.2) при $p(X) \equiv 1$, $s = 2$, $A_i = 1/N$, $i = 1, 2, \dots$, получим после несложных преобразований

$$\begin{aligned} R_N[f] = \int_0^1 f'_x(t, 1) K_1(t) dt + \int_0^1 f'_y(1, t) K_2(t) dt + \\ + \int_0^1 \int_0^1 f''_{xy}(t_1, t_2) K_3(t_1, t_2) dt_1 dt_2, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} K_1(t) = (-t + 1/N \sum_{i=1}^N \Theta(x_i - t)), \quad K_2(t) = (-t + 1/N \sum_{i=1}^N \Theta(y_i - t)), \\ K_3(t_1, t_2) = (t_1 t_2 - 1/N \sum_{i=1}^N \Theta(x_i - t_1) \Theta(y_i - t_2)), \quad \Theta(\tau) = \begin{cases} 0, & \tau > 0, \\ 1/2, & \tau = 0, \\ 1, & \tau < 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Легко видеть, что суммы, входящие в выражение для K_1 , K_2 и K_3 , имеют следующую наглядную интерпретацию:

$\sum_{i=1}^N \Theta(x_i - t) = n(t, x_1, \dots, x_N)$ — количество точек с координатами x_i , удовлетворяющими условию $x_i \leq t$;

$\sum_{i=1}^N \Theta(x_i - t_1) \Theta(y_i - t_2) = n(t_1, t_2, x_1, \dots, x_N)$ — количество точек с координатами (x_i, y_i) , удовлетворяющими неравенствам $x_i < t_1$, $y_i < t_2$.

Заметим, что, используя аналогичное (3.2.4) разложение в ряд Тейлора функции s -переменных, можно получить представление остатка $R_N[f]$, содержащее при производных ядра $K_l(t_1, \dots, t_l)$ вида

$$K(t_1, \dots, t_l) = (-1)^l \left(\prod_{i=1}^l t_i - n(t_1, \dots, t_l; X_1^{(l)}, \dots, X_N^{(l)}) \right), \quad l \leq s,$$

где $x_i^{(l)}$ — проекция точки $x_i = (x_1, \dots, x_s)$ на одну из гиперграней гиперкуба, а $n(t_1, \dots, t_l; X_1^{(l)}, \dots, X_N^{(l)})$ — количество точек, для которых выполнены неравенства $x_{i,j}^{(l)} < t_i$, $i = 1, \dots, l$; $X_j^{(l)} = (x_{1,j}^{(l)}, \dots, x_{N,j}^{(l)})$.

Функции $D_l^*(X_1^{(l)}, \dots, X_N^{(l)}) = N \sup K(t_1, \dots, t_l)$ носят названия «дискрепанс со звёздочкой» (star discrepancy). Поскольку «дискрепанс без звёздочки» нами не используется, мы будем говорить просто дискрепанс (иногда используется русский термин «отклонение множества точек $X_1^{(l)}, \dots, X_N^{(l)}$ »).

Вернёмся к двумерному случаю. Функции $f'_x(x, 1)$, $f'_y(1, y)$ и $f''_{xy}(x, y)$ независимы и могут принадлежать различным классам интегрируемых функций. Неравенство

$$\begin{aligned} |R_N(f)| &\leq M_{1,0} \sup_t |K_1(t)| + M_{0,1} \sup_t |K_2(t)| + M_{1,1} \sup_{t_1, t_2} |K_3(t_1, t_2)|, \\ M_{1,0} &= \int_0^1 |f'_x(u, 1)| dt, \quad M_{0,1} = \int_0^1 |f'_y(1, v)| dt, \\ M_{1,1} &= \int_0^1 \int_0^1 |f''_{xy}(u, v)| dudv \end{aligned} \tag{3.2.5}$$

является точным. Существует функция $f(x, y)$ с интегрируемыми производными, для которой достигается знак равенства (3.2.5).

Поскольку $K_1(t) = K_3(t, 1)$ и $K_2(t) = K_3(1, t)$, имеем $\sup_{t_1, t_2} K_3(t_1, t_2) \geq \sup_t K_1(t)$, и неравенство (3.2.5) можно переписать в виде

$$|R_N(f)| \leq \text{Var} f \cdot \frac{D_2(x_1^{(2)}, \dots, x_N^{(2)})}{N}, \tag{3.2.6}$$

где $\text{Var} f = M_{10} + M_{01} + M_{11}$ — вариация в смысле Харди—Краузе функции f . Это и есть частный случай неравенства Коксмса—Хлавки, которое в общем s -мерном случае имеет сходный вид:

$$|R_N(f)| \leq \text{Var} f \cdot \frac{D_s(X_1, \dots, X_N)}{N}. \quad (3.2.7)$$

Отметим, что использование другой метрики, например метрики L^2 в предположении, что f'_x, f'_y, f''_{xy} интегрируемы с квадратом, не позволяет получить похожего неравенства, точного в упомянутом классе функций (см. приложение, где также обсуждается вопрос об оценке остатка в случае существования у f производных высших порядков).

Дискрепанс служит мерой отклонения множества точек $X_1, \dots, X_N$ от равномерного расположения в единичном s -мерном гиперкубе. Метод квази Монте-Карло использует последовательности точек $X_1, X_2, \dots$, для которых можно построить последовательность чисел $D_1(X_1, X_2), \dots, D_s(X_1, \dots, X_N)$. Известно, что эти числа возрастают с ростом N . Представляют интерес последовательности $X_1, X_2, \dots$ с наименее быстрым увеличением дискрепансов. Построенные сегодня с помощью теоретико-числовых методов последовательности обеспечивают порядок роста $O(\ln^s N)$. Наиболее удачными, по-видимому, являются последовательности И. М. Соболя [39], используются также последовательности Дж. Холтона, Форе и другие. Они достаточно полно описаны в литературе. Имеются программы (например, в пакете R), вычисляющие координаты соответствующих точек. По этой причине мы не будем останавливаться на вопросе их конструирования. Отметим лишь следующее.

1. В отличие от псевдослучайных чисел, квазислучайные числа (последовательности с малыми дискрепансами) настроены на определённую размерность интеграла.
2. Со статистической точки зрения квазислучайные числа сильно коррелированы и в задачах моделирования должны использоваться с осторожностью.

Таким образом, последовательности квазислучайных чисел обладают следующими полезными свойствами (преимуществами).

1. Позволяют вычислять интегралы по единичному s -мерному гиперкубу при фиксированном s с погрешностью порядка $\ln^s N/N$ от широкого класса функций.
2. Обладают улучшенными по сравнению с квазислучайными числами свойствами равномерной распределённости, что может

быть очень важным для общих методов глобальной оптимизации.

Определёнными недостатками квазислучайного подхода можно считать следующие.

1. Квазислучайные векторы X_i зависимы в статистическом смысле, и использование их в задачах имитации требует предварительного тщательного анализа. Их координаты приближённо независимы в совокупности. Действительно, пусть координаты точек X_i произвольным образом разбиты на две группы: $X_i = (Y_i, Z_i)$ и $f(X) = f_1(Y)f_2(Z)$; тогда имеет место асимптотическое равенство

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f_1(Y_i) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_2(Z_i).$$

2. При очень большой кратности s интеграла $\ln^s N$ может играть заметную роль, и ситуация, при которой $\ln^s N/N$ будет существенно меньше $1/\sqrt{N}$, наступит лишь при очень больших значениях N . Дело осложняется в тех весьма распространённых случаях, когда s трудно или невозможно оценить априори. Как уже отмечалось, уже в простейших случаях, когда используется метод отбора, конструктивная размерность интеграла может быть неограниченной. При решении уравнений с помощью моделирования цепи Маркова даже без использования метода отбора, s может быть очень большим.
3. Неравенство Коксмса—Хлавки, как легко видеть, не может служить эффективным средством оценки погрешности интегрирования конкретной функции. Вычисление вариации — не менее трудная задача, чем вычисление самого интеграла. В то же время, если $f(x) \in \mathbf{L}_\mu^2$, обычный метод Монте-Карло позволяет строить доверительный интервал для значения интеграла. Для преодоления недостатка *QMC*-метода было предложено использовать рандомизованные квазислучайные числа (РКСЧ), или *RQM* — английское сокращение для названия метода. Наиболее распространённый приём введения случайности состоит в том, что вместо любой квазислучайной координаты x в вычислениях участвует $\{x + \alpha\}$, где α — псевдослучайное число, $\{a\}$ обозначает дробную долю числа a .

Пусть $X_1, X_2, \dots, X_N$ — квазислучайные s -мерные векторы, расположенные в s -мерном единичном кубе D_s , а $R_1, R_2, \dots, R_N$ — набор случайных векторов, равномерно распределённых в D_s .

Если $\{Y\}$ обозначает вектор, компонентами которого являются дробные доли компонент вектора Y , то сумма

$$\sum_{MN}(f) = \frac{1}{MN} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N f(\{X_n + R_m\})$$

служит оценкой интеграла $\int_{D_s} f(X) dX$. Порядок погрешности будет равен $O(\frac{N}{M \ln(N)})$, математическое ожидание величины $\sum_{MN}(f)$ есть искомый интеграл, и её дисперсия может быть использована для построения доверительного интервала. Очевидно, что без использования рандомизации при том же объёме вычислительной работы мы имели бы погрешность порядка $O(\frac{\ln(MN)}{MN})$, что в $\frac{\ln(M)}{M}$ -раз лучше рандомизованной оценки. Попытка обойтись без рандомизации рассматривалась в работе [60].

Поскольку квазислучайные последовательности имеют некоторые свойства, сходные со свойствами случайных чисел (аналог закона больших чисел, например), можно попробовать применить к ним формально статистические процедуры оценивания погрешности. Разумно предположить, что распределение в теоретико-числовом смысле средних арифметических $\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(X_n)$ близко к нормальному со средним $\int_{D_s} f(X) dX$. Что касается дисперсии, то её оценка оказывается затруднительной в силу очевидной зависимости векторов $\{X_n\}_{n=1}^N$. Действительно, попытка формально оценить второй момент распределения средних приводит нас к необходимости оценивания ковариаций $f(X_n)$ и $f(X_{n+k})$ для $n = 1, 2, \dots, N$ и $k = 1, 2, \dots, N - n$. Очевидно, что корректная процедура оценивания требует привлечения более чем N значений подынтегральной функции, что опять же приводит к увеличению вычислительной сложности.

Заметим теперь, что сумма $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(X_j)$ может рассматриваться как реализация случайной кубатурной суммы $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\{X_j + R\})$. Квазислучайные узлы, однако, обладают свойством расслоения. Если случайные точки попадают в гиперпараллелепипед объёма d , содержащийся в единичном гиперкубе D_s с вероятностью d , то из N квазислучайных точек такому параллелепипеду принадлежит N/d точек с вероятностью, близкой к единице. Для последовательностей Соболя, связанных с функциями Хаара, указанное свойство выполняется при делении гиперкуба на параллелепипеды со сторонами, равными

2^{-m_l} , $l = 1, 2, \dots, s$ при некоторых целых положительных m_s , и зависимость между квазислучайными узлами интегрирования выражается в принадлежности с вероятностью 1 некоторых подмножеств узлов различным гиперпараллелепипедам. Использование этих соображений позволяет привлечь теорию случайных квадратурных формул [7]. Для построения доверительного интервала привлекаются случайные квадратуры, точные для функций Хаара. Их дисперсия вычисляется без привлечения упоминавшихся ковариаций. Вычислительные примеры для интегралов кратности $s \leq 10$ показали удовлетворительные результаты.

Глава 4

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЗАДАЧИ

4.1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ. ПАРАЛЛЕЛИЗМ

Решение нелинейных уравнений с использованием методов Монте-Карло и квази Монте-Карло — область сравнительно мало исследованная. Как обычно, широко используются методы приближённой линеаризации. Мы обсудим кратко основные подходы в связи с зрения ПР-свойствами соответствующих алгоритмов.

1. Для уравнений с полиномиальной нелинейностью вида

$$\varphi(X) = \sum_{l=1}^{\infty} \int d\mu^l K_l(X, X_1, X_2, \dots, X_l) \prod_{m=1}^l \varphi(X_m) + f(X),$$
$$d\mu^l = \bigotimes_{m=1}^l \mu(dX_m)$$
(4.1.1)

при соответствующих предположениях об абсолютной сходимости рядов и существовании интегралов можно указать методы представления решения (функционалов от решения) в виде интеграла по траекториям ветвящегося марковского процесса.

Необходимым условием для этого является сходимость в некоторой метрике итерационного процесса

$$\overline{\varphi}_{n+1}(X) = \sum_{l=1}^l \int d\mu^l |K_l(X, X_1, X_2, \dots, X_l)| \prod_{m=1}^l \overline{\varphi}_n(X_m) + |f(X)|,$$
$$n = 0, 1, \dots, \quad \overline{\varphi}_0 = |f|.$$
(4.1.2)

При вычислении функционалов $\int \varphi_n(X) h(X) \mu(dX) = (\varphi_n, h)$, где $\varphi_0 = f$, φ_n — n -я итерация оператора в правой части (4.1.1), $n = 1, 2, \dots$, достаточно предполагать слабую сходимость (для функционалов (φ_n, h_j)). При сделанных предположениях

линеаризация (одна из простейших — см. [42]), если положить

$$\psi^j(X_1, \dots, X_j) = \prod_{l=1}^j \varphi(X_l), \text{ даст}$$

$$\begin{aligned} \psi^{(j+1)}(X, X_1, \dots, X_j) = \\ = \sum_{l=1}^{\infty} \int d\mu^l K_l(X, y_1, y_2, \dots, y_l) \psi^{(l+j)}(X_1, \dots, X_j, y_1, \dots, y_l) + \\ + |f(X)| \psi^j(X_1, \dots, X_j), \quad j = 0, 1, \dots, \end{aligned}$$

бесконечную систему линейных уравнений относительно ψ_j . Общая схема, описанная в § 2.2, позволяет строить ветвящийся марковский процесс для решения этой системы.

Известные методы обработки траекторий процесса (деревьев) — метод поколений и лексикографический — определяют структуру ПР-алгоритма решения уравнений вида (4.1.1).

Соответствующие алгоритмы для решения систем алгебраических уравнений с квадратичной нелинейностью довольно подробно исследованы в работах С. М. Ермакова и И. В. Калошина [43], [44]. Уравнения вида $\Delta U = F(u)$, где F — аналитическая функция, рассматривались Г. А. Михайловым [47], А. С. Расуловым [24]. В этих работах приводятся примеры эффективного использования аппарата ветвящихся процессов для решения уравнений. Приложения к решению уравнения Больцмана рассматривались Н. М. Москалёвой [46], Г. А. Михайловым [47].

Как и в линейном случае, условие (4.1.2) является довольно ограничительным. Некоторые приёмы снятия этого ограничения, основанные на специальной замене переменных, указаны в работах В. Г. Сережиной [48].

2. Значительно более широкий класс методов решения нелинейных задач использует последовательные приближения, основанные на линеаризации. Если при этом не выполняются условия мажорантного типа (вида (4.1.2)), то получить представление решения в виде интеграла по траекториям не удастся и необходимо запоминание промежуточных результатов.

Пусть для решения уравнения $\varphi = F(\varphi)$, где φ — функция $\varphi = \varphi(X)$, $X \in D \subset \mathbf{R}^s$, а F — нелинейный оператор, используется метод последовательных приближений

$$\varphi_{n+1} = F(\varphi_n), \quad n = 0, 1, \dots, \quad (4.1.3)$$

и при каждом n используется алгоритм метода Монте-Карло, позволяющий вычислить $\varphi_n(X)$ с заданной точностью (в смысле некоторой функциональной метрики). Как мы видели, параллелизм рассмотренных ранее для линейного случая алгоритмов был тесно связан с несмещённостью оценок решения при каждом n . Для линейных операторов широкого класса L выполняется соотношение

$$\mathbb{E}L\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\xi_i\right)=L(\mathbb{E}\xi), \quad (4.1.4)$$

где ξ_i — независимые в совокупности реализации случайной величины ξ . Для нелинейного оператора K соотношение такого рода, вообще говоря, не выполняется. Однако если F — нелинейная функция с нужными свойствами гладкости, то

$$F(\bar{\xi})=F(\mathbb{E}\xi)+F'(\mathbb{E}\xi)(\bar{\xi}-\mathbb{E}\xi)+F''(\mathbb{E}\xi)\frac{(\bar{\xi}-\mathbb{E}\xi)^2}{2!}+\cdots,$$

где

$$\bar{\xi}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\xi_i$$

и

$$\mathbb{E}F(\bar{\xi})=F(\mathbb{E}\xi)+\frac{F''(\mathbb{E}\xi)}{2!}\frac{\mathrm{Var}\xi}{N}+O(N^{-3/2}). \quad (4.1.5)$$

Аналогичные результаты могут быть получены для оператора F , если производные понимать в смысле Фреше. Из (4.1.5) следует, что смещение имеет больший порядок малости $O(1/N)$ по сравнению с погрешностью математического ожидания — $O(N^{-1/2})$.

Аналогично вычисляется главный член дисперсии $F(\bar{\xi})$. При достаточно широких предположениях распределение $F(\bar{\xi})$ асимптотически нормально [49].

Изложенные соображения позволяют исследовать различные методы последовательной линеаризации, в том числе метод Ньютона. Метод Ньютона и его модификации являются одними из наиболее популярных методов решения нелинейных уравнений. В случае операторных уравнений — это метод Ньютона—Канторовича.

Напомним некоторые определения, относящиеся к операторному случаю.

Определение 1. $\mathcal{B}$ и $\mathcal{C}$ — банаховы пространства. Банахово пространство линейных операторов из $\mathcal{B}$ в $\mathcal{C}$, норма в котором является операторной нормой, порожденной пространствами $\mathcal{B}$ и $\mathcal{C}$ будем обозначать $\mathcal{L}(\mathcal{B}, \mathcal{C})$. Положим $\mathcal{L}(\mathcal{B}) := \mathcal{L}(\mathcal{B}, \mathcal{B})$.

Определение 2. Пусть $\mathcal{B}$ и $\mathcal{C}$ — банаховы пространства. Пусть D — открытое подмножество в $\mathcal{B}$ и A — оператор, отображающий D в $\mathcal{C}$. Оператор A называется дифференцируемым по Фреше в точке $g \in D$, если существует такой оператор $L \in \mathcal{L}(\mathcal{B}, \mathcal{C})$, что

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{\|A(g+h) - Ag - Lh\|}{\|h\|} = 0. \quad (4.1.6)$$

Оператор L , который обозначают обычно $A'(g)$, называют производной Фреше оператора A в g .

Определение 3. Последовательностью Ньютона будем называть последовательность величин

$$f_{n+1} = f_n - (B'(f_n))^{-1} B f_n, \quad n \geq 0. \quad (4.1.7)$$

Следующая теорема дает достаточные условия сходимости метода Ньютона в случае банаховых пространств (считаем, что метрика и топология порождаются нормой).

Следующая теорема, принадлежащая Канторовичу, дает критерий сходимости и устанавливает существование решения в общем случае.

Теорема 6. Пусть $\mathcal{B}$ — банахово пространство и заданы $r > 0$ и $f_0 \in \mathcal{B}$. Предположим, что оператор $B : \overline{S}(f_0, r) \rightarrow \mathcal{B}$ дифференцируем по Фреше и $(B'(f_0))^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{B})$. Предположим, кроме того, что B' удовлетворяет следующему условию Липшица в $\overline{S}(f_0, r)$:

$$\|B'(f) - B'(g)\| \leq p\|f - g\|. \quad (4.1.8)$$

Допустим, что

$$b_0 \geq \|B'(f_0)\|^{-1}, \quad \eta_0 \geq \|f_1 - f_0\| = \|(B'(f_0))^{-1} B f_0\|, \quad (4.1.9)$$

и положим $h_0 = b_0 p \eta_0$. Если

$$h_0 \leq 1/2, \quad (1 - (1 - 2h_0)^{1/2})h_0^{-1}\eta_0 \leq r, \quad (4.1.10)$$

то последовательность Ньютона (4.1.7) с начальным приближением f_0 сходится к решению $\bar{f}$ уравнения $Bf = 0$ в $\overline{S}(f_0, r)$.

Основные недостатки метода Ньютона, как вычислительного средства, следующие:

- 1) чувствительность к выбору начального приближения, которая проявляется, даже в конечномерном случае, при этом часто теорема 6 дает неоправданно «пессимистические» условия сходимости;

- 2) необходимо на каждой итерации построения последовательности Ньютона вычислять производную Фреше;
- 3) необходимо на каждой итерации построения последовательности Ньютона решать линейное уравнение для обращения производной Фреше.

На практике процедуры расчета производной Фреше и ее обращения могут быть очень трудоемкими.

Для преодоления второй и третьей проблемы в ряде работ были предложены модификации метода Ньютона. В частности, в одной из модификаций используется последовательность, определяемая формулой

$$f_{n+1} = f_n - (B'(f_0))^{-1} B f_n, \quad n \geq 0, \quad (4.1.11)$$

и требуется только одно вычисление производной Фреше. При этом скорость сходимости уменьшается и становится геометрической.

Рандомизация и квази рандомизация метода Ньютона основана на применении метода (квази) Монте-Карло к обращению линейного оператора B' , входящего в (4.1.8). В конечномерном случае, когда $F(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))^T$, $B' \equiv F'$ есть матрица Якоби, и при каждом n задача сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Как неоднократно отмечалось, при определённых условиях рандомизация позволяет строить ПР-алгоритм решения такой системы. Если случайный процесс с дискретным временем получения последовательности приближений к точному решению будет стохастически устойчивым, то можно моделировать различные независимые реализации процесса на отдельных вычислительных устройствах («глобальный» или крупнозернистый параллелизм). Кроме полезного свойства параллелизма алгоритм позволяет также строить доверительные эллипсоиды для последовательных приближений к решению.

Проблема, которая возникает при наличии многих процессоров, состоит в следующем. Относительно малое число независимых испытаний на каждом из процессоров может привести к ухудшению порядка сходимости методов (1-й порядок) и к потере стохастической устойчивости. Большое число испытаний приводит к использованию параллелизма в основном при решении линейной задачи. В любом случае важно понимать существо проблемы. О рандомизации метода Ньютона см. [50] и [51].

Как обычно, метод Монте-Карло может быть эффективным, если нас удовлетворяет сравнительно грубое приближённое решение и s очень велико. Предполагая, что выполнены достаточные условия применимости метода Ньютона, (используем первые члены разложения в

ряд Тейлора и строим метод последовательных приближений:

$$x_i^{(l+1)} = f_i(X^{(l)}) + \sum_{j=1}^s \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(X^{(l)})(x_j^{(l+1)} - x_j^{(l)}), \quad (4.1.12)$$

$$i = 1, \dots, s, \quad l = 0, 1, \dots$$

При каждом l полученную систему уравнений для X^{l+1} решаем методом Монте-Карло или квази Монте-Карло, используя описанные ранее методы.

Выбор соответствующей модификации зависит от свойств матрицы $A = \left\| \frac{\partial f_i(X^l)}{\partial x_j} \right\|_{i,j=1}^s$. Если окажется, что $\|A\| > 1$, то необходимо использовать специальные приёмы введения псевдообуславливателя или применять рандомизованные методы вычисления определителей [52], а также случайный поиск (минимизация невязки).

Замечание (параллелизм). При фиксированном m используются параллельные технологии для решения систем линейных уравнений, описанные ранее. При определённых условиях (например, стохастическая устойчивость) вычисления по формулам (4.1.12) можно осуществлять на различных процессорах. Полученные оценки $\xi_i^{(m)}$ затем осредняются. Среднее при условии стохастической устойчивости распределено приближенно нормально, и может быть подсчитана эмпирическая дисперсия, но $E\xi_i^{(m)} \neq x_i^{(m)}$ ввиду наличия смещения, которое имеет порядок $O(1/N_1)$, где N_1 — число независимых испытаний, осуществляемых каждым процессором при решении линейных систем. Для простоты мы считаем это число одинаковым для каждого процессора. Следует иметь в виду, что «внешнее» осреднение (между k процессорами) уменьшает случайную ошибку в $\frac{1}{\sqrt{k}}$ раз, но сохраняет порядок систематической. Это означает, что N_1 должно заметно превосходить число процессоров для того, чтобы систематической погрешностью можно было пренебречь.

4.2. ПРИМЕРЫ

Пример 4.1. [61] Ниже приводится пример конструирования и исследования ПР-алгоритма решения конкретной прикладной задачи расчёта цены американского опциона. Это задача с подвижной границей. Она сводится к нелинейной краевой задаче для параболического уравнения в частных производных и достаточно трудна, чтобы служить иллюстрацией упомянутых выше подходов. Американский опцион является частным случаем класса ценных бумаг, цена которых зависит от пройденного пути, то есть нас интересует не только цена в конечный момент T , но и промежуточные состояния.

Стоимость акций, на которых построен опцион, обозначим через $S(t)$, а период существования опциона через $[0, T]$. Цена опциона удовлетворяет следующему уравнению в частных производных [53]:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\sigma^2 S^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial S^2} + rS \frac{\partial P}{\partial S} - rP = 0, \quad (4.2.1)$$

где t — время; S — цена акции; $P = P(S, t)$ — цена опциона; σ — постоянная волатильность; r — безрисковая ставка.

Предположения и ограничения, при которых это уравнение имеет место, можно найти в доступной литературе (например, [59]).

Наиболее известными двумя подходами, позволяющими устранить подвижную границу, являются специальная замена переменных и метод штрафных функций [55]. После замены переменных полученное нелинейное уравнение решают методом последовательной линеаризации (метод Ньютона).

Мы рассмотрим метод штрафных функций совместно с дискретизацией задачи, что сравнительно с методом Ньютона дает более простые алгоритмы.

Суть метода заключается в добавлении к уравнению в частных производных небольшого слагаемого, которое представляет собой непрерывную функцию $f(P)$, нелинейно зависящую от цены опциона P . При этом получается нелинейное дифференциальное уравнение с фиксированной областью определения. Как показано в работе [55], решение этого уравнение будет обладать свойствам аналитического решения задачи нахождения цены американского опциона при достаточной малости добавляемого слагаемого. Рассмотрим уравнение Блэка—Шоулса с такой добавкой:

$$\frac{\partial P_\varepsilon}{\partial t} + F + f_\varepsilon(P_\varepsilon) = 0 \quad (4.2.2)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} P(S, T) &= \max(K - S, 0), \\ \lim_{S \rightarrow \infty} P(S, t) &= 0, \\ P(0, t) &= K. \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Здесь индексация призвана подчеркнуть зависимость от ε . Справедлива следующая теорема [55], [56]:

Теорема 7. Пусть P — единственное решение уравнения Блэка—Шоулса, а P_ε — единственное решение уравнения (4.2.2) для любого $\varepsilon > 0$. Тогда $P_\varepsilon \rightarrow P$ в $L_\infty^{loc}(\bar{Q}_T)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, где $Q_T = [0, T] \times Q$, $Q \subset R$ — открытое и ограниченное.

Далее индекс ε будет опускаться. Пусть $0 < \varepsilon \ll 1$ и

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\sigma^2 S^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial S^2} + rS \frac{\partial P}{\partial S} - rP + f(P) = 0, \quad S \geq 0, \quad 0 \leq t < T, \quad (4.2.4)$$

где

$$f(P) = \frac{\varepsilon C}{P + \varepsilon - K + S}. \quad (4.2.5)$$

Здесь $C \geq rK$ — положительная константа.

Как уже отмечалось, при стремлении ε к нулю решение задачи (4.2.4), (4.2.5), (4.2.3) будет стремиться к цене американского опциона. Получившаяся задача является нелинейной с фиксированной областью определения.

Для численного решения задачи (4.2.4), (4.2.5), (4.2.3) могут быть использованы различные методы; их обзор можно найти в [3]. Мы рассмотрим метод конечных разностей.

Обратим внимание также на следующий интересный факт. При дискретизации мы переходим от задачи, где время представлено непрерывно, к задачам с дискретным временем. Рассматривая список временных моментов, когда опцион может быть исполнен, мы переходим, таким образом, к формальному рассмотрению так называемого бермудского опциона.

Для решения задачи (4.2.4), (4.2.5), (4.2.3) методом конечных разностей в области $S \geq 0$, $0 \leq t \leq T$, как и в [3], введем сетку:

$$\begin{aligned} \Delta S &= \frac{S_\infty}{M}, \quad \Delta t = \frac{T}{N}, \\ S_i &= i\Delta S, \quad i = 0, \dots, M, \\ t_j &= j\Delta t, \quad j = 0, \dots, N, \\ P_{i,j} &= P(S_i, t_j). \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

Полуневная разностная схема для уравнения (4.2.4) имеет вид

$$\begin{aligned} &\frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\Delta t} + \\ &+ \frac{(i\Delta S)^2 \sigma^2}{2} \frac{P_{i-1,j} - 2P_{i,j} + P_{i+1,j}}{(\Delta S)^2} + i\Delta S r \frac{P_{i+1,j} - P_{i-1,j}}{2\Delta S} - rP_{i,j} + \\ &+ \frac{\varepsilon C}{P_{i,j+1} + \varepsilon - K + i\Delta S} = 0, \quad i = 1 \dots M-1, \quad j = 0 \dots N-1, \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

$$\begin{aligned} P_{i,N} &= \max(K - i\Delta S, 0), \quad i = 1 \dots M-1, \\ P_{M,j} &= 0, \quad j = 0 \dots N-1, \\ P_{0,j} &= K, \quad j = 0 \dots N-1. \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

После перегруппировки слагаемых получим

$$\begin{aligned}
P_{i,j} = & \frac{i^2\sigma^2\Delta t - ri\Delta t}{2(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)}P_{i-1,j} + \frac{i^2\sigma^2\Delta t + ri\Delta t}{2(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)}P_{i+1,j} + \\
& + \frac{P_{i,j+1}}{(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)} + \frac{\Delta t\varepsilon C}{(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)(P_{i,j+1} + \varepsilon - K + i\Delta S)}, \\
i = & 1 \dots M-1, \quad j = 0 \dots N-1.
\end{aligned} \tag{4.2.9}$$

Заметим, что в общем эта система является нелинейной, однако на каждом шаге по времени получается линейная система вида

$$X_j = AX_j + F(X_{j+1}), \tag{4.2.10}$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & c_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & 0 & c_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & c_{M-2} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{M-1} & 0 \end{pmatrix}, \tag{4.2.11}$$

где

$$\begin{aligned}
a_i &= \frac{i^2\sigma^2\Delta t - ri\Delta t}{2(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)}, \\
c_i &= \frac{i^2\sigma^2\Delta t + ri\Delta t}{2(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)}, \\
S_i &= i\Delta S, \\
i &= 1, \dots, M-1,
\end{aligned} \tag{4.2.12}$$

$$F((x_1, x_2, \dots, x_{M-1})) = (f_1(x_1), f_2(x_2), \dots, f_{M-1}(x_{M-1}))^T, \tag{4.2.13}$$

$$\begin{aligned}
f_i(x_i) = & \frac{x_i}{(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)} + \frac{\Delta t\varepsilon C}{(x_i + \varepsilon - K + i\Delta S)(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)}, \\
i = & 1, \dots, M-1.
\end{aligned} \tag{4.2.14}$$

Таким образом, при каждом фиксированном j система (4.2.10) является системой линейных алгебраических уравнения (X_{j+1} — вычислено на предыдущем шаге, X_j — неизвестно). Последовательно решив N систем уравнений, начиная с j , равного $N-1$, и до 0, мы найдем цену опциона в начальный момент времени. Теперь мы перейдем к основному содержанию работы — применению стохастических методов и исследованию их устойчивости. Докажем следующую лемму.

Лемма 8. При каждом фиксированном j существует $\Delta t > 0$ такое, что спектральный радиус матрицы $|A|$ (4.2.11) меньше единицы.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Рассмотрим сумму модулей строки матрицы $|A|$:

$$|a_i| + |c_i| = \frac{\Delta t(|(i^2\sigma^2 - ri)| + i^2\sigma^2 + ri)}{2(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)}, \quad i = 1, \dots, M-1. \quad (4.2.15)$$

При фиксированном ΔS , уменьшая Δt , можно сделать сумму меньше единицы для любого i , сделав норму (в качестве нормы берётся максимум из сумм модулей элементов строк) матрицы $|A|$, а тем самым и её спектральный радиус, меньше единицы. Можно получить оценку для Δt :

$$\frac{\Delta t(|(i^2\sigma^2 - ri)| + i^2\sigma^2 + ri)}{2(1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t)} = \frac{\Delta t \max(i^2\sigma^2, ri)}{1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t} < 1. \quad (4.2.16)$$

Заметим, что неравенство

$$\frac{i^2\sigma^2\Delta t}{1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t} < 1 \quad (4.2.17)$$

выполнено для любых Δt и ΔS . Рассмотрим второе неравенство:

$$\frac{ri\Delta t}{1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t} < 1. \quad (4.2.18)$$

Напомним, что $1 \leq i \leq M$, поэтому

$$\frac{ri\Delta t}{1 + i^2\sigma^2\Delta t + r\Delta t} \leq \frac{rM\Delta t}{1 + \sigma^2\Delta t + r\Delta t} < 1. \quad (4.2.19)$$

После преобразований получим

$$\Delta t(r(M-1) - \sigma^2) < 1. \quad (4.2.20)$$

При $r(M-1) - \sigma^2 \leq 0$ предыдущее неравенство, а следовательно и (4.2.16), выполнены. Если же $r(M-1) - \sigma^2 > 0$, то для выполнения неравенства (4.2.16) достаточно следующего условия на Δt :

$$\Delta t < \frac{1}{r(M-1) - \sigma^2}. \quad (4.2.21)$$

■

Доказанная лемма означает, можно находить решение системы методом Монте-Карло (возможно также применение квази Монте-Карло).

В этом случае вычисления будут производиться по формуле

$$\xi_j = (\widetilde{I - A})^{-1} F(\hat{\xi}_{j+1}(N_{j+1})), \quad (4.2.22)$$

где волна означает, что соответствующий результат обращения матрицы и умножения её на вектор осуществляется посредством метода Монте-Карло, при этом $\hat{\xi}_{j+1}(N_{j+1})$ — среднее N_{j+1} испытаний на $(j + 1)$ -м слое. При переходе со слоя на слой мы будем иметь дело с двумя видами ошибок: случайной и детерминированной. При решении системы (4.2.10) используются несмещенные оценки, однако в силу нелинейности функции $F(X)$ будет возникать смещение при переходе со слоя на слой. Возьмем математическое ожидание от правой части (4.2.22):

$$\begin{aligned} E((\widetilde{I - A})^{-1} F(\hat{\xi}_{j+1}(N_{j+1}))) &= \\ &= E((\widetilde{I - A})^{-1}) E(F(\hat{\xi}_{j+1}(N_{j+1}))) = (I - A)^{-1} E(F(\hat{\xi}_{j+1}(N_{j+1}))). \end{aligned} \quad (4.2.23)$$

Первое равенство выполнено в силу того, что на разных слоях используются независимые траектории. Рассмотрим разложение $F(X)$ в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} F(\hat{\xi}_{j+1}(N_{j+1})) &= F\left(\frac{1}{N_{j+1}} \sum_{l=1}^{N_{j+1}} \xi_{j+1}^{(l)}\right) = \\ &= F(E\xi_{j+1}) + F'(E\xi_{j+1}) \left(\frac{1}{N_{j+1}} \sum_{l=1}^{N_{j+1}} \xi_{j+1}^{(l)} - E\xi_{j+1}\right) + \\ &\quad + \frac{1}{2} F''(E\xi_{j+1}) \left(\frac{1}{N_{j+1}} \sum_{l=1}^{N_{j+1}} \xi_{j+1}^{(l)} - E\xi_{j+1}\right)^2 + \dots \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

Возьмем математическое ожидание от левой и правой части полученного равенства, предварительно отметив, что $E\xi_{j+1}^{(l)} = E\xi_{j+1}$:

$$E(F(\hat{\xi}_{j+1}(N_{j+1}))) = F(E\xi_{j+1}) + F''(E\xi_{j+1}) \frac{E\xi_{j+1}^2 - (E\xi_{j+1})^2}{2N_{j+1}} + \dots, \quad (4.2.25)$$

где

$$F''(X) = \begin{pmatrix} f_1'' & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f_2'' & 0 & \cdots \\ \vdots & & f_3'' & \vdots \\ & & & \ddots \\ 0 & \cdots & & f_{M-2}'' & 0 \\ & & & 0 & f_{M-1}'' \end{pmatrix}, \quad (4.2.26)$$

$$f_i'' = \frac{\Delta t \varepsilon C}{(1 + i^2 \sigma^2 \Delta t + r \Delta t)(P_{i,j+1} + \varepsilon - K + i \Delta S)^3}, \quad i = 1, \dots, M-1. \quad (4.2.27)$$

В [55] было показано, что при $\Delta t \leq \varepsilon/C$ решение уравнения (4.2.10) удовлетворяет неравенству

$$P_{i,j} \geq \max(K - S_i, 0) \quad \forall i, j. \quad (4.2.28)$$

Оценим f_i'' :

$$\begin{aligned} f_i'' &\leq \frac{\Delta t \varepsilon C}{(1 + i^2 \sigma^2 \Delta t + r \Delta t)(\max(K - S_i, 0) + \varepsilon - K + i \Delta S)^3} \leq \\ &\leq \frac{\Delta t C}{(1 + i^2 \sigma^2 \Delta t + r \Delta t) \varepsilon^2} \leq \frac{1}{(1 + i^2 \sigma^2 \Delta t + r \Delta t) \varepsilon}. \end{aligned} \quad (4.2.29)$$

Из этого следует, что при достаточно больших N_j (порядка $1/\varepsilon$ и больше) смещением можно будет пренебречь.

Перейдем к рассмотрению случайной ошибки. При переходе по времени со слоя на слой эта ошибка может оставаться ограниченной, а может неограниченно расти с ростом N . Поэтому необходимо исследовать её поведение. Обозначим $\varepsilon_j = \xi_j - X_j$ — вектор-столбец случайных ошибок на каждом слое. Выразим $\text{cov} \varepsilon_j$ через $\text{cov} \varepsilon_{j+1}$ в удобной для дальнейшего анализа форме. Из (4.2.22) следует

$$X_j + \varepsilon_j = \widetilde{(I - A)}^{-1} (F(X_{j+1} + \varepsilon_{j+1})). \quad (4.2.30)$$

Напишем разложение функции F в ряд Тейлора:

$$F(X_j + \varepsilon_j) = F(X_j) + F'(X_j)\varepsilon_j + F''(X_j)\varepsilon_j^2 + \dots \quad (4.2.31)$$

Отметим, что при достаточно малых ε и Δt слагаемым $F''(X_j)\varepsilon_j^2$ и всеми последующими можно будет пренебречь, то есть $F(X_j + \varepsilon_j) \approx F(X_j) + F'(X_j)\varepsilon_j$. Положим также $\widetilde{(I - A)}^{-1} = (I - A)^{-1} + \delta$, где $E\delta = 0$. Перепишем равенство (4.2.30):

$$X_j + \varepsilon_j = ((I - A)^{-1} + \delta)(F(X_{j+1}) + F'(X_{j+1})\varepsilon_{j+1}). \quad (4.2.32)$$

Учитывая, что X_j удовлетворяет (4.2.10), получим для ε_j следующее выражение:

$$\varepsilon_j = \delta F(X_{j+1}) + (I - A)^{-1} F'(X_{j+1}) \varepsilon_{j+1} + \delta F'(X_{j+1}) \varepsilon_{j+1}, \quad (4.2.33)$$

и соответственно для ε_j^T , заметив прежде, что F' — диагональная матрица и следовательно $(F')^T = F'$:

$$\varepsilon_j^T = F(X_{j+1})^T \delta^T + \varepsilon_{j+1}^T F'(X_{j+1}) ((I - A)^{-1})^T + \varepsilon_{j+1}^T F'(X_{j+1}) \delta^T. \quad (4.2.34)$$

Методами, описанными в [6], можно прийти к

$$\|Y_L^j\| = (\mathcal{A} + \mathcal{D}) \|Y_L^{j+1}\| + \mathcal{F}_{j+1}, \quad (4.2.35)$$

где Y_L^j — векторизация матрицы $\text{cov} \varepsilon_j$; $\mathcal{A} = \|\alpha_{i_0, i_1} \alpha_{i_3, i_2}\|$ — кронекеровское произведение, $\mathcal{D} = \|f'_{i_1} E(\delta_{i_0, i_1} \delta_{i_3, i_2}) f'_{i_2}\|$ — матрицы $(M - 1)^2 \times (M - 1)^2$, i_0, i_1, i_2, i_3 меняются от 1 до $M - 1$, $\alpha_{l, k}$ — элементы матрицы $(I - A)^{-1} F'(X_{j+1})$; матрица $\mathcal{F}_{j+1}$ объединяет слагаемые, не зависящие от ε_{j+1} . При этом собственные векторы $\mathcal{A}$ есть $\varphi_i \varphi_j^T$, $i, j = 1, \dots, M - 1$, где φ_i — собственный вектор-столбец матрицы $(I - A)^{-1} F'$, а собственные числа $\mathcal{A}$ есть $\lambda_i \lambda_j$, $i, j = 1, \dots, M - 1$, где λ_i — собственные числа матрицы $(I - A)^{-1} F'$. Матрица $\mathcal{D}$ представляет собой произведение $\mathcal{M} \hat{F}$, где $\hat{F}$ — диагональная матрица с диагональю $\|f'_i f'_j\|_{(i, j)=(1, 1)}^{(M-1, M-1)}$, а элементы матрицы $\mathcal{M}$ есть ковариации вектора, составленного из элементов матрицы погрешностей δ . Элементы матрицы $\mathcal{M}$ имеют порядок $1/N_j$, где N_j — количество независимых траекторий на слое с номером j . Оценим f'_i , выражение для которого имеет вид

$$f'_i = \frac{1}{1 + i^2 \sigma^2 \Delta t + r \Delta t} \left(1 - \frac{\Delta t \varepsilon C}{(P_{i, j+1} + \varepsilon - K + i \Delta S)^2} \right); \quad (4.2.36)$$

найдем условие на Δt , при котором разность, стоящая в скобках, больше нуля:

$$1 - \frac{\Delta t \varepsilon C}{(P_{i, j+1} + \varepsilon - K + i \Delta S)^2} \geq 1 - \frac{\Delta t \varepsilon C}{(\varepsilon - K)^2} \geq 0, \quad (4.2.37)$$

откуда получаем условие

$$\Delta t \leq \frac{(\varepsilon - K)^2}{\varepsilon C}. \quad (4.2.38)$$

Таким образом, норма матрицы F' меньше единицы при Δt из (4.2.38).

Из (4.2.35) и вышесказанного вытекают следующие утверждения:

Утверждение 4.2.1. Для стохастической устойчивости алгоритма (4.2.22) необходимо и достаточно, чтобы максимум из модулей первых собственных чисел матриц $A + \frac{1}{N_j}M'$, $j = N - 1 \dots 1$ при любых натуральных N был меньше единицы.

Утверждение 4.2.2. Если первые собственные числа матриц $(I - A)^{-1}F'_j$ по модулю строго меньше единицы, то существует такой набор N_j , $j = N - 1, \dots, 1$, что при всех $N_k > N_j$ алгоритм (4.2.22) будет стохастически устойчивым.

Необходимо оценить первое собственное число матрицы $(I - A)^{-1}F'_j$. Матрицу F'_j можно представить в виде произведения диагональных матриц $\tilde{F}_1 \tilde{F}_2$ с элементами, равными соответственно

$$\frac{1}{1 + i^2 \sigma^2 \Delta t + r \Delta t} \quad \text{и} \quad 1 - \frac{\Delta t \varepsilon C}{(P_{i,j+1} + \varepsilon - K + i \Delta S)^2}, \quad i = 1, \dots, M - 1. \quad (4.2.39)$$

Далее,

$$(I - A)^{-1}F'_j = (\tilde{F}_1^{-1}(I - A))^{-1}\tilde{F}_2 = (I - \Delta t \tilde{A})^{-1}(I - \Delta t \tilde{F}), \quad (4.2.40)$$

где

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_{M-1} & c_{M-2} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{M-1} & b_{M-1} \end{pmatrix}, \quad (4.2.41)$$

$$\tilde{F} = \begin{pmatrix} \tilde{f}_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \tilde{f}_2 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \tilde{f}_3 & \dots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \tilde{f}_{M-2} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \tilde{f}_{M-1} \end{pmatrix}$$

$$a_i = \frac{i^2 \sigma^2 - ri}{2}, \quad b_i = -i^2 \sigma^2 - r, \quad c_i = \frac{i^2 \sigma^2 + ri}{2}, \quad (4.2.42)$$

$$\tilde{f}_i = \frac{\varepsilon C}{(P_{i,j+1} + \varepsilon - K + i \Delta S)^2}, \quad i = 1, \dots, M - 1.$$

При достаточно малых Δt можно считать $(I - \Delta t \tilde{A})^{-1} \approx I + \Delta t \tilde{A}$, следовательно

$$(I - \Delta t \tilde{A})^{-1}(I - \Delta t \tilde{F}) \approx (I + \Delta t \tilde{A})(I - \Delta t \tilde{F}) \approx I + (\tilde{A} - \tilde{F})\Delta t. \quad (4.2.43)$$

Если матрица $\tilde{A} - \tilde{F}$ отрицательно определённая, то при достаточно малых Δt первое собственное число матрицы $I + \Delta t(\tilde{A} - \tilde{F})$, а следовательно и матрицы $(I - A)^{-1}F'_j$, меньше единицы. Можно показать, что при $r > \sigma^2/3$ матрица $\tilde{A} - \tilde{F}$ отрицательно определённая. Также выполнение условия

$$\tilde{f}_i > \frac{(4i^2 + 4i + 1)\sigma^4 - (12i^2 + 12i + 6)\sigma^2 r - 3r^2}{4(i + 1)^2\sigma^2 + 4i^2\sigma^2 + 4r} \quad (4.2.44)$$

для любого i обеспечит отрицательную определённость. Это условие также легко проверять в процессе вычислений. Показать отрицательную определённость матрицы $\tilde{A} - \tilde{F}$ в общем случае не удаётся. Более того, в некоторых, далёких от реальных ситуаций, случаях возможно нарушение отрицательной определённости, что вызывает небольшие возмущения в поведении алгоритма, но сохраняет устойчивость в целом.

Ниже приведены результаты вычислений систем (4.2.10) методом Монте-Карло и детерминированным методом. Расчёты производились для следующих параметров: $T = 0.75$, $S_\infty = 100$, $M = 100$, $N = 700$, $\sigma \equiv 0.15$, $r \equiv 0.055$, $K = 35$, $\varepsilon = 0.001$, $C = 2$. На графиках (рис. 2 и 3) изображена цена опциона в зависимости от цены акции в момент времени $t = 0$. Количество моделируемых траекторий для оценки каждого узла сетки: 50 — для первого графика, 100 — для второго. Сплошная линия соответствует решению, полученному методом Монте-Карло, (нанесены средние значения оценок. Доверительный интервал достаточно мал — имеет порядок колебаний среднего и на графиках не изображён). Штриховая линия соответствует точно посчитанному детерминированным методом.

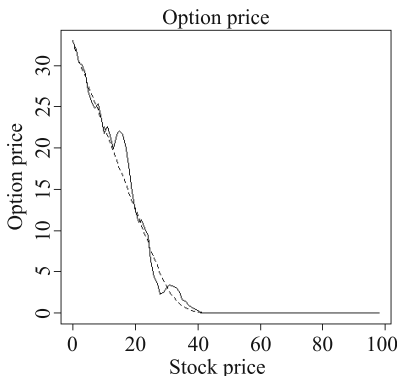


Рис. 2. Кол-во траекторий — 50

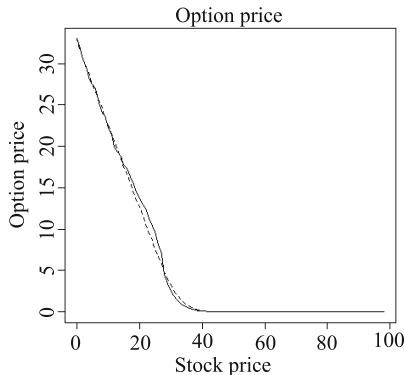


Рис. 3. Кол-во траекторий — 100

Также были проведены эксперименты для следующих параметров: $T = 0.75$, $S_\infty = 100$, $M = 100$, $N = 900$, $\sigma \equiv 0.7$, $r \equiv 10^{-4}$, $K = 35$, $\varepsilon = 10^{-4}$, $C = 2$. Количество моделируемых траекторий для оценки каждого узла сетки: 200 — для первого графика, 250 — для второго. Сплошная линия соответствует решению, полученному методом Монте-Карло, штриховая — точно посчитанному детерминированным методом.

Условие (4.2.44) очевидным образом может быть наиболее ограничительным при малых r . Случай $r = 0$ не реален, но интересно было проследить поведение алгоритма при малых r .

Следующие примеры ($r = 10^{-4}$) обнаруживают нарушение устойчивости (даже детерминированной!) в начальной области (наличие «горба» на графиках) и сравнительное увеличение статистической ошибки (рис. 4, 5).

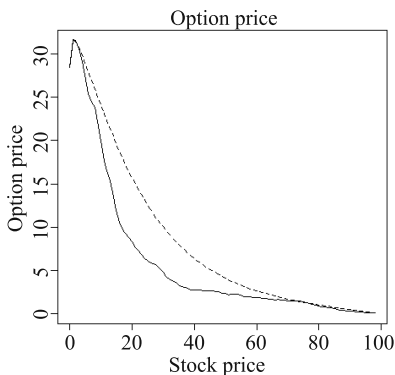


Рис. 4. Кол-во траекторий — 200

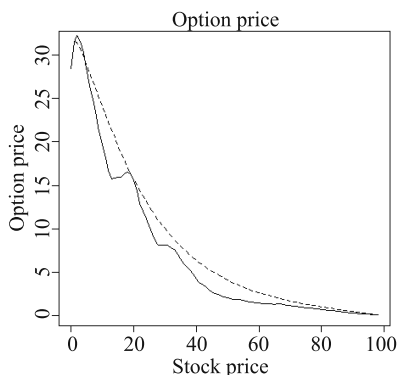


Рис. 5. Кол-во траекторий — 250

Следующим примером распараллеливания достаточно сложного алгоритма решения нелинейной задачи (создания ПР-алгоритма) является пример исследования спектра линейного оператора.

Пример 4.2. Рассматривается алгоритм вычисления спектра линейного оператора, представленный в [57]. Ряд важных прикладных задач связан с вычислением собственных значений линейного оператора. Среди них задачи исследования ядерных реакторов, массового обслуживания и ряд других. Предлагаемые методы используют скалярные произведения $(Y, A^m X)$, где A — линейный оператор действующий в линейном нормированном пространстве F вещественных функций (векторов) и $X \in F$, а Y принадлежит сопряженному к F пространству. Как следует из результатов главы 3, во многих случаях можно указать ПР-алгоритм метода Монте-Карло или квази Монте-Карло для вычисления $(Y, A^m X)$. В случае использования метода

Монте-Карло этот алгоритм основан на моделировании цепи Маркова и $(Y, A^m X)$ вычисляются со случайной ошибкой, имеющей, как правило, нормальное распределение. Спектр A будем предполагать дискретным. Собственные числа могут иметь комплексные значения и быть кратными. Они будут нумероваться в порядке убывания их модулей, $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n| \geq \dots$. Оператор может задаваться вычислительным алгоритмом. Задание его с помощью матрицы, ядра и др. не обязательно.

Обозначим через $\mu_1 = \lambda_1, \mu_2, \dots, \mu_l, \dots$ значения собственных чисел без учета их кратности, занумерованных в порядке убывания их модулей (для комплексно-сопряженных чисел порядок нумерации чисел с равным модулем безразличен), и назовем многочлен степени k

$$P_k(x) = \prod_{j=1}^k (x - \mu_j) \quad (4.2.45)$$

k -минимальным многочленом оператора A .

Если F — конечномерное пространство векторов размерности n и A — матричный $n \times n$ -оператор, то коэффициенты минимального многочлена A при известных итерациях находятся известным методом Крылова [58]. Очевидно, что при очень больших значениях степени минимального многочлена метод Крылова практически не применим. Тем более он не применим в случае счетного спектра оператора. Алгоритм вычисления k -минимального многочлена основан на лемме 9, которая приводится ниже с доказательством.

Рассматривается последовательность вещественных чисел

$$\xi_t = \sum_{k=1}^T a_k b_k^t, \quad |\xi_t| < \infty, \quad (4.2.46)$$

где a_k и b_k — числа (могут быть комплексные), все b_k различны,

$$|b_1| \geq |b_2| \geq \dots \geq |b_T|, \quad (4.2.47)$$

но могут быть равными по модулю, $T > 0$, может быть бесконечным, и в этом случае предполагается абсолютная сходимость ряда (4.2.46) (в последнем случае $|b_k| \leq 1$).

Лемма 9. Пусть ξ_t , $t = 1, 2, \dots$, заданы формулой (4.2.46) и пусть для некоторого L , $1 \leq L \leq T$ и возрастающей последовательности номеров t , $t = 1, 2, \dots$ при каждом t существует решение системы уравнений

$$\sum_{l=0}^L c_l^{(t)} \xi_{t+l+j} = 0, \quad j = 0, 1, \dots, L-1. \quad (4.2.48)$$

Тогда если

- (1) $b_k, k = 1, \dots, T$, удовлетворяет неравенствам (4.2.47), но $|b_L| > |b_{L+1}|, |b_L| > 0$,
(2) $a_k \neq 0, k = 1, \dots, L$,
(3) для некоторого $l = l_0, 0 \leq l_0 \leq L, c_{l_0}^{(t)} = 1, t=0,1,\dots$,
то существует предел

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c_l^{(t)} = c_l, \quad l = 0, 1, \dots, L, \quad (4.2.49)$$

и многочлен

$$Q(x) = \sum_{l=0}^L c_l x^l$$

имеет своими корнями числа $b_k, k = 1, \dots, L$:

$$Q(x) = c \prod_{k=1}^L (x - b_k), \quad c = \text{const.} \quad (4.2.50)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Обозначим $Q_t(x) = \sum_{l=0}^L c_l^{(t)} x^l$ и положим $l_0 = L$ ($c_L^{(t)} \equiv 1$), что не умаляет общности. Подставляя в (4.2.48) выражение (4.2.46) для ξ_{t+l+j} , имеем

$$\sum_{l=0}^L c_l^{(t)} \sum_{k=1}^T a_k b_k^{t+l+j} = \sum_{k=1}^T a_k b_k^{t+j} \sum_{l=0}^L c_l^{(t)} b_k^l = 0, \quad j = 0, \dots, L-1,$$

или

$$\sum_{k=1}^L a_k b_k^{t+j} Q_t(b_k) + \sum_{k=L+1}^T a_k b_k^{t+j} Q_t(b_k) = 0, \quad j = 0, \dots, L-1.$$

Заметим далее, что $Q_t(b_k)$ ограничены $|Q_t(b_k)| \leq M_1 < \infty, k = 1, 2, \dots$, в силу предположения о существовании решения системы (4.2.48) и условия $|b_k| < |b_L|$,

$k = L+1, L+2, \dots$ и $\sum_{k=L+1}^T |a_k| < M_2 < \infty$ (абсолютная сходимость ряда при $T \rightarrow \infty$).

Для каждого j разделим j -е равенство на $|b_L|^{t+j}$.

Имеем

$$\sum_{k=1}^L a_k Q_t(b_k) \frac{b_k^{t+j}}{|b_L|^{t+j}} = - \sum_{k=L+1}^T a_k Q_t(b_k) \frac{b_k^{t+j}}{|b_L|^{t+j}}, \quad j = 1, 2, \dots, L. \quad (4.2.51)$$

Совокупность полученных равенств можно рассматривать как систему уравнений относительно $a_k Q_t(b_k)$ с определителем $\det \|b_k^{t+j} / |b_L^{t+j}| \|_{k,j=1}^L$. При этом

$$\left| \sum_{k=L+1}^T a_k Q_t(b_k) \frac{b_k^{t+j}}{|b_L^{t+j}|} \right| \leq M_1 \cdot M_2 \cdot q^{t+j}, \quad q = \max_{L+1 \leq k \leq T} \left| \frac{b_k}{b_L} \right|.$$

Определитель системы при каждом t отличен от нуля (определитель Вандермонда), а её правая часть стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$. Таким образом, $a_k Q_t(b_k) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$, а так как $a_k \neq 0$, $k = 1, \dots, L$, получим

$\sum_{l=0}^L c_l^{(t)} b_k^l \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$. Поскольку все b_k различны (по предположению), то

многочлен $\sum_{l=0}^L c_l^{(t)} y^l$ кратных корней не имеет, и из существования предела $\lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^L c_l^{(t)} b_k^l = 0$ следует существование предела $\lim_{t \rightarrow \infty} c_l^{(t)} = c_l$, что и доказывает лемму. ■

Если A — линейный оператор в гильбертовом пространстве F , а X и Y — элементы F , то функционалы $(A^t X, Y)$, $t = 1, 2, \dots$ могут быть выбраны в качестве последовательности ξ_t , определяемой формулой (4.2.46). Если в разложении X и Y по элементам базиса F присутствуют представители всех инвариантных подпространств F , то b_k будут представлять все значения собственных чисел оператора A .

Доказанная лемма может служить источником алгоритмов для вычисления коэффициентов k -минимального многочлена оператора. При этом следует заметить следующее:

- при $T = L$ в случае матричного оператора вычислительный метод совпадает с методом Крылова вычисления коэффициентов минимального многочлена матрицы;
- лемма справедлива для вещественных чисел ξ_t , и реальные вычисления, вообще говоря, могут потребовать операции над числами с очень большим числом знаков.

Далее для случая матричного оператора $A = \|a_{ij}\|_{i,j=1}^n$ мы приведем ряд численных примеров, заимствованных из [57], на которых видны особенности поведения статистических погрешностей.

Если при некотором t вычислен (со случайной ошибкой) вектор $A^t X = (x_1^t, \dots, x_n^t)$, то $A^{t+1} X$ определяют с помощью многократного вычисления оценок, рассмотренных ранее. Например, оценки

$$\frac{x_{i0}^t a_{i0i1}}{p_{i0}^0 p_{i0i1}}, \quad (4.2.52)$$

где $\vec{p}^0 = (p_1^0, \dots, p_n^0)$ — вектор, согласованный с $A^t X$, а $\mathcal{P} = \|p_{ij}\|_{i,j=1}^n$ — стохастическая матрица, согласованная с A . Моделируется распределение $\vec{p}^0$ и переход от i_0 к i_1 с помощью матрицы $\mathcal{P}$. При очень большом n и относительно небольшой требуемой точности такой подход весьма эффективен.

Поскольку $\xi_t = (A^t X, Y)$ находятся со случайной ошибкой, случайную ошибку будут иметь и коэффициенты $c_i^{(t)}$, и определяемые как решение нелинейного алгебраического уравнения приближенные оценки $\hat{\lambda}_j$, $j = 1, \dots, L$, собственных чисел оператора A . Также ввиду нелинейности задачи $\hat{\lambda}_j$ будут иметь систематическую погрешность. Если число N_t независимых испытаний при оценке ξ_t относительно невелико, то изучение поведения ошибок у $\hat{\lambda}_j$ — очень трудная задача. При больших N_t работает асимптотическая теория; можно воспользоваться предельной теоремой (утверждение 9.3.1 на стр. 271 книги [49]), из которой следует, в частности, что систематическая погрешность имеет порядок $O(N^{-1})$, а случайная — $O(N^{-1/2})$, где $N = \min_t N_t$. Следовательно, систематическая ошибка может быть, начиная с некоторого N , пренебрежимо малой. Если смещением можно пренебречь, то вычислительная процедура оценки результирующей погрешности состоит в следующем.

При некотором фиксированном $t, t+1, \dots, t+L-1$ и N_t вычисляется M независимых оценок $\hat{\lambda}_j$ и по этим оценкам строится доверительный интервал для λ_j . Конечность дисперсии оценок (4.2.52) гарантирует их асимптотическую нормальность.

Замечание (относительно параллелизма). *Параллелизм при вычислении каждого ξ_t осуществляется очевидным образом. Получение каждой оценки $\hat{\lambda}_j$ или некоторой их частичной совокупности может быть поручено отдельному процессору. При этом следует иметь ввиду, что доверительный интервал, построенный по среднему M реализаций системы, как обычно уменьшится в $\sqrt{M}$ раз, но систематическая погрешность — среднее погрешностей каждой реализации — является средним систематический погрешностей каждой реализации и сохраняет порядок. Таким образом, порядок числа используемых процессоров не может превосходить $O(\sqrt{N})$. Особо следует отметить, что распараллеливание возможно при величине N , обеспечивающей правильный порядок получаемых оценок $\hat{\lambda}_j$.*

Метод показал себя безусловно эффективным при вычислении первых нескольких собственных чисел. Для матриц с нормой, большей единицы, требовалось масштабирование. В противном случае наблюдалась неустойчивость относительно ошибок округления.

Пусть дан линейный оператор A с дискретным спектром, собственные числа которого различны, но могут быть равны по модулю. Будем

моделировать случайные величины $\xi_m = (A^m X, Y)$ с помощью метода Монте-Карло, где X и Y — векторы, компоненты которых получены с помощью датчика случайных чисел. Выбирая длину окна L и составляя систему линейных уравнений

$$\begin{aligned} c_0 \xi_m + c_1 \xi_{m+1} + \dots + c_L \xi_{m+L} &= 0, \\ c_0 \xi_{m+1} + c_1 \xi_{m+2} + \dots + c_L \xi_{m+L+1} &= 0, \\ \vdots & \\ c_0 \xi_{m+L-1} + c_1 \xi_{m+L} + \dots + c_L \xi_{m+L+1} &= 0, \end{aligned} \quad (4.2.53)$$

находим значения чисел $\hat{c}_0, \hat{c}_1, \dots, \hat{c}_L$. Так как c_j должны быть известны с точностью до общего множителя, фиксируем $c_L = 1$. Решив уравнение вида

$$\lambda^L + c_{L-1} \lambda^{L-1} + \dots + c_0 = 0, \quad (4.2.54)$$

коэффициентами которого являются найденные c_j , получим собственные числа линейного оператора A .

Сложность метода заключается в выборе исходных параметров: L — длина окна, m — степень ξ_m , с которой начинаем строить систему сдвигов, и N — число испытаний в методе Монте-Карло при моделировании ξ_m .

При L , равным размерности матрицы, метод совпадает с методом Крылова, погрешность вычислений зависит только от погрешности метода Монте-Карло и параметр m можно взять равным 1.

Если же L меньше размерности матрицы, то возникает дополнительная погрешность, погасить которую можно с помощью увеличения значения параметра m , погрешность метода Монте-Карло также присутствует в этом случае.

Рассматривались матрицы различных порядков, для которых подсчитывались математическое ожидание и дисперсия (ниже обозначенного как σ) в группе экспериментов с одинаковыми исходными параметрами (размер выборки фиксировался и был равен 10 для всех испытаний с фиксированными исходными параметрами). Как показала практика, выбором X и Y с помощью датчика случайных чисел мы можем обеспечить ненулевые коэффициенты a_k в разложении векторов $\xi_m = (A^m X, Y) = \sum_{k=1}^T a_k \lambda_k^m$ на составляющие, что позволяет получить достоверные результаты.

Приведём сначала некоторые результаты *численных экспериментов*, в которых величины $(A^m X, Y)$ были вычислены без случайной ошибки.

Пример 4.2.1. Рассматривалась матрица восьмого порядка с вещественными собственными числами. Вычисления производились при различных значениях параметров L и m , где L — длина окна, а m —

степень матрицы, то есть $\xi_m = (A^m X, Y)$. Приведем результаты (таблица 4.1) с наилучшими значениями параметров. В левой колонке записаны точные собственные числа исследуемой матрицы, в последующих колонках — результаты применения алгоритма с параметрами L и m .

Таблица 4.1. Собственные числа матрицы 8-го порядка, найденные при различных значениях параметров L и m

Точные значения	Параметры $L; m$							
	8; 1	7; 1	6; 2	5; 5	4; 8	3; 14	3; 25	2; 14
30,1947	30,1947	30,1947	30,1947	30,1947	30,1947	30,1947	30,1947	30,1947
13,2645	13,2645	13,2645	13,2645	13,2645	13,2645	13,2645	13,2641	—
−8,2408	−8,2408	−8,2408	−8,241	−8,2405	−8,2414	−8,2455	—	—
6,0134	6,0134	6,0498	5,9697	5,9532	5,8677	—	—	—
−3,7765	−3,7765	−3,6329	−3,5384	−4,0049	—	—	—	—
3,7439	3,7439	4,3031	3,1941	—	—	—	—	—
−2,5051	−2,5051	−1,4452	—	—	—	—	—	—
1,3058	1,3058	—	—	—	—	—	—	—

Пример 4.2.2. Рассматривалась стохастическая матрица 10-го порядка, второе и третье собственные числа которой являются комплексно-сопряженными. Результаты показывают, что точность вычисления собственных чисел зависит от обоих параметров, причем, чем меньше длина окна L , тем больше должно быть значение m . Следует отметить, ситуация когда число L приближенно равно модулю двух комплексно-сопряженных чисел, нарушает условие (1) леммы, и последнее собственное число находится неверно, что и показывают приведенные ниже результаты (таблица 4.2).

Перейдем к случаям, когда ξ_t вычисляются со случайной ошибкой. Здесь и далее рассматривались примеры, где все ξ_t вычислялись с помощью метода Монте-Карло, и оценивалось второе собственное число. Для стохастических матриц задача актуальна, когда второе собственное число является комплексным.

Пример 4.2.3. Ставилась задача определить оптимальное соотношение между количеством итераций N , необходимых для нахождения ξ_m , и конечным результатом, то есть математическим ожиданием и среднеквадратичным отклонением второго собственного числа.

Рассматривалась стохастическая матрица пятого порядка, для которой фиксировались исходные вектора X, Y , длина окна L и m , исходя из точных значений ξ_m , полученных в работе [41]. Параметры с наилучшими результатами фиксировались, и вычисления производились по алгоритму, описанному выше, где ξ_m вычислялись рекурсивно

Таблица 4.2. Собственные числа матрицы 10-го порядка, найденные при различных значениях параметров L и m

Точные значения	Параметры $L; m$		
	9; 2	8; 4	7; 6
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
$-0.1466 + 0.0862i$	$-0.1465 + 0.0862i$	$-0.1465 + 0.0862i$	$-0.1465 + 0.0862i$
$-0.1466 - 0.0862i$	$-0.1465 - 0.0862i$	$-0.1465 - 0.0862i$	$-0.1465 - 0.0862i$
$-0.0420 + 0.1387i$	$-0.0418 + 0.1387i$	$-0.0418 + 0.1386i$	$-0.0418 + 0.1387i$
$-0.0420 - 0.1387i$	$-0.0418 - 0.1387i$	$-0.0418 - 0.1386i$	$-0.0418 - 0.1387i$
0.1397	0.1398	0.1398	0.1397
$-0.0561 + 0.0595i$	$-0.0495 + 0.0343i$	$-0.0633 + 0.0399i$	-0.0426
$-0.0561 - 0.0595i$	$-0.0495 - 0.0343i$	$-0.0633 - 0.0399i$	—
$0.0486 + 0.0236i$	0.0208	—	—
$0.0486 - 0.0236i$	—	—	—
6,8	5,10	4,13	3,16
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
$-0.1465 + 0.0862i$	$-0.1418 + 0.0882i$	$-0.1459 + 0.0730i$	$-0.1556 + 0.0898i$
$-0.1465 - 0.0862i$	$-0.1418 - 0.0882i$	$-0.1459 - 0.0730i$	$-0.1556 - 0.0898i$
$-0.0418 + 0.1387i$	$0.0059 + 0.1533i$	-0.0047	—
$-0.0418 - 0.1387i$	$0.0059 - 0.1533i$	—	—
0.1398	—	—	—
—	—	—	—
—	—	—	—
—	—	—	—
—	—	—	—

с помощью метода Монте-Карло с числом итераций равным N :

$$A = \begin{pmatrix} 0.0625 & 0.125 & 0.25 & 0.25 & 0.3125 \\ 0.3 & 0.05 & 0.15 & 0.1 & 0.4 \\ 0.09 & 0.18 & 0.27 & 0.136 & 0.318 \\ 0.21 & 0.36 & 0.105 & 0.26 & 0.053 \\ 0.12 & 0.04 & 0.24 & 0.28 & 0.32 \end{pmatrix}. \quad (4.2.55)$$

Матрица A — стохастическая, собственные числа которой равны

$$1.00000; \quad -0.04273 \pm 0.21713i; \quad 0.10905; \quad -0.05521.$$

При фиксированных X и Y , $L = 3$, $m = 2$ ($M = [m + 2*(L + 1) - 3] = 7$ — количество подряд полученных ξ_m , необходимых для реализации алгоритма) и применении ортогонализации получены следующие результаты (см. таблицу 4.3).

Величины ξ_m находятся рекурсивно, поэтому именно первые значения ξ_m должны находиться с наибольшей точностью. Практика показывает, в этом случае, при меньшей вычислительной сложности, погрешность метода меньше, чем при большей вычислительной сложности, но равном числе итераций на каждом шаге вычисления ξ_m (сравните четвертую строку таблицы со второй, первый столбец таблицы

Таблица 4.3. Зависимость погрешности второго собственного числа от числа испытаний в методе Монте-Карло

$N \times M$	$E\lambda_2$	σ_1	σ_2
$50\,000 \times 7$	$-0.04194 + 0.20610i$	0.00722	0.00279
$25\,000 \times 7 = 175\,000$	$-0.04688 + 0.20564i$	0.00545	0.00744i
$10\,000 \times 7$	$-0.05456 + 0.20218i$	0.03323	0.01393i
$50\,000 \times 3 = 150\,000$	$-0.04454 + 0.20522i$	0.00403	0.00704i
$5\,000 \times 7$	$-0.02406 + 0.21819i$	0.06061	0.02480i

показывает общее число итераций в методе Монте-Карло, необходимых для получения последовательности величин ξ_m).

Пример 4.2.4. Ставилась задача нахождения погрешности значения второго собственного числа от длины окна L и m — степень ξ_m , с которой начинаем строить систему сдвигов. Количество итераций в методе Монте-Карло для вычисления одного ξ_m фиксировалось ($N = 250000$). Результаты отображены в таблице 4.4. Через σ_1 и σ_2 обозначены средние квадратичные отклонения (на одно испытание) вещественной и мнимой части λ_2 соответственно.

Таблица 4.4. Зависимость погрешности 2-го собственного числа от длины окна L и степени m

$L; m$	$E\lambda_2$	σ_1	σ_2
3; 2	$-0.04216 + 0.21949i$	0.0039	0.0056i
3; 3	$-0.03665 + 0.22852i$	0.00418	0.0164i
3; 1	$-0.04136 + 0.23641i$	0.01065	0.0223i
4; 1	$-0.04556 + 0.21075i$	0.00625	0.00598i

Наилучшими параметрами для матрицы пятого порядка оказались $L = 3$, $m = 2$. Как видно из таблицы, с уменьшением длины окна L необходимо увеличивать число m , но это увеличение не должно быть слишком большим, иначе это приведет к обратным результатам. Параметры $L = 3$, $m = 3$ немного ухудшают вычисление второго собственного числа. При увеличении значения параметра m возникает дополнительная погрешность метода, которая растет не линейно и с трудом может быть найдена аналитически. Результаты данного эксперимента показывают, что выбор длины L и m должен быть «сбалансирован».

Пример 4.2.5. Ставилась задача нахождения второго собственного числа для матриц, не являющихся стохастическими. Практика показала, что в этом случае погрешность метода Монте-Карло с ростом m растет экспоненциально. В таких ситуациях необходимо нормировать матрицу и свести её модуль к стохастической матрице. Известно, что неотрицательная матрица A , имеющая положительное максимальное характеристическое число $r > 0$ и соответствующий этому числу

положительный собственный вектор $z = (z_1, z_2, \dots, z_n) > 0$, простыми линейными преобразованиями может быть сведена к стохастической матрице $P = \frac{1}{r} Z^{-1} A Z$, где Z — диагональная матрица. Собственные числа исходной матрицы могут быть легко восстановлены по собственным числам полученной стохастической матрицы.

Результаты метода, применяемого к матрице без нормировки и с нормировкой, приведены в таблице 4.5.

Рассматривалась матрица

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 4 & 5 \\ 6 & 1 & 3 & 2 & 8 \\ 2 & 4 & 6 & 3 & 7 \\ 4 & 7 & 2 & 5 & 1 \\ 3 & 1 & 6 & 7 & 8 \end{pmatrix} \quad (4.2.56)$$

с собственными числами

$$20.98978; -0.66060 \pm 4.51289i; -0.97786, 2.3093.$$

Таблица 4.5. Подсчет второго собственного числа для нестохастической матрицы

$N = 50\,000$	$E\lambda_2$	σ_1	σ_2
без нормировки	$-0.48443 + 4.54973i$	0.26874	0.29891i
с нормировкой	$-0.65834 + 4.825788i$	0.03436	0.11946i

Пример 4.2.6. Так как одной из важных областей приложений являлось массовое обслуживание, интерес данной работы состоял в определении погрешности метода для матриц больших размерностей. Рассматривались простейшие системы массового обслуживания с одним прибором, время обслуживания которых распределено по показательному закону с параметром $\mu(t)$ и интенсивностью поступающего потока $\lambda(t)$. Для генерирования матрицы перехода такого рода использовался датчик случайных чисел *RAND*, который генерирует числа от 0 до 1: $\lambda = 0,21 + 0,2 * RAND$ и $\mu = 0,45 + 0,2 * RAND$. Для системы такого типа с десятью возможными состояниями при фиксированном значении $N = 50000$ (число испытаний в методе МК) хорошие результаты для λ_2 были получены уже при длине окна $L = 3$.

Собственные числа сгенерированной матрицы перехода равны:

$$1.00000; \mathbf{0.89539}; 0.78407; -0.67308; -0.59884; \\ 0.57361; -0.42364; 0.36718; -0.42364; 0.05796.$$

Результаты, полученные в результате применения рассматриваемого метода, отображены в таблице 4.6.

Таблица 4.6. Подсчет второго собственного числа
для СМО с 10 состояниями

$L; m$	$E\lambda_2$	σ
3; 16	0.89059	0.01848
3; 6	0.92924	0.01310
2; 25	0.88163	0.04796

Для системы массового обслуживания подобного типа, но с количеством состояний равным 20 также были получены хорошие результаты (таблица 4.7). Фиксировалось значение $N = 50000$, вектора X, Y . Точное значение второго собственного числа $\lambda_2 = \mathbf{0,96112}$.

Таблица 4.7. Подсчет второго собственного числа
для СМО с 20 состояниями

$L; m$	$E\lambda_2$	σ
3; 16	0.96201	0.02255
3; 6	0.96102	0.01443
2; 25	0.96894	0.01460

Вопрос устойчивости данного метода при увеличении погрешности метода Монте-Карло также был изучен для матрицы большого порядка $n = 20$ (см. таблицу 4.7). Кроме того, был рассмотрен алгоритм, использующий в своей основе метод наименьших квадратов [41].

Алгоритм состоит в следующем.

1⁰. Вычисляются $\xi_t = ((A^t(A - \lambda I)X, Y)$ с помощью метода Монте-Карло.

2⁰. Выбирается длина окна l и образуются линейные комбинации с элементами векторов

l -вложений $Z_i = (\xi_i, \dots, \xi_{i+l-1})$, с коэффициентами $c_0, c_1, \dots, c_{l-1}$, которые находятся из условия

$$\sum_{t=k}^{k+m} (c_0 \xi_t + c_1 \xi_{t+1} + c_2 \xi_{t+2} + \dots + c_{l-1} \xi_{t+l-1})^2 = \min.$$

Для этого решается система из l уравнений:

$$\begin{aligned} c_0 \sum_{t=k}^{k+m} \xi_t^2 + c_1 \sum_{t=k}^{k+m} \xi_t \xi_{t+1} + \dots + c_L \sum_{t=k}^{k+m} \xi_t \xi_{t+L} &= 0 \\ c_0 \sum_{t=k}^{k+m} \xi_t \xi_{t+1} + c_1 \sum_{t=k}^{k+m} \xi_{t+1}^2 + \dots + c_L \sum_{t=k}^{k+m} \xi_{t+1} \xi_{t+L+1} &= 0 \\ \dots &\dots \dots \\ c_0 \sum_{t=k}^{k+m} \xi_t \xi_{t+L-1} + c_1 \sum_{t=k}^{k+m} \xi_{t+1} \xi_{t+L-1} + \dots + c_L \sum_{t=k}^{k+m} \xi_{t+L-1}^2 &= 0. \end{aligned} \quad (4.2.57)$$

Обозначим найденные коэффициенты $\hat{c}_0, \hat{c}_1, \dots, \hat{c}_{l-1}$.

3⁰. Составляется многочлен с найденными коэффициентами:

$$Q(\lambda) = c_0 + c_1\lambda + c_2\lambda^2 + \dots + c_{l-1}\lambda^{l-1}.$$

Таблица 4.8. Таблица сравнения двух алгоритмов

Алгоритм 1 $L; m; N$	$E\lambda_2$	σ	Алгоритм 2 $L; m; k; N$	$E\lambda_2$	σ
3; 16; 50 000	0.94333	0.02189	4; 25; 15; 50 000	0.95698	0.02380
3; 16; 25 000	0.96683	0.02573	4; 25; 15; 25 000	0.96614	0.02524
3; 16; $N = 10\ 000$	0.92884	0.04781	4; 25; 15; 10 000	0.96798	0.03798

Корни многочлена являются 2-м, 3-м ... $(l-1)$ -м собственными числами оператора A .

Данный алгоритм оказывается более устойчив к случайным ошибкам и должен использоваться в случаях недостаточной точности вычисления ξ_t , $n=20$, $\lambda_2=0,95795$.

Как видно из приведённых примеров, предлагаемое обобщение метода Крылова может быть эффективным для определённого круга задач. Как обычно, случай близких собственных чисел может представлять значительные вычислительные трудности.

Как и ранее, в нелинейных задачах мы различаем «внутренний» параллелизм — при вычислении скалярных произведений, и «внешний», позволяющий при различных значениях параметров (множеств псевдо- или квазислучайных чисел) решать задачу полностью на различных вычислительных устройствах. Это позволяет, кроме всего прочего, строить доверительный эллипсоид для решения задачи.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ермаков С. М.* Параметрически разделимые алгоритмы // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 1, вып. 4. 2010. С. 25–31.
- [2] *Bailey, David H., Borwein, Peter B., Plouffe, Simon.* On the Rapid Computation of Various Polylogarithmic Constants // Mathematics of Computation. Vol. 66, N 218. 1997. P. 903–913.
- [3] *Кейперс Л., Хидерпейтер Г.* Равномерное распределение последовательностей. М.: Наука, 1985. 408 с.
- [4] *Hsu L. C.* A general approximation method of evaluating multiple integrals // Tohohi math. J. 1957. Vol. 9. N 1. P. 45–55.
- [5] *Ермаков С. М.* О мультипликативном датчике случайных чисел // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 1. 2003. Вып. 3, № 17. С. 23–30.
- [6] *Ермаков С. М.* Метод Монте-Карло в вычислительной математике. Вводный курс. СПб.: «Невский Диалект»; М.: «Бином», 2009. 192 с.
- [7] *Ермаков С. М.* Метод Монте-Карло и смежные вопросы. 2-е изд. М.: Наука, 1975. 472 с.
- [8] *Fishman G. S.* Monte Carlo Concept, Algorithms and applications. Springer, 1996. 698 p.
- [9] *Gerlovina V., Nekrutkin V.* Asymptotical behavior of linear congruential generators // Monte Carlo Methods and Appl. 2005. Vol. 11, N 2. P. 135–162.
- [10] *Matsumoto M., Nishimura T.* Mersenne Twister A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator // ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation. 1998. N 8. P. 3–30.
- [11] *Panneton F., L'Ecuyer P.* Improved Long-Period Generators Based on Linear Recurrences Modulo 2 // ACM Transactions on Mathematical Software. 2006. Vol. 32, N 1. P. 1–16.
- [12] *Walker A. J.* New Fast method for generating discrete random numbers with arbitrary frequency distributions // Elektronik Letters. 1974. Vol. 10. P. 127–128.
- [13] *Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E.* Equations of state calculations by fast computing machines // Journal of Chemical Physics. Vol. 21. 1953. P. 1087–1091.
- [14] *Hastings W. K.* Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications. Biometrika. 1970. N 57. P. 97–109.

- [15] *Kendall W.S., Liang F., Wang J.S.* Markov Chain Monte Carlo: Innovations and Applications. World Scientific Publishing Company. 2005. 239 p.
- [16] *Tsybakov A.* Adaptive estimation of the mode of a multivariate density // J. of nonparametric statistics. Vol. 17. 2009. N 1. P. 83–105.
- [17] *Цыбаков А. Б.* Рекуррентное оценивание моды многомерного распределения // Проблемы передачи информации. 1990. Т. 26. Вып. 1. С. 38–45.
- [18] *Ермаков С. М., Мисов Т.* Моделирование Δ^2 -распределения // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1. 2005. Вып. 4. С. 53–60.
- [19] *Ermakov S.M., Schwabe R.* On Randomizing Estimators in Linear Regression Models // Freie Universitaet Berlin Verlag, Serie A – Mathematik. 1999. N 4. P. 7–10.
- [20] *Ермаков С. М., Леора С. Н.* Метод Метрополиса в задачах поиска экстремума // Математические модели. Теория и приложения: Сб. Вып. 11. СПб.: Изд-во ВВМ, 2010. С. 72–82.
- [21] *Price K. V., Storn R. M., Lampinen J. A.* Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization. Springer, 2005. 538 p.
- [22] *Wynn H. P.* (1970). The sequential generation of D-optimum experimental designs // The Annals of Mathematical Statistics. 1970. Vol. 41, N 5. P. 1655–1664.
- [23] *Ченцов Н. Н.* Оценка неизвестной плотности распределения по наблюдениям. ДАН СССР. 1962. № 147. I. С. 45–48.
- [24] *Ермаков С. М., Расулов А. С., Бакоев, Веселовская А. З.* Избранные алгоритмы метода Монте-Карло. Ташкент: Изд-во Ташкентского гос. ун-та, 1992. 132 с.
- [25] *Михайлов Г. А., Войтишек А. В.* Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Академия, 2006. 367 с.
- [26] *Хисамутдинов А. И.* Единичный класс оценок для вычисления по методу Монте-Карло функционалов от решения интегрального уравнения 2-го рода // ЖВМ и МФ. 1970. Вып. 10. № 5. С. 1269–1280.
- [27] *Baudet G. M.* Asynchronous iterative methods for multiprocessors // Journal of the ACM. Vol. 25, N 2. April 1978. P. 226–244.
- [28] *Вагнер В., Ермаков С. М.* Стохастическая устойчивость и параллелизм метода Монте-Карло // ДАН. 2001. Т. 379, № 4. С. 439–441.
- [29] *Ermakov S.M., Wagner W.* Monte Carlo difference schemes for the wave equations // Monte Carlo Methods and Appl. 2002. Vol. 8. N 1. P. 1–29.
- [30] *Evans D. H.* Applied Multiplex Sampling // Technometrics. 1963. Vol. 5, N 3. P. 341–359.
- [31] *Ермаков С. М., Адамов А. В.* О стохастической устойчивости метода Монте-Карло (случай операторов) // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1, вып. 2. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2004. С. 3–8.

- [32] *Михайлов Г. А., Медведев И. Н.* Оптимизация весовых алгоритмов статистического моделирования: научное издание. Новосибирск: Омега Принт, 2011. 302 с.
- [33] *Radon J.* Cur mehanischen kubatur // Monatshefte für mathematik. 1948. Vol. 52, N 4. P. 286–300.
- [34] *Мысовский И. П.* Интерполяционные кубатурные формулы. М.: Наука, 1981. 336 с.
- [35] *Мысовский И. П.* Лекции по методам вычислений. М.: Физматгиз, 1962. 342 с.
- [36] *Соболев С. Л.* Введение в теорию кубатурных формул. М.: Наука, 1974. 808 с.
- [37] *Коробов Н. М.* Теоретико-числовые методы в приближенном анализе. М.: Физматгиз, 1963. 224 с.
- [38] *Niederreiter H.* Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods. CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, 63. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1992. 244 p.
- [39] *Соболь И. М.* Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. М.: Наука, 1969. 288 с.
- [40] *Liu J. S.* Monte Carlo strategies in scientific Computing. Springer, 2003. 359 p.
- [41] *Ермаков С. М., Видяева К. О.* Об оценке спектра линейного оператора // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1. 2012. Вып. 1. С. 11–17.
- [42] *Некруткин В. В.* Прямая и сопряженная схема Неймана—Улама для решения нелинейных интегральных уравнений // ЖВМ и МФ. 1974. Вып. 14. № 6. С. 1409–1415.
- [43] *Ermaikov S. M., Kaloshin I.* Solving the Nonlinear Algebraic Equations with Monte Carlo Method // Advances in Stochastic Simulation Methods. Birkhauser: Boston-Basel-Berlin, 2000. P. 3–15.
- [44] *Ермаков С. М., Калашин И. В.* Метод Монте-Карло для решения систем уравнений с квадратичной нелинейностью // Нелинейные динамические системы / под ред. д-ра физ.-мат. наук, проф. Г. А. Леонова. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2003. Вып. 5.
- [45] *Расулов А. С.* Метод Монте-Карло для решения нелинейных задач. Ташкент: ФАН, 1992. 104 с.
- [46] *Ермаков С. М., Москалева Н. М.* Ветвящиеся процессы и уравнение Больцмана. Вычислительные аспекты // Вестн. ЛГУ. Сер. 1. 1987. Вып. 3(15). С. 38–43.
- [47] *Михайлов Г. А.* Весовые методы Монте-Карло. Новосибирск, 2000. 248 с.
- [48] *Ермаков С. М., Серезина В. Г.* Об алгоритмах обобщенного интегрирования при решении нелинейных уравнений. Деп. в ВИНТИ 02.09.83 N 5021-83.

- [49] Уилкс С. Математическая статистика. М.: Наука, 1967. 632 с.
- [50] Halton J. H. Sequential Monte Carlo techniques for solving non-linear systems // Monte Carlo Methods And Applications. 2006. Vol. 12. N 2. P. 113–141.
- [51] Тимофеев К. А. Об одном классе методов Монте-Карло для решения уравнений с квадратичной нелинейностью уравнений // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 10. Вып. 3. 2008. С. 23–28.
- [52] Ермаков С. М., Карюкин В. В., Кашистанов Ю. Н. Алгоритмы метода Монте-Карло для решения линейных уравнений в случае $\rho(|k|) \geq 1$ // Сб. VII Всесоюзное совещание «Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике». Новосибирск, 1985. С. 121–124.
- [53] Black F., Scholes M. The Pricing of Options and Corporate Liabilities // Journal of Political Economy. 1973. Vol. 81. С. 637–654.
- [54] Duffy D. Finite difference methods in financial engineering: a partial differential equation approach // John Wiley & Sons Ltd. 2006. 423 p.
- [55] Zvan R., Forsyth P. A., Vetzal K. R. Penalty methods for american options with stochastic volatility // Journal of Computational and Applied Mathematics, N 91. 1998. P. 199–218.
- [56] Nielson B. F., Skavhaug O., Tvelto A. Penalty and front-fixing methods for the numerical solution of American option problems // J. Comp. Finan, N 4. 2002.
- [57] Видяева К. О., Ермаков С. М. К обобщению метода Крылова вычисления коэффициентов минимального многочлена // ЖВМ и МФ. 2013. Т. 53, № 5. С. 1–9.
- [58] Крылов А. Н. О численном решении уравнения, которым в технических вопросах определяются частоты малых колебаний материальных систем // Известия АН СССР. Отделение математических и естественных наук. 1931. Сер. VII, № 4. С. 491–539.
- [59] Люю Ю. Д. Методы и алгоритмы финансовой математики. М.: Бином; Лаборатория знаний, 2007. 751 с.
- [60] Антонов А. А., Ермаков С. М. Эмпирическая оценка погрешности квази Монте-Карло вычислений // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 1. Вып. 1. 2014. С. 3–11.
- [61] Дмитриев А. В., Ермаков С. М., Ермаков К. С. Параллельный Монте-Карло метод оценки американских опционов // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 1. Вып. 1. 2013. С. 72–81.

ЧАСТЬ II

МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (БЕССЕТОЧНЫЕ МЕТОДЫ)

ВВЕДЕНИЕ

В основе применения методов Монте-Карло при решении краевых задач для уравнений в частных производных лежит представление этих решений в виде интегралов по вероятностным мерам, что сразу предполагает возможность создания ПР-алгоритмов их вычисления. Одно из самых известных представлений связано с континуальными интегралами. Решение задачи представляется в виде математического ожидания функционала от траектории марковского случайного процесса. Одним из возможных подходов к построению оценок является использование приближений случайного процесса, полученные путем решения стохастического дифференциального уравнения. Наиболее развитый метод такого типа носит название *многосеточный метод Монте-Карло* (Multilevel Monte Carlo Method, [1, 2]). Хорошо разработаны статистические методы, связанные с решением систем линейных уравнений, полученных в результате дискретизации дифференциального уравнения. О методах такого рода шла речь в I части.

Мы рассматриваем так называемые «бессеточные методы», связанные с построением статистических оценок на траекториях цепей Маркова с дискретным временем. Их основу составляет схема Неймана—Улама для решения интегральных уравнений второго рода. Такие методы естественно называть *методами случайных блужданий* (Random Walks Methods). Если интегральное уравнение получается на основе уравнений теории потенциала, то говорят об алгоритмах случайного блуждания по границе. Если интегральное уравнение получено из теоремы о среднем значении, то соответствующее блуждание происходит внутри области.

В 5-й главе рассматриваются алгоритмы статистического моделирования для решения задачи Коши и первой краевой задачи для параболического уравнения второго порядка, в основном с переменными коэффициентами.

В 6-й главе рассматриваются алгоритмы статистического моделирования для решения краевых задач для эллиптических уравнений второго порядка как с переменными, так и с постоянными коэффици-

ентами в пространстве R^n , где $n > 2$. Для первой краевой задачи исследуются, в основном, блуждания внутри области, а для второй краевой задачи — блуждания по границе области. Как и в первой главе, задачи рассматриваются в классической постановке, то есть граница области и функции, входящие в уравнение, предполагаются достаточно гладкими и ограниченными.

Глава 5

СТАТИСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

5.1. НЕОБХОДИМЫЕ СВЕДЕНИЯ О ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЯХ

В качестве основного источника сведений о параболических уравнениях мы используем монографию [3], поэтому стараемся придерживаться используемых в ней обозначений и терминологии.

Формула

$$L = L(x, t, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t}) = \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^n a_i(x, t) \frac{\partial}{\partial x_i} + a_0(x, t) \quad (5.1.1)$$

определяет параболический оператор в области $D_{n+1}^{(T)} = R^n \times (0, T)$ или в области $Q_T = D \times (0, T)$, где D — ограниченная область в пространстве R^n с границей $\Gamma \in H^{1+\beta}$, $0 \leq \beta < 1$. Коэффициенты оператора принадлежат классу функций $H^{\alpha, \frac{\alpha}{2}}(\overline{D_{n+1}^{(T)}})$, $0 \leq \alpha < 1$. Матрица коэффициентов при старших производных предполагается симметричной, а ее собственные числа лежат в фиксированном отрезке $[\nu, \mu]$, $\nu > 0$. Нас интересуют решения уравнения

$$L \left(x, t, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t} \right) u(x, t) = f(x, t) \quad (5.1.2)$$

или функционалы от них.

5.1.1. Фундаментальное решение параболического уравнения

При сделанных предположениях существует фундаментальное решение $Z(x, y, t, \tau)$, удовлетворяющее уравнению

$$L\left(x, t, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t}\right) u = \delta(x - y)\delta(t - \tau), \quad (5.1.3)$$

ограниченное при $|x| \rightarrow \infty$.

Фундаментальное решение $Z(x, y, t, \tau)$ может быть представлено в виде функционала от решения интегрального уравнения Вольтерра. Фиксируем точку (y, τ) . Пусть $A(y, \tau)$ — матрица, составленная из старших коэффициентов $a_{ij}(y, \tau)$ оператора L , $A^{(i,j)}(y, \tau)$ — элементы обратной матрицы $A^{-1}(y, \tau)$. Рассмотрим функцию Z_0 , которая при $t > \tau$ определяется равенством

$$\begin{aligned} Z_0(x - y, y, t, \tau) &= \\ &= \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(y, \tau))^{\frac{1}{2}}} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{4(t - \tau)} \sum_{i,j=1}^n A^{(i,j)}(y, \tau)(x_i - y_i)(x_j - y_j)\right). \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

При $t < \tau$ функция $Z_0(x - y, y, t, \tau) = 0$.

Функция Z_0 удовлетворяет неравенству

$$Z_0(x - y, y, t, \tau) \leq \left(\frac{\mu}{\nu}\right)^{\frac{n}{2}} Z_1(x - y, t - \tau), \quad (5.1.5)$$

где

$$Z_1(x - y, t - \tau) = \frac{1}{[4\pi\mu(t - \tau)]^{\frac{n}{2}}} \exp\left(-\frac{|x - y|^2}{4\mu(t - \tau)}\right).$$

Фундаментальное решение Z можно представить в виде

$$Z(x, y, t, \tau) = Z_0(x - y, y, t, \tau) + \int_{\tau}^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) Q(z, y, \lambda, \tau) dz, \quad (5.1.6)$$

где функция Q является решением уравнения Вольтерра:

$$Q(x, y, t, \tau) + \int_{\tau}^t d\lambda \int_{R^n} K(x, z, t, \lambda) Q(z, y, \lambda, \tau) dz + K(x, y, t, \tau) = 0, \quad (5.1.7)$$

а функция K определена равенством

$$K(x, z, t, \lambda) = \sum_{i,j=1}^n [a_{i,j}(z, \lambda) - a_{i,j}(x, t)] \frac{\partial^2 Z_0(x - z, z, t, \lambda)}{\partial x_i \partial x_j} + \\ + \sum_{i=1}^n a_i(x, t) \frac{\partial Z_0(x - z, z, t, \lambda)}{\partial x_i} + a_0(x, t) Z_0(x - z, z, t, \lambda). \quad (5.1.8)$$

Существуют положительные постоянные C и c , такие что при $0 \leq \tau < t$

$$|K(x, y, t, \tau)| \leq c(t - \tau)^{-\frac{n+2-\alpha}{2}} \exp \left(-C \frac{|x - y|^2}{t - \tau} \right). \quad (5.1.9)$$

Пусть $K_1(x, y, t, \tau) = K(x, y, t, \tau)$. Для повторных ядер

$$K_m(x, y, t, \tau) = \int_{\tau}^t d\lambda \int_{R^n} K(x, z, t, \lambda) K_{m-1}(z, y, \lambda, \tau) dz, \quad (5.1.10) \\ m = 2, 3, \dots$$

при $0 \leq \tau < t$ по индукции доказывается оценка

$$|K_m(x, y, t, \tau)| \leq c^m \left(\frac{\pi}{C} \right)^{\frac{n(m-1)}{2}} \frac{\Gamma^m \left(\frac{\alpha}{2} \right)}{\Gamma \left(\frac{m\alpha}{2} \right)} (t - \tau)^{-\frac{n-2+m\alpha}{2}} \times \\ \times \exp \left(-C \frac{|x - y|^2}{t - \tau} \right), \quad (5.1.11)$$

где $\Gamma(\alpha)$ обозначает гамма-функцию.

Из оценки (5.1.11) следует, что ряд Неймана для уравнения (5.1.7) сходится равномерно при $t - \tau > 0$,

$$Q(x, y, t, \tau) = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m K_m(x, y, t, \tau), \quad (5.1.12)$$

и справедливо неравенство

$$|Q(x, y, t, \tau)| \leq c_1(t - \tau)^{-\frac{n+2-\alpha}{2}} \exp \left(-C \frac{|x - y|^2}{t - \tau} \right). \quad (5.1.13)$$

Для уравнений с постоянными коэффициентами фундаментальное решение имеет вид

$$Z(x - y, y, t, \tau) = \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}}} \times$$

$$\times \exp \left(-\frac{1}{4(t-\tau)} \sum_{i,j=1}^n A^{(i,j)}(x_i - y_i - a_i(t-\tau)) \right. \\ \left. (x_j - y_j - a_j(t-\tau)) - a_0(t-\tau) \right). \quad (5.1.14)$$

При $t < \tau$ функция $Z(x - y, y, t, \tau) = 0$.

5.1.2. Формально-сопряженный оператор и формулы Грина

Предположим дополнительно, что коэффициенты a_{ij} имеют вторые частные производные по переменным x , непрерывные в $\overline{Q_T}$ или в $\overline{D_{n+1}^{(T)}}$, и a_i имеют частные производные по переменным x , также непрерывные в $\overline{Q_T}$ или в $\overline{D_{n+1}^{(T)}}$. Тогда в соответствующей области определен оператор M , формально сопряженный с оператором L :

$$Mu = -\frac{\partial u}{\partial t} - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (a_{ij}(x, t)u) - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (a_i(x, t)u) + a_0(x, t)u. \quad (5.1.15)$$

Иногда бывает удобна не дивергентная форма записи этого оператора

$$Mu = -\frac{\partial u}{\partial t} - \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^n d_i(x, t) \frac{\partial u}{\partial x_i} + d_0(x, t)u, \quad (5.1.16)$$

коэффициенты которой определяются формулами

$$d_i = -2 \cdot \sum_{j=1}^n \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_j} - a_i, d_0 = - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2 a_{ij}}{\partial x_i \partial x_j} - \sum_{j=1}^n \frac{\partial a_j}{\partial x_j} + a_0. \quad (5.1.17)$$

Пусть $Q \subseteq \overline{D_{n+1}^{(T)}}$ — какая-либо область с кусочно-гладкой границей ∂Q , тогда для любых $u, v \in C^{2,1}(\overline{Q})$ справедлива вторая формула Грина [11]:

$$\int_Q (vLu - uMv) dxdt = \\ = \int_{\partial Q} \sum_{j=1}^n \left[- \sum_{i=1}^n a_{ij}(x, t) \left(v \frac{\partial u}{\partial x_i} - u \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) + b_j uv \right] \cos(\nu, x_j) d_{(x,t)} S + \\ + \int_{\partial Q} uv \cos(\nu, t) d_{(x,t)} S, \quad (5.1.18)$$

где ν — внешняя нормаль к ∂Q , а $b_j = a_j + \sum_{i=1}^n \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_i}$. Используя формулу Грина (5.1.18), легко получить интегральное представление для решения $u(x, t)$ уравнения (5.1.2).

Для получения подобного представления применим формулу Грина и метод замороженных коэффициентов. Фиксируем точку (x, t) . Пусть $A(x, t)$ — матрица, составленная из старших коэффициентов $a_{ij}(x, t)$ оператора L , $A^{(i,j)}(x, t)$ — элементы обратной матрицы $A^{-1}(x, t)$. Рассмотрим функцию Z^0 , которая при $t > \tau$ определяется равенством

$$Z^0(y - x, t, \tau) = \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \times \\ \times \exp \left(-\frac{1}{4(t - \tau)} \sum_{i,j=1}^n A^{(i,j)}(x, t)(y_i - x_i)(y_j - x_j) \right). \quad (5.1.19)$$

При $t < \tau$ функция $Z^0 = 0$.

По переменным (y, τ) она удовлетворяет уравнению $M_0 Z^0 = 0$. Здесь M_0 — оператор, формально сопряженный оператору L_0 , который получается из оператора L отбрасыванием младших членов и заменой старших коэффициентов фиксированными значениями $a_{ij}(x, t)$.

Определим функцию $\sigma(y, x, t)$ равенством

$$\sigma(y, x, t) = \left(\sum_{i,j=1}^n A^{(i,j)}(x, t)(y_i - x_i)(y_j - x_j) \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.1.20)$$

тогда равенство (5.1.19) можно записать в виде

$$Z^0(y - x, t, \tau) = \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp \left(-\frac{\sigma^2(y, x, t)}{4(t - \tau)} \right). \quad (5.1.21)$$

Пусть $Q \subseteq Q_t$ — какая-либо ограниченная область с кусочно-гладкой границей ∂Q и $(x, t) \in \partial Q \cap Q_T$. Для $0 < \varepsilon < t$ определим область Q_ε и ее верхнюю границу D_ε :

$$Q_\varepsilon = \{(y, \tau) \in Q | \tau < t - \varepsilon\},$$

$$D_\varepsilon = \{(y, \tau) \in \partial Q_\varepsilon | \tau = t - \varepsilon\}.$$

Наложим на область Q дополнительное условие

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\tilde{D}_\varepsilon} Z^0(y - x, t, t - \varepsilon) dy = 1, \quad (5.1.22)$$

где $\tilde{D}_\varepsilon$ — проекция D_ε на R^n .

Пусть функция $v(y, \tau)$ удовлетворяет в области Q ограничениям

$$\begin{aligned} |v(y, \tau) - Z^0(y - x, t, \tau)| &\leq c(t - \tau)^{-\frac{n-\lambda}{2}} \exp\left(-C\frac{|y-x|^2}{t-\tau}\right), \\ \left|\frac{\partial}{\partial \tau}(v(y, \tau) - Z^0(y - x, t, \tau))\right| &\leq c(t - \tau)^{-\frac{n+2-\lambda}{2}} \exp\left(-C\frac{|y-x|^2}{t-\tau}\right), \\ \left|\frac{\partial}{\partial y_i}(v(y, \tau) - Z^0(y - x, t, \tau))\right| &\leq c(t - \tau)^{-\frac{n+1-\lambda}{2}} \exp\left(-C\frac{|y-x|^2}{t-\tau}\right), \\ \left|\frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j}(v(y, \tau) - Z^0(y - x, t, \tau))\right| &\leq c(t - \tau)^{-\frac{n+2-\lambda}{2}} \exp\left(-C\frac{|y-x|^2}{t-\tau}\right) \end{aligned} \quad (5.1.23)$$

при некоторых положительных постоянных c , C и λ .

Применяя формулу Грина (5.1.18) к решению $u(y, \tau)$ уравнения (5.1.2) и функции $v(y, \tau)$ в области Q_ε , получим равенство

$$\begin{aligned} &\int_{Q_\varepsilon} (vLu - uMv) dyd\tau = \\ &= \int_{\partial Q_\varepsilon \setminus D_\varepsilon} \sum_{j=1}^n \left[-\sum_{i=1}^n a_{ij}(y, \tau) \left(v \frac{\partial u}{\partial y_i} - u \frac{\partial v}{\partial y_i} \right) + b_j uv \right] \cos(\nu, y_j) d_{(y, \tau)} S + \\ &\quad + \int_{\partial Q_\varepsilon \setminus D_\varepsilon} uvc \cos(\nu, \tau) d_{(y, \tau)} S + \int_{D_\varepsilon} uvd_{(y, \tau)} S. \end{aligned} \quad (5.1.24)$$

Выполним предельный переход в равенстве (5.1.24) при $\varepsilon \rightarrow 0$. Очевидно, что

$$\int_Q |vLu| dyd\tau \leq t \cdot \left(1 + c_1 t^{\frac{\lambda}{2}}\right) \cdot \|f\|_{C(\overline{Q})}$$

при некоторой положительной постоянной c_1 . Поэтому

$$\int_{Q_\varepsilon} vLudyd\tau = \int_{Q_\varepsilon} vfdy d\tau \rightarrow \int_Q vfdy d\tau$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$ в силу абсолютной непрерывности интеграла Лебега.

Полагая $v_0(y, \tau) = Z^0(y - x, t, \tau)$, в силу равенства $M_0 Z^0 = 0$ находим

$$\begin{aligned} Mv_0(y, \tau) &= Mv_0(y, \tau) - M_0 v_0(y, \tau) = \\ &= \sum_{i,j=1}^n [a_{ij}(x, t) - a_{ij}(y, \tau)] \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} v_0(y, \tau) + \\ &\quad + \sum_{i=1}^n d_i(y, \tau) \frac{\partial}{\partial y_i} v_0(y, \tau) + d_0(y, \tau) v_0(y, \tau). \end{aligned} \quad (5.1.25)$$

Из оценок (11.3) и (11.17) (см. [3], гл.IV) следует, что при некоторых постоянных $c > 0$ и $C > 0$ выполняется неравенство

$$|Mv_0(y, \tau) - M_0v_0(y, \tau)| \leq c(t - \tau)^{-\frac{n+2-\alpha}{2}} \exp\left(-C\frac{|y-x|^2}{t-\tau}\right), \quad (5.1.26)$$

которое влечет интегрируемость функции $u(y, \tau)Mv_0(y, \tau)$ на множестве Q . В силу ограничений (5.1.23) функция $u(y, \tau)M(v(y, \tau) - v_0(y, \tau))$ также интегрируема на Q . Таким образом, $u(y, \tau)Mv(y, \tau)$ интегрируема на Q . Поэтому

$$\int_{Q_\varepsilon} uMv dy d\tau \rightarrow \int_Q uMv dy d\tau$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$ в силу абсолютной непрерывности интеграла Лебега.

Исследуем поведение интегралов в правой части равенства (5.1.24) при $\varepsilon \rightarrow 0$. Очевидно, что

$$\begin{aligned} \int_{D_\varepsilon} uv_0 d_{(y, \tau)} S &= \int_{\tilde{D}_\varepsilon} u(y, t - \varepsilon) Z^0(y - x, t, t - \varepsilon) dy = \\ &= \int_{\tilde{D}_\varepsilon} [u(y, t - \varepsilon) - u(y, t)] Z^0(y - x, t, t - \varepsilon) dy + \int_{\tilde{D}_\varepsilon} u(y, t) Z^0(y - x, t, t - \varepsilon) dy. \end{aligned} \quad (5.1.27)$$

Второй из интегралов в (5.1.27) стремится к $u(x, t)$. По условию (5.1.22) для этого достаточно проверить, что

$$I(\tilde{D}_\varepsilon) = \int_{\tilde{D}_\varepsilon} |u(y, t) - u(x, t)| Z^0(y - x, t, t - \varepsilon) dy \rightarrow 0$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Пусть W_δ — шар в R^n с центром в точке x , такой что для всех $y \in W_\delta$ выполнено неравенство $|u(y, t) - u(x, t)| < \delta$. Тогда

$$I(\tilde{D}_\varepsilon) = I(W_\delta \cap \tilde{D}_\varepsilon) + I(\tilde{D}_\varepsilon \setminus W_\delta) \leq \delta + 2 \cdot \|u\|_{C(\bar{Q})} \int_{R^n \setminus W_\delta} Z^0(y - x, t, t - \varepsilon) dy,$$

так как по переменной y функция $Z^0(y - x, t, t - \varepsilon)$ является плотностью распределения вероятностей. Интеграл в полученном неравенстве стремится к нулю при $\varepsilon \rightarrow 0$, поэтому и $I(\tilde{D}_\varepsilon) \rightarrow 0$.

Первый интеграл в (5.1.27) можно сделать сколь угодно малым за счет равномерной по y малости подынтегральной функции. Аналогичным образом, используя ограничения (5.1.23), получаем оценку

$$\left| \int_{D_\varepsilon} u(v - v_0) d_{(y, \tau)} S \right| \leq c_1 \varepsilon^{\lambda/2}.$$

Значит,

$$\int_{D_\varepsilon} uv d_{(y,\tau)} S \rightarrow u(x, t).$$

Для исследования остальных интегралов в правой части формулы (5.1.24) требуются дополнительные предположения. Поэтому далее рассматриваются конкретные области Q .

5.1.3. Представление решения параболического уравнения в цилиндре

Рассмотрим случай, когда Q является эллиптическим цилиндром $Q = D_R \times (0, t)$, где $D_R = \{y \in R^n | \sigma(y, x, t) < R\}$. Условие (5.1.22) теперь выполнено, поскольку $\tilde{D}_\varepsilon = D_R$ и по переменной y функция $Z^0(y - x, t, t - \varepsilon)$ является плотностью распределения вероятностей, которое слабо сходится при $\varepsilon \rightarrow 0$ к вырожденному распределению, сосредоточенному в точке x . Второй интеграл в правой части формулы (5.1.24), очевидно, равен $-\int_{D_R} u(y, 0) Z^0(y - x, t, 0) dy$. Наконец, первый интеграл стремится к интегралу по боковой поверхности цилиндра в силу непрерывности и ограниченности подинтегральной функции. В результате получаем следующее интегральное представление функции $u(x, t)$:

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_0^t \int_{D_R} [v(y, \tau) Lu(y, \tau) - u(y, \tau) Mv(y, \tau)] dy d\tau + \\ & + \int_{D_R} u(y, 0) v(y, 0) dy + \int_0^t \int_{\partial D_R} \sum_{j=1}^n \times \\ & \times \left[\sum_{i=1}^n a_{ij}(y, \tau) \left(v(y, \tau) \frac{\partial u}{\partial y_i} - u(y, \tau) \frac{\partial v}{\partial y_i} \right) + b_j(y, \tau) u(y, \tau) v(y, \tau) \right] \times \\ & \times \cos(\nu, y_j) d_y S d\tau. \quad (5.1.28) \end{aligned}$$

Применим формулу (5.1.28) к функции

$$\begin{aligned} v(y, \tau) = & \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \times \\ & \times \left(\exp \left(-\frac{\sigma^2(y, x, t)}{4(t - \tau)} \right) - \exp \left(-\frac{R^2}{4(t - \tau)} \right) \right), \end{aligned}$$

обращающейся в ноль на боковой поверхности цилиндра. Простые вычисления показывают, что

$$\frac{\partial}{\partial y_i} (v(y, \tau) - Z^0(y - x, t, \tau)) = 0,$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \tau} (v(y, \tau) - Z^0(y - x, t, \tau)) = \\
& = \left(\frac{n}{2(t - \tau)} - \frac{R^2}{4(t - \tau)^2} \right) \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{R^2}{4(t - \tau)} \right).
\end{aligned} \tag{5.1.29}$$

Условие (5.1.23) теперь выполнено, например, при $C = \frac{R^2}{8}$. Поскольку

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial y_i} v(y, \tau) &= \frac{\partial}{\partial y_i} Z^0(y - x, t, \tau) = \\
&= -\frac{1}{2(t - \tau)} \sum_{j=1}^n A^{(i,j)}(x, t) (y_j - x_j) Z^0(y - x, t, \tau), \\
\nu &= \frac{A^{-1}(x, t)(y - x)}{\|A^{-1}(x, t)(y - x)\|},
\end{aligned}$$

формула (5.1.28) примет вид

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= \int_0^t \int_{D_R} [v(y, \tau) Lu(y, \tau) - \\
&\quad - u(y, \tau) Mv(y, \tau)] dy d\tau + \int_{D_R} u(y, 0) v(y, 0) dy + \\
&\quad + \int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{[(y - x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y - x)]}{2(t - \tau) \|A^{-1}(x, t)(y - x)\|} \times \\
&\quad \times Z^0(y - x, t, \tau) u(y, \tau) d_y S d\tau.
\end{aligned} \tag{5.1.30}$$

Поскольку

$$\begin{aligned}
M_0 v(y, \tau) &= -M_0 \left(\frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{R^2}{4(t - \tau)} \right) \right) = \\
&= \left(\frac{n}{2(t - \tau)} - \frac{R^2}{4(t - \tau)^2} \right) \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{R^2}{4(t - \tau)} \right),
\end{aligned} \tag{5.1.31}$$

получаем следующее представление решения:

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= \int_0^t \int_{D_R} v(y, \tau) Lu(y, \tau) dy d\tau + \\
&\quad + \int_0^t \int_{D_R} [M_0 v(y, \tau) - Mv(y, \tau)] u(y, \tau) dy d\tau +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^t \int_{D_R} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \times \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau + \int_{D_R} v(y, 0) u(y, 0) dy + \\
& \quad + \int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)]}{2(t-\tau) \|A^{-1}(x, t)(y-x)\|} \times \\
& \quad \times \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) d_y S d\tau. \quad (5.1.32)
\end{aligned}$$

Рассмотрим некоторые частные случаи формулы (5.1.32). Если матрица $A(x, t) = A$ постоянна, а оператор $L = \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}$, то $M_0 = M$,

$$[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)] = \sigma^2(x, y, t) = R^2,$$

и формула (5.1.32) приобретает вид

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= \int_0^t \int_{D_R} v(y, \tau) L u(y, \tau) dy d\tau + \\
& + \int_0^t \int_{D_R} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}}} \times \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau + \int_{D_R} v(y, 0) u(y, 0) dy + \\
& \quad + \int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{R^2}{2(t-\tau) \|A^{-1}(y-x)\|} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}}} \times \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) d_y S d\tau. \quad (5.1.33)
\end{aligned}$$

Для оператора $L = \frac{\partial}{\partial t} - \Delta$ она превращается в равенство

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= \int_0^t \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \quad \times \left(\exp \left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)} \right) - \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) \right) L u(y, \tau) dy d\tau + \\
& \quad + \int_0^t \int_{D_R} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi t]^{\frac{n}{2}}} \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4t}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4t}\right) \right) u(y, 0) dy + \\
& + \int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{R}{2(t-\tau)} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \cdot \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(y, \tau) d_y S d\tau,
\end{aligned} \tag{5.1.34}$$

где $r = \|y - x\|$. При $R^2 \geq 2nt$ формула (5.1.34) превращается в теорему о среднем значении. При выполнении противоположного неравенства $R^2 < 2nt$ можно воспользоваться аналогичной формулой

$$\begin{aligned}
u(x, t) = & \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \right) f(y, \tau) dy d\tau + \\
& + \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_{D_R} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(y, \tau) dy d\tau + \\
& + \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi\frac{R^2}{2n}]^{\frac{n}{2}}} \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4\frac{R^2}{2n}}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4\frac{R^2}{2n}}\right) \right) u\left(y, t - \frac{R^2}{2n}\right) dy + \\
& + \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_{\partial D_R} \frac{R}{2(t-\tau)} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \cdot \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(y, \tau) d_y S d\tau
\end{aligned} \tag{5.1.35}$$

для цилиндра $D_R \times \left(t - \frac{R^2}{2n}, t\right)$.

5.1.4. Интегральное представление решения задачи Коши

Для оператора L , заданного в $\overline{D_{n+1}^{(T)}}$, в интегральном представлении (5.1.30) можно выполнить предельный переход при $R \rightarrow \infty$. Очевидные неравенства

$$\begin{aligned}
\| (y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t) (y-x) \| & \leq \| A(y, \tau) \| \cdot \| A^{-1}(x, t) (y-x) \|^2, \\
\| A^{-1}(x, t) (y-x) \|^2 & \leq \| A^{-1}(x, t) \|^2 \cdot \sigma^2(x, y, t)
\end{aligned}$$

позволяют оценить поверхностный интеграл в формуле (5.1.30):

$$\int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t) (y-x)]}{2(t-\tau) \| A^{-1}(x, t) (y-x) \|} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times Z^0(y-x, t, \tau) u(y, \tau) d_y S d\tau \leq \\
& \leq \frac{\mu}{\nu} \int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{R}{2(t-\tau)} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \times \\
& \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(y, \tau) d_y S d\tau \leq \frac{\|u\|}{\Gamma(\frac{n}{2})} \frac{\mu}{\nu} \int_0^t \frac{R^n}{(t-\tau)} \frac{1}{[4(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) d\tau \leq \frac{\|u\|}{\Gamma(\frac{n}{2})} \frac{\mu}{\nu} \int_{\frac{R^2}{4t}}^\infty s^{\frac{n}{2}-1} \cdot \exp(-s) ds.
\end{aligned}$$

Следовательно, поверхностный интеграл в формуле (5.1.30) стремится к нулю при $R \rightarrow \infty$. Поскольку $v(y, \tau) \leq v_0(y, \tau)$ и $v(y, \tau) \rightarrow v_0(y, \tau)$ при $R \rightarrow \infty$, а

$$\int_{R^n} v_0(y, \tau) dy = 1,$$

выполняется

$$\int_{D_R} u(y, 0) v(y, 0) dy \rightarrow \int_{R^n} u(y, 0) v_0(y, 0) dy$$

и

$$\int_0^t \int_{D_R} v(y, \tau) Lu(y, \tau) dy d\tau \rightarrow \int_0^t \int_{R^n} v_0(y, \tau) Lu(y, \tau) dy d\tau.$$

Из равенства

$$\begin{aligned}
Mv(y, \tau) &= Mv_0(y, \tau) - \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + d_0\right) \times \\
&\times \left(\frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \right) = \\
&= Mv_0(y, \tau) + \left(\frac{n}{2(t-\tau)} - \frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - d_0 \right) \times \\
&\times \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right)
\end{aligned}$$

несложными преобразованиями получаем оценку

$$\begin{aligned}
& \int_0^t \int_{D_R} |u(y, \tau) Mv(y, \tau) - u(y, \tau) Mv_0(y, \tau)| dy d\tau \leq \\
& \leq \text{const} \cdot \|u\| \int_0^t \left(\frac{n}{2(t-\tau)} + \frac{R^2}{4(t-\tau)^2} + \|d_0\| \right) \frac{R^n}{\Gamma(\frac{n+1}{2}) [4(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) d\tau \leq \text{const} \cdot \|u\| \left(\left(1 + \frac{2t\|d_0\|}{n}\right) \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})} \int_{\frac{R^2}{4t}}^\infty s^{\frac{n}{2}-1} \times \right.
\end{aligned}$$

$$\times \exp(-s) ds + \frac{1}{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)} \int_{\frac{R^2}{4t}}^{\infty} s^{\frac{n}{2}} \cdot \exp(-s) ds \Bigg),$$

которая показывает, что

$$\int_0^t \int_{D_R} u(y, \tau) M v(y, \tau) dy d\tau \rightarrow \int_0^t \int_{R^n} u(y, \tau) M v_0(y, \tau) dy d\tau.$$

Выполнив в (5.1.30) предельный переход при $R \rightarrow \infty$, получим интегральное представление для решения задачи Коши:

$$\begin{aligned} u(x, t) = \int_0^t \int_{R^n} [v_0(y, \tau) Lu(y, \tau) - u(y, \tau) M v_0(y, \tau)] dy d\tau + \\ + \int_{R^n} u(y, 0) v_0(y, 0) dy. \quad (5.1.36) \end{aligned}$$

5.1.5. Представление решения параболического уравнения в шароиде

Поверхность уровня фундаментального решения параболического уравнения будем называть *сфероидом*, а ограниченную сфероидом область — *шароидом*. Получим интегральное представление для решения параболического уравнения в шароиде Q_R , определяемом с помощью функции

$$Z^0(y - x, t, \tau) = \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp\left(-\frac{\sigma^2(y, x, t)}{4(t - \tau)}\right),$$

являющейся фундаментальным решением для главной части параболического оператора с коэффициентами, замороженными в точке (x, t) . Шароид Q_R определим неравенством

$$\begin{aligned} Q_R &= Q_R(x, t) = \\ &= \left\{ (y, \tau) \mid Z^0(y - x, t, \tau) - (2\pi R^2/n)^{-n/2} (\det A(x, t))^{-1/2} > 0, \tau < t \right\}. \end{aligned}$$

На сфероиде выполняется равенство

$$\sigma^2(y, x, t) = 2n(t - \tau) \ln \left(\frac{R^2}{2n(t - \tau)} \right), \quad (5.1.37)$$

поэтому

$$\frac{R^2}{2n(t - \tau)} \geq 1.$$

Правую часть равенства (5.1.37) будем обозначать $\rho^2(\tau)$.

Из этих формул следует, что $t - R^2/(2n) \leq \tau \leq t$, причем гиперплоскости $\tau = t$ и $\tau = t - R^2/(2n)$ имеют пересечение со сфероидом в единственной точке, пространственные координаты которой равны x , а сечением сфероида гиперплоскостью $\tau = c$ является эллипсоид, максимальный размер которого $R/\sqrt{\epsilon}$.

Проверим условие (5.1.22) для шароида:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\tilde{D}_\epsilon} Z^0(y - x, t, t - \epsilon) dy = 1,$$

где область интегрирования $\tilde{D}_\epsilon$ определяется неравенством $\sigma^2(y, x, t) \leq 2n\epsilon \ln(R^2/(2n\epsilon))$. Выполняя в интеграле линейную замену переменных $y - x = \sqrt{\epsilon}z$, получим

$$\int_{\tilde{D}_\epsilon} Z^0(y - x, t, t - \epsilon) dy = \int_{T_\epsilon} p(z) dz,$$

где T_ϵ — область, ограниченная эллипсоидом $z' A^{-1}(x, t) z = 2n \ln(R^2/(2n\epsilon))$, а $p(z)$ — плотность нормального распределения со средним 0 и матрицей ковариаций $2A(x, t)$. Полученный интеграл стремится к 1 при $\epsilon \rightarrow 0$, так как область интегрирования расширяется до всего пространства. В качестве функции $v(y, \tau)$ выберем

$$Z^0(y - x, t, \tau) - (2\pi R^2/n)^{-n/2} (\det A(x, t))^{-1/2},$$

тогда условия (5.1.23), очевидно, выполнены (первое условие выполнено, так как шароид — ограниченное множество). Поскольку $v(y, \tau) = 0$ на сфероиде и

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y_i} v(y, \tau) &= \frac{\partial}{\partial y_i} Z^0(y - x, t, \tau) = -\frac{1}{2(t - \tau)} (A^{-1}(x, t)(y - x))_i Z^0(y - x, t, \tau), \\ \cos(\nu, y_i) &= \frac{(2A^{-1}(x, t)(y - x))_i}{\sqrt{\|2A^{-1}(x, t)(y - x)\|^2 + (\partial \rho^2 / \partial \tau)^2}}, \end{aligned}$$

при $\epsilon \rightarrow 0$ из формулы (5.1.24) получим

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \int_{Q_R} [v(y, \tau) Lu(y, \tau) - u(y, \tau) Mv(y, \tau)] dy d\tau + \\ &+ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\partial Q_R \setminus D_\epsilon} \frac{[(y - x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y - x)]}{(t - \tau) \sqrt{\|2A^{-1}(x, t)(y - x)\|^2 + (\partial \rho^2 / \partial \tau)^2}} \times \\ &\times Z^0(y - x, t, \tau) u(y, \tau) d_{(y, \tau)} S. \end{aligned} \quad (5.1.38)$$

Выбирая $u(y, \tau) \equiv 1$, из (5.1.38) получим

$$\int_{\partial Q_R} \frac{[(y - x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y - x)]}{(t - \tau) \sqrt{\|2A^{-1}(x, t)(y - x)\|^2 + (\partial \rho^2 / \partial \tau)^2}} Z^0(y - x, t, \tau) d_{(y, \tau)} S < \infty.$$

Значит, для ограниченного решения параболического уравнения справедливо интегральное представление

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_{Q_R} [v(y, \tau) Lu(y, \tau) - u(y, \tau) Mv(y, \tau)] dy d\tau + \\ & + \int_{\partial Q_R} \frac{[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)]}{(t-\tau) \sqrt{\|2A^{-1}(x, t)(y-x)\|^2 + (\partial \rho^2 / \partial \tau)^2}} \times \\ & \times Z^0(y-x, t, \tau) u(y, \tau) d_{(y, \tau)} S. \end{aligned} \quad (5.1.39)$$

Для упрощения поверхностного интеграла в этой формуле воспользуемся очевидной леммой.

Лемма 1. Пусть поверхность S в пространстве R^{n+1} задана уравнением вида $g(y) = h(\tau)$, где $y \in R^n$, а $\tau \in [t_1, t_2] \subset R^1$. Тогда для непрерывной функции $f(y, \tau)$ и гладких функций $g(y)$ и $h(\tau)$ справедлива формула

$$\int_S \frac{f(y, \tau)}{\sqrt{\|\text{grad} g(y)\|^2 + (\partial h(\tau) / \partial \tau)^2}} d_{(y, \tau)} S = \int_{t_1}^{t_2} d\tau \int_{S(\tau)} \frac{f(y, \tau)}{\|\text{grad} g(y)\|} d_y S,$$

где $S(\tau)$ — проекция сечения поверхности S на R^n .

Воспользовавшись леммой и подставив значение $Z^0(y-x, t, \tau)$ на сфероиде, получим

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_{Q_R} [v(y, \tau) Lu(y, \tau) - u(y, \tau) Mv(y, \tau)] dy d\tau + \\ & + \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t d\tau \int_{\partial D_{\rho(\tau)}} \left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \times \\ & \times \frac{[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)]}{2(t-\tau)(\pi R^2)^{n/2} (\det A(x, t))^{1/2} \|A^{-1}(x, t)(y-x)\|} u(y, \tau) d_y S, \end{aligned} \quad (5.1.40)$$

где, как и ранее, $D_\rho = \{y | \sigma(y, x, t) \leq \rho\}$ — область ограниченная эллипсоидом. Сформулируем еще одну полезную лемму о вычислении интегралов.

Лемма 2. Пусть область D_R является объединением эллипсоидов

$$S_r(x, t) = \{y | \sigma(y, x, t) = r\}, \quad 0 \leq r \leq R.$$

Тогда для любой интегрируемой функции $g(y)$ справедливы равенства

$$\int_{D_R} g(y) dy = \int_0^R \left(\int_{S_r(x, t)} \frac{g(y)}{\|\text{grad}_y \sigma(y, x, t)\|} d_y S \right) dr =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^R \left(\int_{S_r(x,t)} \frac{g(y)r}{\|A^{-1}(x,t)(y-x)\|} d_y S \right) dr = \\
&= \int_0^R \left(\int_{S_1^0(x,t)} \frac{g(x+r\omega)}{\|A^{-1}(x,t)\omega\|} d_\omega S \right) r^{n-1} dr = \\
&= \sigma_n (\det A(x,t))^{\frac{1}{2}} \int_0^R E g(x+r\Omega) r^{n-1} dr, \quad (5.1.41)
\end{aligned}$$

где $S_1^0(x,t) = \{\omega \in R^n | \omega^T A^{-1}(x,t)\omega = 1\}$ — эллипсоид с центром в нуле, $\sigma_n = 2\pi^{\frac{n}{2}}/\Gamma(\frac{n}{2})$ — площадь поверхности сферы радиуса 1 в R^n . Случайный вектор Ω распределен на $S_1^0(x,t)$ с плотностью

$$p(x,t,\omega) = \frac{1}{\sigma_n (\det A(x,t))^{\frac{1}{2}} \|A^{-1}(x,t)\omega\|}. \quad (5.1.42)$$

Его можно моделировать по формуле [8]

$$\Omega = (A(x,t))^{\frac{1}{2}} \Omega_1, \quad (5.1.43)$$

где $(A(x,t))^{\frac{1}{2}}$ — треугольная матрица квадратного корня из матрицы $A(x,t)$, Ω_1 — изотропный единичный вектор в пространстве.

Применяя лемму к формуле (5.1.40), находим

$$\begin{aligned}
u(x,t) &= \int_{Q_R} [v(y,\tau)Lu(y,\tau) - u(y,\tau)Mv(y,\tau)] dy d\tau + \\
&+ \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t d\tau E \left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \rho^n(\tau) \frac{[\Omega' A^{-1}(x,t)A(y,\tau)A^{-1}(x,t)\Omega]}{\Gamma(n/2)(t-\tau)R^n} u(x+\rho(\tau)\Omega, \tau), \quad (5.1.44)
\end{aligned}$$

где $y = x + \rho(\tau)\Omega$. Аналогичная формула

$$\begin{aligned}
u(x,t) &= \\
&= \int_{Q_{R,\delta}} [v(y,\tau)Lu(y,\tau) - u(y,\tau)Mv(y,\tau)] dy d\tau + \int_{\bar{D}_{R,\delta}} v(y,\delta)u(y,\delta) dy + \\
&+ \int_{\delta}^t d\tau E \left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \rho^n(\tau) \frac{[\Omega' A^{-1}(x,t)A(y,\tau)A^{-1}(x,t)\Omega]}{\Gamma(n/2)(t-\tau)R^n} u(x+\rho(\tau)\Omega, \tau) \quad (5.1.45)
\end{aligned}$$

справедлива при $t - R^2/(2n) < \delta < t$ для усеченного шароида

$$\begin{aligned}
Q_{R,\delta} &= Q_{R,\delta}(x,t) = \\
&= \left\{ (y,\tau) | Z^0(y-x,t,\tau) - (2\pi R^2/n)^{-n/2} (\det A(x,t))^{-1/2} > 0, \delta < \tau < t \right\}
\end{aligned}$$

с нижней границей

$$D_{R,\delta} = D_{R,\delta}(x, t) = \\ = \left\{ (y, \delta) | Z^0(y - x, t, \delta) - (2\pi R^2/n)^{-n/2} (\det A(x, t))^{-1/2} > 0 \right\},$$

имеющей проекцию $\tilde{D}_{R,\delta}$ на координатное пространство. Отметим, что вместо функции Z^0 для построения шароидов можно использовать другие фундаментальные решения, например решение вида (5.1.14), в котором в качестве параметров берутся все коэффициенты параболического уравнения, замороженные в точке (x, t) .

5.2. ПРИМЕНЕНИЕ СХЕМЫ НЕЙМАНА—УЛАМА К РЕШЕНИЮ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

Стохастические методы решения краевых задач для уравнений в частных производных чаще всего основаны на интегральном представлении решения краевой задачи. Это интегральное представление обычно рассматривается как интегральное уравнение, к которому применяется схема Неймана—Улама [6]. Довольно часто полученное интегральное уравнение рассматривается в пространстве $M(Q)$ ограниченных борелевских функций на некотором компакте Q в евклидовом пространстве R^n и имеет вид

$$u(x) = \int_Q u(y)P(x, dy) + F(x), \quad x \in Q, \quad (5.2.1)$$

где $P(x, dy)$ — субстохастическое ядро, а $F(x)$ является интегралом от граничных условий или правой части уравнения. Известно [9], [12], что при $F(x) \geq 0$ решение уравнения (5.2.1) представимо в виде

$$u(x) = \sum_{i=0}^{\infty} K^i F(x) + K^{\infty} u(x), \quad x \in Q, \quad (5.2.2)$$

где K — интегральный оператор в представлении (5.2.1), а

$$K^{\infty} u(x) = \lim_{i \rightarrow \infty} K^i u(x). \quad (5.2.3)$$

Действительно, из уравнения (5.2.1) следует неравенство

$$\sum_{i=0}^n K^i F(x) = u(x) - K^{n+1} u(x) \leq 2\|u\|.$$

Значит, ряд в (5.2.2) сходится и существует предел (5.2.3). Равенство (5.2.2) очевидно. Для функции $v(x) = K^{\infty} u(x)$, в силу теоремы Лебега

об ограниченной сходимости, справедливо равенство $v(x) = Kv(x)$. Такие функции будем называть инвариантными. Сумму ряда

$$GF(x) = \sum_{i=0}^{\infty} K^i F(x)$$

называют потенциалом функции $F(x)$. Заметим, что $Ku(x) \leq u(x)$. Функции, обладающие этим свойством называются эксцессивными. Представление эксцессивной функции в виде суммы потенциала и инвариантной функции называется разложением Рисса. Оно единственное, так как $K^\infty GF(x) = 0$.

Суммируем все сказанное в следующей теореме.

Теорема 1. Пусть функции $F(x) \geq 0$, тогда ограниченное решение $u(x)$ уравнения (5.2.1) единственным способом раскладывается в сумму потенциала и инвариантной функции.

Несмещенные оценки решения уравнения (5.2.1) обычно строят на траекториях цепи Маркова $\{x_i\}_{i=0}^\infty$, определяемой переходной вероятностью $P(x, dy)$. Процесс обрывается в некоторый случайный марковский момент τ_1 при переходе в поглощающее состояние Δ , лежащее вне Q (при этом $u(\Delta) = 0$).

5.2.1. Свойства траекторий цепи Маркова

Изучим некоторые свойства последовательности $\{x_i\}_{i=0}^\infty$, стартующей из точки $x_0 = x$. Определим момент обрыва цепи τ_1 как момент первого попадания цепи в состояние Δ , то есть $\tau_1 = \inf\{n | x_n = \Delta\}$. Пусть $\{\mathfrak{A}_i\}_{i=0}^\infty$ — последовательность σ -алгебр, порожденная цепью до момента времени i , χ_i — индикатор события $\{\tau_1 > i\}$. Пусть $u(x)$ — ограниченная эксцессивная функция, удовлетворяющая уравнению (5.2.1). Определим стандартную последовательность несмещенных оценок

$$\eta_i = \sum_{j=0}^{i-1} F(x_j) \chi_j + \chi_i u(x_i), \quad (5.2.4)$$

которая, очевидно, является равномерно интегрируемым мартингалом относительно потока $\{\mathfrak{A}_i\}_{i=0}^\infty$ и

$$E_x \chi_i u(x_i) = K^i u(x).$$

По теореме сходимости мартингалов существует $\eta_\infty = \lim \eta_i$ P_x п.н. и $E_x \eta_\infty = u(x)$. Ряд $\sum_{j=0}^\infty F(x_j) \chi_j$ P_x п.н. сходится в силу теоремы Леви. Поэтому по теореме Лебега об ограниченной сходимости $K^\infty u(x) = E_x \lim \chi_i u(x_i)$.

Теорема 2. 1. Если для всех $x \in Q$ вероятность $P_x(\tau_1 < \infty) = 1$, то всякая ограниченная эксцессивная функция является потенциалом.
 2. Если функция $u(x) \equiv 1$ является потенциалом, то для всех $x \in Q$ вероятность $P_x(\tau_1 < \infty) = 1$.
 3. Если существует строго положительная инвариантная функция, то при всех x

$$P_x(\tau_1 = \infty) > 0.$$

4. Пусть Γ — множество нулей неотрицательной непрерывной на Q функции $F(x)$, потенциал которой всюду конечен. Пусть $P_x(\tau_1 = \infty) > 0$ и $\rho(x, \Gamma)$ — расстояние от x до Γ , тогда

$$P_x(\lim \rho(x_i, \Gamma) = 0 | \tau_1 = \infty) = 1.$$

5. Пусть Γ_1 — множество нулей неотрицательной непрерывной на Q функции $F_1(x)$, Γ_2 — множество нулей неотрицательной непрерывной на Q функции $F_2(x)$, потенциалы которых всюду конечны. Пусть $P_x(\tau_1 = \infty) > 0$, тогда

$$P_x(\lim \rho(x_i, \Gamma_1 \cap \Gamma_2) = 0 | \tau_1 = \infty) = 1.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Функция $u_1(x) \equiv 1$ является эксцессивной, поэтому

$$K^\infty u_1(x) = E_x \lim \chi_i = P_x(\tau_1 = \infty) = 0.$$

Далее, для ограниченной эксцессивной функции $u(x)$

$$|K^\infty u(x)| \leq \limsup K^i |u(x)| \leq \|u\| K^\infty u_1(x) = 0.$$

Пусть единичная функция является потенциалом функции $g(x)$, тогда

$$g(x) = P(x, \Delta), \quad K^{i-1} g(x) = P_x(\tau_1 = i)$$

и

$$P_x(\tau_1 < \infty) = \sum_{i=1}^{\infty} P_x(\tau_1 = i) = \sum_{i=0}^{\infty} K^i g(x) = 1.$$

Пусть χ_∞ — индикатор события $\{\tau_1 = \infty\}$, $v(x)$ — строго положительная инвариантная функция, тогда

$$\begin{aligned} 0 < v(x) &= K^\infty v(x) = E_x \lim \chi_i v(x_i) \leq \\ &\leq E_x \chi_\infty \sup v(x) = P_x(\tau_1 = \infty) \sup v(x). \end{aligned}$$

Значит, $P_x(\tau_1 = \infty) > 0$.

Поскольку P_x п.н. $\lim F(x_i)\chi_i = 0$ и $\chi_i = 1$ для всех i на множестве $\{\tau_1 = \infty\}$, P_x п.н. $\lim F(x_i) = 0$ на этом множестве. Пусть $\{\rho(x_{i_k}, \Gamma)\}_{k=0}^\infty$ — сходящаяся подпоследовательность. Используя компактность множества состояний Q , из последовательности $\{x_{i_k}\}_{k=0}^\infty$ можно выделить сходящуюся подпоследовательность. Не умаляя общности, можно считать, что последовательность $\{x_{i_k}\}_{k=0}^\infty$ сама сходится к некоторой точке $\tilde{x}$. Тогда из непрерывности функции $F(x)$ следует, что $0 = \lim F(x_{i_k}) = F(\tilde{x})$. Значит, точка $\tilde{x} \in \Gamma$ и $\rho(\tilde{x}, \Gamma) = 0$. Из непрерывности расстояния от точки до замкнутого множества следует, что $\lim \rho(x_{i_k}, \Gamma) = \rho(\tilde{x}, \Gamma) = 0$. Таким образом, последовательность расстояний имеет не более одной предельной точки. Хотя бы одна предельная точка у нее имеется, так как она ограничена. Значит, $\lim \rho(x_i, \Gamma) = 0$.

Очевидно, что функция $F(x) = F_1(x) + F_2(x)$ имеет всюду конечный потенциал. Множество ее нулей $\Gamma = \Gamma_1 \cap \Gamma_2$, поэтому утверждение 5 является следствием утверждения 4. ■

Рассмотрим примеры применения теорем 1 и 2. Подробное описание уравнений (5.2.1) и соответствующих им процессов блуждания можно найти в [8] для примеров 1, 2, 3 и в [18] — для примера 4.

Пример 1. Блуждание по сферам

В этом случае

$$F(x) = \int_{D_R(x)} G(x, y) f(y) dy,$$

если решение $u(x)$ обращается в ноль на границе области ∂Q . Здесь $R(x) = \rho(x, \partial Q)$ — расстояние от точки x до границы области, $G(x, y)$ — функция Грина для шара, $f(y)$ — правая часть уравнения Пуассона. Полагая $f(x) \equiv 1$, находим $F(x) = R^2(x)/2n$. Ядро $P(x, dy)$ сосредоточено на сфере. Если часть сферы является участком границы компакта Q , то значения решения в этих точках известны и переход в них означает переход в поглощающее состояние, то есть известное граничное условие учитывается в правой части уравнения (5.2.1). Таким образом, *блуждание по сферам* п.н. сходится к границе области или попадает на нее за конечное число шагов.

Пример 2. Блуждание по эллипсоидам

В этом случае

$$F(x) = \int_{T(x)} \mathcal{L}(y, x) f(y) dy,$$

где $T(x)$ — эллипсоид с центром в точке x , $\mathcal{L}(y, x)$ — функция Леви, обращающаяся в ноль на границе эллипсоида вместе с первыми производными, $f(y)$ — правая часть эллиптического уравнения. Полагая $f(x) \equiv 1$,

находим $F(x) = R_1^2(x)/2n$, где $R_1(x) > 0$ для внутренних точек компакта Q . Таким образом, необрывающиеся внутри области траектории блуждания по эллипсоидам п.н. сходятся к границе области или попадают на нее за конечное число шагов.

Пример 3. Блуждание по сфероидам

При решении первой краевой задачи для параболического оператора $L = \frac{\partial}{\partial t} - \Delta$ ядро интегрального уравнения (5.2.1) сосредоточено на сфероиде — поверхности уровня фундаментального решения — и является стохастическим. Функцию $F(x, t)$ можно взять равной

$$F(x, t) = \frac{r^{\frac{2}{n}}(x, t)}{4(1 + \frac{2}{n})^{(1 + \frac{n}{2})}},$$

где $r(x, t) = 0$ только на боковой поверхности и нижнем основании $t = 0$ пространственно-временного цилиндра. В силу теоремы 2 блуждание по сфероидам п.н. сходится либо к боковой поверхности, либо к нижнему основанию пространственно-временного цилиндра.

Пример 4. Блуждание по цилиндрам

Теперь при решении первой краевой задачи для параболического оператора $L = \frac{\partial}{\partial t} - \Delta$ ядро интегрального уравнения (5.2.1) сосредоточено на поверхности или внутри прямого кругового цилиндра, лежащего внутри пространственно-временного цилиндра, в котором решается краевая задача. Будем рассматривать решение краевой задачи с нулевыми граничными условиями, тогда

$$F(x, t) = \int_{\max(0, t - \frac{R^2}{2n})}^t \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\ \times \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4(t - \tau)}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4(t - \tau)}\right) \right) f(y, \tau) dy d\tau.$$

Здесь $f(x, t)$ — правая часть уравнения, $r = \|x - y\|$, остальные переменные такие же, как в примере 1. При $f(y, \tau) \equiv 1$ функция $F(x, t)$ обращается в ноль лишь при $t = 0$ или $R(x) = 0$. Значит, траектория блуждания по цилиндрам приближается п.н. к границе пространственно-временного цилиндра или заканчивается на его границе за конечное число шагов. Рассмотрим теперь решение краевой задачи $u(x, t)$, обращающегося в ноль на боковой поверхности пространственно-временного цилиндра и положительное на его нижнем основании. Тогда

$$F(x, t) = \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi t]^{\frac{n}{2}}} \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4t}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4t}\right) \right) u(x, 0) dy \quad (5.2.5)$$

при $R^2(x) \geq 2nt > 0$ и $F(x, 0) = u(x, 0)$ при $R(x) > 0$. Значит, траектория блуждания по цилиндрам приближается п.н. к боковой границе пространственно-временного цилиндра или заканчивается на его границе за конечное число шагов.

Отметим, что для точек $x \in \partial Q$ ядро $P(x, dy)$ должно определяться из условий непрерывности решения уравнения (5.2.1) на компакте Q . Чаще всего распределение $P(x, dy)$ сосредоточено в граничной точке x . Однако в примере 4 переходная вероятность $P(x, 0, dy, d\tau) \equiv 0$.

Как правило, сама последовательность $\{x_i\}_{i=0}^\infty$ п.н. сходится. В частности, справедлива

Теорема 3. 1. Пусть при всех $m = 1, \dots, n$ координатные функции $v_m(x)$ таковы, что при некоторой ограниченной эксцессивной функции $w_m(x)$ сумма $w_m(x) + v_m(x)$ или разность $w_m(x) - v_m(x)$ являются эксцессивными функциями, тогда последовательность $\{x_i\}_{i=0}^\infty$ п.н. сходится на множестве $\{\tau_1 = \infty\}$.

2. Пусть при всех $m = 0, 1, \dots, n$ координатные функции $v_m(x)$ таковы, что при некоторой постоянной w_m сумма $w_m + v_m(x)$ или разность $w_m - v_m(x)$ являются эксцессивными функциями, тогда последовательность $\{x_i\}_{i=0}^\infty$ п.н. сходится на множестве $\{\tau_1 = \infty\}$.

3. Пусть при всех $m = 0, 1, \dots, n$ координатные функции $v_m(x)$ таковы, что либо $v_m(x)$ или $-v_m(x)$ являются эксцессивными функциями, либо $v_m(x)$ — инвариантна, тогда последовательность $\{x_i\}_{i=0}^\infty$ п.н. сходится на множестве $\{\tau_1 = \infty\}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Утверждения 2 и 3 являются следствиями 1, так как константа эксцессивна для субстохастического ядра. Пусть теперь функция $h_m(x) = w_m(x) - v_m(x)$ эксцессивна. Последовательность стандартных оценок (5.2.4) для $h_m(x)$ и последовательность $\{\chi_i h_m(x_i)\}_{i=0}^\infty$ п.н. сходится. Последовательность стандартных оценок (5.2.4) для $w_m(x)$ и последовательность $\{\chi_i w_m(x_i)\}_{i=0}^\infty$ также п.н. сходится. Поэтому последовательность $\{\chi_i v_m(x_i)\}_{i=0}^\infty$ также п.н. сходится. Очевидно, что отсюда следует утверждение теоремы. ■

Применим доказанную теорему к блужданиям из предшествующих примеров.

Блуждание по сферам. Очевидно, что можно подобрать такую постоянную w , что все функции $w + v_m(x)$ будут неотрицательными и, следовательно, эксцессивными. Значит, блуждание по сферам с вероятностью 1 либо сходится к точке на границе, либо обрывается на границе за конечное число шагов.

Аналогично, блуждание по эллипсоидам с вероятностью 1 либо сходится к точке на границе, либо обрывается на границе или внутри области за конечное число шагов.

Блуждание по сферам с вероятностью 1 сходится либо к точке на боковой поверхности пространственно-временного цилиндра, либо к точке на его нижнем основании, так как функции $v_m(x, t)$ при $m = 1, \dots, n-1$ являются инвариантными, а функция $v_n(x, t) = t$ эксцессивна.

Блуждание по цилиндрам с вероятностью 1 сходится либо к точке на боковой поверхности пространственно-временного цилиндра, либо обрывается на его границе за конечное число шагов. Действительно, при некоторой константе w функции $w + v_m(x, t)$ при $m = 1, \dots, n-1$ являются положительными и эксцессивными, а функция $v_n(x, t) = t$ также эксцессивна.

5.2.2. Статистические оценки

Стандартная последовательность несмещенных оценок (5.2.4) нереализуема, так как содержит функции $F(x)$ и $u(x)$, значения которых неизвестны. Чтобы получить реализуемую оценку, эти функции оценивают либо несмещенно, либо с «малым» смещением. Опишем соответствующую процедуру, следуя [8]. Будем предполагать, что выполнено следующее условие:

последовательность $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ п.н. сходится на множестве $\{\tau_1 = \infty\}$ к некоторой точке $x_{\infty} \in \partial Q$.

Пусть $\delta > 0$, τ_2 — момент первого попадания цепи в δ -окрестность границы ∂Q и $\tau_{\delta} = \min(\tau_1, \tau_2)$. Для марковской цепи, удовлетворяющей этому условию, величина τ_{δ} п.н. конечна.

Последовательность несмещенных оценок $\{\xi_i\}_{i=0}^{\infty}$ для решения $u(x)$ задачи (5.2.1) будем называть *допустимой*, если существует последовательность σ -алгебр $\{\mathfrak{B}_i\}_{i=0}^{\infty}$ таких, что $\mathfrak{A}_i \subseteq \mathfrak{B}_i$ и $\mathfrak{B}_i \subseteq \mathfrak{B}_{i+1}$, а ξ_i имеет вид $\xi_i = \zeta_i + \chi_i u(x_i)$, где $\zeta_i - \mathfrak{B}_i$ измерима. Для допустимой последовательности оценок определим случайную величину ξ_{δ} равенством $\xi_{\delta} = \zeta_{\tau_{\delta}} + \chi u(x_{\tau_{\delta}}^*)$, где χ — индикатор события $\{\tau_1 > \tau_2\}$, а $x_{\tau_{\delta}}^*$ — точка границы, отстоящая от точки $x_{\tau_{\delta}}$ на расстояние, не большее чем δ . Справедлива

Теорема 4. ([8], теорема 2.3.2). *Если допустимая последовательность оценок $\{\xi_i\}_{i=0}^{\infty}$ образует квадратично-интегрируемый мартингал относительно семейства σ -алгебр $\{\mathfrak{B}_i\}_{i=0}^{\infty}$, указанного в ее определении, то случайная величина ξ_{δ} является $\varepsilon(\delta)$ -смещенной для непрерывной функции $u(x)$ ($\varepsilon(\delta)$ — модуль непрерывности функции $u(x)$), а ее дисперсия есть ограниченная функция параметра δ .*

Условие квадратичной интегрируемости стандартной последовательности оценок вытекает из следующей леммы.

Лемма 3. Пусть уравнение (5.2.1) имеет ограниченные решения для правой части $F(x)$ и $|F(x)|$, тогда стандартная последовательность несмещенных оценок образует квадратично-интегрируемый мартингал относительно потока σ -алгебр $\{\mathfrak{A}_i\}_{i=0}^\infty$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Заметим, что потенциал $GF^2(x) \leq \|F\|G|F(x)| < \infty$. Поэтому для стандартной оценки справедливо неравенство

$$\begin{aligned}
 E_x \eta_i^2 &\leq 2E_x \left(\sum_{j=0}^{\infty} \chi_j |F(x_j)| \right)^2 + 2\|u\|^2 = \\
 &= 2E_x \sum_{j=0}^{\infty} \chi_j F^2(x_j) + 4E_x \left(\sum_{j=0}^{\infty} \chi_j |F(x_j)| \sum_{m=j+1}^{\infty} \chi_m |F(x_m)| \right) + 2\|u\|^2 = \\
 &= 2GF^2(x) + 4E_x \sum_{j=0}^{\infty} \chi_j |F(x_j)| E_x \left(\chi_j \sum_{m=j+1}^{\infty} \chi_m |F(x_m)| \mid \mathfrak{A}_j \right) + 2\|u\|^2 = \\
 &= 2GF^2(x) + 4E_x \sum_{j=0}^{\infty} \chi_j |F(x_j)| (G|F|(x_j) - |F(x_j)|) + 2\|u\|^2 \leq \\
 &\leq 2GF^2(x) + 4\|(G|F| - |F|)\|G|F|(x) + 2\|u\|^2.
 \end{aligned}$$

■

Функцию $F(x)$ обычно представляют в виде $F(x) = h(x)Ef(Y)$, где $h(x) > 0$, случайная величина Y имеет распределение, зависящее от x , а функция $f(y)$ является правой частью дифференциального уравнения или значением его решения на границе. Пусть $\{y_j\}_{j=0}^\infty$ — последовательность случайных величин, таких что

$$F(x_i) = h(x_i)E(f(y_i) \mid \mathfrak{A}_i) \quad (5.2.6)$$

п.н. и $\mathfrak{B}_i$ — минимальная σ -алгебра, порожденная $\mathfrak{A}_i$ и последовательностью $\{y_j\}_{j=0}^i$, тогда последовательность несмещенных оценок

$$\xi_i = \sum_{j=0}^{i-1} h(x_j)f(y_j)\chi_j + \chi_i u(x_i) \quad (5.2.7)$$

является допустимой. Такие оценки будем по традиции называть *оценками по столкновениям*. Если уравнение (5.2.1) имеет ограниченное решение $\tilde{u}(x)$ для правой части $F(x) = h(x)$, то из леммы 3 следует, что последовательность несмещенных оценок

$$\tilde{\xi}_i = \sum_{j=0}^{i-1} h(x_j)\chi_j + \chi_i \tilde{u}(x_i) \quad (5.2.8)$$

образует квадратично-интегрируемый мартингал относительно потока σ -алгебр $\{\mathfrak{A}_i\}_{i=0}^\infty$. Отсюда, очевидно, следует

Лемма 4. Пусть уравнение (5.2.1) имеет ограниченное решение для правой части $F(x) = h(x)$. Тогда для правой части вида (5.2.6) с ограниченной функцией $f(x)$ уравнение (5.2.1) также имеет ограниченное решение, и последовательность несмещенных оценок (5.2.7) образует квадратично-интегрируемый мартингал относительно потока σ -алгебр $\{\mathfrak{B}_i\}_{i=0}^\infty$.

Отметим, что во всех примерах, рассмотренных выше, условие леммы 4 выполняется, если соответствующие краевые задачи имеют ограниченные решения необходимой гладкости для постоянной правой части (при нулевом граничном условии) и нулевой правой части дифференциального уравнения (при постоянном граничном условии). В последнем случае $h(x) = P(x, \Gamma_0)$, где Γ_0 — множество точек границы ∂Q , входящих в носитель меры $P(x, dy)$. При этом $h(x)$ имеет смысл вероятности обрыва траектории на границе ∂Q . В этом случае в качестве вектора y_i , обычно, используют следующую точку траектории, то есть полагают $y_i = x_{i+1}$. В итоге получается оценка по поглощению.

Для точной оценки математического ожидания $E_x \tau_\delta$ обычно используют теорему восстановления. Тот факт, что это математическое ожидание конечно, легко получить, используя оценки (5.2.8).

Лемма 5. Пусть уравнение (5.2.1) имеет ограниченные решения для правой части $F(x) = h(x)$ и существует постоянная $c(\delta)$, такая что выполнено неравенство $h(x) \geq c(\delta) > 0$ для всех $x \in Q$, удовлетворяющих условию $\rho(x, \partial Q) \geq \delta$. Тогда справедливо неравенство $E_x \tau_\delta \leq Gh(x)/c(\delta)$.

Применим лемму (5) к примерам 1-4.

Для блуждания по сферам $h(x) = R^2(x)/2n$, константа $c(\delta) = \delta^2/2n$ и $E_x \tau_\delta \leq \text{const}/\delta^2$. Известна точная оценка [8] $E_x \tau_\delta \leq c|\ln \delta|$.

Для блуждания по эллипсоидам $h(x) = R_1^2(x)/2n > 0$, константа $c(\delta) = \inf \{R_1^2(x)/2n | \text{dist}(x, \Gamma) > \delta\}$ и $E_x \tau_\delta \leq \text{const}/c(\delta)$.

Для блуждания по сфероидам

$$h(x, t) = \frac{r^{\frac{2}{n}}(x, t)}{4(1 + \frac{2}{n})^{(1+\frac{n}{2})}} \geq \frac{\min(2e\delta^2/n, 4\delta)}{4(1 + \frac{2}{n})^{(1+\frac{n}{2})}} = c(\delta)$$

и $E_x \tau_\delta \leq t/c(\delta) \leq \text{const}/\delta^2$.

Для блуждания по цилиндрам нужно рассмотреть решение уравнения с правой частью $f(x) \equiv 1$, нулевым граничным условием и начальным условием $u(x, 0) \equiv 1$ вне δ -окрестности границы ∂Q . Тогда,

как показано в [18]

$$h(x, t) = \frac{R^2(x)}{2n} P_x \left(\gamma \theta < \frac{n}{2} \right),$$

если $t > R^2(x)/2n$ и

$$h(x, t) = t P_x \left(\gamma \theta < \frac{R^2(x)}{4t} \right) + P_x \left(\gamma < \frac{R^2(x)}{4t} \right),$$

если $t \leq R^2(x)/2n$. Случайная величина γ имеет гамма распределение, а θ распределена равномерно на отрезке $[0, 1]$. При $R(x) \geq \delta$ справедливо неравенство

$$\begin{aligned} h(x, t) &\geq \min(t, \delta^2/2n) P_x \left(\gamma \theta < \frac{n}{2} \right) + P_x \left\{ t \leq \frac{R^2(x)}{2n} \right\} P_x \left(\gamma < \frac{n}{2} \right) = \\ &= \min(t, \delta^2/2n) c_1 + P_x \left\{ t \leq \frac{R^2(x)}{2n} \right\} c_2 \geq \min(c_2, c_1 \delta^2/2n), \end{aligned}$$

где константы обозначают соответствующие вероятности. При достаточно малом δ функция $h(x, t) \geq c_1 \delta^2/2n$, поэтому $E_x \tau_\delta \leq \text{const}/\delta^2$.

Отметим, что в *схеме Неймана—Улама с весами* можно доказать аналогичные утверждения. Остановимся кратко на одном частном случае такой схемы. А именно, предположим, что ядро $P(x, B)$ абсолютно непрерывно относительно субстохастического ядра $\tilde{P}(x, B)$, а плотность $\tilde{p}(x, y) \leq 1$. На траекториях марковской цепи с переходной функцией $\tilde{P}(x, B)$ определим весовую последовательность q_i , $i = 0, 1, \dots$, равенствами $q_0 = 1$, $q_i = q_{i-1} \tilde{p}(x_{i-1}, x_i)$ при $i = 1, 2, \dots$. Рассмотрим последовательность несмещенных оценок для $u(x)$:

$$\eta_i = \sum_{j=0}^{i-1} h(x_j) q_j f(y_j) \tilde{\chi}_j + \tilde{\chi}_i q_i u(x_i), \quad (5.2.9)$$

где $\tilde{\chi}_i$ — индикатор события $\{\tilde{\tau} > i\}$, а $\tilde{\tau}$ — момент обрыва новой цепи Маркова. Отметим, что оценка (5.2.7) получается из оценки (5.2.9) путем рандомизации весовых коэффициентов, поэтому имеет больший второй момент.

5.3. ЗАДАЧА КОШИ

Рассмотрим задачу Коши

$$\begin{aligned} L(x, t, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t}) u(x, t) &= f(x, t), \\ u(x, 0) &= \varphi(x). \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

Известно [3], что если функция f удовлетворяет условию Гёльдера по всем своим аргументам, φ непрерывна, а f и φ растут при $|x| \rightarrow \infty$ не быстрее $e^{a|x|^2}$, то решение задачи Коши может быть записано в виде суммы потенциалов:

$$u(x, t) = \int_0^t d\tau \int_{R^n} Z(x, y, t, \tau) f(y, \tau) dy + \int_{R^n} Z(x, y, t, 0) \varphi(y) dy. \quad (5.3.2)$$

Константа a зависит от T и коэффициентов уравнения.

Обсудим кратко известные методы решения задачи Коши. Из представления (5.3.2) следует, что при $a_0(x) \equiv 0$ фундаментальное решение является плотностью вероятностей по переменной y , поэтому при известном фундаментальном решении интегралы в (5.3.2) легко вычислить методом Монте-Карло.

Для уравнений с постоянными коэффициентами для этого в силу (5.1.14) и (5.3.2) достаточно уметь моделировать нормально распределенный случайный вектор в R^n со средним $(x_1 - a_1(t - \tau), \dots, x_n - a_n(t - \tau))'$ и ковариационной матрицей $2(t - \tau)A$, а также равномерное распределение на отрезке $[0, t]$. Пусть γ — случайная величина, имеющая гамма распределение с параметром $\frac{n}{2}$, а ω — изотропный случайный вектор в R^n . Если γ и ω независимы, то случайный вектор

$$Y(x, t, \tau) = x - (t - \tau)\bar{a} + \sqrt{4(t - \tau)\gamma}\sqrt{A}\omega \quad (5.3.3)$$

имеет требуемое распределение. Здесь $\sqrt{A}$ — треугольная матрица квадратного корня из матрицы A , то есть $A = \sqrt{A}(\sqrt{A})'$. Вектор $\bar{a}$ составлен из коэффициентов a_i . Пусть случайная величина θ имеет равномерное распределение на отрезке $[0, 1]$, а γ , θ и ω независимы в совокупности, тогда случайная величина

$$\xi_0(x, t) = t \cdot e^{-a_0 t(1-\theta)} \cdot f(Y(x, t, t\theta), t\theta) + e^{-a_0 t} \cdot \varphi(Y(x, t, 0), 0) \quad (5.3.4)$$

является несмещенной оценкой решения $u(x, t)$.

Если коэффициенты уравнения (5.3.1) и его правая часть не зависят от времени, то существует однородный диффузионный процесс X_s , стартовый из точки x , на траекториях которого справедливо вероятностное представление функции $u(x, t)$,

$$\begin{aligned} u(x, t) = E_x \int_0^t \exp \left(- \int_0^s a_0(X_\tau) d\tau \right) f(X_s) ds + \\ + E_x \exp \left(- \int_0^t a_0(X_s) ds \right) \varphi(X_t), \end{aligned} \quad (5.3.5)$$

в котором символ E_x обозначает математическое ожидание следующей за ним случайной величины. Представление (5.3.5) явно указывает вид

несмещенных статистических оценок для $u(x, t)$ на траекториях процесса X_s . Отметим, что реализация этих оценок связана с моделированием траекторий случайного процесса. Для этого требуется решать систему стохастических дифференциальных уравнений численно, что приводит к смещенным оценкам для $u(x, t)$ и затрудняет вычисление погрешности. В работах [43, 45] Вагнер предложил и исследовал метод домножения оценки на весовой множитель с целью сохранения ее несмещенности. А именно, для диффузионного процесса рассматривается задача оценивания функционала $Eg(X_t)$. Стохастическое дифференциальное уравнение для процесса решается методом Эйлера. Пусть $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_m = t$, и $Y_{t_0}, Y_{t_1}, \dots, Y_{t_m}$ — эйлерова аппроксимация диффузионного процесса, $p_y(Y)$ — значение плотности конечномерного распределения этого процесса на построенной реализации Y , наконец, ζ — несмещенная оценка плотности конечномерного распределения диффузионного процесса, тогда выражение $\zeta g(Y_{t_m})/p_y(Y)$, очевидно, будет несмещенной оценкой для функционала $Eg(X_t)$. В работе построены оценки ζ , имеющие конечные моменты при достаточно малом шаге в методе Эйлера. Результаты работы [43] также представлены в [8]. В работах [44, 46, 47] рассмотрены алгоритмы метода Монте-Карло для вычисления других функционалов на траекториях диффузионных процессов.

Наконец, для случая дифференцируемых коэффициентов уравнения можно получить, используя формулы Грина, интегральное уравнение для $u(x, t)$, и решить его методом Монте-Карло. Такие алгоритмы рассмотрены в работах [4] и [5] для уравнений, главной частью которых является оператор Лапласа. На уравнение с переменной матрицей старших коэффициентов они непосредственно не переносятся.

Мы будем строить несмещенные оценки решения задачи Коши и функционалов от него на траекториях случайных блужданий. В основе построений лежит формула (5.3.2), в которой каждый интеграл оценивается по одному случайному узлу. Фундаментальное решение является функционалом от решения интегрального уравнения Вольтерра (5.1.7), поэтому оценка для него находится по схеме Неймана—Улама [6].

Для уравнений с гладкими коэффициентами само решение задачи Коши удовлетворяет интегральному уравнению Вольтерра со слабо положительным ядром, к которому также применима схема Неймана—Улама.

5.3.1. Несмещенные оценки решения задачи Коши

Из представления (5.3.2) для решения задачи Коши и формулы (5.1.6) для фундаментального решения следует, что решение задачи Коши распадается в сумму четырех потенциалов:

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= u_1(x, t) + u_2(x, t) + u_3(x, t) + u_4(x, t) = \\
&= \int_0^t d\tau \int_{R^n} Z_0(x - y, y, t, \tau) f(y, \tau) dy + \int_{R^n} Z_0(x - y, y, t, 0) \varphi(y) dy + \\
&+ \int_0^t d\tau \int_{R^n} \left(\int_\tau^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) Q(z, y, \lambda, \tau) dz \right) f(y, \tau) dy + \\
&+ \int_{R^n} \left(\int_0^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) Q(z, y, \lambda, 0) dz \right) \varphi(y) dy. \quad (5.3.6)
\end{aligned}$$

В силу неравенства (5.1.5) для несмещенного оценивания $u_1(x, t)$ и $u_2(x, t)$ можно использовать плотность Z_1 . Нормально распределенный случайный вектор Y , имеющий плотность $Z_1(x - y, t - \tau)$, можно моделировать по формуле (5.3.3), которая теперь примет вид

$$Y(x, t, \tau) = x + \sqrt{4\mu(t - \tau)\gamma}\omega. \quad (5.3.7)$$

Пусть

$$Y = Y(x, t, t\theta),$$

а функция

$$W = \frac{Z_0}{Z_1},$$

тогда, аналогично (5.3.4), несмещенными оценками $u_1(x, t)$ и $u_2(x, t)$ будут

$$\xi_1(x, t) = t \cdot W(x - Y, Y, t, t\theta) \cdot f(Y, t\theta) \quad (5.3.8)$$

и

$$\xi_2(x, t) = W(x - Y, Y, t, 0) \cdot \varphi(Y) \quad (5.3.9)$$

соответственно. Случайные элементы γ, θ, ω в этих формулах должны быть независимы в совокупности. Если функции f и φ ограничены, то дисперсии построенных оценок конечны, поскольку функция W также ограничена в силу неравенства (5.1.5).

Пусть функции f и φ — ограничены. Тогда в выражениях для u_3 и u_4 в формуле (5.3.6) можно менять порядок интегрирования, поскольку повторные интегралы сходятся абсолютно в силу неравенств (5.1.5) и (5.1.13).

Рассмотрим функции

$$v_3(z, \lambda) = \int_0^\lambda d\tau \int_{R^n} Q(z, y, \lambda, \tau) f(y, \tau) dy, \quad (5.3.10)$$

$$v_4(z, \lambda) = \int_{R^n} Q(z, y, \lambda, 0) \varphi(y) dy. \quad (5.3.11)$$

Тогда

$$u_3(x, t) = \int_0^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) v_3(z, \lambda) dz, \quad (5.3.12)$$

$$u_4(x, t) = \int_0^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) v_4(z, \lambda) dz. \quad (5.3.13)$$

В силу неравенства (5.1.13) функция $v_3(z, \lambda)$ — ограничена, а

$$v_4(z, \lambda) \leq \text{const} \cdot \lambda^{\frac{\alpha}{2}-1}.$$

Умножая уравнение (5.1.7) на $f(y, \tau)$ и интегрируя, получим для v_3 интегральное уравнение

$$\begin{aligned} v_3(x, t) + \int_0^t d\lambda \int_{R^n} K(x, z, t, \lambda) v_3(z, \lambda) dz + \\ + \int_0^t d\tau \int_{R^n} K(x, y, t, \tau) f(y, \tau) dy = 0. \end{aligned} \quad (5.3.14)$$

Аналогично, подставляя в (5.1.7) $\tau = 0$, умножая его на $\varphi(y)$ и интегрируя по y , получаем для v_4 уравнение

$$\begin{aligned} v_4(x, t) + \int_0^t d\lambda \int_{R^n} K(x, z, t, \lambda) v_4(z, \lambda) dz + \\ + \int_{R^n} K(x, y, t, 0) \varphi(y) dy = 0. \end{aligned} \quad (5.3.15)$$

Из неравенства (5.1.11) следует, что к уравнениям (5.3.14) и (5.3.15) применима схема Неймана—Улама [6]. Для ее реализации достаточно выбрать плотность вероятности перехода обрывающейся цепи Маркова, согласованную с ядром уравнения $K(x, z, t, \lambda)$. В качестве такой плотности можно взять, например,

$$p((x, t) \rightarrow (z, \lambda)) = \frac{\alpha(1-q)}{2t^{\frac{\alpha}{2}}}(t-\lambda)^{\frac{\alpha}{2}-1} Z_2(x-z, t-\lambda), \quad (5.3.16)$$

где $0 < q < 1$ является вероятностью обрыва цепи на текущем шаге, а

$$Z_2(x-z, t-\lambda) = \left(\frac{C}{\pi(t-\lambda)} \right)^{\frac{n}{2}} \exp \left(-C \frac{|x-z|^2}{t-\lambda} \right) \quad (5.3.17)$$

при $0 \leq \lambda < t$. При $\lambda > t$ функция $Z_2(x-z, t-\lambda) = 0$. Постоянная C в этих формулах берется из неравенства (5.1.9), которое также влечет согласованность плотности и ядра интегрального уравнения. Отметим,

что вероятность обрыва цепи на каждом шаге постоянна, поэтому цепь обрывается с вероятностью 1 и среднее число шагов до обрыва равно q^{-1} .

Для моделирования цепи $\{(x_m, t_m)\}_{m=1}^{\infty}$, стартующей из точки $(x_0, t_0) = (x, t)$, будем использовать независимые в совокупности изотропные случайных векторы $\{\omega_m\}_{m=1}^{\infty}$ и случайные величины $\{\gamma_m\}_{m=1}^{\infty}$, имеющие гамма распределение с параметром $n/2$. Предполагается также, что эти случайные элементы статистически не зависят от выбранных ранее элементов ω, θ, γ .

Пусть, кроме того, $\{\beta_m\}_{m=1}^{\infty}$ последовательность случайных величин, независимых в совокупности с определенными ранее и имеющих на отрезке $[0, 1]$ бета-распределение с параметрами $(1, \frac{\alpha}{2})$. Плотность распределения

$$p(s) = \frac{\alpha}{2}(1-s)^{\frac{\alpha}{2}-1}. \quad (5.3.18)$$

Тогда, при $m = 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned} t_m &= t_{m-1}\beta_m, \\ x_m &= x_{m-1} + \sqrt{C^{-1}(t_{m-1} - t_m)\gamma_m\omega_m}. \end{aligned} \quad (5.3.19)$$

Момент обрыва цепи N имеет геометрическое распределение с параметром q , то есть $P\{N = m\} = q(1-q)^m$ при $m = 0, 1, 2, \dots$, и не зависит от траектории. При построении несмещенных оценок для решения уравнения

$$v(x, t) + \int_0^t d\lambda \int_{R^n} K(x, z, t, \lambda)v(z, \lambda)dz + F(x, t) = 0 \quad (5.3.20)$$

определим последовательность весовых функций при $m = 1, 2, \dots$:

$$\begin{aligned} W^{(0)} &= 1, \\ W^{(m)} &= (-1)^{m+1}W^{(m-1)} \frac{K(x_{m-1}, x_m, t_{m-1}, t_m)}{p((x_{m-1}, t_{m-1}) \rightarrow (x_m, t_m))}. \end{aligned} \quad (5.3.21)$$

Стандартными несмещенными оценками [6] для функции $v(x, t)$ являются случайные величины

$$\eta(x, t) = \sum_{m=0}^N W^{(m)}F(x_m, t_m) \quad (5.3.22)$$

и

$$\zeta(x, t) = \frac{W^{(N)}F(x_N, t_N)}{q}. \quad (5.3.23)$$

В качестве функции $F(x, t)$ в уравнении (5.3.14) берется

$$F(x, t) = \int_0^t d\tau \int_{R^n} K(x, y, t, \tau) f(y, \tau) dy,$$

поэтому несмещенными оценками для $v_3(x, t)$ будут

$$\eta_3(x, t) = (1 - q) \sum_{m=0}^N W^{(m+1)} f(x_{m+1}, t_{m+1})$$

и

$$\zeta_3(x, t) = \frac{(1 - q) W^{(N+1)} f(x_{N+1}, t_{N+1})}{q}.$$

Полагая $Y = Y(x, t, t\theta)$, для функции $u_3(x, t)$ получаем две несмещенные оценки:

$$\xi_3(x, t) = t \cdot W(x - Y, Y, t, t\theta) \cdot \eta_3(Y, t\theta) \quad (5.3.24)$$

и

$$\xi_3'(x, t) = t \cdot W(x - Y, Y, t, t\theta) \cdot \zeta_3(Y, t\theta). \quad (5.3.25)$$

В уравнении (5.3.15) роль функции $F(x, t)$ выполняет функция

$$F_1(x, t) = \int_{R^n} K(x, y, t, 0) \varphi(y) dy,$$

которая неограничена. Поэтому аналогичные несмещенные оценки для $v_4(x, t)$ имеют бесконечную дисперсию. Чтобы получить оценки с конечной дисперсией, нужно при оценивании $F(x, t)$ включить особенность ядра $K(x, y, t, 0)$ в плотность. Для этого запишем $v_4(x, t)$ в виде разности $v_4(x, t) = v_5(x, t) - F_1(x, t)$. Тогда для $v_5(x, t)$ справедливо уравнение (5.3.20), в котором функция

$$\begin{aligned} F(x, t) &= F_2(x, t) = \\ &= - \int_0^t d\lambda \int_{R^n} K(x, z, t, \lambda) \int_{R^n} K(z, y, \lambda, 0) \varphi(y) dy dz \end{aligned} \quad (5.3.26)$$

уже ограничена. Таким образом,

$$u_4(x, t) = - \int_0^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) \int_{R^n} K(z, y, \lambda, 0) \varphi(y) dy dz + u_5(x, t). \quad (5.3.27)$$

Для оценки интеграла в (5.3.27) возьмем случайную величину β , имеющую бета-распределение с параметрами $(\frac{\alpha}{2}, 1)$. Положим

$$\begin{aligned} Y &= Y(x, t, t\beta), \quad y_0 = Y, \quad y_1 = y_0 + \sqrt{C^{-1}(t\beta)\gamma_1}\omega_1, \\ W_1 &= -t \frac{2}{\alpha} \beta^{1-\frac{\alpha}{2}} \frac{K(y_0, y_1, t\beta, 0)}{Z_2(y_1 - y_0, t\beta)}, \\ \xi_4(x, t) &= W(x - Y, Y, t, t\beta) \cdot W_1 \cdot \varphi(y_1). \end{aligned} \quad (5.3.28)$$

Случайная величина $\xi_4(x, t)$ — несмещенная оценка интеграла.

Функцию $u_5(x, t)$ оцениваем на траекториях цепи Маркова. Для этого требуется получить несмещенную оценку $F_2(x_m, t_m)$. Интегралы (5.3.26) и (5.3.27) имеют одинаковую структуру и одинаково оцениваются. Теперь случайная величина β имеет бета-распределение с параметрами $(\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2})$. Построение оценки завершают формулы

$$\begin{aligned} y_0 &= x_m + \sqrt{C^{-1}(t_m - t_m\beta)\gamma_{m+1}}\omega_{m+1}, \\ y_1 &= y_0 + \sqrt{C^{-1}t_m\beta\gamma_{m+2}}\omega_{m+2}, \\ W_m &= -t_m B\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}\right) \beta^{1-\frac{\alpha}{2}} (1-\beta)^{1-\frac{\alpha}{2}} \times \\ &\times \frac{K(x_m, y_0, t_m, t_m\beta)}{Z_2(x_m - y_0, t_m - t_m\beta)} \frac{K(y_0, y_1, t_m\beta, 0)}{Z_2(y_0 - y_1, t_m\beta)}, \\ \phi_m &= W_m \varphi(y_1). \end{aligned} \quad (5.3.29)$$

Здесь ϕ_m — несмещенная оценка $F_2(x_m, t_m)$, а

$$B\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}\right) = \int_0^1 s^{\frac{\alpha}{2}-1} (1-s)^{\frac{\alpha}{2}-1} ds$$

— бета-функция. По аналогии с оценками для $u_3(x, t)$ получаем несмещенные оценки для $u_5(x, t)$:

$$\xi_5(x, t) = t \cdot W(x - Y, Y, t, t\theta) \cdot \sum_{m=0}^N W^{(m)} \phi_m, \quad (5.3.30)$$

$$\xi_5'(x, t) = t \cdot W(x - Y, Y, t, t\theta) \cdot \frac{W^{(N)} \phi_N}{q}, \quad (5.3.31)$$

которые построены на траекториях цепи Маркова, стартовой из точки $(Y, t\theta)$.

Почти очевидным следствием включения всех особенностей в плотности вероятностей перехода марковской цепи является конечность дисперсии построенных оценок. Действительно, дисперсии стандартных оценок в схеме Неймана—Улама заведомо конечны [6], если ряд

Неймана для ядра K^2/p сходится в том функциональном пространстве, в котором решается интегральное уравнение (5.3.20). В нашем случае это пространство $L_\infty(D_{n+1}^{(T)})$. Поскольку

$$\frac{|K|}{p} \leq \frac{2c}{\alpha(1-q)} \left(\frac{\pi}{C}\right)^{\frac{n}{2}} = c_2,$$

для оператора Вольтерра с ядром K^2/p выполнено неравенство

$$\frac{K^2(x, y, t, \tau)}{p((x, t) \rightarrow (y, \tau))} \leq cc_2(t - \tau)^{-\frac{n+2-\alpha}{2}} \exp\left(-C\frac{|x - y|^2}{t - \tau}\right), \quad (5.3.32)$$

которое влечет сходимость ряда Неймана. Отметим, что дисперсии оценок равномерно ограничены при ограниченных f и φ .

Таким образом, доказана

Теорема 5. Пусть коэффициенты параболического оператора (5.1.1) принадлежат классу $H^{\alpha, \frac{\alpha}{2}}(\overline{D_{n+1}^{(T)}})$, $\alpha < 1$, матрица коэффициентов при старших производных — симметричная, а ее собственные числа лежат в фиксированном отрезке $[\nu, \mu]$ и $\nu > 0$. Пусть функция $f(x, t)$ из класса $H^{\alpha, \frac{\alpha}{2}}(\overline{D_{n+1}^{(T)}})$ и непрерывная функция $\varphi(x)$ ограничены. Тогда случайные величины $\xi = \xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + \xi_4 + \xi_5$ и $\xi' = \xi_1 + \xi_2 + \xi'_3 + \xi_4 + \xi'_5$, определяемые формулами (5.3.8), (5.3.9), (5.3.24), (5.3.25), (5.3.28) — (5.3.31), являются несмещенными оценками решения задачи Коши (5.3.1). Дисперсии оценок равномерно ограничены по переменным x, t .

5.3.2. Определение постоянных c и C

Вычислив производные в представлении (5.1.8) ядра K , получим

$$\begin{aligned} K(x, y, t, \tau) = & -\frac{1}{2(t - \tau)}[n - \text{Tr}(A(x, t)A^{-1}(y, \tau))]Z_0 + \\ & + \frac{1}{4(t - \tau)^2}(x - y)'A^{-1}(y, \tau)[A(y, \tau) - A(x, t)]A^{-1}(y, \tau)(x - y)Z_0 - \\ & - \frac{1}{2(t - \tau)}a'(x, t)A^{-1}(y, \tau)(x - y)Z_0 + a_0(x, t)Z_0, \end{aligned} \quad (5.3.33)$$

где функция $\text{Tr}(\cdot)$ — вычисляет след матрицы, $a(x, t)$ — столбец с компонентами $a_i(x, t)$, а операция a' означает транспонирование матрицы.

В качестве C можно взять любую постоянную, удовлетворяющую неравенству $4\mu C < 1$.

Пусть A, B — симметричные матрицы с постоянными элементами, удовлетворяющими условиям

$$|a_{i,j}(x, t) - a_{i,j}(y, \tau)| \leq \tilde{a}_{i,j}|x - y|^\alpha + \tilde{b}_{i,j}|t - \tau|^{\frac{\alpha}{2}},$$

а S — ортогональная матрица, приводящая матрицу $A^{-1}(y, \tau)$ к диагональному виду. Тогда,

$$\begin{aligned} n - \text{Tr}(A(x, t)A^{-1}(y, \tau)) &= \text{Tr}(S'(A(y, \tau) - A(x, t))SS'A^{-1}(y, \tau)S) = \\ &= \sum_{j=1}^n \lambda_j S'_j(A(y, \tau) - A(x, t))S_j = \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n \lambda_j s_{k,j} (a_{k,m}(y, \tau) - a_{k,m}(x, t)) s_{m,j}, \end{aligned}$$

где S_j — j -й столбец матрицы S , а λ_j — j -е собственное число матрицы $A^{-1}(y, \tau)$. Отсюда получаем неравенства

$$\begin{aligned} |n - \text{Tr}(A(x, t)A^{-1}(y, \tau))| &\leq \frac{1}{\nu} \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n |a_{k,m}(y, \tau) - a_{k,m}(x, t)| \leq \\ &\leq \frac{1}{\nu} \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n \left(\tilde{a}_{k,m} |x - y|^\alpha + \tilde{b}_{k,m} |t - \tau|^{\frac{\alpha}{2}} \right) = \tilde{c}_1 |x - y|^\alpha + \tilde{c}_2 |t - \tau|^{\frac{\alpha}{2}}. \end{aligned} \quad (5.3.34)$$

Несложные выкладки дают следующие оценки сверху для квадратичной формы в равенстве (5.3.33):

$$\begin{aligned} (x - y)' A^{-1}(y, \tau) [A(y, \tau) - A(x, t)] A^{-1}(y, \tau) (x - y) &\leq \\ &\leq \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n |z_k| \left(\tilde{a}_{k,m} |x - y|^\alpha + \tilde{b}_{k,m} |t - \tau|^{\frac{\alpha}{2}} \right) |z_k| \leq \\ &\leq \left(\|\tilde{A}\| |x - y|^\alpha + \|\tilde{B}\| |t - \tau|^{\frac{\alpha}{2}} \right) |z|^2 \leq \\ &\leq \left(\|\tilde{A}\| |x - y|^\alpha + \|\tilde{B}\| |t - \tau|^{\frac{\alpha}{2}} \right) \left(\frac{1}{\nu} |x - y| \right)^2 = \\ &= (\tilde{c}_3 |x - y|^\alpha + \tilde{c}_4 |t - \tau|^{\frac{\alpha}{2}}) |x - y|^2, \end{aligned} \quad (5.3.35)$$

где z_k — компоненты вектора $z = A^{-1}(y, \tau)(x - y)$.

Оценка билинейной формы в равенстве (5.3.33) имеет вид

$$\begin{aligned} |a'(x, t)A^{-1}(y, \tau)(x - y)| &\leq \\ &\leq \frac{1}{\nu} |a(x, t)| |x - y| \leq \frac{|\tilde{a}|}{\nu} |x - y| = \tilde{c}_5 |x - y|, \end{aligned} \quad (5.3.36)$$

где $\tilde{a}$ — вектор, компоненты которого оценивают компоненты вектора $a(x, t)$, то есть $|a_i(x, t)| \leq \tilde{a}_i$ при $i = 1, 2, \dots, n$. Из неравенств (5.3.34)–(5.3.36) получаем оценку сверху для $|K|$:

$$\begin{aligned}
|K(x, y, t, \tau)| &\leq \frac{1}{2(t-\tau)} (\tilde{c}_1|x-y|^\alpha + \tilde{c}_2|t-\tau|^{\frac{\alpha}{2}}) Z_0 + \\
&+ \frac{1}{4(t-\tau)^2} (\tilde{c}_3|x-y|^\alpha + \tilde{c}_4|t-\tau|^{\frac{\alpha}{2}})|x-y|^2 Z_0 + \\
&+ \frac{1}{2(t-\tau)} \tilde{c}_5|x-y| Z_0 + \tilde{a}_0 Z_0, \quad (5.3.37)
\end{aligned}$$

где $\tilde{a}_0$ — верхняя граница для $|a_0(x, t)|$. Запишем это неравенство в виде

$$|K(x, y, t, \tau)| \leq c(x, t, y, \tau)(t-\tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} Z_0,$$

где

$$\begin{aligned}
c(x, t, y, \tau) &= \frac{1}{2} \left(\tilde{c}_1 \frac{|x-y|^\alpha}{|t-\tau|^{\frac{\alpha}{2}}} + \tilde{c}_2 \right) + \frac{|x-y|^2}{4(t-\tau)} \left(\tilde{c}_3 \frac{|x-y|^\alpha}{|t-\tau|^{\frac{\alpha}{2}}} + \tilde{c}_4 \right) + \\
&+ \tilde{c}_5 \frac{|x-y|}{2|t-\tau|^{\frac{1}{2}}} (t-\tau)^{\frac{1-\alpha}{2}} + \tilde{a}_0 (t-\tau)^{1-\frac{\alpha}{2}}.
\end{aligned}$$

Применяя к Z_0 неравенство (5.1.5), получим

$$Z_0(x-y, y, t, \tau) \leq \left(\frac{1}{4\pi\nu} \right)^{\frac{n}{2}} \exp \left(-C_1 \frac{|x-y|^2}{(t-\tau)} \right) (t-\tau)^{-\frac{n}{2}} \exp \left(-C \frac{|x-y|^2}{(t-\tau)} \right),$$

где

$$C_1 = \frac{1}{4\mu} - C.$$

Пусть $\beta > 0$. Функция $s^\beta \exp(-Cs)$ ограничена на интервале $[0, +\infty)$ постоянной

$$M(\beta, C) = \left(\frac{\beta}{C} \right)^\beta \exp(-\beta),$$

поэтому

$$\begin{aligned}
c(x, t, y, \tau) \exp \left(-C_1 \frac{|x-y|^2}{(t-\tau)} \right) &\leq \frac{1}{2} \left(\tilde{c}_1 M \left(\frac{\alpha}{2}, C_1 \right) + \tilde{c}_2 \right) + \\
&+ \frac{1}{4} \left(\tilde{c}_3 M \left(1 + \frac{\alpha}{2}, C_1 \right) + \tilde{c}_4 M(1, C_1) \right) + \\
&+ \tilde{c}_5 \frac{1}{2} M \left(\frac{1}{2}, C_1 \right) T^{\frac{1-\alpha}{2}} + \tilde{a}_0 T^{1-\frac{\alpha}{2}} = \tilde{c}.
\end{aligned}$$

Отсюда получаем окончательное неравенство

$$|K(x, y, t, \tau)| \leq \left(\frac{1}{4\pi\nu} \right)^{\frac{n}{2}} \tilde{c} (t-\tau)^{-\frac{n+2-\alpha}{2}} \exp \left(-C \frac{|x-y|^2}{(t-\tau)} \right).$$

5.3.3. Оценка функционалов

Пусть $h(x, t)$ — интегрируемая на $D_{n+1}^{(T)}$ по мере Лебега функция. Для оценки функционала

$$\Phi(h) = \int_0^T dt \int_{R^n} h(x, t) u(x, t) dx \quad (5.3.38)$$

обычно выбирают плотность распределения начальной точки $\pi(x, t)$ и какую-либо несмещенную оценку $\xi(x, t)$ решения. Тогда величина

$$\frac{h(x_0, t_0) \xi(x_0, t_0)}{\pi(x_0, t_0)}$$

будет несмещенной оценкой $\Phi(h)$, если (x_0, t_0) имеет плотность распределения π , согласованную с функцией h . Дисперсия оценки функционала заведомо будет конечной, если функция

$$\frac{h^2(x, t)}{\pi(x, t)}$$

интегрируема на $D_{n+1}^{(T)}$ по мере Лебега, а в качестве $\xi(x_0, t_0)$ выбрана одна из ранее построенных несмещенных оценок для $u(x, t)$.

Для вычисления функционала $\Phi(h)$ можно использовать также «сопряженную» схему, предложенную в [7] для решения начально-краевой задачи. Для такой схемы ядро Z_0 можно включить в плотность вероятности перехода, что может привести к уменьшению дисперсии. По-существу, речь идет о построении несмещенных оценок функционалов от решения Q интегрального уравнения (5.1.7). Отметим, что реализация «сопряженной» схемы не требует вычисления констант c и C . Дополнительных условий гладкости от коэффициентов уравнения также не требуется. В отличие от «прямой» схемы, в «сопряженной» схеме не используются в явном виде границы спектра ν , μ матрицы коэффициентов при старших производных. Платой за такие преимущества является более сложная процедура построения несмещенных оценок.

Используя (5.3.2) и (5.1.6), запишем функционал $\Phi(h)$ (5.3.38) в виде

$$\begin{aligned} \Phi(h) &= \Phi_1(h) + \Phi_2(h) + \Phi_3(h) + \Phi_4(h) = \\ &= \int_0^T dt \int_{R^n} dx h(x, t) \int_0^t d\tau \int_{R^n} Z_0(x - y, y, t, \tau) f(y, \tau) dy + \\ &\quad + \int_0^T dt \int_{R^n} dx h(x, t) \int_{R^n} Z_0(x - y, y, t, 0) \varphi(y) dy + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^T dt \int_{R^n} dx h(x, t) \int_0^t d\tau \int_{R^n} \times \\
& \times \left(\int_\tau^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) Q(z, y, \lambda, \tau) dz \right) f(y, \tau) dy + \\
& + \int_0^T dt \int_{R^n} dx h(x, t) \int_{R^n} \times \\
& \times \left(\int_0^t d\lambda \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) Q(z, y, \lambda, 0) dz \right) \varphi(y) dy. \quad (5.3.39)
\end{aligned}$$

Заметим, что функция $Z_0(x - y, y, t, \tau)$ по переменной x является плотностью распределения нормального случайного вектора X , у которого матрица ковариаций есть $2(t - \tau)A(y, \tau)$, а среднее равно y . Такой вектор моделируется по формуле

$$X = y + \sqrt{2(t - \tau)} \sqrt{A(y, \tau)} \Xi,$$

где $\sqrt{A}$ — треугольная матрица квадратного корня из матрицы A , Ξ — нормальный случайный вектор с единичной матрицей ковариаций и нулевым средним.

Предполагая $\varphi(y)$ интегрируемой в R^n по мере Лебега, а $h(x, t)$ — ограниченной, получаем несмещенную оценку для $\Phi_2(h)$:

$$\phi_2 = T \frac{\varphi(Y)}{\pi_2(Y)} h \left(Y + \sqrt{2T\theta} \sqrt{A(Y, T\theta)} \Xi, T\theta \right), \quad (5.3.40)$$

где случайная величина θ распределена равномерно на отрезке $[0, 1]$, а случайный вектор Y имеет плотность распределения $\pi_2(y)$, согласованную с функцией $\varphi(y)$. Случайные элементы Ξ, θ, Y должны быть независимы в совокупности.

Предполагая $f(y, \tau)$ интегрируемой на $D_{n+1}^{(T)}$ по мере Лебега, меняя порядок интегрирования по переменным t и τ , аналогично получаем несмещенную оценку для $\Phi_1(h)$:

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= (T - \Theta) \frac{f(Y, \Theta)}{\pi_1(Y, \Theta)} h \times \\
& \times \left(Y + \sqrt{2(T - \Theta)\theta} \sqrt{A(Y, (T - \Theta)\theta)} \Xi, \Theta + (T - \Theta)\theta \right), \quad (5.3.41)
\end{aligned}$$

где случайный вектор (Y, Θ) имеет плотность распределения $\pi_1(y, \tau)$, согласованную с функцией $f(y, \tau)$. Случайные элементы Ξ, θ и (Y, Θ) должны быть независимы в совокупности.

Для оценивания $\Phi_3(h)$ сделаем замену переменной и представим его в виде

$$\begin{aligned}\Phi_3(h) = & \int_0^T d\tau \int_{R^n} dy f(y, \tau) \int_\tau^T d\lambda \int_{R^n} dz \int_\lambda^T dt \times \\ & \times \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) Q(z, y, \lambda, \tau) h(x, t) dx. \quad (5.3.42)\end{aligned}$$

Используя (5.1.12), получим следующие несмещенные оценки для $Q(z, y, \lambda, \tau)$:

$$\psi = - \sum_{m=1}^N \left(-\frac{1}{1-q} \right)^{m-1} K_m(z, y, \lambda, \tau), \quad (5.3.43)$$

$$\psi' = - \left(-\frac{1}{1-q} \right)^{N-1} \frac{K_N(z, y, \lambda, \tau)}{q}. \quad (5.3.44)$$

Здесь $0 < q < 1$, а N имеет геометрическое распределение, то есть $P(N = m) = q(1 - q)^{m-1}$, при $m = 1, 2, \dots$. Подставляя оценки (5.3.43) и (5.3.44) в (5.3.42), получим несмещенные оценки для $\Phi_3(h)$, которые подлежат дальнейшей рандомизации. Для этого нужно выполнить несмещенное оценивание функционалов

$$\begin{aligned}\Psi_m(h) = & \int_0^T d\tau \int_{R^n} dy f(y, \tau) \int_\tau^T d\lambda \int_{R^n} dz \int_\lambda^T dt \times \\ & \times \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) K_m(z, y, \lambda, \tau) h(x, t) dx. \quad (5.3.45)\end{aligned}$$

Воспользуемся процедурой оценивания, предложенной в [7] для решения начально-краевой задачи. Пусть $v(z, \lambda)$ — ограниченная функция в $D_{n+1}^{(T)}$. Рассмотрим интеграл

$$V(y, \tau) = \int_\tau^T d\lambda \int_{R^n} v(z, \lambda) K(z, y, \lambda, \tau) dz. \quad (5.3.46)$$

Пусть

$$S_1^0(y, \tau) = \{ \omega \in R^n | \omega^T A^{-1}(y, \tau) \omega = 1 \}$$

есть эллипсоид с центром в нуле,

$$\sigma_n = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2})}$$

— площадь поверхности сферы радиуса 1 в R^n . Случайный вектор Ω распределен на $S_1^0(y, \tau)$ с плотностью

$$p(y, \tau, \omega) = \frac{1}{\sigma_n \sqrt{\det(A(y, \tau))} |A^{-1}(y, \tau) \omega|}. \quad (5.3.47)$$

Его можно моделировать по формуле [8]

$$\Omega = \sqrt{A(y, \tau)} \Omega_1, \quad (5.3.48)$$

где Ω_1 — изотропный единичный вектор в пространстве. Тогда

$$\begin{aligned} V(y, \tau) = & - \int_{\tau}^T d\lambda \int_0^{\infty} dr E \left(\frac{n - \text{Tr} (A(y + r\Omega, \lambda) A^{-1}(y, \tau))}{(\lambda - \tau) \Gamma(\frac{n}{2}) (4(\lambda - \tau))^{\frac{n}{2}}} \times \right. \\ & \times \exp \left(-\frac{r^2}{4(\lambda - \tau)} \right) r^{n-1} v(y + r\Omega, \lambda) \Big) - \\ & - \int_{\tau}^T d\lambda \int_0^{\infty} dr E \frac{2r^2 [\Omega^T A^{-1}(y, \tau) A(y + r\Omega, \lambda) A^{-1}(y, \tau) \Omega - 1]}{4(\lambda - \tau)^2 \Gamma(\frac{n}{2}) (4(\lambda - \tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\ & \times \exp \left(-\frac{r^2}{4(\lambda - \tau)} \right) r^{n-1} v(y + r\Omega, \lambda) - \\ & - \int_{\tau}^T d\lambda \int_0^{\infty} dr E \left(\frac{r a'(y + r\Omega, \lambda) A^{-1}(y, \tau) \Omega}{(\lambda - \tau) \Gamma(\frac{n}{2}) (4(\lambda - \tau))^{\frac{n}{2}}} \times \right. \\ & \times \exp \left(-\frac{r^2}{4(\lambda - \tau)} \right) r^{n-1} v(y + r\Omega, \lambda) \Big) + \\ & + \int_{\tau}^T d\lambda \int_0^{\infty} dr E a_0(y + r\Omega, \lambda) v(y + r\Omega, \lambda) \frac{2r^{n-1}}{\Gamma(\frac{n}{2}) (4(\lambda - \tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\ & \times \exp \left(-\frac{r^2}{4(\lambda - \tau)} \right), \quad (5.3.49) \end{aligned}$$

где знак E означает математическое ожидание (по Ω). Из условия принадлежности коэффициентов уравнения классам Гёльдера вытекает следующее представление для выражений в первых двух интегралах:

$$\begin{aligned} n - \text{Tr} (A(y + r\Omega, \lambda) A^{-1}(y, \tau)) = \\ = \text{Tr} ([A(y, \tau) - A(y + r\Omega, \tau)] A^{-1}(y, \tau)) + \\ + \text{Tr} ([A(y + r\Omega, \tau) - A(y + r\Omega, \lambda)] A^{-1}(y, \tau)) = \\ = g_1(y + r\Omega, y, \tau) r^{\alpha} + g_2(y + r\Omega, y, \lambda, \tau) (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad (5.3.50) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\Omega^T A^{-1}(y, \tau) A(y + r\Omega, \lambda) A^{-1}(y, \tau) \Omega - 1] = \\ = \Omega^T A^{-1}(y, \tau) [A(y + r\Omega, \tau) - A(y, \tau)] A^{-1}(y, \tau) \Omega + \\ + \Omega^T A^{-1}(y, \tau) [A(y + r\Omega, \lambda) - A(y + r\Omega, \tau)] A^{-1}(y, \tau) \Omega = \\ = h_1(y + r\Omega, y, \tau) r^{\alpha} + h_2(y + r\Omega, y, \lambda, \tau) (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad (5.3.51) \end{aligned}$$

где g_1, g_2, h_1, h_2 являются ограниченными функциями. Подставляя эти выражения в (5.3.49) и выполняя замену переменной

$$s = \frac{r^2}{4(\lambda - \tau)},$$

получаем для $V(y, \tau)$ представление

$$\begin{aligned} V(y, \tau) = & - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^{\infty} ds \frac{2^{\alpha}}{2\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+\alpha}{2}-1} \exp(-s) \times \\ & \times E \left(g_1(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, y, \tau) v(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) \right) - \\ & - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^{\infty} ds \frac{1}{2\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n}{2}-1} \exp(-s) \times \\ & \times E \left(g_2(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, y, \lambda, \tau) v(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) \right) - \\ & - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^{\infty} ds \frac{2^{\alpha}}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+2+\alpha}{2}-1} \exp(-s) \times \\ & \times E \left(h_1(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, y, \tau) v(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) \right) - \\ & - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^{\infty} ds \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+2}{2}-1} \exp(-s) \times \\ & \times E \left(h_2(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, y, \lambda, \tau) v(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) \right) - \\ & - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{-\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} ds \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+1}{2}-1} \exp(-s) \times \\ & \times E \left(a'(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) A^{-1}(y, \tau) \Omega v(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) \right) + \\ & + \int_{\tau}^T d\lambda \int_0^{\infty} ds \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n}{2}-1} \exp(-s) \times \\ & \times E \left(a_0(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) v(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda) \right). \quad (5.3.52) \end{aligned}$$

Пусть $\gamma(m)$ — случайная величина, имеющая гамма распределение с параметром m . Тогда представление (5.3.52) можно записать в виде

$$\begin{aligned} V(y, \tau) = & - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \frac{2^{\alpha}\Gamma(\frac{n+\alpha}{2})}{2\Gamma(\frac{n}{2})} \times \\ & \times E g_1 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) (\lambda - \tau)} \Omega, y, \tau \right) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right) - \\
& - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \frac{1}{2} E g_2 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, y, \lambda, \tau} \right) \times \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right) - \\
& - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \frac{2^{\alpha} \Gamma(\frac{n+2+\alpha}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2})} E h_1 \times \\
& \times \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2+\alpha}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, y, \tau} \right) \times \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2+\alpha}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right) - \\
& - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \frac{n}{2} E h_2 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, y, \lambda, \tau} \right) \times \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right) - \\
& - \int_{\tau}^T d\lambda (\lambda - \tau)^{-\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2})} E a' \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+1}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right) A^{-1}(y, \tau) \Omega \times \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+1}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right) + \\
& + \int_{\tau}^T d\lambda E a_0 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right) v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (\lambda - \tau)\Omega, \lambda} \right).
\end{aligned} \tag{5.3.53}$$

Оценивая интегралы по переменной λ , получаем несмещенную оценку $\eta(y, \tau)$ для $V(y, \tau)$:

$$\begin{aligned}
\eta(y, \tau) = & -(T - \tau)^{\frac{\alpha}{2}} \frac{2^{\alpha} \Gamma(\frac{n+\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(\frac{n}{2})} g_1 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, y, \tau} \right) \times \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, \tau + (T - \tau)\vartheta} \right) - \\
& - (T - \tau)^{\frac{\alpha}{2}} \frac{1}{\alpha} g_2 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, y, \tau + (T - \tau)\vartheta, \tau} \right) \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, \tau + (T - \tau)\vartheta} \right) - \\
& - (T - \tau)^{\frac{\alpha}{2}} \frac{2^{\alpha+1}\Gamma(\frac{n+2+\alpha}{2})}{\alpha\Gamma(\frac{n}{2})} h_1 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2+\alpha}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, y, \tau} \right) \times \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2+\alpha}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, \tau + (T - \tau)\vartheta} \right) - \\
& - (T - \tau)^{\frac{\alpha}{2}} \frac{n}{\alpha} \times h_2 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, y, \tau + (T - \tau)\vartheta, \tau} \right) \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2}{2} \right) (T - \tau)\vartheta\Omega, \tau + (T - \tau)\vartheta} \right) - \\
& - (T - \tau)^{\frac{1}{2}} \frac{2\Gamma(\frac{n+1}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2})} a' \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+1}{2} \right) (T - \tau)\delta\Omega, \tau + (T - \tau)\delta} \right) \times \\
& \times A^{-1}(y, \tau)\Omega v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+1}{2} \right) (T - \tau)\delta\Omega, \tau + (T - \tau)\delta} \right) + \\
& + (T - \tau)a_0 \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (T - \tau)\theta\Omega, \tau + (T - \tau)\theta} \right) \times \\
& \times v \left(y + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) (T - \tau)\theta\Omega, \tau + (T - \tau)\theta} \right), \quad (5.3.54)
\end{aligned}$$

где случайные величины $\vartheta, \delta, \theta$ распределены на отрезке $[0, 1]$. Величины ϑ, δ имеют плотности $\frac{\alpha}{2}s^{\frac{\alpha}{2}-1}$ и $\frac{1}{2\sqrt{s}}$ соответственно, а θ распределена равномерно. Выбирая с вероятностью $\frac{1}{6}$ одно из слагаемых в (5.3.54) и умножая его на 6, получаем окончательную несмещенную оценку $\zeta(y, \tau)$ для $V(y, \tau)$.

Оценки ψ_m для функционалов $\Psi_m(h)$ из (5.3.45) будем строить на траекториях неоднородной цепи Маркова $\{(y_k, \tau_k)\}_{k=0}^{\infty}$. Начальное состояние цепи выбирается в $D_{n+1}^{(T)}$ с некоторой плотностью $\pi(y, \tau)$, согласованной с функцией $f(y, \tau)$. В оценку ψ_m при этом записывается дробь

$$\frac{f(y_0, \tau_0)}{\pi(y_0, \tau_0)}.$$

Далее последовательно выполняются m переходов, на каждом из которых реализуется оценка $\zeta(y_k, \tau_k)$ по независимым в совокупности последовательностям случайных элементов $\{\vartheta_k\}_{k=0}^{\infty}, \{\delta_k\}_{k=0}^{\infty}, \{\theta_k\}_{k=0}^{\infty}, \{\Omega_k\}_{k=0}^{\infty}$. При этом ψ_m умножается на весовой множитель в оценке $\zeta(y_k, \tau_k)$, а аргументы функции v определяют следующее состояние

цепи. Например, если на шаге $k = 1, 2, \dots, m$ в оценке (5.3.54) было выбрано первое слагаемое, то ψ_m нужно умножить на

$$-6(T - \tau_{k-1})^{\frac{\alpha}{2}} \frac{2^\alpha \Gamma(\frac{n+\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(\frac{n}{2})} g_1 \times \\ \times \left(y_{k-1} + 2\sqrt{\gamma_{k-1} \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) (T - \tau_{k-1}) \vartheta_{k-1} \Omega_{k-1}, y_{k-1}, \tau_{k-1}} \right)$$

и перейти в точку (y_k, τ_k) с координатами

$$y_k = y_{k-1} + 2\sqrt{\gamma_{k-1} \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) (T - \tau_{k-1}) \vartheta_{k-1} \Omega_{k-1}}, \\ \tau_k = \tau_{k-1} + (T - \tau_{k-1}) \vartheta_{k-1}.$$

На заключительном этапе, в соответствии с (5.3.45), выбираются время t_m , распределенное равномерно на отрезке $[\tau_m, T]$, и координата x_m , распределенная нормально с плотностью $Z_0(x - y_m, y_m, t_m, \tau_m)$, а оценка ψ_m умножается на $(T - t_m)h(x_m, t_m)$. Применяя формулы (5.3.42)–(5.3.45), получаем оценки функционала $\Phi_3(h)$:

$$\phi_3 = - \sum_{m=1}^N \left(-\frac{1}{1-q} \right)^{m-1} \psi_m, \quad (5.3.55)$$

$$\phi'_3 = - \left(-\frac{1}{1-q} \right)^{N-1} \frac{\psi_N}{q}. \quad (5.3.56)$$

Функционал $\Phi_4(h)$ оценивается также по формулам (5.3.55)–(5.3.56), в которых величины ψ_m строятся на траекториях марковской цепи, стартующей из точки $(y_0, 0)$. Первоначальное значение оценки ψ_m равно

$$\frac{\varphi(y_0)}{\pi(y_0)},$$

где y_0 распределено в R^n с плотностью $\pi(y)$, согласованной с функцией $\varphi(y)$.

Ограниченность дисперсий построенных оценок вытекает из ограниченности весового множителя в оценке $\zeta(y, \tau)$ и доказывается так же, как аналогичное утверждение в «прямой схеме» для первой краевой задачи [7].

Теорема 6. Пусть функция $h(x, t)$ ограничена, а функция $\frac{f^2(y, \tau)}{\pi(y, \tau)}$ интегрируема в $D_{n+1}^{(T)} = R^n \times (0, T)$. Тогда дисперсии оценок ϕ_3 и ϕ'_3 конечны.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Оценим второй момент для ϕ'_3 :

$$E(\phi'_3)^2 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{E\psi_m^2}{q(1-q)^{m-1}}. \quad (5.3.57)$$

Заметим, что

$$E\psi_m^2 = E \frac{f^2(y_0, \tau_0)}{\pi(y_0, \tau_0)} \Pi_{k=0}^{m-1} \tilde{\zeta}^2(y_k, \tau_k) (T - t_m)^2 h^2(x_m, t_m),$$

где $\tilde{\zeta}(y_k, \tau_k)$ — весовой множитель в оценке $\zeta(y_k, \tau_k)$. Рассмотрим интегральный оператор, определенный представлением (5.3.52), в котором все интегралы берутся со знаком «+», а функции g_1, g_2, h_1, h_2, a_0 и выражение $a'(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda)A^{-1}(y, \tau)\Omega$ заменяются на их модули. Пусть $\overline{K}(x, y, t, \tau)$ — ядро этого оператора, а $\overline{K}_m(x, y, t, \tau)$ — его повторное ядро. Для ядра $\overline{K}(x, y, t, \tau)$ справедлива оценка (5.1.9) с некоторыми новыми постоянными c_1 и C_1 , поэтому ряд из повторных ядер

$$\sum_{m=1}^{\infty} B^m \overline{K}_m(x, y, t, \tau) \quad (5.3.58)$$

равномерно сходится для любой постоянной B . Весовой множитель $\zeta(y_k, \tau_k)$ в оценке $\zeta(y_k, \tau_k)$ ограничен в силу ограниченности функций g_1, g_2, h_1, h_2, a_0 и выражения $a'(y + 2\sqrt{s(\lambda - \tau)}\Omega, \lambda)A^{-1}(y, \tau)\Omega$. Поэтому существует постоянная B , такая что $|\tilde{\zeta}(y_k, \tau_k)| \leq (1 - q)B$. Тогда

$$\begin{aligned} E\psi_m^2 &\leq \int_0^T d\tau \int_{R^n} dy \frac{f^2(y, \tau)}{\pi(y, \tau)} \int_{\tau}^T d\lambda \int_{R^n} dz \int_{\lambda}^T dt \times \\ &\times \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) (1 - q)^m B^m \overline{K}_m(z, y, \lambda, \tau) h^2(x, t) dx. \end{aligned} \quad (5.3.59)$$

Теперь из равенства (5.3.57) следует неравенство

$$\begin{aligned} E(\phi'_3)^2 &\leq \int_0^T d\tau \int_{R^n} dy \frac{f^2(y, \tau)}{\pi(y, \tau)} \int_{\tau}^T d\lambda \int_{R^n} dz \int_{\lambda}^T dt \times \\ &\times \frac{1 - q}{q^2} \int_{R^n} Z_0(x - z, z, t, \lambda) \overline{Q}(z, y, \lambda, \tau) T h^2(x, t) dx < \infty, \end{aligned} \quad (5.3.60)$$

где $\overline{Q}$ — сумма ряда (5.3.58).

Для второго момента случайной величины ϕ_3 справедливо неравенство

$$E(\phi_3)^2 \leq \sum_{m=1}^{\infty} \frac{E\psi_m^2}{(1-q)^{m-1}} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} E \frac{|\psi_m|}{(1-q)^{m-1}} \sum_{l=m+1}^{\infty} |\psi_l|. \quad (5.3.61)$$

Уже доказано, что первое слагаемое в (5.3.61) конечно. Пусть $\mathfrak{F}_m$ — σ -алгебра, порожденная цепью до момента времени m , а функция $h_1(y, \tau)$ определена равенством

$$h_1(y, \tau) = \int_{\tau}^T d\lambda \int_{\lambda}^T dt \int_{R^n} dz \int_{R^n} Z_0(x-z, z, t, \lambda) \overline{Q}(z, y, \lambda, \tau) |h(x, t)| dx;$$

тогда

$$E \left(\sum_{l=m+1}^{\infty} |\psi_l| \mid \mathfrak{F}_m \right) = \frac{|f(y_0, \tau_0)|}{\pi(y_0, \tau_0)} \prod_{k=0}^{m-1} |\tilde{\zeta}(y_k, \tau_k)| h_1(y_m, \tau_m).$$

Теперь аналогично (5.3.59) и (5.3.60) получаем неравенство

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{m=1}^{\infty} E \frac{(-1)^m \psi_m}{(1-q)^{m-1}} \sum_{l=m+1}^{\infty} (-1)^l \psi_l \right| \leq \\ & \leq \int_0^T d\tau \int_{R^n} dy \frac{f^2(y, \tau)}{\pi(y, \tau)} \int_{\tau}^T d\lambda \int_{R^n} dz \int_{\lambda}^T dt \times \\ & \times h_1(z, \lambda) (1-q) \int_{R^n} Z_0(x-z, z, t, \lambda) \overline{Q}(z, y, \lambda, \tau) |h(x, t)| dx < \infty. \end{aligned}$$

■

5.3.4. Задача Коши для уравнений с дифференцируемыми коэффициентами

Если коэффициенты $a_{ij}(x, t)$ оператора L имеют ограниченные производные второго порядка, а коэффициенты $a_i(x, t)$ — ограниченные производные первого порядка по пространственным переменным, то, применив формулу (5.1.36), получим интегральное уравнение

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_0^t \int_{R^n} [v_0(y, \tau) f(y, \tau) - \\ & - u(y, \tau) M v_0(y, \tau)] dy d\tau + \int_{R^n} \varphi(y) v_0(y, 0) dy. \end{aligned} \quad (5.3.62)$$

При сделанных предположениях справедливо неравенство (5.1.26). Следовательно, оператор

$$Ku(x, t) = - \int_0^t \int_{R^n} u(y, \tau) M v_0(y, \tau) dy d\tau \quad (5.3.63)$$

имеет слабую особенность, и ряд Неймана для уравнения (5.3.62) сходится, если функции $f(x, t)$ и $\varphi(x)$ ограничены.

$$u(x, t) = \sum_{i=0}^{\infty} K^i F(x, t), \quad (5.3.64)$$

где

$$\begin{aligned} F(x, t) &= F_1(x, t) + F_2(x, t) = \\ &= \int_0^t \int_{R^n} v_0(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau + \int_{R^n} \varphi(y) v_0(y, 0) dy. \end{aligned} \quad (5.3.65)$$

Из формулы (5.1.25) следует, что ядро $K_1(x, y, t, \tau)$ оператора K представимо в виде

$$\begin{aligned} K_1(x, y, t, \tau) &= -M v_0(y, \tau) = -M v_0(y, \tau) + M_0 v_0(y, \tau) = \\ &= \sum_{i,j=1}^n [-a_{ij}(x, t) + a_{ij}(y, \tau)] \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} v_0(y, \tau) - \\ &- \sum_{i=1}^n d_i(y, \tau) \frac{\partial}{\partial y_i} v_0(y, \tau) - d_0(y, \tau) v_0(y, \tau) = \\ &= \frac{[n - \text{Tr}(A(y, \tau) A^{-1}(x, t))]}{2(t - \tau)} v_0(y, \tau) + \\ &+ \frac{(y - x)' A^{-1}(x, t) [A(y, \tau) - A(x, t)] A^{-1}(x, t) (y - x)}{4(t - \tau)^2} v_0(y, \tau) + \\ &+ \frac{d'(y, \tau) A^{-1}(x, t) (y - x)}{2(t - \tau)} v_0(y, \tau) - d_0(y, \tau) v_0(y, \tau), \end{aligned} \quad (5.3.66)$$

поэтому для построения несмещенных оценок для функции $u(x, t)$ можно применять как методы § 5.3.1, так и методы § 5.3.3.

В первом случае оценки строятся на траекториях цепи Маркова с переходной плотностью (5.3.16) и имеют вид

$$\eta(x, t) = \sum_{m=0}^N W^{(m)} F(x_m, t_m) \quad (5.3.67)$$

и

$$\zeta(x, t) = \frac{W^{(N)} F(x_N, t_N)}{q}, \quad (5.3.68)$$

где N — момент обрыва цепи, имеющий геометрическое распределение ($P(N = m) = q(1 - q)^m$, $m = 0, 1, \dots$). Весовые коэффициенты вычисляются по формулам $W^{(0)} = 1$,

$$W^{(m)} = W^{(m-1)} \frac{K_1(x_{m-1}, x_m, t_{m-1}, t_m)}{p((x_{m-1}, t_{m-1}) \rightarrow (x_m, t_m))} \quad (5.3.69)$$

при $m = 1, 2, \dots$. Траектория цепи моделируется по формулам (5.3.19). Постоянная C должна удовлетворять условию $4\mu C < 1$. Окончательные несмещенные оценки для $u(x, t)$ получаются заменой $F(x, t)$ на ее несмещенную оценку $tf(x + \sqrt{2t(1 - \theta)}Y, t\theta) + \varphi(x + \sqrt{2t}Y)$, где θ распределена равномерно на отрезке $[0, 1]$, а Y — случайный вектор, имеющий нормальное распределение со средним 0 и матрицей ковариаций $A(x, t)$.

Рассмотрим теперь применение методов § 5.3.3. Зафиксируем число q ($0 < q < 1$) и промоделируем геометрическое распределение с параметром q . Пусть N — полученная реализация ($P(N = m) = q(1 - q)^m$, $m = 0, 1, \dots$), тогда

$$\xi_1(x, t) = \frac{K^N F(x, t)}{q(1 - q)^N}$$

и

$$\xi_2(x, t) = \sum_{m=0}^N \frac{K^m F(x, t)}{(1 - q)^m}$$

являются несмещенными оценками для $u(x, t)$. Для определения несмещенной оценки для $K^m F(x, t)$ последовательно, m раз, выполним процедуру оценивания интеграла (5.3.63), которая аналогична процедуре оценивания интеграла (5.3.46). Формула (5.3.49) теперь примет вид

$$\begin{aligned} Ku(x, t) = & \int_0^t d\tau \int_0^\infty dr E \left(\frac{n - \text{Tr}(A(x + r\Omega, \tau)A^{-1}(x, t))}{(t - \tau)\Gamma(\frac{n}{2})(4(t - \tau))^{\frac{n}{2}}} \times \right. \\ & \times \exp\left(-\frac{r^2}{4(t - \tau)}\right) r^{n-1} u(x + r\Omega, \tau) \Big) + \\ & + \int_0^t d\tau \int_0^\infty dr E \frac{2r^2 [\Omega' A^{-1}(x, t) A(x + r\Omega, \tau) A^{-1}(x, t) \Omega - 1]}{4(t - \tau)^2 \Gamma(\frac{n}{2})(4(t - \tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\ & \times \exp\left(-\frac{r^2}{4(t - \tau)}\right) r^{n-1} u(x + r\Omega, \tau) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^t d\tau \int_0^\infty dr E \left(\frac{rd'(x+r\Omega, \tau)A^{-1}(x, t)\Omega}{(t-\tau)\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \right. \\
& \quad \times \exp\left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)}\right) r^{n-1}u(x+r\Omega, \tau) \Big) + \\
& - \int_0^t d\lambda \int_0^\infty dr E d_0(x+r\Omega, \tau)u(x+r\Omega, \tau) \times \\
& \quad \times \frac{2r^{n-1}}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \exp\left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)}\right). \quad (5.3.70)
\end{aligned}$$

Случайный вектор Ω распределен на $S_1^0(x, t)$ с плотностью

$$p(x, t, \omega) = \frac{1}{\sigma_n \sqrt{\det(A(x, t))} |A^{-1}(x, t)\omega|}. \quad (5.3.71)$$

Аналогами формул (5.3.50) и (5.3.51) будут следующие формулы:

$$\begin{aligned}
n-Tr \left(A(x+r\Omega, \tau)A^{-1}(x, t) \right) &= Tr \left([A(x, t) - A(x+r\Omega, t)] A^{-1}(x, t) \right) + \\
&+ Tr \left([A(x+r\Omega, t) - A(x+r\Omega, \tau)] A^{-1}(x, t) \right) = \\
&= \tilde{g}_1(x+r\Omega, x, t)r^\alpha + \tilde{g}_2(x+r\Omega, x, \tau, t)(t-\tau)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad (5.3.72)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& [\Omega' A^{-1}(x, t)A(x+r\Omega, \tau)A^{-1}(x, t)\Omega - 1] = \\
& = \Omega' A^{-1}(x, t) [A(x+r\Omega, t) - A(x, t)] A^{-1}(x, t)\Omega + \\
& + \Omega' A^{-1}(x, t) [A(x+r\Omega, \tau) - A(x+r\Omega, t)] A^{-1}(x, t)\Omega = \\
& = \tilde{h}_1(x+r\Omega, x, t)r^\alpha + \tilde{h}_2(x+r\Omega, x, \tau, t)(t-\tau)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad (5.3.73)
\end{aligned}$$

где $\tilde{g}_1, \tilde{g}_2, \tilde{h}_1, \tilde{h}_2$ являются ограниченными функциями. Подставляя эти выражения в (5.3.70) и выполняя замену переменной

$$s = \frac{r^2}{4(t-\tau)},$$

получаем для $Ku(x, t)$ представление

$$\begin{aligned}
Ku(x, t) &= \int_0^t d\tau (t-\tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^\infty ds \frac{2^\alpha}{2\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+\alpha}{2}-1} \exp(-s) \times \\
& \times E \left(\tilde{g}_1(x+2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, x, t)u(x+2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau) \right) + \\
& + \int_0^t d\tau (t-\tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^\infty ds \frac{1}{2\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n}{2}-1} \exp(-s) \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times E \left(\tilde{g}_2(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, x, \tau, t)u(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau) \right) + \\
& + \int_0^t d\tau (t-\tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^\infty ds \frac{2^\alpha}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+2+\alpha}{2}-1} \exp(-s) \times \\
& \times E \left(\tilde{h}_1(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, x, t)u(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau) \right) + \\
& + \int_0^t d\tau (t-\tau)^{\frac{\alpha}{2}-1} \int_0^\infty ds \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+2}{2}-1} \exp(-s) \times \\
& \times E \left(\tilde{h}_2(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, x, \tau, t)u(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau) \right) + \\
& + \int_0^t d\tau (t-\tau)^{-\frac{1}{2}} \int_0^\infty ds \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n+1}{2}-1} \exp(-s) \times \\
& \times E \left(d'(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau)A^{-1}(x, t)\Omega u(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau) \right) - \\
& - \int_0^t d\tau \int_0^\infty ds \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})} s^{\frac{n}{2}-1} \exp(-s) \times \\
& \times E \left(d_0(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau)u(x + 2\sqrt{s(t-\tau)}\Omega, \tau) \right). \quad (5.3.74)
\end{aligned}$$

Несмещенной оценкой для $Ku(x, t)$ будет случайная величина

$$\begin{aligned}
\tilde{\eta}(x, t) = & t^{\frac{\alpha}{2}} \frac{2^\alpha \Gamma(\frac{n+\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(\frac{n}{2})} \tilde{g}_1 \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+\alpha}{2} \right)} t\vartheta\Omega, x, t \right) \times \\
& \times u \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+\alpha}{2} \right)} t\vartheta\Omega, t - t\vartheta \right) + \\
& + t^{\frac{\alpha}{2}} \frac{1}{\alpha} \tilde{g}_2 \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right)} t\vartheta\Omega, x, t - t\vartheta, t \right) \times \\
& \times u \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right)} t\vartheta\Omega, t - t\vartheta \right) + \\
& + t^{\frac{\alpha}{2}} \frac{2^{\alpha+1} \Gamma(\frac{n+2+\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(\frac{n}{2})} \tilde{h}_1 \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2+\alpha}{2} \right)} t\vartheta\Omega, x, t \right) \times \\
& \times u \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2+\alpha}{2} \right)} t\vartheta\Omega, t - t\vartheta \right) + \\
& + t^{\frac{\alpha}{2}} \frac{n}{\alpha} \times \tilde{h}_2 \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2}{2} \right)} t\vartheta\Omega, x, t - t\vartheta, t \right) \\
& \times u \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+2}{2} \right)} t\vartheta\Omega, t - t\vartheta \right) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + t^{\frac{1}{2}} \frac{2\Gamma(\frac{n+1}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2})} d' \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+1}{2} \right) t\delta\Omega, t - t\delta} \right) A^{-1}(x, t) \Omega \times \\
& \times u \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n+1}{2} \right) t\delta\Omega, t - t\delta} \right) - \\
& - td_0 \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) t\theta\Omega, t - t\theta} \right) \times \\
& \times u \left(x + 2\sqrt{\gamma \left(\frac{n}{2} \right) t\theta\Omega, t - t\theta} \right), \quad (5.3.75)
\end{aligned}$$

где, как и формуле (5.3.54), случайные величины $\vartheta, \delta, \theta$ распределены на отрезке $[0, 1]$, а $\gamma(m)$ — случайная величина, имеющая гамма-распределение с параметром m . Величины ϑ, δ имеют плотности $\frac{\alpha}{2}s^{\frac{\alpha}{2}-1}$ и $\frac{1}{2\sqrt{s}}$ соответственно, а θ распределена равномерно. Выбирая с вероятностью $\frac{1}{6}$ одно из слагаемых в (5.3.75) и умножая его на 6, получаем окончательную несмещенную оценку $\tilde{\zeta}(x, t)$ для $Ku(x, t)$.

Оценки ψ_m для $K^m F(x, t)$ будем строить на траекториях неоднородной цепи Маркова $\{(x_k, t_k)\}_{k=0}^{\infty}$. Начальное состояние цепи (x, t) . Далее последовательно выполняются m переходов, на каждом из которых реализуется оценка $\tilde{\zeta}(x_k, t_k)$ по независимым в совокупности последовательностям случайных элементов $\{\vartheta_k\}_{k=0}^{\infty}, \{\delta_k\}_{k=0}^{\infty}, \{\theta_k\}_{k=0}^{\infty}, \{\Omega_k\}_{k=0}^{\infty}$. При этом ψ_m умножается на весовой множитель в оценке $\tilde{\zeta}(y_k, \tau_k)$, а аргументы функции u определяют следующее состояние цепи. Например, если на шаге $k = 1, 2, \dots, m$ в оценке (5.3.75) было выбрано первое слагаемое, то ψ_m нужно умножить на

$$6t_{k-1}^{\frac{\alpha}{2}} \frac{2^{\alpha}\Gamma(\frac{n+\alpha}{2})}{\alpha\Gamma(\frac{n}{2})} \tilde{g}_1 \left(x_{k-1} + 2\sqrt{\gamma_{k-1} \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) t_{k-1}\vartheta_{k-1}\Omega_{k-1}, x_{k-1}, t_{k-1}} \right)$$

и перейти в точку (x_k, t_k) с координатами

$$x_k = x_{k-1} + 2\sqrt{\gamma_{k-1} \left(\frac{n+\alpha}{2} \right) t_{k-1}\vartheta_{k-1}\Omega_{k-1}},$$

$$t_k = t_{k-1} - t_{k-1}\vartheta_{k-1}.$$

На заключительном этапе ψ_m умножается на оценку для $F(x_m, t_m)$, равную

$$\begin{aligned}
& t_m f \left(x_m + 2\sqrt{\gamma_m \left(\frac{n}{2} \right) t_m \theta_m \Omega_m, t_m - t_m \theta_m} \right) + \\
& + \varphi \left(x_m + 2\sqrt{\gamma_m \left(\frac{n}{2} \right) t_m \Omega_m} \right).
\end{aligned}$$

Таким образом, случайные величины

$$\tilde{\xi}_1(x, t) = \frac{\psi_N}{q(1-q)^N}$$

и

$$\tilde{\xi}_2(x, t) = \sum_{m=0}^N \frac{\psi_m}{(1-q)^m}$$

являются несмещенными оценками для $u(x, t)$. Повторяя рассуждения из доказательства теоремы 6, легко доказать конечность дисперсий построенных оценок.

5.4. ПЕРВАЯ КРАЕВАЯ ЗАДАЧА В ОГРАНИЧЕННОЙ ОБЛАСТИ

Пусть D — ограниченная область в R^n с границей Γ . Рассмотрим первую краевую задачу

$$\begin{aligned} L(x, t, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t})u &= f, \\ u|_{\Gamma} &= \Phi(x, t), \\ u|_{t=0} &= \varphi(x). \end{aligned} \tag{5.4.1}$$

В [3] показано, что если $f \in H^{\alpha, \frac{\alpha}{2}}(\overline{Q_T})$, $\varphi \in C(\overline{D})$, функция Φ непрерывна, а коэффициенты a_{ij} имеют производные $\frac{\partial a_{ij}}{\partial x_k}$, удовлетворяющие условию Гельдера по переменным x с показателем α , и Γ — поверхность Ляпунова, то задача (5.4.1) имеет классическое, непрерывное вплоть до границы решение в области $Q_T = D \times (0, T)$.

Несмещенные оценки для решения уравнения теплопроводности построены как на траекториях блуждания по границе [10], так и на траекториях блуждания внутри пространственно-временного цилиндра [8]. В первом случае решение представляется в виде теплового потенциала двойного слоя, плотность которого удовлетворяет интегральному уравнению Вольтерра—Фредгольма. К этому уравнению применима схема Неймана—Улама и общая теория статистических оценок для нее. Во втором случае используется теорема о среднем значении в шароиде. В данном параграфе будут построены несмещенные оценки решения $u(x, t)$ задачи (5.4.1) на траекториях марковской цепи «блуждания по цилиндрам» и марковской цепи «блуждания по шароидам» как для уравнений с постоянными коэффициентами, так и для уравнений с переменными коэффициентами.

5.4.1. Блуждание по цилиндрам для уравнения с постоянными коэффициентами

Рассмотрим задачу (5.4.1) для оператора с постоянными коэффициентами:

$$L = \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Пусть $\text{dist}(x, \Gamma)$ обозначает расстояние от точки x до границы Γ . Зададимся функцией $R = R(x)$, непрерывной в D и удовлетворяющей неравенствам

$$c_1 \text{dist}(x, \Gamma) \leq R(x) \leq c_2 \text{dist}(x, \Gamma)$$

при некоторых положительных постоянных c_1 и c_2 и условию $D_R \subset D$. Запишем интегральное представление (5.1.33) решения уравнения в цилиндре:

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_0^t \int_{D_R} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau + \\ & + \int_0^t \int_{D_R} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}}} \times \\ & \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau + \int_{D_R} v(y, 0) \varphi(y, 0) dy + \\ & + \int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{R^2}{2(t-\tau) \|A^{-1}(y-x)\|} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}}} \times \\ & \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) d_y S d\tau. \quad (5.4.2) \end{aligned}$$

Ядро интегрального оператора в этой формуле при выполнении неравенства $R^2 \geq 2nt$ неотрицательное и субстохастическое. При $R^2 < 2nt$ справедливо представление

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_{D_R} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau + \\ & + \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_{D_R} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}}} \times \\ & \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau + \int_{D_R} v \left(y, t - \frac{R^2}{2n} \right) u \left(y, t - \frac{R^2}{2n} \right) dy + \end{aligned}$$

$$+ \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_{\partial D_R} \frac{R^2}{2(t-\tau) \|A^{-1}(y-x)\|} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(y, \tau) d_y S d\tau, \quad (5.4.3)$$

в котором ядро интегрального оператора стохастическое. Таким образом, решение краевой задачи $u(x, t)$ удовлетворяет в цилиндре $\overline{Q_T}$ уравнению

$$u(x, t) = \int_{\overline{Q_T}} u(y, \tau) K(x, t, dy, d\tau) + F(x, t), \quad (5.4.4)$$

где $K(x, t, dy, d\tau)$ — субстохастическое ядро, а функция $F(x, t)$ определяется равенством

$$F(x, t) = \\ = \chi_{\{R^2 > 2nt\}} \int_{D_R} v(y, 0) \varphi(y, 0) dy + \int_{\max(0, t-\frac{R^2}{2n})}^t \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\ \times \left(\exp\left(-\frac{(y-x)' A^{-1}(y-x)}{4(t-\tau)}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \right) f(y, \tau) dy d\tau. \quad (5.4.5)$$

Отметим, что если область интегрирования в поверхностном интеграле в формулах (5.4.2)–(5.4.3) содержит часть боковой поверхности цилиндра Q_T , то интеграл по ней от функции $\Phi(x, t)$ следует добавить к функции $F(x, t)$. На боковой поверхности цилиндра Q_T ядро $K(x, t, dy, d\tau)$ является вырожденным вероятностным распределением, сосредоточенным в точке (x, t) , а на нижнем основании цилиндра $K(x, 0, dy, d\tau) \equiv 0$.

Стохастическое ядро $K(x, t, dy, d\tau)$ однозначно определяется формулами (5.4.2) и (5.4.3) и задает в области $\overline{Q_T}$ цепь Маркова $(x(k), t(k))$ ($k = 0, 1, 2, \dots$), которую назовем *блужданием по цилиндрам*. Состояния цепи вида $(x, 0)$ будем считать поглощающими. Справедлива

Лемма 6. *Последовательность $(x(k), t(k))$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) с вероятностью 1 либо обрывается за конечное число шагов на боковой поверхности или нижнем основании цилиндра $\overline{Q_T}$, либо сходится к случайной точке на боковой поверхности цилиндра.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Рассматривая решение краевой задачи с нулевыми граничными условиями и правой частью $f(x, t) \equiv 1$, получаем, что функция

$$F(x, t) = \int_{\max(0, t - \frac{R^2}{2n})}^t \int_{D_R} \frac{1}{[4\pi(t - \tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\ \times \left(\exp\left(-\frac{(y-x)'A^{-1}(y-x)}{4(t-\tau)}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \right) dy d\tau$$

неотрицательна и имеет ограниченный потенциал GF . Аналогичное утверждение верно для функции

$$F(x, t) = \chi_{\{R^2 > 2nt\}} \int_{D_R} v(y, 0) \varphi(y, 0) dy.$$

Поскольку пересечение множества нулей этих функций есть боковая поверхность цилиндра $\overline{Q_T}$, по теореме 2 получаем, что необрывающиеся траектории цепи п.н. приближаются к боковой поверхности цилиндра. Очевидно, что координатные функции являются инвариантными функциями для ядра $K(x, t, dy, d\tau)$, а время t — эксцессивная функция. Применяя теорему 3, видим, что необрывающиеся траектории $(x(k), t(k))$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) п.н. сходятся к случайной точке на боковой поверхности цилиндра $\overline{Q_T}$. ■

Пусть Ω_1 — изотропный единичный вектор в пространстве и $\Omega = \sqrt{A}\Omega_1$; тогда представление решения (5.4.2) можно записать в виде

$$u(x, t) = \int_0^t \int_0^R \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\ \times \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \right) r^{n-1} E f(x + r\Omega, \tau) dr d\tau + \\ + \int_0^t \int_0^R \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) r^{n-1} E u(x + r\Omega, \tau) dr d\tau + \\ + \int_0^R \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4t)^{\frac{n}{2}}} \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4t}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4t}\right) \right) r^{n-1} E \varphi(x + r\Omega) dr + \\ + \int_0^t E \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})(t-\tau)} \frac{R^n}{(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(x + R\Omega, \tau) d\tau = I_1 + I_2 + I_3 + I_4. \quad (5.4.6)$$

Аналогичные выражения получаются для представления (5.4.3):

$$\begin{aligned}
u(x, t) = & \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_0^R \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \right) r^{n-1} E f(x + r\Omega, \tau) dr d\tau + \\
& + \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t \int_0^R \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) r^{n-1} E u(x + r\Omega, \tau) dr d\tau + \\
& + \int_0^R \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4\frac{R^2}{2n})^{\frac{n}{2}}} \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4\frac{R^2}{2n}}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4\frac{R^2}{2n}}\right) \right) \times \\
& \times r^{n-1} E u(x + r\Omega, t - \frac{R^2}{2n}) dr + \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t E \frac{1}{\Gamma(\frac{n}{2})(t-\tau)} \frac{R^n}{(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(x + R\Omega, \tau) d\tau = J_1 + J_2 + J_3 + J_4. \quad (5.4.7)
\end{aligned}$$

Формулы сильно упрощаются, если выполнить замену переменной, взяв в качестве новой переменной $s = \frac{R^2}{4(t-\tau)}$ в интегралах по переменной τ или $s = \frac{r^2}{4(t-\tau)}$ в интегралах по переменной r . После этого под интегралом появятся плотности гамма-распределения с параметром $\frac{n}{2}$ либо $\frac{n}{2} + 1$. Записав разность экспонент в интегралах I_3 и J_3 в виде интеграла и изменив порядок интегрирования в повторных интегралах, получим под интегралом плотность случайной величины γ , имеющей гамма-распределение с параметром $\frac{n}{2} + 1$.

Пусть ρ — случайная величина, имеющая плотность распределения nr^{n-1} на отрезке $[0, 1]$ и, наконец, пусть θ равномерно распределена на $[0, 1]$. Пусть χ_A — индикатор события A , тогда

$$I_1 = t \cdot E \chi_{\{\gamma \leq \frac{R^2}{4t\theta}\}} f(x + 2\rho\sqrt{t\theta\gamma}\Omega, t - t\theta), \quad (5.4.8)$$

$$I_2 = E \chi_{\{\gamma > \frac{R^2}{4t}\}} \chi_{\{\theta > \frac{n}{2\gamma}\}} u\left(x + R\rho\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma}\right), \quad (5.4.9)$$

$$I_3 = E \chi_{\{\gamma \leq \frac{R^2}{4t}\}} \varphi(x + 2\rho\sqrt{t\gamma}\Omega), \quad (5.4.10)$$

$$I_4 = E \chi_{\{\gamma > \frac{R^2}{4t}\}} \chi_{\{\theta \leq \frac{n}{2\gamma}\}} u\left(x + R\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma}\right). \quad (5.4.11)$$

Аналогичные формулы для интегралов из равенства (5.4.7) имеют вид

$$J_1 = \frac{R^2}{2n} \cdot E\chi_{\{\gamma \leq \frac{n}{2\theta}\}} f\left(x + R\rho\sqrt{\frac{2\theta\gamma}{n}}\Omega, t - \frac{R^2}{2n}\theta\right), \quad (5.4.12)$$

$$J_2 = E\chi_{\{\gamma > \frac{n}{2}\}}\chi_{\{\theta > \frac{n}{2\gamma}\}} u\left(x + R\rho\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma}\right), \quad (5.4.13)$$

$$J_3 = E\chi_{\{\gamma \leq \frac{n}{2}\}} u\left(x + R\rho\sqrt{\frac{2\gamma}{n}}\Omega, t - \frac{R^2}{2n}\right), \quad (5.4.14)$$

$$J_4 = E\chi_{\{\gamma > \frac{n}{2}\}}\chi_{\{\theta \leq \frac{n}{2\gamma}\}} u\left(x + R\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma}\right). \quad (5.4.15)$$

Используя полученные формулы, легко определить процедуру моделирования блуждания по цилиндрам $(x(k), t(k))$ и последовательность несмещенных оценок $\xi_k = \xi_k(x, t)$ для решения $u(x, t)$ на траекториях этого блуждания. А именно, пусть

$$\gamma_k, \rho_k, \theta_k, \Omega_k \quad (k = 1, 2, \dots)$$

суть последовательности независимых в совокупности случайных величин с распределениями, определенными ранее, $R_k = R(x(k), t(k))$, $x(0) = x$, $t(0) = t$, $\xi_0 = u(x, t)$. Тогда при условии $0 < 2nt(k-1) < R_{k-1}^2$ в момент времени $k-1$ ($k = 1, 2, \dots$) выполняем следующую последовательность действий:

- 1) моделируем случайные величины $\gamma_k, \rho_k, \theta_k, \Omega_k$;
- 2) в оценке ξ_{k-1} функцию $u(x(k-1), t(k-1))$ заменяем суммой несмещенных оценок интегралов I_1, I_2, I_3, I_4 по формулам (5.4.8)–(5.4.11), выбранным значениям случайных величин и $R = R_{k-1}$;
- 3) если слагаемое, содержащее функцию u , отсутствует, то оценка построена и процесс обрывается ($t(k) = 0$); в противном случае, переходим к пункту 4;
- 4) аргументы функции u в полученной оценке ξ_k определяют новое состояние цепи.

При выполнении противоположного условия $2nt(k-1) > R_{k-1}^2$, в момент времени $k-1$ ($k = 1, 2, \dots$) выполняем аналогичную последовательность действий:

- 1) моделируем случайные величины $\gamma_k, \rho_k, \theta_k, \Omega_k$;
- 2) в оценке ξ_{k-1} функцию $u(x(k-1), t(k-1))$ заменяем суммой несмещенных оценок интегралов J_1, J_2, J_3, J_4 по формулам (5.4.12)–(5.4.15), выбранным значениям случайных величин и $R = R_{k-1}$;
- 3) аргументы функции u в полученной оценке ξ_k определяют новое состояние цепи.

Из определения последовательности $\xi_k (k = 0, 1, 2, \dots)$ следует, что она является мартингалом относительно потока σ -алгебр $\mathfrak{F}_k (k = 0, 1, 2, \dots)$, порожденного блужданием. Непосредственным следствием леммы 4 является важная теорема:

Теорема 7. Пусть функции $f(x, t)$, $\varphi(x)$ и $\Phi(x, t)$ ограничены. Тогда мартингал $\xi_k (k = 0, 1, 2, \dots)$ — квадратично интегрируемый.

Пусть $\delta > 0$, N_1 — момент обрыва траектории, N_2 — момент первого попадания траектории в δ -окрестность границы области D , а $N_\delta = \min(N_1, N_2)$. Из теоремы 7 и леммы 5 вытекает

Лемма 7. Случайная величина N_δ имеет конечное математическое ожидание. Случайная величина ξ_{N_δ} является несмещенной оценкой $u(x, t)$ и имеет конечную дисперсию.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Первое утверждение доказано в качестве примера применения леммы 5, но его легко получить и непосредственно из определения процесса. Будем следить за изменением времени $t(k)$ до момента времени N_δ . Заметим, что на шаге k происходит уменьшение времени $t(k-1)$ на величину $R_{k-1}^2/(4\gamma_k)$ при условии, что $\gamma_k > n/2$, и на величину $R_{k-1}^2/(2n)$ при выполнении противоположного неравенства. При этом $R_{k-1} \geq c_1\delta$. Рассмотрим последовательность независимых случайных величин $\tilde{\tau}_k = (c_1\delta)^2/\max(\gamma_k, n/2) (k = 1, 2, \dots)$. Эти случайные величины одинаково распределены и ограничены. Очевидно, что

$$N_\delta - 1 \leq N = \max\{k : \tilde{\tau}_1 + \tilde{\tau}_2 + \dots + \tilde{\tau}_k \leq t\}.$$

По теореме восстановления $EN = t/E\tau_1 + o(t)$.

Второе утверждение является очевидным следствием равномерной интегрируемости мартингала $\xi_k (k = 0, 1, 2, \dots)$. ■

5.4.2. Блуждание по сфероидам для уравнения с постоянными коэффициентами

Решение краевой задачи (5.4.1) для уравнения с постоянными коэффициентами можно свести к решению задачи для уравнения теплопроводности, но в наклонном цилиндре. Действительно, преобразование $\tilde{u}(x, t) = u(x, t) \exp(a_0 t)$ неизвестной функции позволяет избавиться от коэффициента a_0 , преобразование $\tilde{\tilde{u}}(x, t) = \tilde{u}(\sqrt{A}x + at, t)$ — от коэффициентов a_i при первых производных. При этом матрица при старших производных становится единичной. Применив к уравнению теплопроводности алгоритм *блуждания по сфероидам* из [8], можно выполнить обратные преобразования и получить несмещенные оценки для $u(x, t)$. Этот же результат получится, если организовать блуждание по поверхностям, на которых постоянно фундаментальное решение исходного уравнения. Рассмотрим, как и в предыдущем параграфе, первую краевую задачу для оператора с постоянными коэффициентами, содержащего только старшие производные.

Зададимся функцией $R = R(x, t)$, непрерывной в Q_T и удовлетворяющей неравенствам

$$c_1 \text{dist}(x, \Gamma) \leq R(x, t) \leq c_2 \text{dist}(x, \Gamma)$$

при некоторых положительных постоянных c_1 и c_2 и одному из условий:

$$Q_R \subset Q_T \quad \text{либо} \quad Q_{R,0} \subset Q_T.$$

Используя формулы (5.1.44)–(5.1.45) и равенство $Mv(y, \tau) = 0$, получаем интегральное представление в шароиде (при $t > R^2/(2n)$):

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_{Q_R} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau + \\ & + \int_{t - \frac{R^2}{2n}}^t d\tau E\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \frac{\rho^n(\tau)}{\Gamma(n/2)(t - \tau)R^n} u(x + \rho(\tau)\Omega, \tau), \end{aligned} \quad (5.4.16)$$

или интегральное уравнение в усеченном шароиде (при $t < R^2/(2n)$):

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau + \int_{\tilde{D}_{R,0}} v(y, 0) \varphi(y) dy + \\ & + \int_0^t d\tau E\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \frac{\rho^n(\tau)}{\Gamma(n/2)(t - \tau)R^n} u(x + \rho(\tau)\Omega, \tau). \end{aligned} \quad (5.4.17)$$

Таким образом, для решения $u(x, t)$ первой краевой задачи получено интегральное уравнение с субстохастическим ядром. Формула (5.4.16)

для уравнения теплопроводности получена Л. П. Купцовым [13] другими методами.

Для того чтобы промоделировать *блуждание по сфероидам*, достаточно построить несмещенную оценку поверхностного интеграла в формуле (5.4.17). Подставляя в интеграл функцию

$$\rho(\tau) = \sqrt{(2n(t - \tau) \ln(R^2/(2n(t - \tau)))}$$

и выполняя замену переменной $s = (n/2) \ln(R^2/(2n(t - \tau)))$, получим равенства:

$$\begin{aligned} & \int_0^t d\tau E \left(\frac{n}{2} \right)^{\frac{n}{2}} \frac{\rho^n(\tau)}{\Gamma(n/2)(t - \tau) R^n} u(x + \rho(\tau)\Omega, \tau) = \\ & = \int_0^t d\tau E \left(\frac{n}{2} \right)^{\frac{n}{2}} \frac{(2n(t - \tau)/R^2)^{n/2}}{\Gamma(n/2)(t - \tau)} (\ln(R^2/(2n(t - \tau))))^{n/2} u(x + \rho(\tau)\Omega, \tau) = \\ & = \int_{(n/2) \ln(R^2/(2nt))}^{\infty} E \frac{s^{n/2} \exp(-s)}{(n/2)\Gamma(n/2)} \times \\ & \times u(x + R\sqrt{s} \exp(-s/n)\Omega, t - (R^2/(2n)) \exp(-2s/n)) ds = \\ & = E \chi_{\{\gamma > (n/2) \ln(R^2/(2nt))\}} \times \\ & \times u(x + R\sqrt{\gamma} \exp(-\gamma/n)\Omega, t - (R^2/(2n)) \exp(-2\gamma/n)), \end{aligned}$$

где $\gamma = \gamma(1 + n/2)$. Эта же оценка пригодна и для интеграла в (5.4.16), так как при $t > R^2/(2n)$ событие $\{\gamma > (n/2) \ln(R^2/(2nt))\}$ является достоверным.

Процедура моделирования *блуждания по сфероидам* (x_k, t_k) ($k = 1, 2, \dots$) на k -м шаге состоит из следующих действий:

- 1) моделируем случайную величину γ_k с распределением гамма с параметрами $(1 + n/2, 1/2)$;
- 2) проверяем условие $\gamma_k > (n/2) \ln(R_{k-1}^2/(2nt_{k-1}))$;
- 3) если оно выполнено, то моделируем случайный вектор Ω_k , распределенный с плотностью

$$p(\omega) = \frac{1}{\sigma_n \sqrt{\det(A)} \|A^{-1}\omega\|}$$

на единичном эллипсоиде и вычисляем новые координаты по формулам

$$x_k := x_{k-1} + R_{k-1} \sqrt{\gamma_k} \exp(-\gamma_k/n) \Omega_k,$$

$$t_k := t_{k-1} - (R_{k-1}^2/(2n)) \exp(-2\gamma_k/n);$$

4) в противном случае цепь обрывается.

Из теоремы 2 и теоремы 3 вытекает следующая лемма.

Лемма 8. *Блуждание по сферам с вероятностью единица либо обрывается на нижнем основании, либо сходится к точке на боковой поверхности пространственно-временного цилиндра.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Пусть $u_1(x, t)$ — решение краевой задачи (5.4.1), соответствующее правой части $f(x, t) \equiv 1$ и нулевым граничным и начальным условиям. Тогда функции

$$F(x, t) = \int_{Q_R} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau$$

и

$$F_0(x, t) = \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau$$

непрерывны и обращаются в ноль лишь на нижнем основании и боковой поверхности пространственно-временного цилиндра.

По теореме 2 заключаем, что с вероятностью единица блуждание по шарам либо обрывается, либо приближается к боковой поверхности или нижнему основанию пространственно-временного цилиндра. Рассматривая решение краевой задачи с $f(x, t) \equiv 0$ нулевым граничным условием и согласованным с ним положительным начальным условием, исключаем п.н. приближение необрывающейся траектории блуждания к нижнему основанию пространственно-временного цилиндра, так как в этом случае $F(x, 0) = \varphi(x, 0) > 0$. Очевидно, что субстохастическое ядро, определяемое равенствами (5.4.16)–(5.4.17) удовлетворяет пункту 2 теоремы 3, что и завершает доказательство леммы. ■

Построим мартингал несмещенных оценок решения $u(x, t)$ задачи (5.4.1). Для этого преобразуем оставшиеся интегралы в формулах (5.4.16)–(5.4.17). Применяя лемму 2, получим выражение

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{D}_{R,0}} v(y, 0) \varphi(y) dy = \\ = \int_0^{\rho(0)} dr \frac{2r^{n-1}}{\Gamma(n/2)} E \frac{\exp(-r^2/(4t)) - \exp(-\rho^2(0)/(4t))}{(4t)^{n/2}} \varphi(x + r\Omega), \end{aligned}$$

которое совпадает с интегралом I_3 в формуле (5.4.6). Поэтому,

$$\int_{\tilde{D}_{R,0}} v(y, 0) \varphi(y) dy = E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(R^2/(2nt))\}} \varphi(x + 2\rho\sqrt{t\gamma}\Omega), \quad (5.4.18)$$

где величины γ и ρ имеют такие же распределения, как в формуле (5.4.6). Используя теорему Фубини и лемму 2, находим

$$\begin{aligned} & \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau = \int_0^t d\tau \int_0^{\rho(\tau)} dr \times \\ & \times \frac{2r^{n-1}}{\Gamma(n/2)} E \frac{\exp(-r^2/(4(t-\tau))) - \exp(-\rho^2(\tau)/(4(t-\tau)))}{(4(t-\tau))^{n/2}} f(x + r\Omega, \tau). \end{aligned}$$

Оценивая внутренний интеграл, получим формулу

$$\begin{aligned} & \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau = \\ & = \int_0^t d\tau E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(R^2/(2n(t-\tau)))\}} f(x + 2\rho\sqrt{(t-\tau)\gamma}\Omega, \tau) = \\ & = t E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(R^2/(2nt\theta))\}} f(x + 2\rho\sqrt{t\theta\gamma}\Omega, t - t\theta), \end{aligned}$$

которая является аналогом оценки (5.4.8). Точно так же оцениваем последний интеграл:

$$\begin{aligned} & \int_{Q_R} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau = \\ & = \frac{R^2}{2n} E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(1/\theta)\}} f(x + 2\rho R\sqrt{\theta\gamma/(2n)}\Omega, t - R^2\theta/(2n)). \end{aligned}$$

Пусть, как и ранее, N_1 — момент обрыва траектории блуждания, χ_i — индикатор события $\{N_1 > i\}$. Положим $w_i = \min(t_i, R_i^2/(2n))$ и обозначим через ψ_i индикатор события

$$\{\gamma_{i+1} \leq (n/2) \ln(R_i^2/(2nw_i\theta_{i+1}))\}.$$

Рассмотрим последовательность несмещенных оценок ξ_k ($k = 0, 1, \dots$) для решения $u(x, t)$ задачи (5.4.1), определяемую равенством

$$\begin{aligned} \xi_k &= \sum_{i=0}^{k-1} \chi_i \psi_i w_i f(x_i + 2\rho_{i+1} \sqrt{w_i \theta_{i+1} \gamma_{i+1}} \Omega_{i+1}, t_i - w_i \theta_{i+1}) + \\ &+ \chi_k u(x_k, t_k) + \chi_{\{N_1=k\}} \varphi(x_{k-1} + 2\rho_k \sqrt{t_{k-1} \gamma_k} \Omega_k). \end{aligned}$$

Пусть $\mathfrak{F}_k = \sigma(\theta_i, \rho_i, \gamma_i, \Omega_i, i = 1, 2, \dots, k)$ — σ -алгебра, порожденная независимыми случайными элементами, распределение которых определено выше. Из определения последовательности ξ_k ($k = 0, 1, 2, \dots$) следует, что она является мартингалом относительно потока σ -алгебр $\mathfrak{F}_k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$), порожденного блужданием. Из леммы 4 вытекает следующая теорема.

Теорема 8. Пусть функции $f(x, t)$, $\varphi(x)$ и $\Phi(x, t)$ ограничены. Тогда мартингал $\xi_k (k = 0, 1, 2, \dots)$ — квадратично интегрируемый.

Пусть $\delta > 0$, N_2 — момент первого попадания траектории в δ -окрестность границы области D , а $N_\delta = \min(N_1, N_2)$, тогда справедлива следующая лемма.

Лемма 9. Случайная величина N_δ имеет конечное математическое ожидание. Случайная величина ξ_{N_δ} является несмещенной оценкой $u(x, t)$ и имеет конечную дисперсию.

Доказательство леммы проводится так же как доказательство аналогичной ей леммы 7 для блуждания по цилиндрам.

5.4.3. Блуждание по цилиндрам для уравнения с переменными коэффициентами

Построим алгоритм решения задачи Дирихле (5.4.1) для уравнения с переменными коэффициентами. Пусть $\text{dist}(x, \Gamma)$ — расстояние от точки x до границы Γ . Зададимся функцией $R = R(x, t)$, непрерывной в D и удовлетворяющей неравенствам $c_1 \text{dist}(x, \Gamma) \leq R(x, t) \leq c_2 \text{dist}(x, \Gamma)$ при некоторых положительных постоянных c_1 и c_2 . Фиксируем некоторое $\varepsilon > 0$ и обозначим D_ε — ε -окрестность границы Γ . Считая решение $u(x, t)$ известным в D_ε , запишем интегральное представление (5.1.32) в виде

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_0^t \int_{D_R \setminus D_\varepsilon} [M_0 v(y, \tau) - Mv(y, \tau)] u(y, \tau) dy d\tau + \\ & + \int_0^t \int_{D_R \setminus D_\varepsilon} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \times \\ & \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau + \\ & + \int_0^t \int_{\partial D_R \setminus D_\varepsilon} \frac{[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)]}{2(t-\tau) \|A^{-1}(x, t)(y-x)\|} \times \\ & \times \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy S d\tau + F(x, t), \end{aligned} \quad (5.4.19)$$

где

$$\begin{aligned} F(x, t) = & \int_0^t \int_{D_R} v(y, \tau) f(y, \tau) dy d\tau + \\ & + \int_0^t \int_{D_R \cap D_\varepsilon} [M_0 v(y, \tau) - Mv(y, \tau)] u(y, \tau) dy d\tau + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^t \int_{D_R \cap D_\varepsilon} \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \times \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau + \int_{D_R} v(y, 0) \varphi(y) dy + \\
& \quad + \int_0^t \int_{\partial D_R \cap D_\varepsilon} \frac{[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)]}{2(t-\tau) \|A^{-1}(x, t)(y-x)\|} \times \\
& \quad \times \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy S d\tau. \quad (5.4.20)
\end{aligned}$$

Будем рассматривать его как интегральное уравнение в пространстве функций $C((\overline{D} \setminus D_\varepsilon) \times [0, T])$. Покажем, что ряд Неймана для него сходится. Для этого воспользуемся методом, предложенным в работе [5] (теорема 5.1 и теорема 5.2). Переформулируем их в удобной для нас форме.

Лемма 10. Пусть D_1 — некоторая область в R^n , K — интегральный оператор в $C(\overline{D_1} \times [0, T])$, $B(\cdot, \cdot)$ — бета-функция Эйлера. Если при некоторых постоянных $\delta > 0$ и $C > 0$ для всякой функции $\psi \in C(\overline{D_1} \times [0, T])$, удовлетворяющей при некоторых постоянных $a > -1$ и $C_\psi > 0$ для всех $(x, t) \in \overline{D_1} \times [0, T]$ неравенству $|\psi(x, t)| \leq C_\psi t^a$, выполнено неравенство $|K\psi(x, t)| \leq C_\psi C t^{a+\delta} B(1+a, \delta)$, то ряд Неймана $\sum_{i=0}^\infty K^i \psi$ сходится.

Лемма 11. Пусть $K_i, i = 1, 2, \dots, m$ — операторы, удовлетворяющие условиям леммы 10, $K = \sum_{j=1}^m K_j$. Тогда для всякой ограниченной функции ψ ряд Неймана $\sum_{i=0}^\infty K^i \psi$ сходится.

Заметим, что интегральный оператор

$$K_1 u(x, t) = \int_0^t \int_{D_R \setminus D_\varepsilon} |M_0 v(y, \tau) - M v(y, \tau)| u(y, \tau) dy d\tau \quad (5.4.21)$$

с ядром $k_1(x, t, y, \tau) = |M_0 v(y, \tau) - M v(y, \tau)| = |M_0 v_0(y, \tau) - M v_0(y, \tau)|$ имеет слабую особенность в силу неравенства (5.1.26). Поэтому для всякой функции $\psi \in C((\overline{D} \setminus D_\varepsilon) \times [0, T])$, удовлетворяющей при некоторых постоянных $a > -1$ и $C_\psi > 0$ для всех $(x, t) \in \overline{D} \setminus D_\varepsilon \times [0, T]$ неравенству $|\psi(x, t)| \leq C_\psi t^a$, выполнено неравенство $|K\psi(x, t)| \leq C_\psi C t^{a+\delta} B(1+a, \delta)$, в котором константа C не зависит от ε , а $\delta = \frac{\alpha}{2}$.

Рассмотрим оператор

$$\begin{aligned}
K_2 u(x, t) = \int_0^t \int_{D_R \setminus D_\varepsilon} \left| \frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right| \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \times \\
\times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(y, \tau) dy d\tau. \quad (5.4.22)
\end{aligned}$$

Для функции ψ , удовлетворяющей неравенству $|\psi(x, t)| \leq C_\psi t^a$, получаем оценку

$$\begin{aligned} & |K_2\psi(x, t)| \leq \\ & \leq C_\psi C_0 \int_0^t \left| \frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right| \frac{R^n}{[4(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \tau^a d\tau. \end{aligned} \quad (5.4.23)$$

Поскольку $R(x) \geq c_1\varepsilon$, для любого $\delta > 0$ из (5.4.23) получаем оценку

$$\begin{aligned} |K_2\psi(x, t)| & \leq C_\psi \frac{C_1}{\varepsilon^{2\delta}} \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^{1-\delta}} \tau^a d\tau = \\ & = C_\psi \frac{C_1}{\varepsilon^{2\delta}} t^{a+\delta} B(1+a, \delta), \end{aligned} \quad (5.4.24)$$

в которой C_1 не зависит от ε и δ . Для оператора

$$\begin{aligned} K_3u(x, t) &= \int_0^t \int_{\partial D_R} \frac{[(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)]}{2(t-\tau) \|A^{-1}(x, t)(y-x)\|} \times \\ & \times \frac{1}{[4\pi(t-\tau)]^{\frac{n}{2}} (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) u(y, \tau) d_y S d\tau, \end{aligned} \quad (5.4.25)$$

используя очевидные неравенства

$$\begin{aligned} [(y-x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y-x)] & \leq \|A(y, \tau)\| \cdot \|A^{-1}(x, t)(y-x)\|^2, \\ \|A^{-1}(x, t)(y-x)\|^2 & \leq \|A^{-1}(x, t)\| \cdot \sigma^2(x, y, t), \end{aligned}$$

получаем аналог неравенства (5.4.23):

$$\begin{aligned} |K_3\psi(x, t)| & \leq C_\psi C_2 \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)} \frac{R^n}{[4(t-\tau)]^{\frac{n}{2}}} \times \\ & \times \exp\left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)}\right) \tau^a d\tau. \end{aligned} \quad (5.4.26)$$

При $R(x) \geq c_1\varepsilon$ для любого $\delta > 0$ из (5.4.26) получаем аналог оценки (5.4.24):

$$|K_3\psi(x, t)| \leq C_\psi \frac{C_3}{\varepsilon^{2\delta}} \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^{1-\delta}} \tau^a d\tau = C_\psi \frac{C_3}{\varepsilon^{2\delta}} t^{a+\delta} B(1+a, \delta), \quad (5.4.27)$$

где C_3 не зависит от ε и δ .

Теперь, из леммы 11 следует

Теорема 9. Пусть $K = K_1 + K_2 + K_3$, ψ — произвольная ограниченная функция. Тогда ряд Неймана $\sum_{i=0}^{\infty} K^i \psi$ сходится.

Из теоремы 9 следует, что к уравнению (5.4.19) применима схема Неймана—Улама [6], то есть на траекториях любой однородной цепи Маркова, плотность вероятностей перехода которой согласована с ядром интегрального уравнения (5.4.19), можно построить несмещенные оценки для его решения.

Определим цепь Маркова, на траекториях которой построим несмещенную оценку решения $u(x, t)$ уравнения (5.4.19). Для этого выпишем в явном виде ядро $M_0 v(y, \tau) - Mv(y, \tau)$ первого оператора:

$$\begin{aligned} M_0 v(y, \tau) - Mv(y, \tau) = & \frac{n - \text{sp}(A(y, \tau)A^{-1}(x, t))}{2(t - \tau)} Z^0(y - x, t, \tau) + \\ & + \frac{(y - x)^T A^{-1}(x, t) A(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y - x) - \sigma^2(y, x, t)}{4(t - \tau)^2} Z^0(y - x, t, \tau) - \\ & - \frac{d^T(y, \tau) A^{-1}(x, t)(y - x)}{2(t - \tau)} Z^0(y - x, t, \tau) + d_0(y, \tau) v(y, \tau). \end{aligned} \quad (5.4.28)$$

Здесь $\text{sp}(\cdot)$ — функция, определяющая след матрицы. Вектор d с компонентами $d_i(y, \tau)$ и $d_0(y, \tau)$ определен в (5.1.17).

Заметим, что область D_R является объединением эллипсоидов

$$S_r(x, t) = \{y | \sigma(y, x, t) = r\}, 0 \leq r \leq R.$$

Пусть

$$S_1^0(x, t) = \{\omega \in R^n | \omega^T A^{-1}(x, t) \omega = 1\}$$

есть эллипсоид с центром в нуле, а случайный вектор Ω распределен на $S_1^0(x, t)$ с плотностью

$$p(x, t, \omega) = \frac{1}{\sigma_n (\det A(x, t))^{\frac{1}{2}} \|A^{-1}(x, t) \omega\|}. \quad (5.4.29)$$

Воспользовавшись леммой 2, представление решения (5.4.19) запишем в виде

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \int_0^t \int_0^R \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t - \tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\ & \times \left(\exp\left(-\frac{r^2}{4(t - \tau)}\right) - \exp\left(-\frac{R^2}{4(t - \tau)}\right) \right) r^{n-1} \times \\ & \times Ef(x + r\Omega, \tau) dr d\tau + \int_0^t \int_{D_R} [M_0 v(y, \tau) - Mv(y, \tau)] u(y, \tau) dy d\tau + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^t \int_0^R \left(\frac{R^2}{4(t-\tau)^2} - \frac{n}{2(t-\tau)} \right) \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) r^{n-1} E u(x+r\Omega, \tau) dr d\tau + \int_0^R \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4t)^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \left(\exp \left(-\frac{r^2}{4t} \right) - \exp \left(-\frac{R^2}{4t} \right) \right) r^{n-1} E \varphi(x+r\Omega) dr + \\
& + \int_0^t E \frac{\Omega^T A^{-1}(x, t) A(x+R\Omega, \tau) A^{-1}(x, t) \Omega}{\Gamma(\frac{n}{2})(t-\tau)} \frac{R^n}{(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \times \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) u(x+R\Omega, \tau) d\tau = I_1 + I_2 + I_3 + I_4 + I_5. \quad (5.4.30)
\end{aligned}$$

Для второго слагаемого в формуле (5.4.30) получаем аналогичное представление:

$$\begin{aligned}
& \int_0^t \int_{D_R} [M_0 v(y, \tau) - M v(y, \tau)] u(y, \tau) dy d\tau = \\
& = \int_0^t \int_0^R E \left(\frac{n - \text{sp} (A(x+r\Omega, \tau) A^{-1}(x, t))}{(t-\tau) \Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \right. \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)} \right) r^{n-1} u(x+r\Omega, \tau) \Big) dr d\tau + \\
& + \int_0^t \int_0^R E \frac{2r^2 [\Omega^T A^{-1}(x, t) A(x+r\Omega, \tau) A^{-1}(x, t) \Omega - 1]}{4(t-\tau)^2 \Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)} \right) r^{n-1} u(x+r\Omega, \tau) dr d\tau - \\
& \quad - \int_0^t \int_0^R E \left(\frac{r d^T(x+r\Omega, \tau) A^{-1}(x, t) \Omega}{(t-\tau) \Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \times \right. \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)} \right) r^{n-1} u(x+r\Omega, \tau) \Big) dr d\tau + \\
& + \int_0^t \int_0^R \frac{2}{\Gamma(\frac{n}{2})(4(t-\tau))^{\frac{n}{2}}} \left(\exp \left(-\frac{r^2}{4(t-\tau)} \right) - \exp \left(-\frac{R^2}{4(t-\tau)} \right) \right) r^{n-1} \times \\
& \quad \times E (d_0(x+r\Omega, \tau) u(x+r\Omega, \tau)) dr d\tau = J_1 + J_2 - J_3 + J_4. \quad (5.4.31)
\end{aligned}$$

Формулы сильно упрощаются, если выполнить замену переменной, взяв в качестве новой переменной $s = \frac{R^2}{4(t-\tau)}$ в интегралах по переменной τ или $s = \frac{r^2}{4(t-\tau)}$ в интегралах по переменной r . После этого под интегралом появятся плотности гамма-распределения с параметром $\frac{n}{2}$ либо $\frac{n}{2} + 1$.

Обозначим переменными γ_0, γ_1 с различными индексами случайные величины, имеющие гамма-распределение с параметром $\frac{n}{2}, \frac{n}{2} + 1$ соответственно. Пусть ρ — случайная величина, имеющая плотность распределения nr^{n-1} на отрезке $[0, 1]$ и, наконец, пусть θ равномерно распределена на $[0, 1]$. Пусть χ_A индикатор события A , тогда

$$I_1 = t \cdot E \left(\chi_{\{\gamma_0 < \frac{R^2}{4t\theta}\}} \left(1 - \exp \left(-\frac{R^2}{4t\theta} + \gamma_0 \right) \right) f(x + 2\sqrt{t\theta\gamma_0}\Omega, t - t\theta) \right), \quad (5.4.32)$$

$$I_3 = E \chi_{\{\gamma_1 > \frac{R^2}{4t}\}} u \left(x + R\rho\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma_1} \right) - E \chi_{\{\gamma_0 > \frac{R^2}{4t}\}} u \left(x + R\rho\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma_0} \right), \quad (5.4.33)$$

$$I_4 = E \left(\chi_{\{\gamma_0 < \frac{R^2}{4t}\}} \left(1 - \exp \left(-\frac{R^2}{4t} + \gamma_0 \right) \right) \varphi(x + 2\sqrt{t\gamma_0}\Omega) \right), \quad (5.4.34)$$

$$I_5 = E \chi_{\{\gamma_0 > \frac{R^2}{4t}\}} \left(\Omega^T A^{-1}(x, t) A \left(x + R\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma_0} \right) A^{-1}(x, t) \Omega \right) \times \\ \times u \left(x + R\Omega, t - \frac{R^2}{4\gamma_0} \right). \quad (5.4.35)$$

Получим аналогичные формулы для интегралов из равенства (5.4.31). Для упрощения их записи будем считать, что элементы матрицы $A(x, t)$ удовлетворяют условию Липшица

$$|a_{ij}(x, t) - a_{ij}(y, \tau)| \leq K(\|x - y\| + |t - \tau|). \quad (5.4.36)$$

Тогда

$$\frac{n - sp(A(y, \tau)A^{-1}(x, t))}{(t - \tau)} = g_1(x, t, \tau) + g_2(x, t, y, \tau) \frac{\sigma(y, x, t)}{t - \tau},$$

где

$$g_1(x, t, \tau) = \frac{n - sp(A(x, \tau)A^{-1}(x, t))}{t - \tau}$$

и

$$g_2(x, t, y, \tau) = \frac{sp((A(x, \tau) - A(y, \tau))A^{-1}(x, t))}{\sigma(y, x, t)}$$

являются ограниченными функциями и, следовательно,

$$J_1 = \frac{t}{2} \cdot E \left(\chi_{\{\gamma_0 < \frac{R^2}{4t\theta}\}} g_1(x, t, t - t\theta) u(x + 2\sqrt{t\theta\gamma_0}\Omega, t - t\theta) \right) +$$

$$+ RE \left(\chi_{\{\gamma_0 > \frac{(R\theta)^2}{4t}\}} g_2 \left(x, t, x + R\theta\Omega, t - \frac{(R\theta)^2}{4\gamma_0} \right) \times \right. \\ \left. \times u \left(x + R\theta\Omega, t - \frac{(R\theta)^2}{4\gamma_0} \right) \right). \quad (5.4.37)$$

Используя условие Липшица (5.4.36), получим

$$\Omega^T A^{-1}(x, t) A(x + r\Omega, \tau) A^{-1}(x, t) \Omega - 1 = \\ = h_1(x, t, \tau, \Omega)(t - \tau) + h_2(x, t, \tau, \Omega, r)r,$$

где

$$h_1(x, t, \tau, \Omega) = \frac{\Omega^T A^{-1}(x, t) A(x, \tau) A^{-1}(x, t) \Omega - 1}{t - \tau}$$

и

$$h_2(x, t, \tau, \Omega, r) = \frac{\Omega^T A^{-1}(x, t) (A(x + r\Omega, \tau) - A(x, \tau)) A^{-1}(x, t) \Omega}{r}$$

являются ограниченными функциями. Значит,

$$J_2 = t \cdot E \left(\chi_{\{\gamma_1 < \frac{R^2}{4t\theta}\}} h_1(x, t, t - t\theta, \Omega) u(x + 2\sqrt{t\theta\gamma_1}\Omega, t - t\theta) \right) + \\ + RE \left(\chi_{\{\gamma_1 > \frac{(R\theta)^2}{4t}\}} h_2 \left(x, t, \frac{(R\theta)^2}{4\gamma_1}, \Omega, R\theta \right) u \left(x + R\theta\Omega, t - \frac{(R\theta)^2}{4\gamma_1} \right) \right). \quad (5.4.38)$$

Аналогично,

$$J_3 = RE \left(\chi_{\{\gamma_0 > \frac{(R\theta)^2}{4t}\}} d^T \left(x + R\theta\Omega, t - \frac{(R\theta)^2}{4\gamma_0} \right) \times \right. \\ \left. \times A^{-1}(x, t) \Omega u \left(x + R\theta\Omega, t - \frac{(R\theta)^2}{4\gamma_0} \right) \right), \quad (5.4.39)$$

$$J_4 = tE \chi_{\{\gamma_0 < \frac{R^2}{4t\theta}\}} \left(1 - \exp \left(-\frac{R^2}{4t\theta} + \gamma_0 \right) \right) \times \\ \times d_0(x + 2\sqrt{t\theta\gamma_0}\Omega, t - t\theta) u(x + 2\sqrt{t\theta\gamma_0}\Omega, t - t\theta). \quad (5.4.40)$$

Таким образом, определены несмещенные оценки всех интегралов, которые входят в представление (5.4.19).

Определим в области Q цепь Маркова $(x(k), t(k))$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) с помощью процедуры ее моделирования. Одновременно будем строить последовательность несмещенных оценок $\xi(k)$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) для $u(x, t)$.

Пусть

$$\gamma_0(k), \gamma_1(k), \rho(k), \theta(k)$$

есть последовательности независимых в совокупности случайных величин с распределениями, определенными ранее.

Начальное состояние цепи $(x(0), t(0)) = (x, t)$. Начальная оценка $\xi(0) = u(x, t)$.

Новое состояние $(x(k+1), t(k+1))$ и новая оценка $\xi(k+1)$ получаются из текущего состояния $(x(k), t(k))$ и текущей оценки $\xi(k)$ в результате следующих действий.

1. Заменяем в оценке $\xi(k)$ величину $u(x(k), t(k))$, используя представление (5.4.19), на оценки входящих в него интегралов по формулам (5.4.32)–(5.4.35) и (5.4.37)–(5.4.40). В оценках используем случайные величины $\gamma_0(k+1)$, $\gamma_1(k+1)$, $\rho(k+1)$, $\theta(k+1)$ и случайный вектор $\Omega(k+1)$, который моделируем по формуле (5.3.48).
2. Исключаем из суммы те слагаемые, для которых равны нулю индикаторы неравенств или весовые множители.
3. Если слагаемые, содержащие функцию u , отсутствуют, то оценка построена и процесс обрывается. В противном случае переходим к пункту 4.
4. Выбираем с равными вероятностями одно из слагаемых, содержащих функцию u , а остальные исключаем из суммы.
5. Выбранное слагаемое умножаем на количество слагаемых, содержащих функцию u , и оставляем в сумме. В результате получаем оценку $\xi(k+1)$.
6. Аргументы функции u в оставшемся слагаемом определяют новое состояние цепи.

Назовем построенную марковскую цепь *блужданием по цилиндрам*.

Отметим, что справедливы следующие утверждения.

Лемма 12. *Последовательность $t(k) \geq 0$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) — невозрастающая и, следовательно, имеет предел $t(\infty)$. Последовательность $x(k)$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) является ограниченным мартингалом и, следовательно, сходится с вероятностью 1 к $x(\infty)$. Если $d_0(x, t) \neq 0$ в цилиндре $\bar{Q}$, то траектории процесса не обрываются и $P(\{x(\infty) \in \partial D\} \cup \{t(\infty) = 0\}) = 1$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Если коэффициент $d_0(x, t) \neq 0$, то процесс блуждания не обрывается внутри области, так как после оценки интегралов I_5 и J_4 обязательно сохранится слагаемое, содержащее искомое решение. Пусть $\mathfrak{F}(k)$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) — последовательность σ -алгебр, порожденных процессом до момента времени k . Тогда $E(x(k+1)|\mathfrak{F}(k)) = x(k)$, следовательно $x(k)$, ($k = 0, 1, 2, \dots$) — ограниченный мартингал. Его сходимость

вытекает из общих теорем о сходимости таких последовательностей [9]. Заметим, что

$$\begin{aligned}
E\|x(k+1) - x(k)\| &\geq \frac{1}{9}E(\chi_{\{\gamma_0 > \frac{R^2(x(k), t(k))}{4t(k)}\}} R(x(k), t(k)) \|\Omega(k+1)\|) = \\
&= \frac{C_0}{\Gamma(\frac{n}{2})} ER(x(k), t(k)) \int_{\frac{R^2(x(k), t(k))}{4t(k)}}^{\infty} s^{\frac{n}{2}-1} e^{-s} ds \geq \\
&\geq \frac{C_0}{\Gamma(\frac{n}{2})} E\chi_{\{t(\infty) > 0\}} R(x(k), t(k)) \int_{\frac{R^2(x(k), t(k))}{4t(k)}}^{\infty} s^{\frac{n}{2}-1} e^{-s} ds. \quad (5.4.41)
\end{aligned}$$

Переходя в неравенстве к пределу, по теореме Лебега получаем неравенство

$$\frac{C_0}{\Gamma(\frac{n}{2})} E\chi_{\{t(\infty) > 0\}} R(x(\infty), t(\infty)) \int_{\frac{R^2(x(\infty), t(\infty))}{4t(\infty)}}^{\infty} s^{\frac{n}{2}-1} e^{-s} ds \leq 0,$$

из которого следует, что $R(x(\infty), t(\infty)) = 0$ п.н. на $\{t(\infty) > 0\}$. ■

Отметим, что условие $d_0(x, t) \neq 0$ не вносит ограничений, так как для функции $u_1(x, t) = e^{\lambda t} u(x, t)$ справедливо уравнение (5.4.1), в котором коэффициент a_0 заменен на $a_0 + \lambda$, а правая часть и граничная функция умножены на $e^{\lambda t}$.

Теперь нам потребуется результат, в некотором смысле обобщающий схему Неймана—Улама.

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ОЦЕНИВАНИЕ СУММЫ РЯДА НЕЙМАНА

Пусть Q — компактное множество в метрическом пространстве, в котором для каждого элемента x и борелевского множества B определен заряд

$$K(x, B) = \sum_{j=1}^m K_j(x, B).$$

В пространстве $M(Q)$ рассмотрим интегральное уравнение

$$u(x) = \sum_{j=1}^m \int_Q u(y) K_j(x, dy) + f(x). \quad (5.4.42)$$

Свяжем с уравнением (5.4.42) мартингал $\xi(k)$ несмещенных оценок его решения $u(x)$. Для этого для каждого ядра $K_j(x, B)$ определим субстохастическое ядро $P_j(x, B)$, относительно которого исходное ядро абсолютно непрерывно. Соответствующую производную Радона—Никодима обозначим $q_j(x, y)$. Положим $\xi(0) = u(x)$, а σ -алгебру $\mathfrak{F}(0)$

будем считать минимальной. Пусть $\xi(n)$ и $\mathfrak{F}(n)$ построены. Для построения $\xi(n+1)$ каждое значение $u(z)$, входящее в предыдущую оценку, заменяется несмещенной оценкой

$$\eta_n(z) + \sum_{j=1}^m \zeta_{n,j}(z) q_j(z, y_j) u(y_j),$$

в которой $E(\eta_n(z) | \mathfrak{F}(n)) = f(z)$ и $E(\zeta_{n,j}(z) | \mathfrak{F}(n), y_1, y_2, \dots, y_m) = 1$, а точка y_j имеет условное распределение $\frac{P_j(z, \cdot)}{P_j(z, Q)}$. Наконец, σ -алгебра $\mathfrak{F}(n+1)$ определяется как σ -алгебра, порожденная процессом до момента времени $n+1$.

Пусть $|K_j|$ — вариация заряда K_j , $|K| = \sum_{j=1}^m |K_j|$ и $\bar{K}$ — интегральный оператор с ядром $|K|(x, B)$, тогда справедлива

Теорема 10. *Предположим, что для некоторой функции $g \in M(Q)$ при всех $x \in Q$ и всех n выполнено неравенство $E(|\eta_n(z)| | \mathfrak{F}(n)) \leq g(z)$, ряд Неймана $\sum_{i=0}^{\infty} (\bar{K})^i g$ сходится и его сумма равна v . Пусть случайные величины $\zeta_{n,j}(z)$ неотрицательны, тогда мартингал $\xi(n)$ равномерно интегрируемый и $|u(x)| \leq v(x)$.*

Доказательство.

Пусть K интегральный оператор в уравнении (5.4.42), тогда

$$\begin{aligned} |u| &= \left| \sum_{i=0}^{\infty} K^i f \right| \leq \sum_{i=0}^{\infty} (\bar{K})^i |f| = \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} (\bar{K})^i |E\eta_0| \leq \sum_{i=0}^{\infty} (\bar{K})^i E|\eta_0| \leq \sum_{i=0}^{\infty} (\bar{K})^i g = v. \end{aligned}$$

Докажем теперь, что $E|\xi(n)| \leq v(x)$. Доказательство проведем индукцией по n . При $n=0$ неравенство доказано. Выполним индукционный переход. Учитывая зависимость оценки от точки x , будем записывать $\xi(n)$ как $\xi(n, x)$. Тогда из определения оценки имеем равенство

$$\xi(n+1, x) = \eta_0(x) + \sum_{j=1}^m \zeta_{0,j}(x) q_j(x, y_j) \xi_1(n, y_j), \quad (5.4.43)$$

где $\xi_1(n, y_j)$ — оценка, полученная из $u(y_j)$ за следующие n шагов. По индукционному предположению $E(|\xi_1(n, y_j)| | \mathfrak{F}(1)) \leq v(y_j)$, поэтому в силу неотрицательности величин $\zeta_{0,j}(z)$

$$\begin{aligned} E|\xi(n+1, x)| &\leq E|\eta_0(x)| + \sum_{j=1}^m E(\zeta_{0,j}(x) | q_j(x, y_j) | E(|\xi_1(n, y_j)| | \mathfrak{F}(1))) \leq \\ &\leq g(x) + \sum_{j=1}^m E(\zeta_{0,j}(x) | q_j(x, y_j) | v(y_j)) \leq \\ &\leq g(x) + \sum_{j=1}^m \int_Q v(y) |K_j|(x, dy) = v(x). \end{aligned}$$

■

В силу теоремы сходимости мартингалов справедливо

Следствие 1. Последовательность оценок $\xi(n)$ сходится с вероятностью 1 к случайной величине $\xi(\infty)$, являющейся несмещенной оценкой $u(x)$.

Понятно, что если процедура последовательного оценивания обрывается за конечное число шагов, то оценка $\xi(\infty)$ будет реализуема.

Применим теорему 10 к блужданию по цилиндрам. В данном случае $4 \leq m \leq 9$. На каждом шаге мы оставляем в оценке одно значение неизвестной функции. Процедура оценивания обрывается либо при попадании $x(k)$ в ε -окрестность границы, где решение считается известным (оно оценивается по известным граничным условиям), либо в случае $t(k) < \varepsilon$ (решение оценивается по начальным условиям). Мажорантное уравнение получается из интегрального представления для $u(x, t)$, если в нем все подинтегральные функции заменить на их модули, а все интегралы взять со знаком «+». Сходимость ряда Неймана для мажорантного уравнения доказывается аналогично теореме 9. Процедура оценивания обрывается с вероятностью 1 в силу леммы 12. Величины $\zeta_{n,j}(z)$ принимают значения 0 и l с вероятностями $1 - \frac{1}{l}$ и $\frac{1}{l}$ соответственно, где l — количество слагаемых в оценке $u(z)$, содержащих функцию u . В качестве функции $g(z)$ можно взять константу.

Таким образом, справедлива

Теорема 11. Оценка $\xi(n)$, построенная в алгоритме блуждания по цилиндрам, является несмещенной для $u(x, t)$ и имеет конечную дисперсию.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Несмещенность оценки доказывают представленные выше рассуждения.

Заметим теперь, что случайные величины $\eta_0, \zeta_{n,j}, q_j$ в блуждании по цилиндрам ограничены некоторой постоянной M . Возводя равенство (5.4.43) в квадрат, получим

$$\begin{aligned} \xi^2(n+1, x) &= (m+1)^2 \left(\frac{\eta_0(x) + \sum_{j=1}^m \zeta_{0,j}(x) q_j(x, y_j) \xi_1(n, y_j)}{m+1} \right)^2 \leq \\ &\leq (m+1)^2 \left(\frac{\eta_0^2(x) + \sum_{j=1}^m \zeta_{0,j}^2(x) q_j^2(x, y_j) \xi_1^2(n, y_j)}{m+1} \right) \leq \\ &\leq (m+1) M^2 \left(1 + \sum_{j=1}^m |\zeta_{0,j}(x) q_j(x, y_j)| \xi_1^2(n, y_j) \right). \end{aligned}$$

Тогда

$$E\xi^2(n+1, x) \leq w(x) = \sum_{i=0}^{\infty} ((m+1)M^2\overline{K})^i g(x),$$

где $g(x) = (m+1)M^2$.

Теперь осталось заметить, что ряд Неймана для оператора $(m + 1)M^2\overline{K}$ сходится для любой ограниченной функции в силу леммы 11. По теореме Фату отсюда получаем оценку

$$E\xi^2(\infty, x) \leq w(x) = \sum_{i=0}^{\infty} ((m + 1)M^2\overline{K})^i g(x).$$

■

Очевидно, что при замене в оценке $\xi(\infty, x)$ значения функции u в точке остановки процесса на значение u в ближайшей точке границы получается малосмещенная оценка решения с конечной дисперсией.

Для реализации оценки необходимо, чтобы среднее число шагов до момента обрыва процесса было конечным. Для этого достаточно показать, что вероятность обрыва процесса за один шаг отделена от нуля снизу. Действительно, из условия $d_0(x, t) \neq 0$ получаем для искомой вероятности p оценку снизу:

$$\begin{aligned} p &\geq \frac{1}{9}P\left(\left\{\gamma_0 < \frac{R^2}{4t\theta}\right\} \cap \{t(1 - \theta) < \varepsilon\}\right) \geq \\ &\geq \frac{1}{9}P\left(\left\{\gamma_0 < \frac{c_1^2\varepsilon^2(1 - \theta)}{4\varepsilon\theta}\right\}\right) = \text{const} > 0. \end{aligned}$$

5.4.4. Блуждание по шароидам для уравнения с переменным коэффициентом при неизвестной функции

Заметим, что вопрос о равномерной по ε ограниченности дисперсии оценки, построенной на траектории блуждания по цилиндрам, остается открытым. В связи с этим представляют интерес различные теоремы о среднем значении для уравнений с переменными коэффициентами.

Рассмотрим наиболее простой случай, когда $a_i \equiv 0$ для всех $i = 1, 2, \dots, n$, а матрица коэффициентов при старших производных постоянна. Пусть $\lambda_1 > 0$ и $\lambda_2 > 0$ удовлетворяют в $\overline{D} \times [0, t]$ условиям $\lambda_1 \geq -a_0(x, t)$ и $\lambda_2 \geq \lambda_1 + a_0(x, t)$. Функция $u_1(x, t) = e^{-\lambda_1 t}u(x, t)$ удовлетворяет уравнению $Lu_1(x, t) + \lambda_1 u_1(x, t) = e^{-\lambda_1 t}f(x, t)$, в котором коэффициент при неизвестной функции имеет вид $a_{01}(x, t) = \lambda_1 + a_0(x, t) \geq 0$. Аналогично, функция $u_2(x, t) = e^{\lambda_2 t}u_1(x, t)$ удовлетворяет уравнению $Lu_2(x, t) + (\lambda_1 - \lambda_2)u_2(x, t) = e^{(\lambda_2 - \lambda_1)t}f(x, t)$, в котором коэффициент при неизвестной функции имеет вид $a_{02}(x, t) = -\lambda_2 + a_{01}(x, t) \leq 0$. Переносим выражение $a_{02}(x, t)u_2(x, t)$ в правую часть уравнения и применяя формулы среднего значения (5.4.16)–(5.4.17), получаем интегральное представление для функции $u_1(x, t)$ в шароиде,

$$\begin{aligned}
u_1(x, t) = & \int_{Q_R} v(y, \tau) e^{-\lambda_2(t-\tau)} e^{-\lambda_1\tau} f(y, \tau) dy d\tau + \\
& + \int_{Q_R} v(y, \tau) (\lambda_2 - (\lambda_1 + a_0(y, \tau))) e^{-\lambda_2(t-\tau)} u_1(y, \tau) dy d\tau + \\
& + \int_{t-\frac{R^2}{2n}}^t d\tau E\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \frac{\rho^n(\tau)}{\Gamma(n/2)(t-\tau)R^n} e^{-\lambda_2(t-\tau)} u_1(x + \rho(\tau)\Omega, \tau),
\end{aligned} \tag{5.4.44}$$

или интегральное представление в усеченном шароиде (при $t < R^2/(2n)$),

$$\begin{aligned}
u_1(x, t) = & \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) e^{-\lambda_2(t-\tau)} e^{-\lambda_1\tau} f(y, \tau) dy d\tau + \\
& + \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) (\lambda_2 - (\lambda_1 + a_0(y, \tau))) e^{-\lambda_2(t-\tau)} u_1(y, \tau) dy d\tau + \\
& + \int_{\tilde{D}_{R,0}} v(y, 0) e^{-\lambda_2 t} \varphi(y) dy + \\
& + \int_0^t d\tau E\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \frac{\rho^n(\tau)}{\Gamma(n/2)(t-\tau)R^n} e^{-\lambda_2(t-\tau)} u_1(x + \rho(\tau)\Omega, \tau).
\end{aligned} \tag{5.4.45}$$

Очевидно, что ядро в каждом из этих представлений субстохастическое. Следовательно, для построения процесса блуждания и оценок на его траекториях снова можно использовать результаты § 5.2, которые их однозначно определяют. Для этого достаточно несмещенно оценить интегралы в формулах (5.4.44)–(5.4.45). Используя несмещенные оценки на траекториях блуждания по сфероидам, находим

$$\begin{aligned}
& \int_0^t d\tau E\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \frac{\rho^n(\tau)}{\Gamma(n/2)(t-\tau)R^n} e^{-\lambda_2(t-\tau)} u_1(x + \rho(\tau)\Omega, \tau) = \\
& = E\chi_{\{\gamma > (n/2) \ln(R^2/(2nt))\}} \exp(-\lambda_2(R^2/(2n)) \exp(-2\gamma/n)) \times \\
& \quad \times u_1(x + R\sqrt{\gamma} \exp(-\gamma/n)\Omega, t - (R^2/(2n)) \exp(-2\gamma/n)),
\end{aligned}$$

где $\gamma = \gamma(1 + n/2)$. Эта же оценка пригодна и для аналогичного интеграла в (5.4.44), так как при $t > R^2/(2n)$ событие $\{\gamma > (n/2) \ln(R^2/(2nt))\}$ является достоверным. Далее, имеет место равенство

$$\int_{\tilde{D}_{R,0}} v(y, 0) e^{-\lambda_2 t} \varphi(y) dy = E\chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(R^2/(2nt))\}} e^{-\lambda_2 t} \varphi(x + 2\rho\sqrt{t\gamma}\Omega), \tag{5.4.46}$$

где величины γ и ρ имеют такие же распределения, как в формуле (5.4.6), а оценка

$$\begin{aligned} \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) e^{-\lambda_2(t-\tau)} e^{-\lambda_1\tau} f(y, \tau) dy d\tau = \\ = t E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(R^2/(2nt\theta))\}} e^{-\lambda_2 t\theta} e^{-\lambda_1(t-t\theta)} f(x + 2\rho\sqrt{t\theta\gamma}\Omega, t - t\theta) \end{aligned}$$

является аналогом оценки (5.4.8). Точно так же оцениваем интеграл

$$\begin{aligned} \int_{Q_R} v(y, \tau) e^{-\lambda_2(t-\tau)} e^{-\lambda_1\tau} f(y, \tau) dy d\tau = \\ = \frac{R^2}{2n} E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(1/\theta)\}} e^{-\lambda_2 R^2\theta/(2n)} e^{-\lambda_1(t-R^2\theta/(2n))} \times \\ \times f(x + 2\rho R\sqrt{\theta\gamma/(2n)}\Omega, t - R^2\theta/(2n)). \end{aligned}$$

Простой заменой функции из уже полученных интегралов, находим

$$\begin{aligned} \int_{Q_{R,0}} v(y, \tau) (\lambda_2 - (\lambda_1 + a_0(y, \tau))) e^{-\lambda_2(t-\tau)} u_1(y, \tau) dy d\tau = \\ = t E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(R^2/(2nt\theta))\}} (\lambda_2 - (\lambda_1 + a_0(x + 2\rho\sqrt{t\theta\gamma}\Omega, t - t\theta))) \times \\ \times e^{-\lambda_2 t\theta} u_1(x + 2\rho\sqrt{t\theta\gamma}\Omega, t - t\theta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{Q_R} v(y, \tau) (\lambda_2 - (\lambda_1 + a_0(y, \tau))) e^{-\lambda_2(t-\tau)} u_1(y, \tau) dy d\tau = \\ = \frac{R^2}{2n} E \chi_{\{\gamma \leq (n/2) \ln(1/\theta)\}} (\lambda_2 - (\lambda_1 + a_0(x + 2\rho\sqrt{t\theta\gamma}\Omega, t - t\theta))) e^{-\lambda_2 R^2\theta/(2n)} \times \\ \times u_1(x + 2\rho R\sqrt{\theta\gamma/(2n)}\Omega, t - R^2\theta/(2n)). \end{aligned}$$

Заметим, что $\{\gamma \leq (n/2) \ln(1/\theta)\} = \{\theta \leq \exp(-2\gamma/n)\}$, поэтому процедура моделирования *блуждания по сферам и шарикам* (x_k, t_k) ($k = 1, 2, \dots$) на k -м шаге состоит из следующих действий:

- 1) моделируем случайную величину γ_k , имеющую гамма-распределение с параметрами $(1 + n/2, 1/2)$, и случайную величину $\eta_k = -\ln(\theta_k)$, имеющую показательное распределение;
- 2) моделируем случайный вектор Ω_k , распределенный с плотностью

$$p(\omega) = \frac{1}{\sigma_n \sqrt{\det(A)} \|A^{-1}\omega\|}$$

на единичном эллипсоиде;

- 3) проверяем неравенство $\eta_k > \lambda_2 R_{k-1}^2 / (2n \exp(2\gamma/n))$;

- 4) если оно не выполнено, то переходим к пункту 8;
- 5) проверяем условие $\gamma_k > (n/2) \ln(R_{k-1}^2/(2nt_{k-1}))$;
- 6) если оно выполнено, то вычисляем новые координаты по формулам:

$$x_k := x_{k-1} + R_{k-1} \sqrt{\gamma_k} \exp(-\gamma_k/n) \Omega_k,$$

$$t_k := t_{k-1} - (R_{k-1}^2/(2n)) \exp(-2\gamma_k/n)$$

(полученная точка лежит на сфероиде);

- 7) в противном случае цепь обрывается;
- 8) вычисляем новые координаты по формулам

$$x_k := x_{k-1} + 2\rho_k \sqrt{\eta_k \gamma_k / \lambda_2} \Omega_k,$$

$$t_k := t_{k-1} - \eta_k / \lambda_2$$

(полученная точка лежит в шароиде);

- 9) процесс обрывается с вероятностью $(\lambda_1 + a_0(x_k, t_k))/\lambda_2$ в полученной точке шароида.

Несмещенные оценки для $u_1(x, t)$ на траекториях построенного блуждания легко строятся по аналогии с оценками для блуждания по сфероидам и обладают аналогичными свойствами.

Отметим, что возможны и другие замены неизвестной функции, приводящие к тождеству с неотрицательным субстохастическим ядром. Например, если коэффициент $a_0(y, \tau) \geq 0$, то можно использовать замену $u_1(y, \tau) = (1 - c(t - \tau))u(y, \tau)$, которая при выполнении условий $c(t - \tau) \leq 1$, $c \geq \max_{(y, \tau) \in Q_R} a_0(y, \tau)$ приводит к интегральному уравнению с субстохастическим ядром в шароиде, которое следует выбирать усеченным, если $cR^2/(2n) > 1$.

5.4.5. Алгоритмы, связанные с дискретизацией времени

Заменяя производную по времени в параболическом уравнении ее разностной аппроксимацией, можно свести решение первой краевой задачи (5.4.1) к решению последовательности краевых задач для уравнения эллиптического типа. Рассмотрим данный метод на примере неявной (по времени) разностной схемы Эйлера. Не умаляя общности, можно считать, что $c_0 > a_0(x, t) > c > 1$. Выполнения этого условия всегда можно добиться экспоненциальным преобразованием неизвестной функции $u(x, t)$.

Пусть τ — шаг по времени, $t_k = k\tau$, $k = 0, 1, 2, \dots, N$, и $T = N\tau$. Пусть M_k — эллиптическая часть параболического оператора при $t = t_k$, $u_k(x) = u(x, t_k)$, $f_k(x) = f(x, t_k)$, $\Phi_k(x) = \Phi(x, t_k)$, и, наконец, $\tilde{u}_k(x)$ — приближение для $u(x, t_k)$, удовлетворяющее системе разностных уравнений

$$M_k \tilde{u}_k(x) = f_k(x) - \frac{\tilde{u}_k(x) - \tilde{u}_{k-1}(x)}{\tau}, \quad x \in D, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (5.4.47)$$

краевым условиям

$$\tilde{u}_k(x) = \Phi_k(x), \quad x \in \partial D, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (5.4.48)$$

и начальному условию

$$\tilde{u}_0(x) = \varphi(x), \quad x \in D. \quad (5.4.49)$$

Погрешность аппроксимации разностной схемы (5.4.47) определяется равенством

$$\psi_k(x) = f_k(x) - \frac{u_k(x) - u_{k-1}(x)}{\tau} - M_k u_k(x), \quad x \in D, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (5.4.50)$$

и имеет порядок $h^{\alpha/2}$, если решение краевой задачи (5.4.1) является элементом пространства $H^{2+\alpha, 1+\frac{\alpha}{2}}(\overline{Q}_T)$, $0 \leq \alpha < 1$. Достаточные для этого условия можно найти в [3] (гл. IV, теорема 5.2). Погрешность

$$z_j(x) = \tilde{u}_j(x) - u_j(x)$$

удовлетворяет разностным уравнениям

$$M_k z_k(x) = \psi_k(x) - \frac{z_k(x) - z_{k-1}(x)}{\tau}, \quad x \in D, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (5.4.51)$$

с однородными граничными и начальным условиями.

Единственность решения разностно-дифференциальных уравнений с заданными граничными и начальным условиями следует из принципа максимума для эллиптических уравнений, который справедлив в силу неравенства

$$a_0(x, t) + 1/\tau > 0, \quad (x, t) \in \overline{Q}_T.$$

Определим оператор M_k^τ равенством

$$M_k^\tau = - \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x, t_k) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^n a_i(x, t_k) \frac{\partial}{\partial x_i} + (c_0 + 1/\tau). \quad (5.4.52)$$

Запишем уравнение (5.4.47) в виде

$$M_k^\tau \tilde{u}_k(x) = f_k(x) + \frac{1}{\tau} \tilde{u}_{k-1}(x) + (c_0 - a_0(x, t_k)) \tilde{u}_k(x),$$

$$x \in D, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (5.4.53)$$

Разностно-дифференциальные уравнения легко преобразуются в разностно-интегральные в результате применения какой-либо теоремы о среднем значении для эллиптического оператора. Воспользуемся алгоритмом, решающим первую краевую задачу для эллиптического уравнения, основанным на функции Леви (см. гл. 6). Пусть $\mathcal{L}_k(y, x)$ — функция Леви для оператора M_k^τ , построенная для области $T_k = T_k(x) \subset D$, и удовлетворяющая условиям

$$\mathcal{L}_k(y, x) = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}_k(y, x)}{\partial y_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad y \in \partial T_k(x), \quad (5.4.54)$$

$$N_y \mathcal{L}(y, x) \geq 0, \quad \mathcal{L}_k(y, x) > 0, \quad y \in T_k(x) \setminus \partial T_k(x),$$

тогда

$$\tilde{u}_k(x) = \int_{T_k} \left(\mathcal{L}_k(y, x) (f_k(y) + \frac{1}{\tau} \tilde{u}_{k-1}(y) + (c_0 - a_0(y, t_k)) \tilde{u}_k(y)) + \tilde{u}_k(y) N_{k,y}^\tau \mathcal{L}_k(y, x) \right) dy. \quad (5.4.55)$$

Здесь, как обычно, N_k^τ — оператор, формально сопряженный к оператору M_k^τ .

Выражение

$$p_k(x, y) = (c_0 + 1/\tau) \mathcal{L}_k(y, x) + N_{k,y}^\tau \mathcal{L}_k(y, x)$$

является по переменной y плотностью вероятностей в области $T_k(x)$. Запишем его в виде смеси плотностей

$$p_k(x, y) = \alpha_k(x) p_{k,1}(x, y) + (1 - \alpha_k(x)) p_{k,2}(x, y),$$

пропорциональных $\mathcal{L}_k(y, x)$ и $N_{k,y}^\tau \mathcal{L}_k(y, x)$. При этом

$$\alpha_k(x) = (c_0 + 1/\tau) \int_{T_k(x)} \mathcal{L}_k(y, x) dy.$$

Используя представление (5.4.55), получим несмещенную оценку $\xi_k(x)$ для $\tilde{u}_k(x)$. Пусть $Y_{k,1}$ имеет плотность распределения $p_{k,1}(x, y)$, а $Y_{k,2}$ имеет плотность распределения $p_{k,2}(x, y)$. Пусть α и β — случайные величины, распределенные равномерно на отрезке $[0, 1]$ и независимые в совокупности с $Y_{k,1}$ и $Y_{k,2}$. Несмещенную оценку $\xi_k(x)$ определяет следующий условный оператор:

If $\alpha > \alpha_k(x)$ Then $\xi_k(x) := \tilde{u}_k(Y_{k,2})$

Else

If $\beta(c_0 + 1/\tau) < 1/\tau$

Then $\xi_k(x) := \tilde{u}_{k-1}(Y_{k,1})$

Else

If $\beta(c_0 + 1/\tau) < 1/\tau + a_0(Y_{k,1}, t_k)$

Then $\xi_k(x) := f_k(Y_{k,1})/a_0(Y_{k,1}, t_k)$

Else $\xi_k(x) := \tilde{u}_k(Y_{k,1})$

Рассмотрим теперь множество $Q = \{0, 1, \dots, N+1\} \times \overline{D}$ и определим на нем однородную цепь Маркова, плотность вероятности перехода $p((k, x) \rightarrow (m, y))$ для которой относительно прямого произведения «считывающей» меры ν и меры Лебега λ определяется предыдущими построениями. То есть за один шаг по времени возможны следующие изменения в состоянии цепи:

- 1) с вероятностью $1 - \alpha_k(x)$ переходим в точку $(k, Y_{k,2})$;
- 2) с вероятностью $\alpha_k(x)$ переходим в точку $y = Y_{k,1}$, а величина m принимает значения

$$k, \quad k-1, \quad N+1$$

с вероятностями

$$(c_0 - a_0(x, t_k))/(1/\tau + c_0), \quad (1/\tau)/(1/\tau + c_0), \quad a_0(x, t_k)/(1/\tau + c_0);$$

- 3) все состояния вида

$$(0, x), \quad (N+1, x), \quad x \in D; \quad (k, x), \quad x \in \partial D$$

являются поглощающими.

Введя обозначение $\tilde{u}(k, x) = \tilde{u}_k(x)$, получаем из (5.4.55) интегральное уравнение

$$\tilde{u}(k, x) = \int_Q p((k, x) \rightarrow (m, y)) \tilde{u}(m, y) d\mu d\lambda + F(k, x), \quad (5.4.56)$$

где

$$F(k, x) = \int_{T_k} \mathcal{L}_k(y, x) f_k(y) d\lambda.$$

Выбирая в качестве областей $T_k(x)$ систему эллипсоидов, построенную в главе 6 для решения первой краевой задачи для эллиптического уравнения и $f_k(x) \equiv 1$, $\Phi(x) \equiv 0$ и $\varphi(x) \equiv 0$, мы можем применить к уравнению (5.4.56) теорему 2. В результате получим следующее утверждение.

Лемма 13. *С вероятностью 1 цепь Маркова $\{(k_j, x_j)\}_{j=0}^\infty$ с переходной плотностью $p((k, x) \rightarrow (m, y))$ либо обрывается за конечное число шагов в некоторой точке (m, y) , либо последовательность $\{k_j\}_{j=0}^\infty$ становится стационарной ($k_j = m$, $j > j_0$, $m \neq 0$, $m \neq N+1$), а расстояние $\rho(x_j, \partial D)$ стремится к 0.*

Пусть $\delta = \min\{j : k_j \in \{0, N+1\}\}$ — момент обрыва цепи, стартующей из точки (k, x) , а χ_j — индикатор события $\{\delta > j\}$. Используя оценку типа $\xi_k(x)$ на каждом шаге марковской цепи, за j шагов получим случайную величину

$$\eta_j = \chi_j \tilde{u}(k_j, x_j) + (1 - \chi_j)(\chi_{\{k_\delta=0\}} \varphi(x_{k_\delta}) + \\ + \chi_{\{k_\delta=N+1\}} f_{k_\delta-1}(x_{k_\delta})/a_0(x_{k_\delta}, t_{k_\delta-1})),$$

которая является несмещенной оценкой для $\tilde{u}(k, x)$. Очевидно, что последовательность $\{\eta_j\}_{j=0}^\infty$ образует ограниченный мартингал, из которого стандартным способом строится малосмещенная оценка для $\tilde{u}(k, x)$, учитывающая граничные условия и не содержащая неизвестной функции.

Естественно назвать построенную статистическую оценку *оценкой по поглощению*. Соответствующую выбранной цепи *оценку по столкновениям* также нетрудно записать. Конечность ее дисперсии вытекает из общих теорем и лемм, доказанных в разделе 5.2.

Ограниченный мартингал сходится с вероятностью 1 к некоторой случайной величине η_∞ , которая несмещенно оценивает $\tilde{u}(k, x)$.

Можно показать, что при нулевых граничных и начальных условиях эта величина либо равна нулю, либо совпадает с отношением $f_{k_\delta-1}(x_{k_\delta})/a_0(x_{k_\delta}, t_{k_\delta-1})$.

Заменяя в оценке η_∞ функцию f на погрешность аппроксимации ψ , получаем несмещенную оценку погрешности $z_k(x)$. Следовательно, порядок точности разностно-дифференциальной схемы совпадает с порядком погрешности аппроксимации.

5.5. ОДНА НЕЛИНЕЙНАЯ КРАЕВАЯ ЗАДАЧА

В данном параграфе рассматривается начально-краевая задача для уравнения теплопроводности с нелинейным условием Стефана—Больцмана, связывающим тепловой поток на поверхности абсолютно черного тела с его температурой. Задача рассматривается в ограниченной выпуклой области $D \subset R^3$, граница которой S — достаточно гладкая поверхность с внешней нормалью ν , например поверхность Ляпунова.

Температура тела $u(x, t)$ как функция точки x и времени t является решением уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\Delta u + f(x, t), \quad x \in D, \quad t \geq 0, \quad (5.5.1)$$

удовлетворяет начальному условию

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in D \quad (5.5.2)$$

и граничному условию Стефана—Больцмана

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} = \beta(x, t) - \kappa u^4(x, t), \quad x \in S, \quad t \geq 0, \quad (5.5.3)$$

где a и κ суть постоянные.

Решение (5.5.1)–(5.5.3) существует и единственно на достаточно малом интервале времени [14]. Используя формулу Грина (5.1.18), получаем в цилиндре $D \times (0, t)$ интегральное представление

$$\begin{aligned} u(x, t) = & -a \int_0^t d\tau \int_S \frac{\partial v(y, \tau)}{\partial \nu_y} u(y, \tau) d_y S + \\ & + a \int_0^t d\tau \int_S v(y, \tau) \frac{\partial u(y, \tau)}{\partial \nu_y} d_y S + \\ & + \varphi_1(x, t) + \varphi_2(x, t), \quad x \in D, \quad t \geq 0, \end{aligned} \quad (5.5.4)$$

где

$$v(y, \tau) = \frac{1}{(4\pi(t-\tau))^{3/2}} e^{-\frac{|x-y|^2}{4a(t-\tau)}}, \quad t > \tau, \quad (5.5.5)$$

есть фундаментальное решение уравнения теплопроводности,

$$\varphi_1(x, t) = \int_D v(y, \tau) u_0(y) dy \quad (5.5.6)$$

и

$$\varphi_2(x, t) = \int_0^t d\tau \int_D v(y, \tau) f(y, \tau) dy \quad (5.5.7)$$

суть тепловые потенциалы.

Используя свойства тепловых потенциалов и устремив x к какой-либо точке границы S , получим для функции $u(x, t)$ интегральное уравнение на границе S :

$$\begin{aligned}
u(x, t) = & -2a \int_0^t d\tau \int_S \frac{\partial v(y, \tau)}{\partial \nu_y} u(y, \tau) d_y S + \\
& + 2a \int_0^t d\tau \int_S v(y, \tau) \frac{\partial u(y, \tau)}{\partial \nu_y} d_y S + \\
& + 2\varphi_1(x, t) + 2\varphi_2(x, t), \quad x \in D, \quad t \geq 0. \quad (5.5.8)
\end{aligned}$$

Пусть S — поверхность Ляпунова с параметром λ ($0 < \lambda < 1$) и $B = C(S \times [0, T])$. Пусть

$$K_1 u = -2a \int_0^t d\tau \int_S \frac{\partial v(y, \tau)}{\partial \nu_y} u(y, \tau) d_y S$$

и

$$K_2 u = 2a \int_0^t d\tau \int_S v(y, \tau) u(y, \tau) d_y S$$

суть линейные операторы, определяемые прямыми значениями потенциалов двойного и простого слоев соответственно. Пусть w_0 — решение линейной задачи (5.5.1)–(5.5.3) при $\kappa = 0$. Тогда для функции $w = u - w_0$ уравнение (5.5.8) трансформируется в нелинейное операторное уравнение в пространстве B :

$$w = K_1 w - \kappa K_2 (w_0 + w)^4. \quad (5.5.9)$$

При достаточно малом T нелинейный оператор в (5.5.9) становится сжимающим.

Теорема 12. Пусть $\overline{V(0, r)}$ — шар радиуса r с центром в нуле в пространстве B . Тогда существует константа T , такая что нелинейный оператор $A(w) = K_1 w - \kappa K_2 (w_0 + w)^4$ является сжимающим в шаре $\overline{V(0, r)}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для любых $w, w_1, w_2 \in \overline{V(0, r)}$ справедливы неравенства

$$\|A(w)\| \leq \|K_1\| \|w\| + \kappa \|K_2\| (\|w\| + \|w_0\|)^4 \leq \|K_1\| r + \kappa \|K_2\| (r + \|w_0\|)^4,$$

$$\|A(w_1) - A(w_2)\| \leq \|K_1\| \|w_1 - w_2\| + 4\kappa (r + \|w_0\|)^3 \|K_2\| \|w_1 - w_2\|.$$

Слабая полярность ядер операторов влечет оценки их норм [4]:

$$\|K_1\| \leq C_1 B(1, \delta_1) T^{\delta_1},$$

$$\|K_2\| \leq C_2 B(1, \delta_2) T^{\delta_2},$$

где C_1 и C_2 — не зависящие от T постоянные, $\delta_1 = \lambda/2$, $\delta_2 = 1/2$, $B(\alpha, \beta)$ — бета функция. Следовательно,

$$\|A(w_1) - A(w_2)\| \leq q \|w_1 - w_2\|,$$

где

$$q = \|K_1\| + 4\kappa(r + \|w_0\|)^3 \|K_2\| < 1$$

для достаточно малых T и, следовательно, $A(w)$ — сжимающий оператор.

Пусть T такое, что $\|K_1\| \overline{r + \kappa} \|K_2\| (r + \|w_0\|)^4 < r$, тогда оператор $A(w)$ преобразует шар $V(0, r)$ в себя и справедливо следующее утверждение.

Следствие 2. Пусть T и r такие, что $q < 1$ и $\overline{\|K_1\| r + \kappa \|K_2\| (r + \|w_0\|)^4} < r$, тогда для любой функции $w_1 \in V(0, r)$ метод простой итерации $w_{n+1} = A(w_n)$ сходится к единственному решению уравнения (5.5.9).

Следствие 3. Для достаточно малых T уравнение (5.5.8) эквивалентно (5.5.1)–(5.5.3).

Построим несмещенную оценку решения $u(x, t)$ задачи (5.5.1)–(5.5.3).

Построение несмещенной оценки в линейном случае. Пусть $\kappa = 0$, то есть задача является линейной. Построим несмещенную оценку ξ для решения уравнения (5.5.8). Рассмотрим потенциал простого слоя

$$\varphi_3(x, t) = 2a \int_0^t d\tau \int_S v(y, \tau) \frac{\partial u(y, \tau)}{\partial \nu_y} d_y S.$$

Тогда уравнение (5.5.8) преобразуется в следующее уравнение:

$$u(x, t) = -2a \int_0^t d\tau \int_S \frac{|x - y|}{t - \tau} v(y, \tau) \cos \varphi_{xy} u(y, \tau) d_y S + \\ + \varphi_1(x, t) + \varphi_2(x, t) + \varphi_3(x, t), \quad (5.5.10)$$

где φ_{xy} — угол между нормальным вектором ν_y в точке y и вектором $y - x$.

Ядро Гаусса $\cos \varphi_{xy} / (2\pi|x - y|^2)$ является плотностью распределения по отношению к площади поверхности на S . Пусть $x \in S$ и H_x

обозначает полупространство, которое содержит D , граница которого является касательной плоскостью к D в точке x . Пусть $r = |x - y|$, $\omega = (y - x)/r$ — изотропный вектор в H_x , тогда

$$u(x, t) = E \int_0^t d\tau \frac{r^3}{t - \tau} v(x + r\omega, \tau) u(x + r\omega, \tau) + \\ + \varphi_1(x, t) + \varphi_2(x, t) + \varphi_3(x, t). \quad (5.5.11)$$

Выполняя замену переменных в интеграле, получим

$$u(x, t) = E \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{r^2}{4at}}^{\infty} \sqrt{s} e^{-s} u\left(x + r\omega, t - \frac{r^2}{4as}\right) + \\ + \varphi_1(x, t) + \varphi_2(x, t) + \varphi_3(x, t). \quad (5.5.12)$$

Функция $p(s) = 2\sqrt{s}e^{-s}/\sqrt{\pi}$ является плотностью гамма-распределения с параметром $3/2$.

Аналогичным образом оцениваются остальные потенциалы, входящие в (5.5.11):

$$\varphi_1(x, t) = E \int_0^{\frac{r^2}{4at}} p(s) u_0(x + 2\sqrt{ast}\omega) ds, \quad (5.5.13)$$

$$\varphi_2(x, t) = E \int_0^{\frac{r^2}{4at}} p(s) \int_0^t f(x + 2\sqrt{as(t-\tau)}\omega, \tau) d\tau ds + \\ + E \int_{\frac{r^2}{4at}}^{\infty} p(s) \int_{t-\frac{r^2}{4as}}^t f(x + 2\sqrt{as(t-\tau)}\omega, \tau) d\tau ds. \quad (5.5.14)$$

Пусть $(t_0, x_0), (t_1, x_1), \dots$ — цепь Маркова, которая останавливается по истечении времени t_0 . Будем строить несмещенную оценку ξ пошагово. Чтобы построить (t_1, x_1) из (t_0, x_0) необходимо выполнить следующие действия:

- промоделировать изотропный вектор $\omega \in H_x$ и случайную величину γ , которая имеет гамма распределение с параметром $3/2$;
- на луче, выходящем из точки x_0 в направлении ω найти точку x_1 , лежащую на поверхности S ;

— вычислить $\delta t_0 = |x_0 - x_1|^2 / (4a\gamma) = r_0^2 / (4a\gamma)$;
— если $\delta t_0 > t_0$, процесс следует остановить, в противном случае следует определить $t_1 = t_0 - \delta t_0$.

Последующие точки моделируются аналогично.

Несмещенная оценка ξ определяется формулой

$$\xi = \xi(x_0, t_0) = \varphi_3(x_0, t_0) + \begin{cases} \delta t_0 f(y_1, \tau_1) + \xi(x_1, t_1), & \delta t_0 < t_0, \\ t_0 f(y_2, \tau_2) + u_0(z_0), & \delta t_0 \geq t_0, \end{cases} \quad (5.5.15)$$

где

$$\begin{aligned} \tau_1 &= t_0 - \alpha \delta t_0, & y_1 &= x_0 + 2\sqrt{a\gamma(t_0 - \tau_1)}\omega, \\ \tau_2 &= \alpha t_0, & y_2 &= x_0 + 2\sqrt{a\gamma(t_0 - \tau_2)}\omega, \\ z_0 &= x_0 + 2\sqrt{a\gamma t_0}\omega. \end{aligned} \quad (5.5.16)$$

Случайная величина α распределена равномерно на отрезке $[0, 1]$. Если $k \geq 1$, то вычисления оценки $\xi(t_k, x_k)$ проводятся в цикле по формуле (5.5.15). Если $\delta t_k \geq t_k$, то процесс обрывается.

Если поверхность S — сфера радиуса 1, то

$$\varphi_3(x, t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} E \int_{\frac{r^2}{4at}}^{\infty} \frac{e^{-s}}{\sqrt{s}} \beta \left(x + r\omega, t - \frac{r^2}{4as} \right) ds. \quad (5.5.17)$$

Пусть γ_1 имеет гамма-распределение с параметром $1/2$, $\delta t_1 = r^2 / (4a\gamma_1)$; тогда случайная величина

$$\zeta = \zeta(x_0, t_0) = \begin{cases} 2\beta(t_0 - \delta x_1, t_1), & \delta t_1 < t_0, \\ 0, & \delta t_1 \geq t_0, \end{cases} \quad (5.5.18)$$

несмещенно оценивает $\varphi_3(t_0, x_0)$. Окончательное выражение для ξ получим, заменяя $\varphi_3(t_0, x_0)$ в (5.5.15) на ее оценку (5.5.18).

Если поверхность S не является сферой, формулы (5.5.15) и (5.5.18) нужно скорректировать. Пусть точка $x_c \in D$. Рассмотрим сферу радиуса 1 с центром в точке x_c и введем следующие обозначения:

ω_0 — центральная проекция x_0 на сферу;

r_s расстояние от ω_0 до точки ω_1 на сфере. Эту точку на сфере мы видим из ω_0 в направлении ω , то есть $\omega_1 = \omega_0 + r_s\omega$;

r_c — расстояние от $x_0 \in S$ до x_c ;

$x_1 \in S$ имеет проекцию ω_1 ;

$r = |x_0 - x_1|$;

$k = \frac{(r_c)^3 \cdot r_s}{r \cdot (x_1 - x_c, \nu_{x_1})}$;

$k_1 = \frac{2\sqrt{a\gamma t_0}}{r}$;

$k_2 = 2 \frac{(r_c)^3 \cdot r_s \cdot (x_1 - x_0, \nu_{x_1})}{r^3 \cdot (x_1 - x_c, \nu_{x_1})}$;

$z_0 = (1 - k)x_0 + k_1 x_1$.

Используя обозначения и формулы (5.5.15)–(5.5.18), можем записать ξ в виде

$$\xi(x_0, t_0) = k \cdot \begin{cases} 2\beta(x_1, t_0 - \delta t_1), & \delta t_1 < t_0 \\ 0, & \delta t_1 \geq t_0 \end{cases} + \\ + k_2 \cdot \begin{cases} \delta t_0 f(y_1, \tau_1) + \xi(x_1, t_1), & \delta t_0 < t_0 \\ t_0 f(y_2, \tau_2) + u_0(z_0), & \delta t_0 \geq t_0 \end{cases}. \quad (5.5.19)$$

Построение несмещенной оценки в нелинейном случае. Для решения нелинейной задачи с граничным условием (5.5.3) и $\kappa \neq 0$ используем оценку (5.5.19) с функцией $\beta - \kappa u^4$ вместо просто β . Тогда на каждом шаге вычислений потребуется оценить $u^4(x_1, t_0 - \delta t_1)$ и $\xi(x_1, t_1)$. Чтобы сохранить условие несмещенности, следует оценивать каждый множитель $u(t_0 - \delta t_1, x_1)$ на статистически независимых траекториях. Процесс моделирования становится ветвящимся, а процедура построения несмещенной оценки $\xi(x_0, t_0)$ становится рекурсивной. Она основана на формуле

$$\xi(x_0, t_0) = k \cdot \begin{cases} 2\beta(x_1, t_0 - \delta t_1) - \kappa \cdot \xi_1(x_1, t_0 - \delta t_1)\xi_2(x_1, t_0 - \delta t_1) \cdot \\ \xi_3(x_1, t_0 - \delta t_1)\xi_4(x_1, t_0 - \delta t_1), & \delta t_1 < t_0 \\ 0, & \delta t_1 \geq t_0 \end{cases} + \\ + k_2 \cdot \begin{cases} \delta t_0 f(y_1, \tau_1) + \xi(x_1, t_1), & \delta t_0 < t_0 \\ t_0 f(y_2, \tau_2) + u_0(z_0), & \delta t_0 \geq t_0 \end{cases}, \quad (5.5.20)$$

где случайные величины $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ являются независимыми реализациями $\xi(t_0 - \delta t_1, x_1)$. Процедура оценивания может быть легко реализована средствами любого транслятора с языка программирования высокого уровня.

Глава 6

СТАТИСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

6.1. НЕОБХОДИМЫЕ СВЕДЕНИЯ ОБ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЯХ

Все необходимые нам сведения об эллиптических уравнениях содержатся в монографии К. Миранда [17]. Изложим кратко те из них, которые нам потребуются.

Определим эллиптический оператор формулой

$$M = \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^n b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} + c(x). \quad (6.1.1)$$

Матрица коэффициентов при старших производных предполагается симметричной, а ее собственные числа — лежащими в фиксированном отрезке $[\nu, \mu]$ и $\nu > 0$. Это означает, что оператор M является сильно эллиптическим.

Нас интересуют решения уравнения $Mu(x, t) = -f(x, t)$, определенные в некоторой ограниченной области $D \subset R^n$ (или вне ее, для внешней краевой задачи), а также функционалы от них.

Граница Γ области D предполагается достаточно гладкой. Будем говорить, что замкнутая область $\overline{D}$ принадлежит классу $A^{(k, \lambda)}$, если в некоторой окрестности каждой точки $x \in \Gamma$ граница задается уравнением $z_n = h(z_1, z_2, \dots, z_{n-1})$ в некоторой системе координат, а функция h имеет непрерывные производные до порядка k включительно, причем ее производные порядка k удовлетворяют условию Гельдера с показателем λ .

Коэффициенты оператора также принадлежат к гельдеровым классам функций.

6.1.1. Фундаментальное решение и функции Леви для эллиптического оператора

Предположим дополнительно, что коэффициенты a_{ij} имеют вторые частные производные, непрерывные в D , и b_i имеют частные производные по переменным x , также непрерывные в D . Тогда в области D определен оператор N , формально сопряженный с оператором M . Пусть

$$e_i = b_i - \sum_{j=1}^n \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_j}.$$

Тогда оператор M можно записать в виде

$$Mu = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u \right) + \sum_{i=1}^n e_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} + c(x)u, \quad (6.1.2)$$

а формально сопряженный оператор N определить равенством

$$Nu = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u \right) - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (e_i(x)u) + c(x)u. \quad (6.1.3)$$

Пусть $T \subset D$ — какая-либо замкнутая область класса $A^{(1)}$, тогда для любых $u, v \in C^{(2)}(\overline{T})$ справедлива вторая формула Грина

$$\begin{aligned} \int_T (vMu - uNv) dx = \\ = \int_{\partial T} \sum_{i,j=1}^n \left[\sum_{i=1}^n a_{ij}(x) \left(v \frac{\partial u}{\partial x_i} - u \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) + e_j uv \right] \cos(\nu, x_j) d_x S, \end{aligned} \quad (6.1.4)$$

где ν — внешняя нормаль к ∂T .

Используя формулу Грина (6.1.4), легко получить интегральное представление для решения $u(x, t)$ уравнения $Mu = -f$. Для этого применим метод замороженных коэффициентов. Фиксируем точку x . Пусть $A(x)$ — матрица, составленная из старших коэффициентов $a_{ij}(x)$ оператора M , $A^{(i,j)}(x)$ — элементы обратной матрицы $A^{-1}(x)$. Определим функцию $\sigma(y, x)$ равенством

$$\sigma(y, x) = \left(\sum_{i,j=1}^n A^{(i,j)}(x) (y_i - x_i)(y_j - x_j) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.1.5)$$

Функцию

$$H(x, y) = \frac{\sigma^{2-n}(x, y)}{(n-2)\sigma_n \sqrt{\det A(y)}} \quad (6.1.6)$$

будем называть *параметрикс*. По переменной x она удовлетворяет уравнению $M_0 H = 0$. Здесь M_0 — формально самосопряженный оператор, который получается из оператора M отбрасыванием младших членов и заменой старших коэффициентов фиксированными значениями $a_{ij}(y)$.

Пусть $r = |x - y| = (\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2)^{1/2}$. При $r \rightarrow \infty$ функция $H(x, y)$ обладает следующей асимптотикой:

$$H(x, y) = O(r^{2-n}), \quad \frac{\partial H(x, y)}{\partial x_i} = O(r^{1-n}), \quad \frac{\partial^2 H(x, y)}{\partial x_i \partial x_j} = O(r^{-n}). \quad (6.1.7)$$

Функцию $\mathcal{L}(x, y)$, непрерывную в области D при $x \neq y$ вместе со своими первыми и вторыми производными по переменным x_i ($i = 1, 2, \dots, n$), назовем *функцией Леви*, если при некотором $\lambda > 0$ справедлива асимптотика

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x, y) - H(x, y) &= O(r^{\lambda+2-n}), \quad \frac{\partial(\mathcal{L}(x, y) - H(x, y))}{\partial x_i} = O(r^{\lambda+1-n}), \\ \frac{\partial^2(\mathcal{L}(x, y) - H(x, y))}{\partial x_i \partial x_j} &= O(r^{\lambda-n}) \end{aligned} \quad (6.1.8)$$

равномерно по y в каждой замкнутой подобласти $T \subset D$.

Для оператора M с гладкими коэффициентами при $\lambda \leq 1$ и $r \rightarrow 0$ справедлива асимптотика:

$$M_x \mathcal{L}(x, y) = O(r^{\lambda-n}), \quad N_x \mathcal{L}(x, y) = O(r^{\lambda-n}). \quad (6.1.9)$$

Пусть $T \subset D$ — какая-либо замкнутая область класса $A^{(1)}$. Используя формулу Грина (6.1.4) и асимптотику (6.1.9), легко получить интегральное представление решения уравнения $Mu(x) = -f(x)$:

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_T (\mathcal{L}(y, x)f(y) + u(y)N_y \mathcal{L}(y, x)) dy + \\ &+ \int_{\partial T} \sum_{i,j=1}^n \left[\sum_{i=1}^n a_{ij}(y) \left(\mathcal{L}(y, x) \frac{\partial u(y)}{\partial y_i} - u \frac{\partial \mathcal{L}(y, x)}{\partial y_i} \right) + e_j(y)u(y)\mathcal{L}(y, x) \right] \times \\ &\times \cos(\nu, y_j) dy_j S. \end{aligned} \quad (6.1.10)$$

Функцией Грина первой краевой задачи называется *функция Леви* $G(x, y)$, которая как функция точки y является решением уравнения

$$N_y G(x, y) = 0, \quad y \in D \setminus \partial D \setminus \{x\}$$

и удовлетворяет однородному граничному условию

$$G(x, y) = 0, \quad y \in \partial D, \quad x \in D \setminus \partial D.$$

Выбирая область $T = T(x) \subset D$ с известной функцией Грина, из (6.1.10) при $\mathcal{L}(y, x) = G(x, y)$ получаем интегральное уравнение

$$u(x) = \int_T G(x, y) f(y) dy - \int_{\partial T} \sum_{i=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial G(x, y)}{\partial y_i} \cos(\nu, y_j) u(y) d_y S, \quad (6.1.11)$$

В силу принципа максимума справедливы неравенства

$$G(x, y) \geq 0, \quad \sum_{i=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial G(x, y)}{\partial y_i} \cos(\nu, y_j) \leq 0,$$

поэтому ядро интегрального оператора в уравнении (6.1.11) неотрицательно. Функцию Грина, как правило, найти сложно, поэтому используют функции Леви, удовлетворяющие различным условиям, которые упрощают представление (6.1.10). Например, при

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(y, x) = 0, \quad \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \mathcal{L}(y, x)}{\partial y_i} \cos(\nu, y_j) \leq 0, \quad y \in \partial T(x), \\ N_y \mathcal{L}(y, x) \geq 0, \quad \mathcal{L}(y, x) > 0, \quad y \in T(x) \setminus \partial T(x) \end{aligned} \quad (6.1.12)$$

получим интегральное уравнение

$$u(x) = \int_T (\mathcal{L}(y, x) f(y) + u(y) N_y \mathcal{L}(y, x)) dy - \int_{\partial T} \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \mathcal{L}(y, x)}{\partial y_i} \cos(\nu, y_j) u(y) d_y S, \quad (6.1.13)$$

при

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(y, x) = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}(y, x)}{\partial y_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad y \in \partial T(x), \\ N_y \mathcal{L}(y, x) \geq 0, \quad \mathcal{L}(y, x) > 0, \quad y \in T(x) \setminus \partial T(x) \end{aligned} \quad (6.1.14)$$

получим интегральное уравнение

$$u(x) = \int_T (\mathcal{L}(y, x) f(y) + u(y) N_y \mathcal{L}(y, x)) dy. \quad (6.1.15)$$

Справедлива очевидная

Лемма 14. Если при $x \in D$ выполнено неравенство $s(x) \leq 0$, то неотрицательное ядро любого из интегральных уравнений (6.1.11)–(6.1.15) является субстохастическим.

Следовательно, к уравнениям (6.1.11)–(6.1.15) применимы результаты § 5.2. Действительно, каждое из этих уравнений можно записать в виде

$$u(x) = \int_{\overline{D}} u(y)P(x, dy) + F(x), \quad x \in \overline{D}, \quad (6.1.16)$$

где $P(x, dy)$ — субстохастическое ядро, а

$$F(x) = \int_T \mathcal{L}(y, x)f(y)dy - \int_{\partial T \cap \partial D} \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \mathcal{L}(y, x)}{\partial y_i} \cos(\nu, y_j) u(y) d_y S, \quad x \in D, \quad (6.1.17)$$

является интегралом от граничных условий и правой части уравнения. Все точки границы делятся на два типа: *поглощающие* и *непоглощающие*. Для поглощающей точки границы $P(x, B) = 0$ для любого борелевского множества B , $F(x) = u(x)$. Для непоглощающей точки границы $P(x, \cdot)$ является распределением, сосредоточенным в точке x , а $F(x) = 0$.

6.2. ПЕРВАЯ КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА

Рассмотрим первую краевую задачу

$$Mu(x) = -f(x), \quad x \in D; \quad u(x) = \varphi(x), \quad x \in \Gamma. \quad (6.2.1)$$

Будем предполагать, что область D и оператор M таковы, что задача (6.2.1) имеет единственное непрерывное в $\overline{D}$ и регулярное в D решение для любых достаточно гладких функций $f(x)$ и $\varphi(x)$. Достаточные условия для этого дает, например, следующая теорема [17].

Теорема 13. Пусть M — эллиптический оператор, коэффициенты которого в замкнутой области $\overline{D}$ класса $A^{(1,\lambda)}$ удовлетворяют условиям $a_{ij} \in C^{(1,\lambda)}(\overline{D})$, $b_i \in C^{(0,\lambda)}(\overline{D})$, $c \in C^{(0,\lambda)}(\overline{D})$. Пусть $f \in C^{(0,\lambda)}(D) \cap C(\overline{D})$, $\varphi \in C(\Gamma)$ и $c(x) \leq 0$, тогда задача (6.2.1) имеет единственное регулярное решение $u \in C^2(D) \cap C(\overline{D})$.

Для того чтобы применить схему Неймана—Улама к решению первой краевой задачи, наложим на семейство замкнутых множеств $T(x)$ и функцию Леви ограничения:

$$1) \quad T(x) \subseteq \overline{D},$$

$$2) T(x) \in A^{(1)},$$

$$3) h(x) = \int_T \mathcal{L}(y, x) dy - \int_{\partial T \cap \partial D} \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \mathcal{L}(y, x)}{\partial y_i} \cos(\nu, y_j) d_y S > c(\delta) > 0 \text{ при } \text{dist}(x, \Gamma) > \delta.$$

Если дополнительно предположить, что коэффициенты $e_i \in C^{(1)}(D)$, то из результатов § 5.2 вытекает следующая теорема.

Теорема 14. Пусть выполнены следующие условия:

коэффициенты дифференциального оператора достаточно гладкие и $c(x) \leq 0$; задача (6.2.1) имеет единственное регулярное решение в области $\bar{D}$ при всех достаточно гладких $f(x)$ и $\varphi(x)$; для решения краевой задачи справедливо уравнение (6.1.16) с субстохастическим ядром $P(x, dy)$ и оно является одним из уравнений (6.1.11)–(6.1.15); область $T(x)$ и функция Леви в ней выбраны в соответствии с условиями 1–3.

Тогда почти все траектории цепи Маркова с переходной вероятностью $P(x, dy)$, стартовой из точки $x \in D$, либо обрываются за конечное число шагов, либо сходятся к случайной точке на границе Γ .

Пусть $\delta > 0$, τ_1 — момент обрыва цепи, τ_2 — момент первого попадания цепи в δ -окрестность границы Γ и $\tau_\delta = \min(\tau_1, \tau_2)$. Математическое ожидание $E\tau_\delta < \infty$.

Последовательность оценок $\xi_i = \sum_{j=0}^{i-1} h(x_j) f(y_j) \chi_j + \chi_i u(x_i)$, определенная в (5.2.7), образует квадратично интегрируемый мартингал. Случайная величина ξ_{τ_δ} является несмещенной оценкой $u(x)$ и имеет конечную дисперсию. Аналогичные утверждения справедливы для последовательности оценок с весами (5.2.9).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Из принципа максимума для эллиптических уравнений следует, что при $c(x) \leq 0$, $f(x) > 0$ и $\varphi(x) \geq 0$ решение $u(x)$ краевой задачи является неотрицательной ограниченной функцией. Тогда правая часть уравнения (6.1.16) положительна внутри области D , так как из условий (6.1.12), (6.1.14) следует неравенство

$$F(x) \geq \int_T \mathcal{L}(y, x) f(y) dy > 0.$$

Значит, $u(x)$ — эксцессивная функция относительно ядра $P(x, B)$. Пусть $v_m(x)$ — m -я координатная функция, $a > 0$ — постоянная, такая что $v_m(x) + a > 0$ при $x \in \bar{D}$. Для некоторой постоянной $b < 0$ при всех $x \in \bar{D}$ выполнено неравенство $a_m(x) + c(x)v_m(x) + b < 0$. Тогда функция $w_m(x)$, удовлетворяющая уравнению $Mw_m(x) = a_m(x) + c(x)v_m(x) + b$

в области D и совпадающая с $v_m(x) + a$ на границе Γ , эксцессивна. Разность $w_m(x) - v_m(x)$ удовлетворяет уравнению $M(w_m(x) - v_m(x)) = b$ и принимает положительное значение на границе области. Значит, она также эксцессивна. Тогда по теореме 3 почти все траектории цепи Маркова с переходной вероятностью $P(x, dy)$, стартующей из точки $x \in D$, либо обрываются за конечное число шагов, либо сходятся к случайной точке на границе Γ . Значит, $\tau_\delta < \infty$ с вероятностью 1. Условие 3 обеспечивает неравенство $E\tau_\delta < \infty$ в силу леммы 5. Остальные утверждения теоремы являются следствиями леммы 4.

Для оценки с весами доказательство проводится аналогично. ■

Приведем примеры блужданий и оценок, удовлетворяющих выбранной модели.

Пример 5. Блуждание по сферам

Решается задача Дирихле для уравнения Пуассона $\Delta u(x) = -f(x)$, $x \in D \subset R^n$, $n > 2$. В качестве области $T(x) \subset D$ берется шар радиуса $R(x)$ с центром в точке x . Функция $R(x)$ удовлетворяет неравенствам $c_1 \text{dist}(x, \Gamma) \leq R(x) \leq \text{dist}(x, \Gamma)$ и непрерывна. Функция Леви определяется равенством

$$\mathcal{L}(y, x) = \frac{|x - y|^{2-n} - R^{2-n}}{\sigma_n(n-2)}.$$

Несложные вычисления показывают, что справедливы неравенства

$$h(x) = \int_T \mathcal{L}(y, x) dy = \frac{R^2(x)}{2n} \geq \frac{c_1 \delta^2}{2n}.$$

Для выбранной функции Леви выполнены условия (6.1.12), а для решения задачи Дирихле справедливо уравнение (6.1.13), которое теперь имеет вид

$$u(x) = Eu(x + R(x)\omega) + \frac{R^2(x)}{2n} Ef(x + R(x)\rho\omega),$$

где ω — изотропный вектор в R^n , а случайная величина ρ имеет на отрезке $[0, 1]$ плотность распределения $p(r) = 2n(r - r^{n-1})/(n-2)$. Следовательно, к блужданию по сферам применима теорема 14. Несмещенная оценка решения задачи Дирихле на траекториях блуждания по сферам определяется формулой

$$\xi_\delta = \sum_{j=0}^{\tau_\delta-1} \frac{R^2(x_j)}{2n} f(y_j) + u(x_{\tau_\delta}),$$

в которую входят величины, определяемые равенствами:

$$x_0 = x, x_{j+1} = x_j + R(x_j)\omega_j, y_j = x_j + R(x_j)\rho_j\omega_j, j = 0, 1, \dots$$

Отметим, что величина $u(x_{\tau_\delta}) = \varphi(x_{\tau_\delta})$, если $\tau_\delta = \tau_1$. Если же $\tau_\delta < \tau_1$, то $u(x_{\tau_\delta})$ заменяют на $\varphi(x_{\tau_\delta}^*)$, где $x_{\tau_\delta}^*$ — ближайшая к x_{τ_δ} точка границы Γ . Алгоритм моделирования величины ρ представлен в § П.4.1.

Пример 6. Блуждание по сферам и шарам

Решается задача Дирихле для уравнения Гельмгольца:

$$\Delta u(x) - a(x)u(x) = -f(x), \quad x \in D \subset R^n, \quad n > 2.$$

Предполагается, что коэффициент $a(x)$ непрерывен и удовлетворяет неравенству $0 \leq a(x) \leq c^2$, где c — положительная постоянная.

В качестве области $T(x) \subset D$ берется шар радиуса $R(x)$ с центром в точке x . Функция $R(x)$ удовлетворяет неравенствам $c_1 \text{dist}(x, \Gamma) \leq R(x) \leq \text{dist}(x, \Gamma)$ и непрерывна.

Функция Леви определяется равенством

$$\mathcal{L}(y, x) = \frac{1}{\sigma_n(n-2)} \left(\frac{e^{-cr}}{r^{n-2}} - \frac{e^{-cR}}{R^{n-2}} \right),$$

где $r = |x - y|$. Асимптотика (6.1.7) для данной функции справедлива при $\lambda = 1$. Вычисления показывают, что

$$\Delta_y \mathcal{L}(y, x) = e^{-cr} \frac{c^2 r + c(n-3)}{\sigma_n(n-2)r^{n-1}}.$$

Следовательно,

$$N_y \mathcal{L}(y, x) = \frac{e^{-cr}}{\sigma_n(n-2)r^{n-1}} ((c^2 - a(y))r + c(n-3)) + \frac{e^{-cR}a(y)}{\sigma_n(n-2)R^{n-2}}.$$

Нормальная производная функции $\mathcal{L}(y, x)$ на поверхности шара $T(x)$ совпадает с производной по радиусу r :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nu} = - \left(1 + \frac{cR}{n-2} \right) \frac{e^{-cR}}{\sigma_n R^{n-1}}.$$

Значит, для выбранной функции Леви выполнены условия (6.1.12), а для решения задачи Дирихле справедливо уравнение (6.1.13). Функция $h(x)$ удовлетворяет неравенствам

$$\begin{aligned} h(x) &\geq \int_{T(x)} \mathcal{L}(y, x) dy = \frac{e^{-cR}}{c^2(n-2)} \times \\ &\times \left(e^{cR} - 1 - cR - \frac{(cR)^2}{n} \right) \geq \frac{R^2 e^{-cR}}{2n} \geq c(\delta) = \frac{(c_1 \delta)^2 e^{-cd}}{2n} \end{aligned}$$

при $\text{dist}(x, \Gamma) > \delta$. Здесь d — диаметр области D .

В данном примере удобно строить несмещенные оценки с весами (5.2.9) на траекториях необрывающейся внутри области цепи, переходная вероятность для которой совпадает с ядром уравнения при $a(y) \equiv 0$. Она является смесью изотропного распределения в шаре и равномерного распределения на окружности. Опишем процедуру моделирования следующей точки цепи по текущей. Пусть ω — изотропный единичный вектор, γ_1, γ_2 — экспоненциально (с параметром $\lambda = 1$) распределенные независимые случайные величины, α — распределена равномерно и независима от уже определенных случайных элементов. Пусть $\chi^{(n)}$ — индикатор интервала $[0, 1/(n-2)]$, случайная величина $\tilde{\rho} = (\gamma_1 + \chi^{(n)}(\alpha)\gamma_2)/c$, и, наконец, $\rho = \min(\tilde{\rho}, R(x))$, тогда $x_1 = x + \rho\omega$. При переходе из x в x_1 весовой множитель умножается на величину

$$p(x, x_1) = 1 - \chi^{(n)}(\alpha) \frac{a(x_1)}{c^2} \left(\frac{\rho}{R} \right)^{(n-2)} e^{-c(R-\rho)}.$$

Функцию

$$F(x) = \int_T \mathcal{L}(y, x) f(y) dy$$

можно несмещенно оценить нулем при $\rho_1 > cR$ и величиной

$$\frac{1}{n-2} \left(1 - \left(\frac{\rho_1}{R} \right)^{(n-2)} e^{-c(R-\rho_1)} \right) \frac{f(y)}{c^2}$$

при $\rho_1 \leq cR$, где $\rho_1 = (\gamma_1 + \gamma_2)/c$, а точка $y = x + \rho_1\omega$.

6.2.1. Блуждание по эллипсоидам

Следуя работе [20], опишем алгоритм блуждания по эллипсоидам для решения задачи Дирихле (6.2.1). В качестве областей $T(x)$ выберем области, ограниченные эллипсоидами

$$T(x) = T_R(x) = \{y : \sigma(y, x) = (A^{-1}(x)(y-x), (y-x))^{1/2} \leq R\} \subseteq D. \quad (6.2.2)$$

Справедлива

Лемма 15. *Существует непрерывная функция $R = R(x)$, удовлетворяющая в области D при некоторых положительных постоянных c_1 и c_2 неравенствам $c_1 \text{dist}(x, \Gamma) \leq R(x) \leq c_2 \text{dist}(x, \Gamma)$, и выполнено включение $T_R(x) \subset D$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Из условия равномерной эллиптичности оператора следует, что в качестве множества $T(x)$ можно взять максимальный эллипсоид

$T_R(x)$, лежащий в D . Действительно, пусть $y \in \Gamma$ — точка касания максимального эллипсоида с границей Γ . Тогда из условия равномерной эллиптичности оператора M следуют неравенства

$$\mu^{-\frac{1}{2}} \text{dist}(x, y) = \mu^{-\frac{1}{2}} |x - y| \leq \sigma(y, x) = R \leq \nu^{-\frac{1}{2}} |x - y| = \nu^{-\frac{1}{2}} \text{dist}(x, y).$$

Функция $R(x) = \inf_{y \in \Gamma} \sigma(y, x)$ является непрерывной. Действительно, из условий на коэффициенты оператора следует, что $\sigma(y, x)$ является равномерно непрерывной функцией на компакте $\Gamma \times \overline{D}$. По заданному $\varepsilon > 0$ определим $\delta > 0$ так, что при всех $y \in \Gamma$ и $|x - x_1| < \delta$ выполнено неравенство $|\sigma(y, x) - \sigma(y, x_1)| < \varepsilon$. Тогда $R(x) \leq \sigma(y, x) \leq \sigma(y, x_1) + \varepsilon$ и, следовательно, $R(x) \leq R(x_1) + \varepsilon$. Меняя местами x и x_1 , получаем обратное неравенство. ■

Для произвольной положительной функции $p(\rho)$ определим функцию $\mathcal{L}(y, x)$ равенством

$$\mathcal{L}(y, x) = \frac{1}{q(R)\sigma_n(n-2)\sqrt{\det(A(x))}} \int_{\sigma}^R (\sigma^{2-n} - \rho^{2-n}) p(\rho) d\rho, \quad (6.2.3)$$

где

$$\sigma = \sigma(y, x), \quad R = R(x), \quad q(r) = \int_0^R p(\rho) d\rho.$$

Лемма 16. Пусть $p(\rho)$ — ограниченная ($p(\rho) \leq C$) и непрерывная функция на $[0, \infty)$, тогда функция $\mathcal{L}(y, x)$, определенная формулой (6.2.3), является функцией Леви.

Доказательство.

Проверим справедливость асимптотики (6.1.8). Положим

$$\mu(x) = \left(q(R)\sigma_n(n-2)\sqrt{\det(A(x))} \right)^{-1}.$$

Тогда

$$\mathcal{L}(y, x) - H(y, x) = -\mu(x) \left[\sigma^{2-n} \int_0^{\sigma} p(\rho) d\rho + \int_{\sigma}^R \rho^{2-n} p(\rho) d\rho \right].$$

Если x изменяется в замкнутой подобласти $\overline{T} \subset D$, то функция $\mu(x)$ ограничена сверху некоторой постоянной C_1 .

При $n = 3$ получаем неравенство

$$|\mathcal{L}(y, x) - H(y, x)| \leq C \cdot C_1 [1 + |\ln R| + |\ln \sigma|] \leq C \cdot C_1 [\text{const} + |\ln r|].$$

Следовательно, при $0 < \lambda < 1$ верно неравенство $|\mathcal{L}(y, x) - H(y, x)| \leq \text{const} \cdot r^{\lambda-1}$.

При $n > 3$

$$|\mathcal{L}(y, x) - H(y, x)| \leq C \cdot C_1 \left[\sigma^{3-n} + \frac{|\sigma^{3-n} - R^{3-n}|}{n-3} \right] \leq \text{const} \cdot r^{3-n}.$$

Значит, первое из условий (6.1.8) выполнено при $\lambda = 1$.

Вычисляя производные, находим

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\mathcal{L} - H)}{\partial y_i} &= \mu(x)(n-2)\sigma^{1-n} \frac{\partial \sigma}{\partial y_i} \int_0^\sigma p(\rho) d\rho, \\ \frac{\partial^2(\mathcal{L} - H)}{\partial y_i \partial y_j} &= -\frac{1}{q(R)} \frac{\partial^2 H}{\partial y_i \partial y_j} \int_0^\sigma p(\rho) d\rho - \frac{1}{q(R)} \frac{\partial H}{\partial y_i} p(\sigma) \frac{\partial \sigma}{\partial y_j}. \end{aligned}$$

Оценивая производные, получаем неравенства

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial(\mathcal{L} - H)}{\partial y_i} \right| &\leq \frac{C\sigma}{q(R)} \left| \frac{\partial H}{\partial y_i} \right|, \\ \left| \frac{\partial^2(\mathcal{L} - H)}{\partial y_i \partial y_j} \right| &\leq \frac{C}{q(R)} \left(\left| \frac{\partial^2 H}{\partial y_i \partial y_j} \right| \sigma + \left| \frac{\partial H}{\partial y_i} \right| \left| \frac{\partial \sigma}{\partial y_j} \right| \right). \end{aligned}$$

Если x изменяется в замкнутой подобласти $\bar{T} \subset D$, то функция $q(R(x))$ ограничена снизу положительной постоянной. Используя асимптотику для производных параметрикса $H(y, x)$, получаем неравенство

$$\left| \frac{\partial(\mathcal{L} - H)}{\partial y_i} \right| \leq \text{const} \cdot r^{2-n}.$$

Поскольку

$$\left| \frac{\partial \sigma}{\partial y_j} \right| = \left| \frac{1}{\sigma} \sum_{k=1}^n A_{jk}(y_k - x_k) \right| \leq \frac{\mu^{-1}nr}{\nu^{-1/2}r} = \frac{\nu^{1/2}n}{\mu},$$

справедливо неравенство

$$\left| \frac{\partial^2(\mathcal{L} - H)}{\partial y_i \partial y_j} \right| \leq \text{const} \cdot r^{1-n}$$

Следовательно, второе и третье из условий (6.1.8) выполнены при $\lambda = 1$. ■

Подставляя выражения для производных

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_i} = \frac{1}{q(R)} \frac{\partial H}{\partial y_i} \int_\sigma^R p(\rho) d\rho,$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial y_i \partial y_j} = \frac{1}{q(R)} \frac{\partial^2 H}{\partial y_i \partial y_j} \int_{\sigma}^R p(\rho) d\rho - \frac{1}{q(R)} \frac{\partial H}{\partial y_i} p(\sigma) \frac{\partial \sigma}{\partial y_j}$$

в формулу (6.1.3) для сопряженного оператора, получаем

$$\begin{aligned} N_y \mathcal{L}(y, x) &= \frac{1}{q(R)} \int_{\sigma}^R p(\rho) d\rho \cdot N_y H - \\ &- \frac{p(\sigma)}{q(R)} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial H}{\partial y_i} \frac{\partial \sigma}{\partial y_j} - \mu(x) d(y) \int_{\sigma}^R \rho^{2-n} p(\rho) d\rho, \end{aligned} \quad (6.2.4)$$

где

$$d(y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 a_{ij}}{\partial y_i \partial y_j} + c(y) - \sum_{i=1}^n \frac{\partial b_i}{\partial y_i}.$$

Выберем вес $p(\rho)$ так, чтобы функция $N_y \mathcal{L}(y, x)$ была неотрицательной в $T(x)$. Оценим снизу каждое слагаемое в формуле (6.2.4). Заметим, что

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \sigma}{\partial y_i} \frac{\partial \sigma}{\partial y_j} &= \frac{1}{\sigma^2} (A(y) A^{-1}(x)(y-x), A^{-1}(x)(y-x)) \geq \\ &\geq \frac{\nu}{\sigma^2} |A^{-1}(x)(y-x)|^2 \geq \frac{\nu^2}{r^2} |A^{-1}(x)(y-x)|^2 \geq \frac{\nu^2}{\mu^2} = \kappa_1. \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

Поэтому,

$$\begin{aligned} &- \frac{p(\sigma)}{q(R)} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial H}{\partial y_i} \frac{\partial \sigma}{\partial y_j} = \\ &= \mu(x)(n-2)p(\sigma)\sigma^{1-n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \sigma}{\partial y_i} \frac{\partial \sigma}{\partial y_j} \geq \mu(x)(n-2)p(\sigma)\sigma^{1-n} \kappa_1. \end{aligned} \quad (6.2.6)$$

Если коэффициенты оператора M достаточно гладкие, например $a_{ij} \in C^{(2)}(\overline{D})$, $b_i \in C^{(1)}(\overline{D})$ и $c \in C(\overline{D})$, то

$$\left| \frac{N_y H}{q(R)} \right| \leq \kappa_2 \mu(x) r^{1-n} \leq \kappa_2 \mu(x) \nu^{(1-n)/2} \sigma^{1-n}. \quad (6.2.7)$$

Пусть $\kappa_3 = \max_{x \in \overline{D}} |d(x)|$. Из формул (6.2.4)–(6.2.7) следует, что функцию $p(\rho)$, обеспечивающую неотрицательность $N_y \mathcal{L}$ на $T(x)$, достаточно подчинить условию

$$(n-2)\kappa_1 p(\sigma) \geq \kappa_2 \nu^{(1-n)/2} \int_{\sigma}^R p(\rho) d\rho + \kappa_3 \sigma \int_{\sigma}^R \frac{\rho^{2-n}}{\sigma^{2-n}} p(\rho) d\rho,$$

которое заведомо будет выполнено, если

$$p(\sigma) \geq \kappa \int_{\sigma}^R p(\rho) d\rho$$

при

$$\kappa \geq \frac{\kappa_2 \nu^{(1-n)/2} + \kappa_3 R}{(n-2)\kappa_1}.$$

Очевидно, что $p(\sigma) = e^{-\kappa\sigma}$ является искомой функцией. Таким образом, доказана

Теорема 15. Пусть коэффициенты оператора M достаточно гладкие:

$a_{ij} \in C^{(2)}(\overline{D})$, $b_i \in C^{(1)}(\overline{D})$ и $c \in C(\overline{D})$. Тогда существует непрерывная функция $R(x)$ и функция Леви $\mathcal{L}(y, x)$, такие что:

1) для $x \in D$ и некоторых положительных постоянных c_1, c_2 справедливы неравенства $c_1 \text{dist}(x, \Gamma) \leq R(x) \leq c_2 \text{dist}(x, \Gamma)$;

2)

$$\mathcal{L}(y, x) = \frac{\partial \mathcal{L}(y, x)}{\partial y_i} = 0$$

для $y \in \partial T(x)$, $i = 1, 2, \dots, n$;

3) $N_y \mathcal{L}(y, x) \geq 0$ для $y \in T(x)$;

4) для решения первой краевой задачи справедливо интегральное представление

$$u(x) = \int_{T(x)} N_y \mathcal{L}(y, x) u(y) dy + \int_{T(x)} \mathcal{L}(y, x) f(y) dy;$$

5) при $c(x) \leq 0$ ядро уравнения 4 является субстохастическим.

Определим переходную вероятность цепи Маркова $x_0 = x, x_1, \dots$ равенством

$$P(x, B) = \int_{T(x) \cap B} N_y \mathcal{L}(y, x) dy.$$

Применим к уравнению

$$u(x) = \int_{T(x)} N_y \mathcal{L}(y, x) u(y) dy + \int_{T(x)} \mathcal{L}(y, x) f(y) dy \quad (6.2.8)$$

теорему 14. Функцию $h(x)$ легко вычислить, применяя лемму 2 к семейству эллипсоидов $\sigma(y, x) = r$, $0 \leq r \leq R(x)$:

$$\begin{aligned}
h(x) &= \int_{T(x)} \mathcal{L}(y, x) dy = \\
&= \frac{1}{q(R)(n-2)} \int_0^R dr r^{n-1} \int_r^R (r^{2-n} - \rho^{2-n}) p(\rho) d\rho = \\
&= \frac{1}{q(R)(n-2)} \int_0^R d\rho \quad p(\rho) \int_0^\rho (r - r^{n-1} \rho^{2-n}) dr = \\
&= \frac{1}{2nq(R)} \int_0^R \rho^2 p(\rho) d\rho.
\end{aligned}$$

Рассмотрим функцию

$$h_1(r) = \frac{1}{2nq(r)} \int_0^r \rho^2 p(\rho) d\rho.$$

Ее производная положительна:

$$\frac{dh_1}{dr} = \frac{r^2 p(r) q(r) - p(r) \int_0^r \rho^2 p(\rho) d\rho}{2nq^2(r)} > 0.$$

Следовательно, при $\text{dist}(x, \Gamma) \geq \delta$ выполнены неравенства $R(x) \geq c_1 \delta$ и $h(x) \geq h_1(c_1 \delta) > 0$.

Таким образом, все условия теоремы 14 выполнены. Следовательно, построенная цепь Маркова с вероятностью 1 либо обрывается внутри области в некоторый конечный момент τ_1 , либо сходится к точке на границе Γ . Пусть $\delta > 0$, τ_2 — момент первого попадания цепи в δ -окрестность границы Γ и $\tau_\delta = \min(\tau_1, \tau_2)$. Математическое ожидание $E\tau_\delta < \infty$.

Последовательность оценок $\xi_i = \sum_{j=0}^{i-1} h(x_j) f(y_j) \chi_j + \chi_i u(x_i)$, определенная в (5.2.7), образует квадратично-интегрируемый мартингал. Случайная величина ξ_{τ_δ} является несмещенной оценкой $u(x)$ и имеет конечную дисперсию.

Случайные векторы y_j распределены в $T(x_j)$ с плотностью $\mathcal{L}(y, x_j)/h(x_j)$. Алгоритмы моделирования этой плотности и самого блуждания по эллипсоидам содержатся в § П.4.2.

6.3. КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА

Пусть, как и ранее, D — ограниченная область в R^n , Γ — ее граница, $\overline{D} = D \cup \Gamma$ — замыкание D , $D_1 = R^n \setminus \overline{D}$. В данном разделе рассматриваются различные алгоритмы статистического моделирования, решающие краевые задачи для уравнения Пуассона $\Delta u(x) = -f(x)$, как внутренние (в D), так и внешние (в D_1). Для решения первой краевой задачи обычно используют статистические оценки на траекториях случайных блужданий внутри области. Их недостатком является

смещение, связанное с остановкой блуждания вблизи границы и заменой точного значения функции в точке остановки на близкое к нему значение в граничной точке. Данное смещение при практических вычислениях трудно оценить. Альтернативные алгоритмы, основанные на решении уравнений теории потенциала, оценивают лишь конечную сумму ряда Неймана, следовательно тоже содержат систематическую погрешность. Однако если ограничиться областями, которые являются многогранниками, то несмещённые оценки построить можно.

6.3.1. Блуждания по полусферам

В данном параграфе рассматриваются различные варианты *блуждания по полусферам*. Статистические оценки решений краевых задач, построенные на траекториях этих процессов, являются несмещёнными, если область является многогранником. Для произвольной области с регулярной границей предполагается, что часть границы области, где задано условие Неймана, является выпуклой. В этом случае смещение будет обусловлено лишь досрочной остановкой процесса вблизи границы, где задано условие Дирихле. Изложение следует работам [21], [32]. Аналогичные, но смещённые оценки в областях с произвольной границей построены в работах Н. А. Симонова [29], [30].

Пусть T — половинка шара радиуса R с центром в нуле в R^n , $n \geq 3$. Плоскую границу области T обозначим H , а сферическую — S . Пусть $\partial T = H \cup S$. Рассмотрим задачу Дирихле

$$\Delta u = -g, \quad u|_{\partial T} = \varphi, \quad u \in C^2(T) \cap C(\bar{T}), \quad \varphi \in C(\partial T). \quad (6.3.1)$$

Функция Грина $G(x, y)$ задачи Дирихле (6.3.1) строится методом отражений и имеет вид

$$G(x, y) = \frac{1}{(n-2)\sigma_n} \left(\frac{1}{|x-y|^{n-2}} - \frac{1}{|\bar{x}-y|^{n-2}} \right) - \frac{R^{n-2}}{|x|^{n-2}} \frac{1}{(n-2)\sigma_n} \left(\frac{1}{|x^*-y|^{n-2}} - \frac{1}{|\bar{x}^*-y|^{n-2}} \right), \quad (6.3.2)$$

где $x \in T$, x^* — точка, симметричная x относительно сферы S , $\bar{x}$ и $\bar{x}^*$ — точки, симметричные x и x^* относительно плоскости H .

Если $0 < \beta < 1$ и точка x лежит на оси симметрии полушара на расстоянии βR от его центра, то нормальная производная функции Грина по внутренней нормали к поверхности полушара имеет вид

$$k(x, y) = \begin{cases} \frac{2R\beta}{\sigma_n} \left(\frac{1}{|x-y|^n} - \frac{1}{(\beta|\bar{x}-y|)^n} \right), & y \in H, \\ \frac{R}{\sigma_n} (1 - \beta^2) \left(\frac{1}{|x-y|^n} - \frac{1}{|\bar{x}-y|^n} \right), & y \in S. \end{cases} \quad (6.3.3)$$

Для любой функции $u \in C^2(T) \cap C(\overline{T})$ справедливо интегральное представление

$$u(x) = \int_{\partial T} k(x, y) u(y) d_y S - \int_T G(x, y) \Delta u(y) dy. \quad (6.3.4)$$

Очевидно, что $k(x, y)$ является плотностью вероятностей перехода по переменной y . Представления, аналогичные (6.3.4), справедливы для произвольной внутренней точки, произвольной области T , граничные точки которой регулярны [33]. Для решения первой краевой задачи в произвольной замкнутой ограниченной области D с регулярной границей в пространстве R^n зададимся семейством областей $T(x)$, $x \in D$; тогда представление (6.3.4) можно рассматривать как интегральное уравнение в пространстве $C(\overline{D})$:

$$u(x) = \int_{\overline{D}} P(x, dy) u(y) + F(x), \quad x \in \overline{D}, \quad (6.3.5)$$

где субмарковское ядро $P(x, dy)$ имеет плотность $k(x, y)$. Отметим, что функция $F(x)$ должна учитывать как правую часть уравнения, так и граничные значения $\varphi(x)$.

Пусть $x_0 = x, x_1, x_2, \dots$ — цепь Маркова с переходными вероятностями $P(x, A)$. Вообще говоря, это обрывающаяся цепь. На траекториях цепи стандартным образом строится последовательность ξ_i ($i = 0, 1, 2, 3, \dots$) несмещенных оценок для $u(x)$. Пусть N — момент перехода цепи в поглощающее состояние ($N = \infty$, если цепь не обрывается), $N \wedge i$ — минимум из N и i , η_i — несмещенная оценка для $F(x_i)$; тогда

$$\xi_i = u(x_{N \wedge i}) + \sum_{j=0}^{N \wedge i - 1} \eta_j, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.3.6)$$

Свойства траекторий цепи и свойства оценок можно исследовать методами § 5.2.

БЛУЖДЕНИЕ ПО ПОЛУСФЕРАМ В МНОГОГРАННИКЕ

Пусть область D является многогранником. Для каждой внутренней точки области определим $d(x)$ — расстояние от x до границы области D и точку $x_0 \in \partial D$, ближайшую к x . В качестве подобласти $T(x)$ выберем половину шара радиуса $R(x) = d(x)/\beta$ с центром в точке x_0 , если $T(x)$ содержится в D и x_0 является ортогональной проекцией x на некоторую грань многогранника, в противном случае $D(x)$ — шар

радиуса $d(x)$ с центром в точке x . Ядро $P(x, A)$ сосредоточено на границе выбранной области $T(x)$ и имеет плотность $k(x, y)$ в случае полушара, либо определяет равномерное распределение на сфере. Цепь Маркова, определяемую таким ядром, будем называть *блужданием по полусферам*.

Лемма 17. *Процесс «блуждания по полусферам» сходится с вероятностью 1 к точке, лежащей на границе области D . Среднее число шагов до выхода процесса на границу имеет конечные математическое ожидание и дисперсию.*

Доказательство.

Заметим, что координатные функции $v_i(x)$ являются гармоническими, $\Delta v_i(x) = 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Значит, координатные функции — инвариантные для ядра $P(x, A)$ и, в силу теоремы 3, последовательность x_i сходится к некоторому случайному вектору x_∞ п.н. на множестве необрывающихся траекторий. При переходе из x_i на сферу верно равенство $|x_{i+1} - x_i| = d(x_i)$, а при переходе на полусферу справедливо неравенство $|x_{i+1} - x_i| \geq \min(1, \beta^{-1} - 1)d(x_i)$, поэтому $d(x_i) \rightarrow 0$. Дальнейшее доказательство, для наглядности, проведем для трехмерной области. Пусть W — множество тех точек $x \in D$, для которых $T(x)$ является полушаром.

Докажем, что существуют константы $c > 0$ и $\delta > 0$, такие что для всех точек $x \in D \setminus W$ часть полушара радиуса $cd(x)$ с центром в точке x_0 , лежащая в некотором двугранном угле, величина которого больше $\delta > 0$, содержится в W . Пусть $\rho(x_0)$ — расстояние до наименее удаленной от x_0 точки, лежащей на грани, которой x_0 не принадлежит. Если x_0 является проекцией x на некоторую грань многогранника, то $\rho(x_0) \geq \min(1, \operatorname{ctg}(\alpha/2))d(x)$, где α — наименьший из двугранных углов многогранника, в которые входит выбранная грань. Если x_0 не является проекцией x на какую либо грань многогранника, то x_0 лежит на ребре некоторого двугранного угла γ . Выберем из граней, содержащих точку x_0 , ту, расстояние $d_1(x)$ от которой до точки x максимальное, тогда $d_1(x) \geq d(x) \sin(\gamma/2)$ и $\rho(x_0) \geq \min(1, \operatorname{ctg}(\alpha/2)) \sin(\gamma/2)d(x)$, где α — наименьший из двугранных углов многогранника, в которые входит выбранная грань. Таким образом, найдется константа c , такая что полушар радиуса $cd(x)$ с центром в точке x_0 и осью симметрии, перпендикулярной некоторой грани, в которой лежит x_0 , лежит в области D . Искомым множеством является полушар радиуса $\beta cd(x)/4$, если x_0 является внутренней точкой грани, четверть шара, если x_0 лежит на ребре двугранного угла, и долька полушара, вырезанная двугранным углом с ребром, проходящим через точку x_0 перпендикулярно выбранной грани, если x_0 является вершиной многогранника. При этом вели-

чина двугранного угла равна плоскому углу грани с вершиной в точке x_0 .

Из доказанного утверждения следует, что существует положительная постоянная ε , ограничивающая снизу вероятность $P(x, W)$. Для точек $x \in W$ блуждание выходит на границу области D за один шаг с фиксированной положительной вероятностью $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\beta)$. Пусть N — момент первого выхода блуждания на границу ($N = \infty$, если блуждание не выходит на границу за конечное время) и $p_i(x) = P_x(\{N \geq i\})$ ($i = 0, 1, 2, 3, \dots$). Очевидно, что для внутренних точек области D вероятность $p_1(x) = 1$. В силу марковского свойства $p_i(x) = \int_D P(x, dy)p_{i-1}(y)$ ($i = 1, 2, 3, \dots$), поэтому

$$p_2(x) = \begin{cases} 1 - \varepsilon_1, & x \in W, \\ 1, & x \notin W, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} p_3(x) &= \int_D P(x, dy)p_2(y) = \int_W P(x, dy)(1 - \varepsilon_1) + \int_{V \setminus W} P(x, dy) \leq \\ &\leq 1 - \varepsilon_1 P(x, W) \leq 1 - \varepsilon_1 \varepsilon, \end{aligned}$$

и $p_{3i}(x) \leq (1 - \varepsilon_1 \varepsilon)^i$. Следовательно,

$$P_x(\{N < \infty\}) = 1 - \lim_{i \rightarrow \infty} P_x(\{N \geq 3i\}) = 1$$

и в силу монотонности последовательности $p_i(x)$

$$E_x N = \sum_{i=1}^{\infty} p_i(x) \leq 3 \sum_{k=0}^{\infty} (1 - \varepsilon_1 \varepsilon)^k = 3/(\varepsilon_1 \varepsilon),$$

$$E_x N^2 = 2 \sum_{i=1}^{\infty} i p_i(x) - E_x N \leq 18 \sum_{k=1}^{\infty} k (1 - \varepsilon_1 \varepsilon)^{k-1} = 18/(\varepsilon_1 \varepsilon)^2.$$

■

Очевидным следствием доказанной леммы 17 является

Лемма 18. Пусть $F(x)$ ограничена и существует константа C , такая что несмещенные для $F(x_i)$ оценки η_i в (6.3.6) имеют дисперсию $D_x \eta_i \leq C$, и N — момент выхода «блуждания по полусферам» на границу области D ; тогда $\xi_N = \varphi(x_N) + \sum_{i=0}^{N-1} \eta_i$ является несмещенной оценкой для $u(x)$ и $D_x(\xi_N) \leq C_1$ для некоторой константы $C_1 < \infty$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Из ограниченности дисперсий и функции $F(x)$ следует ограниченность вторых моментов величин η_i константой C_0 . Пусть M — наибольшее значение функции $u(x)$, тогда

$$\begin{aligned}
 E_x \xi_N^2 &= E_x \left(\sum_{i=0}^{N-1} \eta_i + u(x_N) \right)^2 = \\
 &= E_x \left(\sum_{i=0}^{N-1} \eta_i^2 + u^2(x_N) \right) + 2E_x \sum_{i=0}^{N-1} \eta_i \left(\sum_{j=1+i}^{N-1} \eta_j + u(x(N)) \right) \leq \\
 &\leq C_0 E_x N + M^2 + 2E_x \sum_{i=0}^{N-1} \eta_i u(x_{i+1}) \leq \\
 &\leq C_0 E_x N + M^2 + E_x \sum_{i=0}^{N-1} (\eta_i^2 + u^2(x_{i+1})) \leq \\
 &\leq 2C_0 E_x N + M^2(1 + E_x N).
 \end{aligned}$$

■

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИЙ И ВЫЧИСЛЕНИЕ ОЦЕНКИ РЕШЕНИЯ

Для моделирования траекторий воспользуемся методом отбора. Для этого представим ядро (6.3.3) в виде

$$k(x, y) = \frac{1}{\sigma_n} \frac{\cos \varphi_{xy}}{|x - y|^{n-1}} k_1(x, y), \quad (6.3.7)$$

где $\cos \varphi_{xy}$ — угол между вектором $y - x$ и внешней нормалью к поверхности полушара $T(x)$ в точке y . Несложные вычисления позволяют получить для функции $k_1(x, y)$ верхнюю границу $M = \max(M_1, M_2)$, где

$$\begin{aligned}
 M_1 &= \frac{2}{\beta} \sqrt{1 + \beta^2} \left(1 - \left(\frac{\beta}{\sqrt{1 + \beta^2}} \right)^n \right), \\
 M_2 &= \sqrt{1 + \beta^2} \frac{1 + \beta}{1 - \beta} \left(1 - \left(\frac{1 - \beta}{1 + \beta} \right)^n \right).
 \end{aligned}$$

Для выбора следующей точки блуждания x_{i+1} моделируем изотропный вектор ω единичной длины и случайную величину α , распределенную равномерно на отрезке $[0, 1]$. Определяем точку $y \in \partial T(x_i)$, видимую из x_i в направлении ω . Если $\alpha M < k_1(x_i, y)$, то $x_{i+1} = y$. В

противном случае процедура повторяется до тех пор, пока неравенство $\alpha M < k_1(x_i, y)$ не будет выполнено.

Функция $F(x)$ в правой части уравнения (6.3.5) имеет вид $F(x) = \int_{T(x)} G(x, y) f(y) dy$. Для получения оценки η_i достаточно записать этот интеграл в сферических координатах. Для вычисления оценки моделируем изотропный единичный вектор ω и две случайные величины α_1 и α_2 , распределенные равномерно на отрезке $[0, 1]$. Определяем точку $y \in \partial T(x_i)$, видимую из x_i в направлении ω , вычисляем $\alpha_{(2)} = \max(\alpha_1, \alpha_2)$ и находим

$$\eta_i = (n-2)\sigma_n \frac{|y-x_i|^2}{2} |\alpha_{(2)}(y-x_i)|^{n-2} G(x_i, x_i + \alpha_{(2)}(y-x_i)) \times \\ \times f(x_i, x_i + \alpha_{(2)}(y-x_i)).$$

ЗАДАЧА С РАЗРЫВОМ НОРМАЛЬНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ

Пусть область D разбита некоторой гиперплоскостью на две подобласти, D_+ и D_- , в каждой из которых функция $u(x)$ — гармоническая внутри области и непрерывная в замкнутой области. Известны значения $\varphi(x)$ функции $u(x)$ на границе области D , и выполняется условие сопряжения

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial \nu_+} = \frac{\partial u}{\partial \nu_-}, \quad (6.3.8)$$

связывающее значения нормальных производных функции $u(x)$, вычисленных для областей D_+ и D_- , на границе раздела. Будем считать, что нормаль ν направлена в сторону D_+ , $\lambda = \text{const} > 0$ и $\lambda \neq 1$. Для упрощения выкладок рассмотрим лишь задачу в пространстве R^3 . Не умаляя общности, можно считать, что плоскость раздела имеет уравнение $v_1(x) = 0$, и вектор ν является ортом первой координатной оси.

Применим для решения задачи процесс «блуждания по полусферам». Действительно, в каждой из областей D_+ и D_- можно строить процесс, как это сделано ранее. При выходе блуждания на плоскую границу необходимо выполнить переход внутрь области.

Пусть точка x лежит на границе раздела области D на D_+ и D_- . Возьмем в качестве области $T(x)$ шар максимального радиуса $d = d(x)$ с центром в x , лежащий в D . Пусть $T_+ = T(x) \cap D_+$ и $T_- = T(x) \cap D_-$. Если решение $u(x)$ имеет на границе раздела правильную нормальную производную, то из формулы Грина и свойств потенциалов простого и двойного слоя легко получить интегральные представления

$$u(x) = \frac{1}{2\pi d^2} \int_{S_+} u(y) d_y S + \frac{1}{2\pi d} \int_{S_+} \frac{\partial u(y)}{\partial \nu} d_y S - \frac{1}{2\pi} \int_H \frac{1}{|x-y|} \frac{\partial u(y)}{\partial \nu_+} d_y S,$$

$$u(x) = \frac{1}{2\pi d^2} \int_{S_-} u(y) d_y S + \frac{1}{2\pi d} \int_{S_-} \frac{\partial u(y)}{\partial \nu} d_y S + \frac{1}{2\pi} \int_H \frac{1}{|x-y|} \frac{\partial u(y)}{\partial \nu_-} d_y S,$$

где $\frac{\partial u(y)}{\partial \nu}$ — производная по внешней нормали на сфере. Учитывая условия разрешимости

$$\int_{S_+} \frac{\partial u(y)}{\partial \nu} d_y S - \int_H \frac{\partial u(y)}{\partial \nu_+} d_y S = 0,$$

$$\int_{S_-} \frac{\partial u(y)}{\partial \nu} d_y S + \int_H \frac{\partial u(y)}{\partial \nu_-} d_y S = 0$$

задачи Неймана в T_+ и в T_- и условие сопряжения, получаем интегральное представление решения

$$u(x) = \frac{\lambda}{1+\lambda} \frac{1}{2\pi d^2} \int_{S_+} u(y) d_y S + \frac{1}{1+\lambda} \frac{1}{2\pi d^2} \int_{S_-} u(y) d_y S. \quad (6.3.9)$$

Из (6.3.9) следует, что переход из точки x нужно выполнять в точку, распределенную с вероятностью $\frac{\lambda}{1+\lambda}$ равномерно на полусфере S_+ и с вероятностью $\frac{1}{1+\lambda}$ равномерно на полусфере S_- .

Отметим, что в данном случае переходная вероятность $P(x, A)$ является марковским ядром и момент обрыва блуждания $N = \infty$ с вероятностью 1. Всякое ограниченное решение исходной задачи является инвариантной функцией ядра и, следовательно, определяет сходящийся мартингал оценок $u(x_i)$. Координатные функции $v_2(x)$ и $v_3(x)$ являются инвариантными для ядра $P(x, A)$, так как они гармонические и удовлетворяют условиям сопряжения на плоскости $v_1(x) = 0$. При $\lambda < 1$ на плоскости $v_1(x) = 0$ верно неравенство

$$\begin{aligned} \int_{T(x)} P(x, dy) v_1(y) &= \frac{\lambda}{1+\lambda} \frac{1}{2\pi d^2} \int_{S_+} v_1(y) d_y S + \frac{1}{1+\lambda} \frac{1}{2\pi d^2} \int_{S_-} v_1(y) d_y S = \\ &= \frac{\lambda-1}{1+\lambda} \frac{1}{2\pi d^2} \int_{S_+} v_1(y) d_y S < 0. \end{aligned}$$

Следовательно, координатная функция $v_1(x)$ — эксцессивная для ядра $P(x, A)$. При $\lambda > 1$ эксцессивной является функция $-v_1(x)$. Из теоремы 3 теперь следует

Лемма 19. *Процесс «блуждания по полусферам» для задачи Дирихле с условием сопряжения нормальных производных на плоской границе раздела сходится с вероятностью 1 к некоторому случайному вектору $x_\infty \in \partial D$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Существование предела уже доказано. При переходе из точки x_i , лежащей на плоскости, на сферу верно равенство $|x_{i+1} - x_i| = d(x_i)$, поэтому $x_\infty \in \partial D$, если блуждание посетило плоскость $x_1 = 0$ бесконечное число раз. В противном случае, начиная с некоторого момента времени, процесс не покидал одного из двух множеств, например множества D_+ . Пусть $d_+(x)$ — расстояние до границы области D_+ . При переходе на полусферу справедливо неравенство $|x_{i+1} - x_i| \geq \min(1, \beta^{-1} - 1)d_+(x_i)$, поэтому $d_+(x_i) \rightarrow 0$, следовательно либо $x_\infty \in \partial D$, либо $v_1(x_\infty) = 0$. Рассмотрим множество B таких траекторий, для которых $v_1(x_\infty) = 0$, $d(x_\infty) > r > 0$ и $v_1(x_i) \neq 0$, начиная с некоторого номера. Все точки последовательности x_i , начиная с некоторого номера, лежат в полушаре радиуса $r/2$ с центром в точке x_∞ , поэтому их проекции на плоскость $v_1(x) = 0$ также лежат в этом полушаре. Следовательно, полушар с центром в $x_0(i)$ и радиуса r лежит в D_+ . Поскольку расстояние до полуплоскости от точки x_i стремится к нулю, отсюда следует, что, начиная с некоторого номера, каждая следующая точка блуждания лежит на полусфере. Итак, для траекторий из множества B переход на полусферу осуществляется бесконечное число раз. Вероятность такого перехода постоянна. Так как выбор направления на каждом шаге блуждания осуществляется независимо от предистории процесса, вероятность перейти на полусферу бесконечное число раз равна нулю. Значит, для всех $r > 0$ с вероятностью 1 выполняется неравенство $d(x_\infty) \leq r$. Справедливость леммы вытекает теперь из непрерывности вероятностной меры. ■

ЗАДАЧА СО СМЕШАННЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Пусть граница Γ области D состоит из двух частей: Γ_1 и Γ_2 . Для определения гармонической в области D функции $u(x)$ по ее значениям на Γ_1 и значениям ее нормальной производной на Γ_2 также можно применить «блуждание по полусферам». Для упрощения выкладок рассмотрим задачу в пространстве R^3 . Пусть точка x лежит внутри области или на границе Γ_2 . Определим функцию $d(x)$ как расстояние от точки

x до Γ_1 . Возьмем в качестве области $T(x)$ пересечение шара радиуса $d = d(x)$ с центром в x и области D . Пусть $\gamma = \Gamma_2 \cap \overline{T(x)}$, а S — сферическая часть границы области $T(x)$. Тогда из формулы Грина и свойств потенциалов простого и двойного слоя следует представление

$$u(x) = \frac{\kappa}{4\pi} \int_{\gamma \cup S} \frac{\cos \varphi_{xy}}{|x-y|^2} u(y) d_y S + \frac{\kappa}{4\pi} \int_{\gamma \cup S} \frac{\frac{\partial u}{\partial \nu}(y)}{|x-y|} d_y S,$$

где

$$\kappa = \kappa(x) = \begin{cases} 1, & x \in D, \\ 2, & x \in \Gamma_2. \end{cases}$$

Учитывая, что

$$\int_{\gamma \cup S} \frac{\partial u}{\partial \nu}(y) d_y S = 0,$$

получаем интегральное представление

$$u(x) = \frac{\kappa}{4\pi} \int_{\gamma \cup S} \frac{\cos \varphi_{xy}}{|x-y|^2} u(y) d_y S + \frac{\kappa}{4\pi} \int_{\gamma} \left(\frac{1}{|x-y|} - \frac{1}{d} \right) \frac{\partial u}{\partial \nu}(y) d_y S, \quad (6.3.10)$$

аналогичное уравнению (6.3.5). Здесь ν — внешняя нормаль к границе области, а φ_{xy} — угол между внешней нормалью к $\gamma \cup S$ и вектором $y - x$.

Если $T(x) \cap V$ — выпуклое множество, то ядро интегрального оператора в (6.3.10) является стохастическим и определяет блуждание, которое естественно назвать *блужданием по сферам и границе*. Очередная точка в таком блуждании является ближайшей к x точкой границы области или границы шара $T(x)$, видимой из x в направлении изотропного вектора ω , распределенного в пространстве, если $x \in D$, или в полупространстве, если $x \in \Gamma_2$. Поведение траекторий этого процесса характеризует

Лемма 20. Пусть Γ_1 содержит замкнутое подмножество Γ_3 , имеющее положительную площадь, и расстояние от которого до $\bar{\Gamma}_2$ положительно. Тогда блуждание по сферам и границе сходится с вероятностью 1 к случайной точке $x_\infty \in \bar{\Gamma}_1$.

Доказательство.

Докажем, что существует гармоническая в области D функция $u(x)$, такая что $\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) = 1$ при $x \in \Gamma_2$. Так как расстояние между множествами Γ_3 и $\bar{\Gamma}_2$ положительно, существуют неотрицательная непрерывная функция $\varphi_1(x)$, равная 1 на $\bar{\Gamma}_2$ и 0 на Γ_3 , и неотрицательная непрерывная функция $\varphi_2(x)$, равная 0 на $\bar{\Gamma}_2$ и 1 на Γ_3 .

Пусть λ_1 и λ_2 — поверхностные интегралы от этих функций по границе $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ области D . Поскольку $\lambda_2 > 0$, поверхностный интеграл от функции $\varphi(x) = \varphi_1(x) - (\lambda_1/\lambda_2)\varphi_2(x)$ равен нулю. Значит, существует гармоническая функция $u(x)$, удовлетворяющая граничному условию $\frac{\partial u}{\partial \nu}(x) = \varphi(x)$.

Пусть x_i — положение блуждания в момент времени i . Из уравнения (6.3.10) для построенной функции $u(x)$ следует, что последовательность случайных величин $u(x_i)$ является ограниченным супермартингалом, который сходится с вероятностью 1. Аналогичными свойствами обладает последовательность $u(x_i) + v_j(x_i)$ для любой координатной функции $v_j(x)$. Значит, последовательность x_i сходится с вероятностью 1 к некоторой точке x_∞ . Если в процессе блуждания переход на сферическую часть границы области $T(x)$ был бесконечное число раз, то на некоторой подпоследовательности i_j ($j = 1, 2, 3, \dots$) выполняется равенство $d(x_{i_j}) = |x_{i_j+1} - x_{i_j}|$. Переходя в нем к пределу, получим $d(x_\infty) = 0$. Рассмотрим множество траекторий B , в которых, начиная с некоторого момента времени, блуждание происходит по границе Γ_2 . Пусть $\Omega(x)$ — телесный угол, под которым видна поверхность Γ_1 из точки x , $\Omega_0 = \inf_{x \in \Gamma_2} \Omega(x) > 0$, $p(x)$ — вероятность того, что блуждание не покинет Γ_2 при переходе из точки $x \in \Gamma_2$. Очевидно, что $p(x) \leq 1 - \frac{\Omega_0}{4\pi} = q < 1$. В силу марковского свойства вероятность того, что траектория не покинет Γ_2 за первые n шагов, не превышает q^n . Ряд $\sum_{n=1}^{\infty} q^n$ сходится, поэтому по лемме Бореля—Кантелли вероятность того, что траектория не покинет Γ_2 равна нулю. Значит, множество траекторий B имеет вероятность ноль, что завершает доказательство леммы. ■

Задачу со смешанными граничными условиями для уравнения Пуассона можно исследовать аналогично.

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Задача Дирихле. Методами «блуждания по сферам» и «блуждания по полусферам» решалась задача Дирихле для уравнения Лапласа в кубе $V = [-1, 1]^3$. В табл. 1 представлены результаты вычислений в десяти случайно выбранных точках куба для граничного условия $\varphi(x) = ((v_1(x) + 1.1)^2 + (v_2(x) + 1)^2 + (v_3(x) + 1)^2)^{-1/2}$. Решение задачи — $u(x) = \varphi(x)$. «Блуждание по сферам» останавливалось в ε -окрестности границы ($\varepsilon = 0.001$). Параметр $\beta = 0.5$, объем выборки $N = 10000$. Погрешности вычислений Δ_1 и Δ_2 определялись как утроенный корень из отношения выборочной дисперсии к объему выборки. Данные с индексом 1 соответствуют «блужданию по сферам», а с ин-

Таблица 1

v_1	v_2	v_3	u	u_1	Δ_1	L_1	u_2	Δ_2	L_2
-0.9	0.7	-0.6	0.532	0.533	0.002	16.7	0.531	0.002	5.0
-0.6	-0.2	-0.1	0.697	0.700	0.008	19.8	0.700	0.008	5.4
-0.2	0.1	0.1	0.521	0.523	0.007	19.8	0.520	0.007	6.9
-0.8	0.1	-0.5	0.727	0.731	0.006	18.5	0.727	0.006	5.0
-0.6	0.6	0.1	0.467	0.467	0.004	18.6	0.468	0.004	6.6
0.3	-0.8	-0.8	0.684	0.683	0.004	17.0	0.685	0.004	6.3
0.2	-0.8	-0.1	0.600	0.600	0.005	19.0	0.601	0.005	4.7
0.7	-0.7	-0.9	0.539	0.539	0.002	16.6	0.539	0.002	5.2
-0.5	-0.1	0.1	0.598	0.597	0.007	20.0	0.599	0.007	7.1
0.1	-0.6	0.8	0.434	0.434	0.003	18.2	0.436	0.003	6.4

дексом 2 — «блужданию по полусферам». Величина L равна средней длине траектории.

Задача с разрывом нормальной производной. Методом «блуждания по полусферам» решалась задача Дирихле для уравнения Лапласа в кубе $D = [-1, 1]^3$ с условием сопряжения (6.3.8) на плоскости $v_1(x) = 0$, при $\lambda = 0.5$. В табл. 2 представлены результаты вычислений в десяти случайно выбранных точках куба для граничного условия

$$\varphi(x) = ((v_1(x) + 1.1)^2 + (v_2(x) + 1)^2 + (v_3(x) + 1)^2)^{-1/2} + \\ + \begin{cases} 0.5v_1(x), & v_1(x) < 0, \\ v_1(x), & v_1(x) \geq 0. \end{cases}$$

Решение задачи $u(x) = \varphi(x)$. Найденное приближенное решение — u_1 . Параметр $\beta = 0.5$, объем выборки $N = 10000$. Погрешности вычислений Δ определялись как утроенный корень из отношения выборочной дисперсии к объему выборки. Величина L равна средней длине траектории.

Таблица 2

x_1	x_2	x_3	u	u_1	Δ	L
-0.3	-0.4	-0.4	0.707	0.731	0.012	14.3
-0.3	-0.2	-0.1	0.734	0.734	0.000	0.0
0.4	0.4	-0.9	0.887	0.889	0.007	6.2
0.9	-0.6	-0.1	1.349	1.350	0.006	5.1
-0.6	-0.7	-0.9	1.390	1.391	0.015	5.5
0.3	0.4	0.1	0.742	0.760	0.014	13.1
0.1	0.8	-0.3	0.540	0.548	0.009	6.7
-0.8	-0.9	-0.5	1.290	1.288	0.014	16.6
0.5	0.3	0.3	0.910	0.914	0.013	11.2
0.2	0.9	0.6	0.557	0.561	0.007	10.2

6.3.2. Внешняя задача Дирихле для уравнения Лапласа

Пусть D — ограниченная область в R^n , $n \geq 3$, Γ — ее граница, $D_1 = R^n \setminus \overline{D}$. Будем решать внешнюю задачу Дирихле:

$$\begin{aligned} \Delta u(x) &= 0, \quad x \in D_1, \quad u(x) = \varphi(x), \quad x \in \Gamma, \\ u(x) &\rightarrow 0 \quad \text{при} \quad x \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (6.3.11)$$

где $\varphi(x)$ — непрерывная функция на Γ .

Для областей D_1 , которые можно представить в виде конечного объединения подобластей с известными функциями Грина, она решалась статистическими методами в [38]. Мы рассматриваем случай произвольной ограниченной области D (как правило, не односвязной), такой что в D_1 справедлива теорема существования и единственности решения задачи (6.3.11).

Пусть K_ρ — шар радиуса ρ с центром в нуле, такой что $\overline{D} \subset \overline{K}_\rho$, и S_ρ — его граница. При $|x| > \rho$ для решения задачи (6.3.11) справедливо интегральное представление ([11], стр. 231):

$$u(x) = \frac{1}{\sigma_n \rho} \int_{S_\rho} \frac{|x|^2 - \rho^2}{|x - y|^n} u(y) d_y S, \quad (6.3.12)$$

которое можно записать в виде

$$u(x) = \left(\frac{\rho}{|x|} \right)^{n-2} \int_{S_\rho} p(x, y) u(y) d_y S. \quad (6.3.13)$$

Функция

$$p(x, y) = \left(\frac{|x|}{\rho} \right)^{n-2} \frac{|x|^2 - \rho^2}{\sigma_n \rho |x - y|^n} \quad (6.3.14)$$

является плотностью распределения (по переменной y), сосредоточенного на сфере S_ρ . Определим в D_1 марковский случайный процесс *блуждания по сферам* следующим образом :

- 1) $x_0 = x \in D_1$;
- 2) если $|x_i| > \rho_1 > \rho$, то x_{i+1} распределено на сфере S_ρ с плотностью $p(x_i, y)$;
- 3) если $|x_i| \leq \rho_1$, то x_{i+1} распределено равномерно на сфере радиуса $R(x_i)$ с центром в точке x_i .

Здесь $R(x) = \text{dist}(x, \Gamma)$.

Поведение процесса описывает следующая

Лемма 21. *С вероятностью 1 блуждание по сферам сходится к случайной точке, лежащей на границе Γ области D_1 .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Зафиксируем произвольную внутреннюю точку $\tilde{x}$ области D . Функция $v(x) = |x - \tilde{x}|^{2-n}$ является гармонической в D_1 и стремится к нулю на бесконечности. Пусть $\mathcal{B}_i$ — σ -алгебра, относительно которой измеримы случайные векторы $x_0, x_1, \dots, x_i$. В силу теоремы о среднем значении для гармонических функций и формулы (6.3.13) имеем

$$E_x(v(x_{i+1})|\mathcal{B}_i) = \begin{cases} v(x_i), & x_i \in \overline{K}_{\rho_1}, \\ \left(\frac{|x_i|}{\rho}\right)^{n-2} v(x_i), & x_i \in R^n \setminus \overline{K}_{\rho_1}. \end{cases} \quad (6.3.15)$$

Отсюда видно, что $E_x(v(x_{i+1})|\mathcal{B}_i) \geq v(x_i)$. Следовательно, $\{v(x_i); \mathcal{B}_i\}_{i=0}^\infty$ — ограниченный субмартигнал, и $\{v(x_i)\}_{i=0}^\infty$ сходится с вероятностью 1 к положительной случайной величине. Значит, $\{|x_i - \tilde{x}|^2\}_{i=0}^\infty$ сходится с вероятностью 1. Взяв две различные точки, $\tilde{x}_1$ и $\tilde{x}_2$, в области D , видим, что последовательность из разностей $\{|x_i - \tilde{x}_1|^2 - |x_i - \tilde{x}_2|^2\}_{i=0}^\infty$ сходится с вероятностью 1. Поэтому, сходится с вероятностью 1 последовательность скалярных произведений $\{(x_i, \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2)\}_{i=0}^\infty$ и, следовательно, сходятся проекции векторов x_i на произвольное направление, т.е. сходится сама последовательность $\{x_i\}_{i=0}^\infty$. Обозначим ее предел x_∞ .

Поскольку при переходе на сферу S_ρ траектория блуждания совершает скачок $|x_{i+1} - x_i| \geq \rho_1 - \rho$, она с вероятностью 1 становится траекторией блуждания по сферам, начиная с некоторого момента времени. Поэтому $R(x_i) = |x_{i+1} - x_i| \rightarrow 0$ с вероятностью 1. ■

Построим последовательность несмещенных оценок $\xi_i = \eta_i u(x_i)$ для $u(x)$. Случайные величины η_i вычисляются по формулам $\eta_0 = 1$, $\eta_{i+1} = \eta_i \zeta_i$, где $\zeta_i = 1$, если $x_i \in \overline{K}_{\rho_1}$, и $\zeta_i = (\rho/|x_i|)^{n-2}$ в противном случае.

Лемма 22. *Последовательность $\{\xi_i; \mathcal{B}_i\}_{i=0}^\infty$ образует ограниченный мартигнал.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Действительно, из определения оценок и марковского свойства цепи следует, что

$$\begin{aligned} E_x(\xi_{i+1}|\mathcal{B}_i) &= \eta_{i+1} E_x(u(x_{i+1})|\mathcal{B}_i) = \eta_{i+1} E_x(u(x_{i+1})|x_i) = \\ &= \eta_{i+1} \begin{cases} u(x_i), & x_i \in \overline{K}_{\rho_1} \\ \left(\frac{\rho}{|x_i|}\right)^{n-2} u(x_i), & x_i \in R^n \setminus \overline{K}_{\rho_1} \end{cases} = \eta_i u(x_i) = \xi_i \end{aligned}$$

Ограниченность мартингала оценок следует из ограниченности решения $u(x)$ в D_1 . ■

Из доказанных лемм следует, что п.н. существует предел $\xi_\infty = \lim_{i \rightarrow \infty} \xi_i = \eta \varphi(x_\infty)$, где $\eta = \lim_{i \rightarrow \infty} \eta_i$. В силу теоремы Лебега $E_x \xi_\infty = \lim_{i \rightarrow \infty} E_x \xi_i = u(x)$. Пусть τ — момент первого попадания процесса в δ -окрестность границы, тогда ξ_τ — также несмещенная оценка $u(x)$ с конечной дисперсией, поскольку $\xi_\tau = E_x(\xi_\infty | \mathcal{B}_\tau)$.

Заменяя в оценке ξ_τ точку x_τ на ближайшую точку границы x_τ^* , получаем оценку ξ_δ . Ее смещение имеет вид $|E_x \xi_\delta - u(x)| \leq \varepsilon(\delta)$, где $\varepsilon(\delta)$ — модуль непрерывности $u(x)$. Очевидно, что

$$D\xi_\delta \leq \varepsilon^2(\delta) + 2\varepsilon(\delta)\|u\| + D\xi_\infty.$$

Получим, наконец, неравенства для второго момента $m_2(x) = E_x \xi_\infty^2$.

Во первых, $m_2(x) = E_x \eta^2 \varphi^2(x_\infty) \leq E_x \eta \varphi^2(x_\infty) = V(x)$, где $V(x)$ — гармоническая в D_1 функция, равная $\varphi^2(x)$ на границе области. Наконец, из неравенства $\eta^2 \leq \zeta_0 \eta$ следует, что

$$m_2(x) = E_x \eta^2 \varphi^2(x_\infty) \leq \left(\frac{\rho}{|x|} \right)^{n-2} E_x \eta \varphi^2(x_\infty) = \left(\frac{\rho}{|x|} \right)^{n-2} V(x)$$

при $x \in R^n \setminus \bar{K}_{\rho_1}$.

В заключение покажем, как можно моделировать случайный вектор Y с плотностью $p(x, y)$. Очевидно, что условное распределение вектора Y , когда фиксирована его проекция Z на направление x , является равномерным на сфере радиуса $\sqrt{\rho^2 - Z^2}$ в R^{n-1} , поэтому Y можно моделировать по формуле

$$Y = \frac{\rho Z_1}{|x|} x + \rho \sqrt{1 - Z_1^2} \Omega_1.$$

Здесь Ω_1 — изотропный вектор в гиперплоскости, ортогональной x . Его моделирование не вызывает затруднений. Случайная величина Z_1 распределена на $[-1, 1]$ с плотностью

$$p(z_1) = |x|^{n-2} (|x|^2 - \rho^2) \frac{\sigma_{n-1}}{\sigma_n} \frac{(1 - z_1^2)^{(n-3)/2}}{(\rho^2 + |x|^2 - 2|x|\rho z_1)^{n/2}}.$$

Алгоритм моделирования случайной величины Z_1 изложен в § П.4.3.

Пусть $n = 3$, а граница области D_1 состоит из плоских участков. Заменяя для точек $x \in \bar{K}_{\rho_1}$ переход на сферу переходом на полусферу, если это возможно, получаем процесс *блуждания по сферам и полусферам* для внешней задачи Дирихле. Докажем для этого процесса аналог леммы 17.

Лемма 23. Процесс «блуждания по сферам и полусферам» для внешней задачи Дирихле сходится с вероятностью 1 к точке, лежащей на границе области D_1 . Среднее число шагов до выхода процесса на границу имеет конечные математическое ожидание и дисперсию.

Доказательство.

Анализируя доказательство леммы 21, убеждаемся, что сохраняется формула (6.3.15), следовательно, траектория процесса *блуждания по сферам и полусферам* сходится к некоторой точке x_∞ п.н., и п.н. траектория не посещает сферу S_ρ , начиная с некоторого шага. Тогда из доказательства леммы 17 следует, что $x_\infty \in \Gamma$.

Пусть W — множество тех точек $x \in \overline{K}_{\rho_1}$, для которых $T(x)$ является полушаром. Как и в лемме 17, убеждаемся, что существует положительная постоянная ε , ограничивающая снизу вероятность перехода $P(x, W)$ для точек $x \in \overline{K}_{\rho_1}$.

Для точек $x \in W$ блуждание выходит на границу области D_1 за один шаг с фиксированной положительной вероятностью $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\beta)$. Пусть N — момент первого выхода блуждания на границу ($N = \infty$, если блуждание не выходит на границу за конечное время) и $p_i(x) = P_x(\{N \geq i\})$ ($i = 0, 1, 2, 3, \dots$). Очевидно, что для внутренних точек области D_1 вероятность $p_1(x) = 1$. В силу марковского свойства

$$p_i(x) = \int_{D_1} P(x, dy) p_{i-1}(y) \quad (i = 1, 2, 3, \dots),$$

поэтому

$$p_2(x) = \begin{cases} 1 - \varepsilon_1, & x \in W, \\ 1, & x \notin W, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} p_3(x) &= \int_{D_1} P(x, dy) p_2(y) = \int_W P(x, dy) (1 - \varepsilon_1) + \int_{D_1 \setminus W} P(x, dy) \leq \\ &\leq 1 - \varepsilon_1 P(x, W) \leq 1 - \varepsilon_1 \varepsilon, \quad x \in \overline{K}_{\rho_1}. \end{aligned}$$

Наконец, $p_4(x) \leq p_3(x)$, $x \in \overline{K}_{\rho_1}$ и

$$p_4(x) = \int_{S_\rho} p(x, y) p_3(y) dy S \leq 1 - \varepsilon_1 \varepsilon, \quad x \notin \overline{K}_{\rho_1}.$$

Следовательно, $p_{4i}(x) \leq (1 - \varepsilon_1 \varepsilon)^i$ и

$$P_x(\{N < \infty\}) = 1 - \lim_{i \rightarrow \infty} P_x(\{N \geq 4i\}) = 1.$$

В силу монотонности последовательности $p_i(x)$

$$E_x N = \sum_{i=1}^{\infty} p_i(x) \leq 4 \sum_{k=0}^{\infty} (1 - \varepsilon_1 \varepsilon)^k = 4/(\varepsilon_1 \varepsilon),$$

$$E_x N^2 = 2 \sum_{i=1}^{\infty} i p_i(x) - E_x N \leq 32 \sum_{k=1}^{\infty} k(1 - \varepsilon_1 \varepsilon)^{k-1} = 32/(\varepsilon_1 \varepsilon)^2.$$

■

Несмещенные оценки ξ_i решения $u(x)$ на траекториях нового процесса имеют прежний вид, и случайная величина $\xi_{\infty} = \xi_N = \eta_N \varphi(x_N)$ также является несмещенной оценкой и может быть эффективно реализована.

6.3.3. Вычисление электростатических емкостей

Одной из возможных областей применения стохастических алгоритмов решения внешней задачи Дирихле для уравнения Лапласа является электростатика. Аналитические формулы для электростатических емкостей объектов известны [31, 39] в редких случаях. Поэтому для определения электростатических емкостей применяются разнообразные вычислительные алгоритмы, в том числе и алгоритмы статистического моделирования [16], связанные с *блужданием по квадратам* и *блужданием по кубам*. В данном параграфе рассматривается универсальный статистический алгоритм вычисления емкостей, основанный на *блуждании по сферам* и *блуждании по сферам и полусферам*, пригодный для областей с произвольными границами. Обсуждаются лишь принципы его работы и простейшие примеры применения. Полное описание алгоритма и его возможностей содержится в работах [25], [26].

Если не оговорено отдельно, формулы и значения электростатических ёмкостей будут приводятся согласно системе СГСЭ («сантиметр-грамм-секунда» электростатическая). В этом случае $\varepsilon_0 = 1$ и несколько упрощаются математические выкладки и вычисления. Также считается, что проводники разделены однородным изотропным диэлектриком с диэлектрической проницаемостью 1.

Согласно [15] *основной задачей электростатики* является отыскание поля, создаваемого системой зарядов на заданных проводниках.

Прямая постановка предполагает нахождение поля вне проводников и плотностей зарядов на проводниках при известных потенциалах проводников. Решение задачи сводится к нахождению функции φ , удовлетворяющей уравнению Лапласа $\Delta \varphi = 0$ всюду вне заданной системы проводников, обращаемой в нуль на бесконечности и принимающей заданные значения φ_i на поверхностях проводников Γ_i :

$$\begin{aligned} \Delta \varphi &= 0, \\ \varphi|_{\Gamma_i} &= \varphi_i, \quad \varphi_i = \text{const}. \end{aligned} \tag{6.3.16}$$

То есть мы имеем первую внешнюю краевую задачу для уравнения Лапласа.

В случае *обратной постановки* считаются известными полные заряды проводников q_i . Искомыми величинами являются потенциалы проводников, распределение зарядов по их поверхностям и поле вне проводников. То есть, требуется найти функцию φ , удовлетворяющую уравнению Лапласа $\Delta\varphi = 0$ вне заданной системы проводников, обращающуюся в нуль на бесконечности, принимающую *некоторые постоянные значения* φ_i на поверхностях проводников Γ_i и удовлетворяющую интегральному соотношению на поверхностях проводников

$$\begin{aligned}\Delta\varphi &= 0, \\ \varphi|_{\Gamma_i} &= \varphi_i, \quad \varphi_i = \text{const}, \\ \int_{\Gamma_i} \frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}} dS &= -4\pi q_i,\end{aligned}\tag{6.3.17}$$

где $\mathbf{n}$ — вектор внешней нормали к поверхности проводника. В [15] показано, что эта задача также имеет единственное решение.

После нахождения констант φ_i решение задачи в *обратной* постановке сводится к решению *прямой* задачи. Кроме того, нахождение указанных констант приводит к отысканию ещё одной характеристики — электростатической ёмкости.

Из единственности решения задачи (6.3.17) следует, что потенциал *уединённого проводника* прямо пропорционален сообщённому ему заряду:

$$\frac{q}{\varphi} = C = \text{const}.\tag{6.3.18}$$

Эту постоянную называют *ёмкостью* уединённого проводника. Она не зависит от заряда и определяется размерами и формой проводника. Для уединённого проводника ёмкость численно равна заряду, при сообщении которого проводник приобретает потенциал, равный 1.

Таким образом, для решения задачи в обратной постановке достаточно найти ёмкость, определяемую формулой

$$C = -\frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}} dS,\tag{6.3.19}$$

после чего из (6.3.18) можно получить потенциал φ на границе проводника и решить задачу в прямой постановке.

В задаче с несколькими проводниками потенциал существенно зависит от формы и расположения проводников. Согласно [15] имеют

$$\begin{aligned}
 q_1 &= C_{11}\varphi_1 + C_{12}(\varphi_2 - \varphi_1) + \dots + C_{1n}(\varphi_n - \varphi_1), \\
 q_2 &= C_{21}(\varphi_1 - \varphi_2) + C_{22}\varphi_2 + \dots + C_{2n}(\varphi_n - \varphi_2), \\
 &\dots \\
 q_n &= C_{n1}(\varphi_1 - \varphi_n) + C_{n2}(\varphi_2 - \varphi_n) + \dots + C_{nn}\varphi_n,
 \end{aligned} \tag{6.3.20}$$

где q_i и φ_i — соответственно *заряд* и *потенциал* i -го проводника; C_{ij} — *взаимная ёмкость* или *ёмкостной коэффициент* i -го проводника по отношению к j -му (величина C_{ii} также называется *собственным ёмкостным коэффициентом*).

Взаимная ёмкость определяется как тот заряд, который должен быть сообщён i -му проводнику для того, чтобы все проводники кроме j -го, имели нулевой потенциал, а j -й проводник — потенциал 1. Соответственно, собственный ёмкостной коэффициент определяется как отношение заряда к потенциалу на этом проводнике при условии, что все остальные проводники заземлены. Так как знаки потенциалов и зарядов совпадают, коэффициент C_{ii} всегда положительный. В случае же взаимных ёмкостей знаки индуцирующего и индуцированного зарядов различны, поэтому C_{ij} при $i \neq j$ отрицателен или равен нулю.

Известно [15], что матрица коэффициентов C_{ij} является *симметричной*, т. е. $C_{ij} = C_{ji}$.

Для вложенных проводников характерно явление *электростатической экранировки* [31]. Пусть проводник 1 находится внутри проводника 2, тогда

$$\begin{aligned}
 C_{13} &= C_{14} = \dots = C_{1n} = 0; \\
 C_{11} &= -C_{12}.
 \end{aligned}$$

После нахождения взаимных ёмкостей, данная система может быть решена любым удобным способом.

Сначала рассмотрим алгоритм нахождения ёмкости одиночного трёхмерного объекта. Рассмотрим задачу в обратной постановке (6.3.17). Благодаря тому, что функция φ гармонична вне области $\mathcal{D}$, ограниченной поверхностью Γ , интеграл (6.3.19) можно вычислять по любой поверхности Γ_1 , являющейся границей $\mathcal{D}_1 \supset \mathcal{D}$.

Действительно, две функции, P и Q , гармонические вне $\mathcal{D}$. Тогда по формуле Грина

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_{\mathcal{D}_1 \setminus \mathcal{D}} (P\Delta Q - Q\Delta P) dV = \\
 &= \int_{\Gamma_1} \left(P \frac{\partial Q}{\partial \mathbf{n}} - Q \frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}} \right) dS - \int_{\Gamma} \left(P \frac{\partial Q}{\partial \mathbf{n}} - Q \frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}} \right) dS,
 \end{aligned}$$

откуда при $Q \equiv 1$, $P = \varphi$ получим искомое равенство

$$\int_{\Gamma_1} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} dS = \int_{\Gamma} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} dS.$$

Для вычисления ёмкости по формуле (6.3.19) выберем в качестве Γ_1 поверхность сферы с центром в нуле, имеющей радиус ρ_1 . Пусть при некотором $\rho < \rho_1$ шар K_ρ , с центром в нуле также содержит $\mathcal{D}$ тогда для $x \in S_{\rho_1}$ по формуле Пуассона

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\rho} \int_{S_\rho} \frac{|\mathbf{x}|^2 - \rho^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} \varphi(\mathbf{y}) d_y S.$$

Для получения нормальной производной функции $\varphi(\mathbf{x})$ продифференцируем формулу Пуассона:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \varphi(\mathbf{x}) &= \frac{1}{4\pi\rho} \int_{S_\rho} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{|\mathbf{x}|^2 - \rho^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} n_i \varphi(\mathbf{y}) d_y S = \\ &= \frac{1}{4\pi\rho} \int_{S_\rho} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{2x_i}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} - \frac{3(|\mathbf{x}|^2 - \rho^2)(x_i - y_i)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^5} \right) n_i \varphi(\mathbf{y}) d_y S. \end{aligned} \quad (6.3.21)$$

Учитывая то, что центры сфер находятся в нуле, подынтегральный множитель можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{2x_i |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2 - 3(|\mathbf{x}|^2 - \rho^2)(x_i - y_i)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^5} \right) \frac{x_i}{|\mathbf{x}|} &= \\ &= \frac{2\rho_1 |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2 - 3(\rho_1^2 - \rho^2) \left(\rho_1 - \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\rho_1} \right)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^5} = \\ &= \frac{2\rho_1^2(\rho_1^2 + \rho^2 - 2(\mathbf{x}, \mathbf{y})) - 3(\rho_1^2 - \rho^2)(\rho_1^2 - (\mathbf{x}, \mathbf{y}))}{\rho_1 |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^5} = \\ &= \frac{\rho_1^2(5\rho^2 - \rho_1^2) - (\mathbf{x}, \mathbf{y})(\rho_1^2 + 3\rho^2)}{\rho_1 |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^5}. \end{aligned}$$

При $\rho_1 = 2\rho$ выражение упрощается до

$$\frac{4\rho^3 - 7(\mathbf{x}, \mathbf{y})\rho}{2|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^5}.$$

Таким образом, окончательная формула для ёмкости имеет вид

$$C = \frac{1}{4\pi(2\rho)^2} \int_{S_{2\rho}} \frac{1}{4\pi\rho^2} \int_{S_\rho} 2\rho^4 \frac{7(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - 4\rho^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^5} \varphi(\mathbf{y}) d_y S d_x S. \quad (6.3.22)$$

Несмещенной оценкой ёмкости C будет величина

$$2\rho^4 \frac{7(X, Y) - 4\rho^2}{|X - Y|^5} \eta_i \varphi(x_i),$$

где точка X распределена равномерно на сфере радиуса 2ρ , точка Y распределена равномерно на сфере радиуса ρ , а величина η_i и точка x_i определены соответствующими формулами § 6.3.2 для *блуждания по сферам*, стартующего из точки Y .

Вычисление значений полученной оценки проводится по следующему алгоритму.

1. Для проводника Γ выберем ρ так, чтобы шар радиуса ρ с центром в нуле содержал проводник.
2. Положим $\rho_1 \stackrel{\text{def}}{=} 2\rho$.
3. Выберем точки X и Y , равномерно распределённые на сферах с центром в нуле радиуса ρ_1 и ρ соответственно. Зададим начальное значение оценки ξ по формуле

$$\xi \leftarrow 2\rho^4 \frac{7(X, Y) - 4\rho^2}{|X - Y|^5}.$$

4. Из точки Y начинается процесс «блуждания по сферам»: $x_0 \leftarrow Y$, $i \leftarrow 0$.
5. Если после i шагов $x_i \notin \overline{K}_{\rho_1}$, то x_{i+1} распределён на сфере S_ρ с плотностью

$$p(x, y) = \frac{|\mathbf{x}|^2 - \rho^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} \frac{|\mathbf{x}|}{4\pi\rho^2}, \quad (6.3.23)$$

$\xi \leftarrow \xi\rho/\rho_1$, и переходим к шагу 7, иначе переходим к шагу 6.

6. Точка x_{i+1} распределёна равномерно на сфере $S_{r_i}(x_i)$ с центром в x_i , где $r_i = \text{dist}(x_i, \Gamma)$, а величина ξ не изменяется.
7. Если точка x_{i+1} попадает в δ -окрестность Γ , блуждание завершается. В этот момент оценка ξ является малосмещённой, т. к. $\varphi(x_{i+1}) \approx 1$. Иначе $i \leftarrow i + 1$ и переходим к шагу 5.

Для проверки разработанного алгоритма было проведено вычисление ёмкостей уединённых объектов, для которых известно аналитическое решение. Результаты расчётов приведены в системе СГСЭ. Вычисления проводились с помощью реализации алгоритма для MPI-кластера с использованием 50 вычислительных и 1 распределяющего процесса на 13 узлах с процессором Intel(R) Core(TM)2 Quad CPU Q8400 @ 2,66GHz под управлением ОС Windows XP. Для компиляции исходного кода использовался Microsoft Visual C++ Express 2010 SP1. Погрешность вычислений Δ определялась как утроенный корень из отношения выборочной дисперсии к количеству траекторий.

Аналитическое решение для проводящего шара $C = r$ приведено в [15]. Параметры программы:

радиус сферы: 5;
 центр фигуры: (1, 2, 3);
 ρ : 8,741 657;
 δ : 10^{-8} .
 результаты:

n	C	Δ
решение	5	—
10^7	5,004 06	$1,734\,52 \cdot 10^{-2}$
10^8	5,001 67	$5,481\,07 \cdot 10^{-3}$
10^9	5,000 16	$1,733\,19 \cdot 10^{-3}$

Аналитическое решение для проводящего эллипсоида приведено в [39]:

$$C = \begin{cases} \frac{\sqrt{a^2 - c^2}}{\arccos(c/a)}, & a = b > c; \\ \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{\text{arch}(a/b)}, & a > b = c. \end{cases} \quad (6.3.24)$$

Параметры программы:

полуось a : 10;
 полуось b : 10;
 полуось c : 5;
 центр фигуры: (1, 2, 3);
 ρ : 15,115 823;
 δ : 10^{-8} .
 результаты:

n	C	Δ
решение	8.269933431	—
10^7	8.274354105	$2.794118390e - 2$
10^8	8.270308854	$8.833984824e - 3$
10^9	8.269438397	$2.793704149e - 3$

Взаимные ёмкости проводников находим, исходя из физического смысла, решая внешнюю задачу Дирихле. Пусть $\tilde{\Gamma}_i$ — поверхность, содержащая внутри себя проводник i и отделяющая его от других. Как и в случае с уединённым проводником, для нахождения ёмкости C_{ij} будем использовать формулу (6.3.19), в которой $\Gamma = \tilde{\Gamma}_i$, $\varphi(x) = \varphi_j(x)$. Функция $\varphi_j(x)$ является гармонической в $\mathcal{D}_1$, обращается в ноль на проводниках Γ_k ($k \neq j$) и равна 1 на проводнике $\tilde{\Gamma}_i$. Для $x \in \tilde{\Gamma}_i$ положим $r = \text{dist}(x, \partial\mathcal{D}_1)$. При $|z| < r$ значение функции $\varphi(x+z)$ можно найти по формуле Пуассона

$$\varphi(x+z) = \frac{1}{4\pi r} \int_{S_r(x)} \frac{r^2 - |z|^2}{|x+z-y|^3} \varphi(y) dy S. \quad (6.3.25)$$

Аналогично (6.3.3) получаем, что

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \varphi(x) = \frac{3}{4\pi r^4} \int_{S_r(x)} (y-x, \mathbf{n}) \varphi(y) dy S = \frac{3}{r} E(\Omega, \mathbf{n}) \varphi(x+r\Omega),$$

где Ω — изотропный вектор в R^3 .

Таким образом, окончательная формула для взаимной ёмкости имеет вид

$$C_{ij} = - \int_{\tilde{\Gamma}_i} \frac{3}{4\pi r(x)} E(\Omega, \mathbf{n}(x)) \varphi_j(x+r\Omega) dx S.$$

Зададим на $\tilde{\Gamma}_i$ распределение $\mathcal{P}_i$ с плотностью $p_i(x) = \partial\mathcal{P}_i/\partial S$. Пусть X — случайный элемент с распределением $\mathcal{P}_i$, тогда

$$C_{ij} = -E \frac{3}{4\pi r(X)p(X)} (\Omega, \mathbf{n}(X)) \varphi_j(X+r(X)\Omega).$$

В частности, если проводник Γ_i можно отделить от других сферой радиуса R_i с центром в точке $\tilde{x}_i$, формула для взаимной ёмкости приобретает вид

$$C_{ij} = -E \frac{3R_i^2}{r(\tilde{x}_i + R_i\Omega_1)} (\Omega, \Omega_1) \varphi_j(\tilde{x}_i + R_i\Omega_1 + r(\tilde{x}_i + R_i\Omega_1)\Omega), \quad (6.3.26)$$

где Ω_1 — изотропный вектор в R^3 , независимый от Ω .

Опишем процесс блуждания для вычисления взаимных ёмкостей C_{ij} при фиксированном i и $j = 1, 2, \dots, n$.

1. Для каждого проводника k выберем оболочку $\tilde{\Gamma}_k$, отделяющую его от других. Построенная оболочка не должна касаться поверхности проводника.

2. Найдём радиус сферы ρ с центром в нуле, содержащей все объекты и их оболочки. Выберем $\rho_1 > \rho$.
3. Выберем точку X и вектор Ω . Точка X распределена с плотностью $p_i(x)$ на поверхности оболочки, отделяющей данный проводник от других. Вектор Ω — изотропный вектор в R^3 . Инициализируем оценку ξ :

$$\xi \leftarrow -\frac{3}{4\pi r(X)p(X)} (\Omega, \mathbf{n}(X)).$$

Нормаль $\mathbf{n}$ к поверхности $\tilde{\Gamma}_i$ — внешняя.

4. Из точки $X + r(X)\Omega$ начинается процесс «блуждания по сферам»: $y_0 \leftarrow X + r(X)\Omega$, $i \leftarrow 0$.
5. Если после i шагов $y_i \notin \overline{K}_{\rho_1}$, то y_{i+1} распределён на сфере S_ρ с плотностью

$$p(x, y) = \frac{|\mathbf{x}|^2 - \rho^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} \frac{|\mathbf{x}|}{4\pi\rho^2}, \quad (6.3.27)$$

$\xi \leftarrow \xi\rho/|\mathbf{y}_i|$, и осуществляется переход к шагу 7. В противном случае переход к шагу 6.

6. Вектор y_{i+1} распределён равномерно на сфере $S_{r_i}(\mathbf{y}_i)$ с центром в $\mathbf{y}_i$, где $r_i = \text{dist}(\mathbf{y}_i, \partial\mathcal{D}_1)$, а величина ξ не изменяется.
7. Если точка $\mathbf{y}_{i+1}$ не попала в δ -окрестность $\partial\mathcal{D}_1$, $i \leftarrow i + 1$ и переход к шагу 5, иначе переход к шагу 8.
8. В накопитель проводника, на котором остановилась траектория, добавляется вес, полученный на этой траектории. В накопителях для остальных C_{ij} лишь увеличивается счётчик траекторий. При этом счётчик *не увеличивается* в накопителях проводников, находящихся внутри i -го проводника, так как траектория, лежащая снаружи, не могла окончиться на этих проводниках.
9. В случае вложенных проводников по окончании расчётов ёмкость для внешнего проводника (i) вычисляется из полученных значений как $C_{ii} - \sum_{j: \Gamma_j \subset \Gamma_i} C_{ij}$, где сумма берётся по номерам проводников, содержащихся в i -м.

6.3.4. Задача Неймана для уравнения Пуассона

Рассмотрим задачу Неймана в стандартной постановке. Пусть $\mathcal{D}$ — одностовязная ограниченная область в пространстве R^n , $n \geq 3$, с границей Γ , которая является поверхностью Ляпунова [40], $\nu = \nu_x$ — внешняя нормаль к поверхности Γ в точке x .

Пусть функции $f \in C(\overline{\mathcal{D}}) \cap C^1(\mathcal{D})$, $\varphi \in C(\Gamma)$. Внутренняя задача Неймана состоит в определении функции $u \in C(\overline{\mathcal{D}}) \cap C^2(\mathcal{D})$, удовлетворяющей уравнениям

$$-\Delta u(x) = f(x), \quad x \in \mathcal{D}, \quad \frac{\partial u(x)}{\partial \nu_i} = \varphi(x), \quad x \in \Gamma, \quad (6.3.28)$$

где выражение $\frac{\partial u(x)}{\partial \nu_i}$ обозначает предельное значение производной $\frac{\partial u(y)}{\partial \nu}$ по направлению внешней нормали ν_x , когда точка y стремится к граничной точке x изнутри области $\mathcal{D}$.

Для существования решения внутренней задачи Неймана должно быть выполнено условие разрешимости:

$$\int_{\mathcal{D}} f(x) dx + \int_{\Gamma} \varphi(x) d_x S = 0. \quad (6.3.29)$$

Алгоритмы статистического моделирования для задачи Неймана для уравнения Пуассона рассматривалась многими авторами. Для ее решения используются оценки как на траекториях блуждания по границе области [4, 36], так и на траекториях блуждания внутри области [30].

Алгоритмы блуждания по границе основаны на известных свойствах интеграла Гаусса, позволяющих записать ньютоновский потенциал двойного слоя в виде математического ожидания некоторой функции от изотропного вектора (случайного направления). Главная особенность таких алгоритмов состоит в том, что в случае интегральных уравнений теории потенциала, к которым они применяются, итерационные методы сходятся, но абсолютная сходимость отсутствует. В этой ситуации обычно оценивают частичную сумму ряда Неймана. Если ряд Неймана сходится медленно, то для улучшения скорости сходимости применяют различные методы аналитического продолжения резольвенты интегрального оператора. Для этого требуется информация о спектре оператора. А именно, нужно знать два первых его характеристических числа. Вторая проблема, возникающая при реализации подобных алгоритмов методом Монте-Карло, связана с необходимостью довольно точно вычислять значительное число итераций оператора. Статистические оценки, которые для этого используются, имеют стандартное отклонение, превышающее оцениваемую величину на несколько порядков. Это приводит к значительному увеличению объема выборки. Для уравнений теории потенциала такие алгоритмы обсуждаются в монографии [4].

В случае блужданий внутри области также строится смещенная оценка решения краевой задачи. Величину смещения, как правило,

оценить трудно. Обычно удается определить лишь ее порядок по отношению к некоторому малому параметру, вводимому при переходе от точных уравнений к их аппроксимации.

Иногда удается заменить исходное интегральное уравнение эквивалентным уравнением с абсолютно сходящимся рядом Неймана. В этом случае стандартная схема Неймана—Улама позволяет построить несмещенные оценки решений интегрального уравнения и функционалов от него. Именно такие алгоритмы здесь и будут рассмотрены. Изложение, в основном следует работам [36, 32, 37].

Пусть $(X, \mathfrak{A})$ — измеримое пространство, $\mu : \mathfrak{A} \rightarrow [0, +\infty]$ — счетно-аддитивная мера на $\mathfrak{A}$, B — банахово пространство μ -интегрируемых функций на X , такое что $|f| \in B$ при $f \in B$. Для измеримого отображения $k : X^2 \rightarrow R^1$ определим интегральный оператор K с ядром $k(x, y)\mu(dy)$:

$$Ku(x) = \int_X k(x, y)u(y)\mu(dy) + f(x).$$

Будем считать, что K — ограниченный оператор в пространстве B , как и оператор $\bar{K}$ с ядром $|k(x, y)|\mu(dy)$. Назовем ограниченный интегральный оператор K_1 главной частью оператора K , если для оператора $K_2 = K - K_1$ спектральный радиус $\rho(\bar{K}_2) < 1$.

Если функция u удовлетворяет уравнению

$$u = Ku + f, \quad (6.3.30)$$

и функция $h = K_1u$ известна или легко несмещенно оценивается, то уравнение (6.3.30), очевидно, равносильно уравнению

$$u = K_2u + h + f, \quad (6.3.31)$$

к которому применима схема Неймана—Улама.

Применим метод выделения главной части к решению *внутренней задачи Неймана* (6.3.28) в выпуклой области $\mathcal{D}$. Используя формулу Грина, для $x \in \mathcal{D}$ получим представление решения:

$$u(x) = \int_{\Gamma} k(x, y)u(y)d_y S + F(x), \quad (6.3.32)$$

где $k(x, y) = (y - x, \nu_y)/(\sigma_n|x - y|^n)$ — ядро Гаусса, а

$$\begin{aligned} F(x) = \int_{\Gamma} \frac{\varphi(y)}{(n-2)\sigma_n|x-y|^{n-2}}d_y S + \\ + \int_{\mathcal{D}} \frac{f(y)}{(n-2)\sigma_n|x-y|^{n-2}}dy = F_1(x) + F_2(x). \end{aligned} \quad (6.3.33)$$

Таким образом, решение задачи является функционалом от сужения его же на границу области. Выполняя в (6.3.32) предельный переход при $x \rightarrow x_0 \in \Gamma$, из свойств потенциала двойного слоя получаем интегральное уравнение для функции $u(x)$ на границе области:

$$u(x) = \int_{\Gamma} 2k(x, y)u(y)d_y S + 2F(x), \quad (6.3.34)$$

в котором ядро интегрального оператора является стохастическим. Применяя формулу Грина к функциям $u(y)$ и $v(x) = |x - y|^2$, получим для $x \in \Gamma$ тождество

$$\int_{\Gamma} (|x - y|^2 \varphi(y) - 2(y - x, \nu_y)u(y))d_y S + \int_{\mathcal{D}} (f(y)|x - y|^2 + 2nu(y))dy = 0. \quad (6.3.35)$$

Поскольку решение внутренней задачи Неймана определяется с точностью до произвольной постоянной, интеграл от функции $2nu(y)$ можно считать равным нулю. Определим теперь оператор K_1 , действующий в $C(\Gamma)$, равенством

$$K_1 u(x) = \alpha(x) \int_{\Gamma} 2(y - x, \nu_y)u(y)d_y S,$$

где $\alpha(x)$ — непрерывная и положительная на Γ функция. Из формулы (6.3.35) следует, что

$$\begin{aligned} H(x) &= K_1 u(x) = \alpha(x) \int_{\Gamma} 2(y - x, \nu_y)u(y)d_y S = \\ &= \alpha(x) \int_{\Gamma} |x - y|^2 \varphi(y)d_y S + \alpha(x) \int_{\mathcal{D}} f(y)|x - y|^2 dy. \end{aligned}$$

Интегральный оператор K_2 имеет субстохастическое ядро $(1 - \alpha(x)\sigma_n|x - y|^n)2k(x, y)d_y S$, если для $x \in \Gamma$ выполнено условие $(1 - \alpha(x)\sigma_n|x - y|^n) > 0$. Последнее неравенство справедливо, например при $\alpha(x) = 1/(\sigma_n d^n)$, где $d > \text{diam}(\mathcal{D})$.

Очевидно, что спектральный радиус $\rho(K_2) < 1$.

Несмещенные оценки для $u(x)$ естественно строить на траекториях блуждания по границе, которое стартует из точки x . Траектория блуждания лежит на границе Γ . Для построения следующей точки траектории x_{i+1} по текущей x_i моделируется случайное направление Ω в полупространстве $\Pi_x = \{y \in R^n | (y - x, \nu_x) < 0\}$ и определяется точка пересечения луча, выходящего из точки x_i в направлении Ω с границей Γ . Если начальная точка лежит внутри области, то первое направление определяется вектором, изотропным во всем пространстве. Обрыв траектории в точке x_{i+1} происходит с вероятностью $\alpha(x_i)\sigma_n|x_i - x_{i+1}|^n$.

В начальной и первой точке блуждания обрыв траектории не происходит.

Пусть τ — момент обрыва траектории. Тогда $E\tau < \infty$ и стандартная оценка по столкновениям

$$\xi = F(x_0) + \sum_{i=1}^{\tau-1} (H(x_i) + 2F(x_i))$$

является несмещенной и имеет конечную дисперсию.

При практической реализации оценки ξ функции $H(x)$ и $F(x)$ также оцениваются несмещенно по одному свободному узлу. При этом следует включать особенности подынтегральных функций в плотность. Пусть $x \in \mathcal{D}$. Записывая ньютонов потенциал $F_2(x)$ в сферических координатах, получаем

$$\begin{aligned} F_2(x) &= \int_{\mathcal{D}} \frac{f(y)}{(n-2)\sigma_n |x-y|^{n-2}} dy = \\ &= \frac{1}{n-2} E \int_0^{r(\Omega)} f(x+r\Omega) r dr = E \frac{r^2(\Omega)}{2(n-2)} f(x+\rho r(\Omega)\Omega), \end{aligned}$$

где Ω — изотропный вектор в пространстве $\rho = \max(\theta_1, \theta_2)$, а θ_1, θ_2 — случайные величины, распределенные равномерно на отрезке $[0, 1]$. Все случайные элементы предполагаются независимыми. Функция $r(\omega)$ — расстояние от точки x до точки $y \in \Gamma$, видимой из x в направлении ω . В точности также оценивается $2F_2(x)$ при $x \in \Gamma$. Вектор Ω при этом должен быть изотропным в полупространстве Π_x .

Аналогично оценивается при $x \in \Gamma$ величина

$$\begin{aligned} H_2(x) &= \alpha(x) \int_{\mathcal{D}} f(y) |x-y|^2 dy = \frac{\alpha(x)\sigma_n}{2} E \int_0^{r(\Omega)} f(x+r\Omega) r^{n+1} dr = \\ &= \frac{\alpha(x)\sigma_n}{2} E \frac{r^{n+2}(\Omega)}{n+2} f(x+\rho r(\Omega)\Omega), \end{aligned}$$

где Ω — изотропный вектор в полупространстве Π_x , $\rho = \max(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n+2})$, а $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n+2}$ — случайные величины, распределенные равномерно на отрезке $[0, 1]$.

Пусть $x_0 \in \mathcal{D}$ — фиксированная точка, тогда при $x \in \Gamma$

$$H_1(x) = \alpha(x) \int_{\Gamma} |x-y|^2 \varphi(y) d_y S = \alpha(x)\sigma_n E \frac{|x-y(\Omega)|^2 |x_0-y(\Omega)|^n}{(y(\Omega)-x_0, \nu_y)} \varphi(y(\Omega)),$$

где Ω — изотропный вектор в пространстве, $y(\omega)$ — точка, видимая из x_0 в направлении ω .

Труднее всего оценить потенциал простого слоя

$$F_1(x) = \int_{\Gamma} \frac{\varphi(y)}{(n-2)\sigma_n|x-y|^{n-2}} d_y S.$$

Пусть $x_0 \in \mathcal{D}$, ω — точка на единичной сфере с центром в нуле, $y(\omega)$ — точка на Γ , видимая из x_0 в направлении ω , ω_0 — единичный вектор в направлении из x_0 в x . Тогда

$$\begin{aligned} F_1(x) &= \int_{\Gamma} \frac{\varphi(y)}{(n-2)\sigma_n|x-y|^{n-2}} d_y S = \\ &= \int_{\Gamma} \frac{|x_0-y|^n(y-x_0, \nu_y)\varphi(y)}{(n-2)(y-x_0, \nu_y)\sigma_n|x_0-y|^n|x-y|^{n-1}} d_y S = \\ &= \int_{S_1(0)} \frac{|x_0-y(\omega)|^n\varphi(y(\omega))}{(n-2)(y(\omega)-x_0, \nu_y)\sigma_n|x-y(\omega)|^{n-1}} d_{\omega} S = \\ &= \int_{S_1(0)} \frac{|x_0-y(\omega)|^n\varphi(y(\omega))|\omega_0-\omega|^{n-2}}{(n-2)(y(\omega)-x_0, \nu_y)\sigma_n|x-y(\omega)|^{n-2}|\omega_0-\omega|^{n-2}} d_{\omega} S = \\ &= \int_{S_1(0)} \frac{\psi(x, \omega)\varphi(y(\omega))}{\sigma_n|\omega_0-\omega|^{n-2}} d_{\omega} S, \end{aligned}$$

где

$$\psi(x, \omega) = \frac{|x_0-y(\omega)|^n|\omega_0-\omega|^{n-2}}{(n-2)(y(\omega)-x_0, \nu_y)|x-y(\omega)|^{n-2}}.$$

Очевидно, что скалярное произведение $(y(\omega)-x_0, \nu_y) \geq \text{const} > 0$. Если R_0 — расстояние от x_0 до границы Γ , то при $|x-x_0| > R_0/2$, очевидно, выполнено неравенство $|y(\omega)-x| \geq R_0|\omega-\omega_0|/2$. В противном случае, $|y(\omega)-x| \geq R_0/2$. Следовательно, функция $\psi(x, \omega)$ ограничена. Заметим, что $|\omega-\omega_0|^2 = 2-2(\omega_0, \omega) = 2(\omega-\omega_0, \omega)$. Следовательно,

$$F_1(x) = \int_{S_1(0)} \frac{\psi(x, \omega)\varphi(y(\omega))2(\omega-\omega_0, \omega)}{\sigma_n|\omega_0-\omega|^n} d_{\omega} S.$$

Определим Ω_1 как изотропный вектор в полупространстве Π_{ω_0} , то есть изотропный вектор, удовлетворяющий условию $(\Omega_1, \omega_0) \leq 0$. Если $\Omega = \Omega(\omega_0, \Omega_1)$ — точка на $S_1(0)$, видимая из ω_0 в направлении Ω_1 , то

$$F_1(x) = E\psi(x, \Omega)\varphi(y(\Omega)).$$

Пусть $\mathcal{D}_e = R^n \setminus \overline{\mathcal{D}}$, функции $f \in C(\overline{\mathcal{D}_e}) \cap C^1(\mathcal{D}_e)$, $\varphi \in C(\Gamma)$. Внешняя задача Неймана состоит в определении функции $u \in C(\overline{\mathcal{D}_e}) \cap C^2(\mathcal{D}_e)$, удовлетворяющей уравнениям

$$-\Delta u(x) = f(x), \quad x \in \mathcal{D}_e, \quad \frac{\partial u(x)}{\partial \nu_e} = \varphi(x), \quad x \in \Gamma, \quad (6.3.36)$$

где выражение $\frac{\partial u(x)}{\partial \nu_e}$ обозначает предельное значение производной $\frac{\partial u(y)}{\partial \nu}$ по направлению внешней нормали ν_x , когда точка y стремится к граничной точке x изнутри области $\mathcal{D}_e$.

Выделяя из решения ньютоновский потенциал

$$v(x) = \frac{1}{(n-2)\sigma_n} \int_{\mathcal{D}_e} |x-y|^{2-n} f(y) dy,$$

легко свести задачу к поиску гармонической в области $\mathcal{D}_e$ функции, удовлетворяющей краевому условию $\frac{\partial u(x)}{\partial \nu_e} = \varphi(x) - \frac{\partial v(x)}{\partial \nu}$. Поэтому будем считать, что $f(x) \equiv 0$. Будем также предполагать, что $u(\infty) = 0$, то есть решение стремится к нулю на бесконечности. В классе таких функций задача Неймана имеет единственное решение [40], и оно представимо в виде потенциала простого слоя $u(x) = \int_{\Gamma} |x-y|^{2-n} \mu(x) d_y S$. Потенциал простого слоя непрерывен во всем пространстве и является гармонической функцией в области $\mathcal{D}$. Используя равенство $\frac{\partial u(x)}{\partial \nu_i} - \frac{\partial u(x)}{\partial \nu_e} = 4\pi\mu(x)$, из (6.3.32, 6.3.33) находим при $x \in \mathcal{D}$

$$u(x) = \int_{\Gamma} k(x, y) u(y) d_y S + F(x), \quad (6.3.37)$$

где $k(x, y) = (y - x, \nu_y) / (\sigma_n |x - y|^n)$ — ядро Гаусса, а

$$F(x) = \int_{\Gamma} \frac{\varphi(y) + (n-2)\sigma_n \mu(y)}{(n-2)\sigma_n |x-y|^{n-2}} d_y S = \int_{\Gamma} \frac{\varphi(y)}{(n-2)\sigma_n |x-y|^{n-2}} d_y S + u(x). \quad (6.3.38)$$

Выполняя предельный переход, получаем для точек $x \in \Gamma$ равенство

$$u(x) = \int_{\Gamma} 2k(x, y) u(y) d_y S + 2F(x).$$

Отсюда получаем уравнение для неизвестной функции на границе Γ :

$$u(x) = - \int_{\Gamma} 2k(x, y) u(y) d_y S - F_e(x), \quad (6.3.39)$$

где

$$F_e(x) = 2 \int_{\Gamma} \frac{\varphi(y)}{(n-2)\sigma_n |x-y|^{n-2}} d_y S. \quad (6.3.40)$$

Равенство (6.3.39) является уравнением теории потенциала, и функция $u(x)$ является его единственным решением. Однако теперь потребуются более жесткие ограничения на границу Γ , обеспечивающие выделение главной части оператора с известным его значением на решении $u(x)$. А именно, потребуем чтобы поверхность Γ была класса C^2 и ее гауссова кривизна в любой точке была отличной от нуля.

Тогда в силу теоремы Адамара область $\mathcal{D}$ будет строго выпуклой, и $(y - x, \nu_y)/|y - x| > 0$. Следовательно, при $x \in \Gamma$

$$c(x) = \inf_{y \in \Gamma} \frac{(y - x, \nu_y)}{|y - x|} > 0.$$

Пусть d — диаметр области $\mathcal{D}$, тогда

$$2k(x, y) \geq 2c(x)/d^{n-1} > 0.$$

Пусть точка $x_0 \in \mathcal{D}$. Определим оператор K_1 в $C(\Gamma)$ равенством

$$K_1 f(x) = -\frac{\alpha(x)}{\sigma_n} \int_{\Gamma} \frac{(y - x_0, \nu_y)}{|x_0 - y|^n} f(y) d_y S,$$

где $\alpha \in C(\Gamma)$. Из формул (6.3.37), (6.3.38) находим значение оператора на решении $u(x)$:

$$K_1 u(x) = \frac{\alpha(x)}{(n-2)\sigma_n} \int_{\Gamma} \frac{\psi(y)}{|x_0 - y|^{n-2}} d_y S.$$

Выберем непрерывную функцию $\alpha(x)$ так, чтобы выполнялось неравенство

$$\frac{2c(x)}{d^{n-1}} \geq \alpha(x) \sup_{y \in \Gamma} \frac{(y - x_0, \nu_y)}{|x_0 - y|^n},$$

тогда ядро оператора $K_2 = K - K_1$ будет субстохастическим и

$$\|K_2\| = \|\overline{K}_2\| = \sup_{x \in \Gamma} (1 - \alpha(x)) < 1.$$

Таким образом, построена главная часть оператора в уравнении (6.3.39). Случайный процесс блуждания по границе и несмещенные оценки на его траекториях строятся также, как для внутренней задачи Неймана.

6.4. О СОЧЕТАНИИ СХЕМЫ НЕЙМАНА—УЛАМА И МЕТОДА СТОХАСТИЧЕСКОЙ АППРОКСИМАЦИИ

Выделение главной части оператора с известным значением на решении исходного интегрального уравнения возможно лишь в редких случаях. В функциональном анализе и математической физике довольно часто используется аппроксимация оператора конечномерным оператором. При этом исходное уравнение второго рода сводится к решению системы линейных уравнений.

Рассмотрим уравнение второго рода

$$u = Ku + f \tag{6.4.1}$$

в банаховом пространстве B . Пусть B_1 — конечномерное подпространство в B с базисом v_m , $m = 1, 2, \dots, d$. Тогда любая последовательность l_m , $m = 1, 2, \dots, d$, функционалов, линейных и непрерывных в B , определяет конечномерный оператор

$$K_1 u = \sum_{m=1}^d l_m(u) v_m. \quad (6.4.2)$$

Пусть, как и ранее, оператор $K_2 = K - K_1$. Если оператор $I - K_2$ имеет непрерывный обратный оператор R , то уравнение (6.4.1) эквивалентно уравнению

$$u = RK_1 u + Rf. \quad (6.4.3)$$

При этом

$$RK_1 u = \sum_{m=1}^d l_m(u) Rv_m = \sum_{m=1}^d l_m(u) w_m, \quad (6.4.4)$$

а w_m — единственное решение уравнения $w_m = K_2 w_m + v_m$. Полагая $c_m = l_m(u)$, находим из (6.4.3) решение уравнения (6.4.1):

$$u = \sum_{m=1}^d c_m w_m + Rf. \quad (6.4.5)$$

Применяя к полученному равенству функционалы l_j , приходим к системе линейных уравнений для неизвестных коэффициентов c_j :

$$c_j = \sum_{m=1}^d c_m l_j(w_m) + l_j(Rf), \quad j = 1, 2, \dots, d. \quad (6.4.6)$$

Справедлива следующая лемма.

Лемма 24. Система уравнений (6.4.6) односторонне разрешима тогда и только тогда, когда однозначно разрешимо уравнение (6.4.1.)

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Пусть постоянные c_j удовлетворяют однородным уравнениям

$$c_j = \sum_{m=1}^d c_m l_j(w_m), \quad j = 1, 2, \dots, d$$

и $u = \sum_{m=1}^d c_m w_m$, тогда $c_j = l_j(u)$. Далее, $u = \sum_{m=1}^d l_m(u) w_m = RK_1 u$. Следовательно, $(I - K_2)u = K_1 u$, то есть функция u является решением однородного уравнения $u = Ku$, поэтому, $u = 0$. Наконец, $c_j = l_j(u) = 0$, так как функционалы l_j — линейные.

Обратно, из (6.4.5) следует, что любое решение уравнения $u = Ku$ представимо в виде $u = \sum_{m=1}^d c_m w_m$, где $c_m = l_m(u)$. Значит, коэффициенты c_m удовлетворяют однородной системе (6.4.6) и, следовательно, равны нулю. ■

Если оператор K является интегральным оператором и K_1 — его главная часть, то для элементов матрицы полученной системы и ее правой части можно построить несмещенные оценки. Разумеется, не всякий конечномерный оператор K_1 , для которого спектральный радиус $\rho(K - K_1) < 1$, будет главной частью K . Однако для интегрального оператора, действующего в пространстве непрерывных функций на метрическом компакте, и для оператора с ядром Гильберта—Шмидта конечномерный интегральный оператор K_1 , удовлетворяющий условию $\rho(K - K_1) < 1$, очевидно, будет главной частью оператора K .

Для решения системы уравнений (6.4.6) естественно применить процедуру стохастической аппроксимации. Опишем ее, следуя работе [42] и монографии [41]. Рассмотрим систему линейных уравнений с d неизвестными

$$AX = B \quad (6.4.7)$$

с симметричной положительно определенной квадратной матрицей A . Пусть X^0 — решение системы, а λ — минимальное собственное число матрицы A .

Пусть (A_i, B_i) — последовательность независимых, одинаково распределенных несмещенных оценок элементов пары (A, B) . Будем предполагать, что все компоненты матрицы A_i и вектора B_i имеют конечные дисперсии. Тогда случайная величина $B'_i B_i$ и компоненты матриц $A'_i B_i$, $A'_i A_i$ также имеют конечные математические ожидания.

Рассмотрим процедуру стохастической аппроксимации

$$X_{i+1} = X_i + \frac{a}{i}(B_{i+1} - A_{i+1}X_i), \quad (6.4.8)$$

где X_1 — фиксированное постоянное начальное приближение, и $2a\lambda > 1$. Простым следствием леммы 2.1 из [41] (глава 6, § 2) является следующая теорема:

Теорема 16. При выполнении перечисленных выше условий $X_i \rightarrow X^0$ п.н. и $E|X_i - X^0|^2 = O(1/i)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Запишем формулу (6.4.8) в виде

$$X_{i+1} = X_i + \frac{a}{i}(-A(X_i - X^0) + G_{i+1}(X_i)), \quad (6.4.9)$$

где

$$G_{i+1}(X) = (A - A_{i+1})X - (B - B_{i+1}). \quad (6.4.10)$$

Теперь итерационная последовательность (6.4.9) имеет стандартную форму (форму (2.2) из [41], глава 6, § 2) и для завершения доказательства теоремы достаточно проверить условия:

- 1) $(-A(X - X^0), (X - X^0)) \leq -\lambda|X - X^0|^2$;
- 2) $|A(X - X^0)|^2 + E|G_i(X)|^2 \leq c(1 + |X|^2)$, $0 < c < \infty$.

Условие 1 следует из ограничений на матрицу A , условие 2 следует из существования дисперсий для элементов матриц A_i и B_i . ■

При более строгих ограничениях на оценки A_i и B_i справедлива центральная предельная теорема для последовательности X_i . Она также является следствием соответствующего результата из [41].

Теорема 17. Пусть выполнены условия теоремы 16, тогда распределение случайного вектора $\sqrt{i}(X_i - X^0)$ слабо сходится при $i \rightarrow \infty$ к нормальному распределению со средним 0 и матрицей ковариаций

$$S = a^2 \int_0^\infty e^{Dt} S_0 e^{D't} dt,$$

где $D = -aA + 0.5I$, a

$$S_0 = EG_1(X^0)(G_1(X^0))' = E(B_1 - A_1 X^0)(B_1 - A_1 X^0)'$$

Доказательство.

В соответствии с теоремой 6.1 ([41], глава 6), достаточно проверить условия:

- 1) $X_i \rightarrow X^0$ п.н.;
- 2) все собственные числа матрицы D отрицательны;
- 3) для некоторого $\theta > 0$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{|X - X^0| < \theta} \sup_{i \geq 1} \int_{|G_i(X)| > R} |G_i(X)|^2 dP = 0.$$

Первое из этих условий доказано в предшествующей теореме, второе условие является очевидным следствием ограничения $2a\lambda > 1$ на параметр a . Для проверки последнего условия воспользуемся неравенствами

$$\begin{aligned} |G_i(X)|^2 &\leq 2|(A - A_i)X|^2 + 2|B - B_i|^2 \leq 2\|A - A_i\|^2|X|^2 + 2|B - B_i|^2 \leq \\ &\leq 2\|A - A_i\|^2(2|X^0|^2 + 2\theta^2) + 2|B - B_i|^2 = Z_i^2. \end{aligned}$$

Случайная величина Z_i имеет распределение, не зависящее от индекса i , и конечное математическое ожидание. При $|X - X^0| < \theta$, $R \rightarrow \infty$ получаем неравенство

$$\begin{aligned} \int_{\{|G_i(X)| > R\}} |G_i(X)|^2 dP &\leq \int_{\{|G_i(X)| > R\}} (Z_i^2) dP \leq \int_{\{Z_i > R\}} Z_i dP = \\ &= \int_{\{Z_1 > R\}} Z_1 dP \rightarrow 0. \end{aligned}$$

$R \rightarrow \infty$. ■

Система уравнений (6.4.6) имеет несимметричную матрицу L с элементами $l_{jm} = l_j(w_m)$. Если она невырожденная, то можно вместо системы $LX = F$ рассматривать систему $AX = B$ с невырожденной симметричной матрицей $A = L'L$ и матрицей $B = L'F$.

Пусть $L_i, \tilde{L}_i, F_i$ ($i = 1, 2, \dots$) — независимые в совокупности несмещенные оценки с конечными вторыми моментами для матриц L, L', F соответственно. Тогда можно применять процедуру стохастической аппроксимации, используя $\tilde{L}_i L_i$ как оценку для A и $\tilde{L}_i F_i$ — для B . Несмещенные оценки элементов матрицы L и правой части F можно получить, используя схему Неймана—Улама.

6.4.1. Выделение главной части для уравнений теории потенциала

Будем решать внутреннюю задачу Дирихле для уравнения Лапласа

$$\Delta u(x) = 0, \quad x \in \mathcal{D}, \quad u(x) = g(x), \quad x \in \Gamma, \quad (6.4.11)$$

в ограниченной выпуклой области $\mathcal{D}$ в R^n , граница которой Γ является поверхностью Ляпунова.

Гармоническая функция $u(x)$ может быть представлена потенциалом двойного слоя

$$u(x) = \int_{\Gamma} \frac{(y - x, \nu_y) \sigma(y)}{|x - y|^n} d_y S, \quad x \in \mathcal{D}, \quad (6.4.12)$$

где ν_y — внешняя нормаль к Γ в точке y , а $\sigma(y)$ — плотность потенциала, удовлетворяющая интегральному уравнению

$$\sigma(x) = -\frac{2}{(n-2)\sigma_n} \int_{\Gamma} \frac{(y - x, \nu_y) \sigma(y)}{|x - y|^n} d_y S - \frac{2g(x)}{(n-2)\sigma_n}, \quad x \in \Gamma. \quad (6.4.13)$$

Определим оператор K_1 равенством

$$K_1 \sigma(x) = -\frac{2}{(n-2)\sigma_n} \int_{\Gamma} \frac{(y - x, \nu_y) \sigma(y)}{d^n} d_y S, \quad x \in \Gamma, \quad (6.4.14)$$

где постоянная $d \geq \sup\{|x - y| \mid x, y \in \Gamma\}$.

Оператор K_1 является вырожденным,

$$K_1\sigma(x) = \sum_{i=0}^n l_i(\sigma)v_i(x) = \sum_{i=0}^n c_i v_i(x),$$

где $v_0(x) = 1$, а $v_1(x), v_2(x), \dots, v_n(x)$ — координатные функции. Функционалы $l_i(\sigma)$ имеют вид

$$l_0(\sigma) = -\frac{2}{(n-2)\sigma_n d^n} \int_{\Gamma} (y, \nu_y) \sigma(y) dy,$$

$$l_i(\sigma) = \frac{2}{(n-2)\sigma_n d^n} \int_{\Gamma} (\nu_y)_i \sigma(y) dy \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

По формуле Грина находим

$$\int_{\Gamma} 2(y - x, \nu_y) d_y S = \int_{\mathcal{D}} \Delta |y - x|^2 dy = 2nV(\mathcal{D}), \quad (6.4.15)$$

где $V(\mathcal{D})$ — мера Лебега области $\mathcal{D}$. Поэтому оператор

$$K_2\sigma(x) = -\frac{2}{(n-2)\sigma_n} \int_{\Gamma} \frac{(y - x, \nu_y)\sigma(y)}{|x - y|^n} \left(1 - \frac{|x - y|^n}{d^n}\right) d_y S \quad (6.4.16)$$

совпадает с $\overline{K}_2$ и имеет в $C(\Gamma)$ норму

$$\|K_2\| = 1 - \frac{2nV(\mathcal{D})}{(n-2)\sigma_n d^n} = q < 1.$$

Значит, K_1 — главная часть оператора K . Ядро оператора K_2 субстохастическое и легко моделируется. Очевидно, что $w_0 = 1/(1+q)$, $l_0(1) = -(1-q)$, поэтому $l_{00} = l_0(w_0) = -(1-q)/(1+q)$. Используя формулу (6.4.15), видим, что $l_i(w_0) = 0$ при $i = 1, 2, \dots, n$. Коэффициент c_0 находим из системы уравнений (6.4.6):

$$c_0 = -\frac{(1+q)}{(n-2)\sigma_n} l_0(Rg).$$

Остальные коэффициенты можно найти методом стохастической аппроксимации, либо решая систему (6.4.6) после предварительной оценки элементов ее матрицы и правой части по выборке достаточно большого объема.

Отметим, что указанный способ выделения главной части оператора применим и к интегральному уравнению (6.3.39) для внешней задачи Неймана.

ПРИЛОЖЕНИЕ

АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

В данном приложении собраны алгоритмы моделирования распределений случайных величин и векторов, которые используются при моделировании марковских цепей и статистических оценок на их траекториях в данной работе. При этом мы не претендуем на оптимальность предложенных процедур моделирования. Необходимо лишь отметить, что при распараллеливании вычислений следует, по возможности, избегать метода отбора, так как он приводит к проблемам в синхронизации выделенных вычислительных процессов. Доказательства известных фактов не приводятся. С ними можно познакомиться в [6] и в первой части данной книги. Всюду в данной главе α — случайная величина, распределенная равномерно на отрезке $[0, 1]$, а *random* — функция, которая возвращает очередное, независимое от предыдущих, значение α .

П.1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТРОПНОГО ВЕКТОРА В R^n

П.1.1. Изотропный вектор в пространстве

Изотропным вектором называется точка Ω , равномерно распределенная на сфере $S_1(0)$ радиуса 1 с центром в нуле в R^n . Мы рассматриваем его как одномерный массив с элементами $\Omega[i]$, $i = 1, 2, \dots, n$. Любую процедуру его моделирования будем обозначать $Get(\Omega, n)$.

При $n = 2$ он может быть найден по формуле

$$\Omega = (\cos(2\pi\alpha), \sin(2\pi\alpha)),$$

либо промоделирован методом отбора:

repeat

$\Omega[1] := 2 * \text{random} - 1;$

$\Omega[2] := 2 * \text{random} - 1;$

$r^2 := ((\Omega[1])^2 + (\Omega[2])^2)$
until $r^2 < 1$;
 $\Omega[1] := \Omega[1]/r$;
 $\Omega[2] := \Omega[2]/r$;

Эффективность метода отбора равна $\pi/4$.

При $n = 3$ проекция Ω на любое направление распределена равномерно на отрезке $[-1, 1]$, поэтому моделируем Ω с помощью процедуры:

$\Omega[3] := 2 * \text{random} - 1$;
 $r := \sqrt{1 - (\Omega[3])^2}$;
 $\text{Get}(\Omega, 2)$;
 $\Omega[1] := r * \Omega[1]$;
 $\Omega[2] := r * \Omega[2]$;

Можно выполнять моделирование и методом отбора. Эффективность равна $\pi/6$.

При $n > 3$ изотропный вектор обычно моделируют по формуле $\Omega = \Xi/|\Xi|$, где Ξ — нормальный вектор с единичной матрицей ковариаций и нулевым вектором математических ожиданий. Компоненты вектора Ξ обычно моделируют парами. Для двумерного распределения используется процедура $\text{Get}(\Omega, 2)$:

$r := \sqrt{-2 * \ln(\text{random})}$;
 $\Xi[1] := r * \Omega[1]$;
 $\Xi[2] := r * \Omega[2]$;

П.1.2. Изотропный вектор в полупространстве

Пусть ν — вектор нормали к границе полупространства. Пусть $R_+^n = \{x \in R^n | (x, \nu) \geq 0\}$ — полупространство. Если Ω — изотропный вектор в пространстве, а $\Omega_1 = \Omega$ при $(\Omega, \nu) \geq 0$, и $\Omega_1 = -\Omega$ при $(\Omega, \nu) < 0$, то Ω_1 — изотропный вектор в пространстве R_+^n .

П.1.3. Неравномерное распределение на эллипсоиде

Пусть A — симметричная, положительно определенная матрица (матрица ковариаций),

$$S_1^0 = \{\omega \in R^n | \omega^T A^{-1} \omega = 1\}$$

— эллипсоид с центром в нуле,

$$\sigma_n = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2})}$$

— площадь поверхности сферы радиуса 1 в R^n . Случайный вектор $\Omega_1 = \sqrt{A}\Omega$ распределен на S_1^0 с плотностью

$$p(\omega) = \frac{1}{\sigma_n \sqrt{\det A} |A^{-1}\omega|}, \quad (\text{П.1.1})$$

где $\sqrt{A}$ — треугольная матрица квадратного корня.

П.2. ГАММА И БЕТА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

Под *гамма*-распределением в данной работе всегда понимается распределение, имеющее на полупрямой $x > 0$ плотность $f(x) = x^{\nu-1}e^{-x}/\Gamma(\nu)$, где ν — положительный параметр, а

$$\Gamma(\nu) = \int_0^\infty x^{\nu-1}e^{-x}dx$$

— гамма-функция. Как правило, мы обозначаем эту случайную величину $\gamma(\nu)$. При натуральном $\nu = m$ ее значение можно получить по формуле

$$\gamma(m) = -\ln \left(\prod_{i=1}^m \alpha_i \right), \quad m = 1, 2, \dots,$$

а при полуцелом $\nu = m + 1/2$ — по формуле

$$\gamma(m + 1/2) = -\ln \left(\prod_{i=1}^m \alpha_i \right) + (\Xi[1])^2/2, \quad m = 0, 1, \dots$$

В общем случае при $0 < \delta < 1$ используется формула $\gamma(m + \delta) = \gamma(m) + \gamma(\delta)$, в правой части которой случайные величины должны быть независимыми. Случайную величину $\gamma(\delta)$ обычно моделируют методом отбора, используя мажоранту

$$g(x) = \begin{cases} e^{-x}, & x > 1; \\ x^{\delta-1}, & 0 < x \leq 1; \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

Эффективность моделирования равна $\Gamma(\delta)/(1/\delta + 1/e)$.

Для моделирования случайной величины можно использовать формулу Йонка:

$$\gamma(\nu) = (\zeta_\nu - 1)\alpha,$$

где величина ζ_ν имеет *бета*-распределение с параметрами $1 - \nu$ и ν .

Заметим, что случайная величина $\gamma(\nu)/\theta$ имеет при $x > 0$ плотность распределения (двухпараметрическое *гамма*-распределение)

$$f(x) = \theta^\nu x^{\nu-1} e^{-\theta x} / \Gamma(\nu).$$

Пусть $p > 0$, $m > 0$ — параметры. Тогда

$$B(p, m) = \int_0^1 x^{p-1} (1-x)^{m-1} dx = \frac{\Gamma(p)\Gamma(m)}{\Gamma(p+m-1)}$$

— *бета*-функция. *Бета*-распределение имеет на отрезке $(0, 1)$ плотность

$$f_{p,m}(x) = \frac{x^{p-1}(1-x)^{m-1}}{B(p, m)}.$$

Моделирование произвольного *бета*-распределения выполняется в несколько этапов и подробно описано в [6]. Мы рассмотрим лишь те случаи, которые требуются в данной работе. Отметим, что если $\beta(p, m)$ имеет распределение с параметрами p, m , то $1 - \beta(p, m)$ имеет распределение с параметрами m, p .

Случай 1: $m = 1$. Моделирование выполняется по явной формуле: $\beta(p, 0) = \alpha^{1/p}$.

Случай 2: $p = 1$. Моделирование выполняется по явной формуле: $\beta(0, m) = 1 - \alpha^{1/m}$.

Случай 3: p, m — целые. Моделирование выполняется с помощью порядковых статистик при выборке объема $p + m - 1$ из равномерного распределения на отрезке $(0, 1)$. А именно, $\beta(p, m) = \alpha_p - p$ -й член вариационного ряда.

Случай 4: m — целое. Тогда

$$\beta(p, m) = \prod_{k=1}^m \alpha_k^{1/(p+k-1)}.$$

Случай 5: Целая часть $[m] = 1$. В этом случае распределение является смесью

$$f_{p,m}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k f_{p+k,2},$$

где

$$p_k = \frac{1}{B(p, m)} \frac{a(a+1) \dots (a+k-1)}{k!(k+p)(k+p+1)},$$

и $a = 2 - m$. Пусть дискретная случайная величина ν имеет распределение p_k , $k = 0, 1, \dots$, тогда

$$\beta(p, m) = \alpha_1^{1/(p+\nu)} \alpha_2^{1/(1+p+\nu)}.$$

Случай 6: $m < 1, p < 1$. Этот случай сводится к предыдущему, так как

$$f_{p,m} = \frac{p}{p+m}(x)f_{p+1,m}(x) + \frac{m}{p+m}f_{p,m+1}(x).$$

Именно этот случай наиболее интересен. Он позволяет промоделировать *гамма*-распределение с нецелым показателем. В свою очередь можно моделировать *бета*-распределение через *гамма*-распределение по формуле

$$\beta(p, m) = \frac{\gamma(p)}{\gamma(p) + \gamma(m)} = \frac{\gamma([p]) + \gamma(\{p\})}{\gamma([p]) + \gamma(\{p\}) + \gamma([m]) + \gamma(\{m\})}.$$

Входящие в данную формулу случайные величины должны быть независимы в совокупности.

П.3. КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Моделирование всех случайных величин, необходимых для реализации рассмотренных алгоритмов, кроме геометрического распределения, уже обсуждалось.

П.3.1. Моделирование геометрического распределения

Геометрическое распределение на множестве натуральных чисел задается рядом вероятностей $p_k = q(1-q)^{k-1}$, $k = 1, 2, \dots$. Используя формулу для суммы первых m членов геометрической прогрессии, легко получить следующую формулу для моделирования этого распределения:

$$N = \left\lceil \frac{\ln(\alpha)}{\ln(1-q)} + 1 \right\rceil.$$

П.4. ПЕРВАЯ КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

П.4.1. Моделирование величины ρ в блуждании по сферам

Для моделирования случайной величины ρ , имеющей на отрезке $[0, 1]$ плотность распределения $p_n(r) = 2n(r - r^{n-1})/(n-2)$, можно представить ее в виде смеси плотностей порядковых статистик

$$p_n(r) = \sum_{k=1}^{n-2} \frac{2n}{(n-2)(k+1)(k+2)} q_k(r),$$

где $q_k(r) = (k+1)(k+2)r^k(1-r)$ — плотность $k+1$ -й порядковой статистики при выборке объема $k+2$ из равномерного распределения на отрезке $[0, 1]$. Суммы коэффициентов смеси находятся явно: $S_0 = 0$, $S_1 = n/3(n-2), \dots, S_l = nl/(n-2)(l+2)$. Поэтому по α , распределенному равномерно на отрезке $[0, 1]$, выбираем номер ν порядковой статистики $\nu = \lceil 2(1 - \alpha(1 - 2/n))^{-1} \rceil - 1$ и моделируем порядковую статистику $\nu+1$ при выборке объема $\nu+2$. Для этого достаточно следить за двумя последними членами вариационного ряда. Приведем фрагмент программы, выполняющей необходимые действия:

```

 $\alpha := \text{random};$ 
 $\beta := \text{random};$ 
if  $\alpha > \beta$  then begin  $\gamma := \alpha$ ;  $\alpha := \beta$ ;  $\beta := \gamma$  end;
for  $k := 1$  to  $n-2$  do
begin  $\gamma := \text{random};$ 
if  $\gamma > \beta$  then begin  $\alpha := \beta$ ;  $\beta := \gamma$  end
else if  $\gamma > \alpha$  then  $\alpha := \gamma$ ;
end;
 $\rho := \alpha$ ;

```

П.4.2. Моделирование блуждания по эллипсоидам

Используя обозначения § 6.2.1, определим в области $T(x)$ следующие функции:

$$\begin{aligned}
 p(x, y) &= N_y \mathcal{L}(y, x), \\
 p_1(x, y) &= N_y \mathcal{L}(y, x) \quad \text{при} \quad c(x) \equiv 0, \\
 p_2(x, y) &= \mu(x)(n-2)p(\sigma)\sigma^{1-n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \sigma}{\partial y_i} \frac{\partial \sigma}{\partial y_j}, \\
 p_3(x, y) &= 2 \frac{\mu}{\nu} \mu(x)(n-2)p(\sigma)\sigma^{1-n}, \\
 p_4(x, y) &= \mu(x)(n-2)p(\sigma)\sigma^{1-n}.
 \end{aligned} \tag{П.4.1}$$

Эти функции неотрицательные и связаны неравенствами

$$p(x, y) \leq p_1(x, y) \leq 2p_2(x, y) \leq p_3(x, y). \tag{П.4.2}$$

Первое неравенство следует из равенства $p(x, y) - p_1(x, y) = c(x)\mathcal{L}(y, x)$ и неравенств $c(x) \leq 0$, $\mathcal{L}(y, x) \geq 0$.

Второе неравенство является следствием выбора функции $p(\rho)$, а именно, $p(\rho)$ следует выбирать исходя из условия

$$p_2(x, y) \geq |p_1(x, y) - p_2(x, y)| + \|c\| \mu(x) \sigma^{2-n} \int_{\sigma}^R p(\rho) d\rho,$$

которое обеспечивает требуемое неравенство. Для этого в доказательстве теоремы 15 постоянные $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ следует выбирать при $c(x) \equiv 0$, а затем увеличить κ_3 на величину $\|c\| = \max_{x \in \overline{D}} |c(x)|$.

Третье неравенство является следствием оценки

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(y) \frac{\partial \sigma}{\partial y_i} \frac{\partial \sigma}{\partial y_j} &\leq \mu |\operatorname{grad}_y \sigma(y, x)|^2 = \\ &= \mu \frac{|A^{-1}(x)(y - x)|^2}{(A^{-1}(x)(y - x), A(x)A^{-1}(x)(y - x))} \leq \frac{\mu}{\nu} \end{aligned}$$

и второго неравенства.

При $c(x) \equiv 0$ функция $u(x) \equiv 1$ является решением уравнения $Mu(x) = 0$, поэтому

$$1 = u(x) = \int_{T(x)} p_1(x, y) u(y) dy = \int_{T(x)} p_1(x, y) dy,$$

следовательно, $p_1(x, y)$ — плотность распределения по переменной y . В силу леммы 2

$$\begin{aligned} \int_{T(x)} p_4(x, y) dy &= \sigma_n \sqrt{\det(A(x))} \int_0^R E p_4(x, x + r\Omega) r^{n-1} dr = \\ &= \frac{1}{q(R)} \int_0^R p(r) dr = 1, \end{aligned}$$

поэтому $p_4(x, y)$ — плотность распределения по переменной y .

Для получения следующей точки Y марковской цепи по текущей X

- 1) моделируем Y с плотностью $p_1(X, y)$;
- 2) моделируем случайную величину α , распределенную равномерно на $[0, 1]$;
- 3) если $\alpha p_1(X, Y) < p(X, Y)$, то переход осуществляется в точку Y ;
- 4) если $\alpha p_1(X, Y) \geq p(X, Y)$, то переход осуществляется в поглощающее состояние.

Неравенства (П.4.2) позволяют использовать для моделирования точки Y метод отбора. В каждом конкретном случае выбирается своя мажоранта. Опишем процедуру моделирования Y с помощью мажоранты $p_3(x, y)$. Пусть функция $next(x)$ возвращает реализацию случайной величины Z с плотностью распределения $p_4(x, z)$, тогда величина Y , имеющая плотность $p_1(X, y)$, реализуется в цикле

repeat
 $Y := next(X);$
 $\alpha := random;$
until $\alpha p_3(X, Y) < p_1(X, Y);$

Эффективность данной процедуры равна $\nu/(2\mu)$ и может оказаться весьма низкой. Примеры более эффективных процедур моделирования Y имеются в [8].

Отметим, что в силу леммы 2 вектор $Z = X + r\sqrt{A(X)}\Omega_1$ имеет плотность распределения $p_4(X, z)$, если r распределено на $[0, R]$ с плотностью $p(\rho)/q(R)$, а Ω_1 — изотропный вектор. Аналогичная формула $Y = X + r\sqrt{A(X)}\Omega_1$ верна и для моделирования случайного вектора Y с плотностью $\mathcal{L}(y, x)/h(x)$, но теперь величина r распределено на $[0, R]$ с плотностью

$$\tilde{p}(r) = \frac{r^{n-1}}{h(x)} \int_r^R (r^{2-n} - \rho^{2-n}) p(\rho) d\rho.$$

П.4.3. Моделирование величины Z_1 для внешней задачи Дирихле

Удобнее моделировать не Z_1 , а случайную величину $T = (1 + Z_1)/2$, которая имеет на $[0, 1]$ плотность

$$p_1(t) = \frac{|x|^{n-2}(|x|^2 - \rho^2)}{(|x| + \rho)^n} \frac{\sigma_{n-1}}{\sigma_n} 2^{n-2} \frac{t^{(n-3)/2}(1-t)^{(n-3)/2}}{(1-at)^{n/2}}, \quad (\text{П.4.3})$$

где $a = 4\rho|x|/(|x| + \rho)^2$. Разлагая $(1-at)^{-n/2}$ в ряд по степеням t , получаем для $p_1(t)$ выражение

$$p_1(t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k p_{k+(n-1)/2, (n-1)/2}(t),$$

где $p_{m,l}(t)$ — плотность бета-распределения с параметрами m, l . Коэффициенты вычисляются по формулам

$$a_{k+1} = a_k a \frac{(n+2k)(n+2k-1)}{4(k+1)(n+k-1)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

$$a_0 = \frac{|x|^{n-2}(|x|^2 - \rho^2)}{(|x| + \rho)^n}.$$

Коэффициенты a_k неотрицательны, и $\sum_{k=0}^{\infty} a_k = 1$.

Формула (П.4.3) показывает, что случайную величину T следует моделировать методом суперпозиции.

1. Выбираем случайный номер K , распределение которого задается коэффициентами a_k , т. е.

$$P(K = k) = a_k.$$

2. Моделируем плотность

$$p_{K+\frac{n-1}{2}, \frac{n-1}{2}}(t).$$

Полученная таким образом случайная величина будет иметь требуемое распределение.

Если $n = 3$, то можно явно вычислить функцию распределения для Z_1 :

$$F(z_1) = \frac{|x|^2 - \rho^2}{2\rho} \left((|x|^2 + \rho^2 - 2|x|\rho z_1)^{-1/2} - (|x| + \rho)^{-1} \right). \quad (\text{П.4.4})$$

Отсюда по формуле обращения получается моделирующая формула

$$Z_1 = \frac{|x|^2 + \rho^2 - \left(\frac{|x|^2 - \rho^2}{|x| - \rho + 2\alpha\rho} \right)^2}{2|x|\rho}. \quad (\text{П.4.5})$$

Здесь α распределено равномерно на $[0, 1]$. Отметим, что коэффициенты a_k убывают со скоростью геометрической прогрессии, так как

$$a \leq \frac{4\rho\rho_1}{\rho^2 + \rho_1^2} < 1.$$

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Heinrich S.* Multilevel Monte Carlo Methods // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 2179. 2001. P. 58–67.
- [2] *Giles M. B.* Multi-Level Monte Carlo Path Simulation // Operations Research. Vol. 56(3). 2008. P. 607–617.
- [3] *Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967.
- [4] *Сабельфельд К. К.* Методы Монте-Карло в краевых задачах. Новосибирск: Наука, 1989.
- [5] *Симонов Н. А.* Стохастические итерационные методы решения уравнений параболического типа // Сиб. матем. журн. 1997. Т. 38:5. С. 1146–1162.
- [6] *Ермаков С. М., Михайлов Г. А.* Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
- [7] *Сипин А. С.* Блуждание по цилиндрам для параболических уравнений // Математические модели. Теория и приложения. Сборник научных статей под ред. проф. М. К. Чиркова. Вып. 11. С. 83–103. СПб.: Изд-во ВВМ, 2010.
- [8] *Ермаков С. М., Некруткин В. В., Сипин А. С.* Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. М.: Наука, 1984.
- [9] *Меер П. А.* Вероятность и потенциалы. М.: Мир, 1973.
- [10] *Курбанмурадов О. А., Сабельфельд К. К., Симонов Н. А.* Алгоритмы случайного блуждания по границе. Новосибирск, 1989.
- [11] *Михлин С. Г.* Линейные уравнения в частных производных. М.: Высшая школа, 1977.
- [12] *Doob J. L.* Discrete potential theory and boundaries // J. Math. Mech. Vol. 8,3. 1959. P. 433–458.
- [13] *Купцов Л. П.* Свойства среднего и принцип максимума для параболических уравнений второго порядка // ДАН СССР. 1978. Т. 242, № 3. С. 56–59.
- [14] *Тихонов А. Н.* О функциональных уравнениях типа Volterra и их применениях к некоторым задачам математической физики // Бюлл. МГУ. Секция А. Сер. матем. и мех. 1938. Т. 1. Вып. 8. С. 1–25.
- [15] *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977.

- [16] *Iverson R. B., Le Coz L. Y.* A floating random-walk algorithm for extracting electrical capacitance // *Mathematics and Computers in Simulation*. 2001. N 55. P. 59–66.
- [17] *Миранда К.* Уравнения с частными производными эллиптического типа. М.: ИЛ, 1957.
- [18] *Сипин А. С. Богданов И. И.* Блуждание по цилиндрам для уравнения теплопроводности // *Математические модели. Теория и приложения. Сборник научных статей под ред. проф. М. К. Чиркова*. Вып. 13. 2012. С. 25–36. СПб.: Изд-во ВВМ НИИХ СПбГУ.
- [19] *Сипин А. С.* Об особенностях применения схемы Неймана–Улама к решению краевых задач // *Математические модели. Теория и приложения. Сборник научных статей под ред. проф. М. К. Чиркова*. Вып. 13. 2012. С. 37–47. СПб.: Изд-во ВВМ НИИХ СПбГУ.
- [20] *Сипин А. С.* Решение первой краевой задачи для уравнения эллиптического типа методом Монте-Карло // *Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике*. Новосибирск, 1976. С. 129–135.
- [21] *Сипин А. С.* Процессы блуждания внутри области и их применение к решению краевых задач // *Международная конференция «Тихонов и современная математика», тезисы докладов секции «Вычислительная математика и информатика»*. Москва, 2006. С. 113–114.
- [22] *Сипин А. С.* Статистические алгоритмы решения задачи Коши для параболических уравнений второго порядка // *Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1*. 2011. Вып. 3. С. 65–74.
- [23] *Сипин А. С.* Статистические алгоритмы решения задачи Коши для параболических уравнений второго порядка. «Сопряженная схема» // *Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1*. 2012. Вып. 1. С. 57–67.
- [24] *Сипин А. С.* Решение двух краевых задач Дирихле методом Монте-Карло // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* Вып. 19:2. 1979. С. 388–401.
- [25] *Кузнецов А. Н.* Решение некоторых задач математической физики методами Монте-Карло. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Вологда, 2012.
- [26] *Кузнецов А. Н., Сипин А. С.* Универсальный алгоритм расчета электростатических емкостей системы проводников методом Монте-Карло // *Матем. моделирование*. Вып. 21:3. 2009. С. 41–52.
- [27] *Кузнецов А. Н., Сипин А. С.* Статистические оценки для степеней оператора Грина // *Вестн. Самарского гос. технич. ун-та. Серия: Физико-математические науки 2.0*. 2009. С. 114–123.
- [28] *Кузнецов А. Н., Рытенкова И. А., Сипин А. С.* Оценки методом Монте-Карло итераций оператора Грина и собственных чисел первой краевой задачи для оператора Лапласа // *Вестн. Самарского гос. технич. ун-та. Серия: Физико-математические науки 4.0*. 2011. С. 82–92.

- [29] *Симонов Н. А.* Методы Монте-Карло для решения эллиптических уравнений с граничными условиями, включающими в себя нормальную производную // ДАН. 2006. Т. 410, № 2. С. 1–4.
- [30] *Симонов Н. А.* Алгоритмы случайного блуждания по сферам для решения смешанной краевой задачи и задачи Неймана // Сибирский журнал вычислительной математики. 2007. Т. 10, № 2. С. 209–220.
- [31] *Смайт В.* Электростатика и электродинамика. Перевод со второго американского издания. М.: Изд-во иностранной литературы, 1954.
- [32] *Ермаков С. М., Сипин А. С.* Процесс «блуждания по полусферам» и его применение к решению краевых задач // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1. 2009. Вып. 3. С. 9–18.
- [33] *Дынкин Е. Б., Юшкевич А. А.* Теоремы и задачи о процессах Маркова. М.: Наука, 1967. 232 с.
- [34] *Ермаков С. М., Сипин А. С.* Новая схема метода Монте-Карло для решения задач математической физики // Докл. АН СССР. Т. 285. № 3. 1985.
- [35] *Сипин А. С.* Решение первой краевой задачи для уравнения эллиптического типа методом Монте-Карло // Методы Монте-Карло в вычислит. математике и мат. физике. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1976. С. 113–119.
- [36] *Сипин А. С.* О решении задачи Неймана методом Монте-Карло // Методы Монте-Карло в вычислит. математике и мат. физике. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1976. С. 129–135.
- [37] *Ermakov S. M., Nekrutkin V. V., Sipin A. S.* Random Processes for Classical Equations of Mathematical Physics. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1989.
- [38] *Мишустин Б. А.* О решении задачи Дирихле для уравнения Лапласа методом статистических испытаний // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1967. Вып. 7, № 5. С. 1179–1188.
- [39] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. (Серия «Теоретическая физика», том VIII). Изд. 2-е, перераб. и доп. М.: Наука, 1982.
- [40] *Гюнтер Н. М.* Теория потенциала и ее применение к основным задачам математической физики. М.: Гостехиздат, 1953.
- [41] *Невельсон М. Б., Хасьминский Р. З.* Стохастическая аппроксимация и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1972.
- [42] *Бочек И. А.* О вычислении коэффициентов Ритца и Галеркина методом Монте-Карло // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1967. Вып. 7, № 1. С. 172–177.
- [43] *Wagner W.* Unbiased Monte Carlo estimators for functionals of weak solutions of stochastic differential equations // Preprint P-MATH-30/87. 1987. Karl-Weierstrass-institut für Mathematik, Berlin.

- [44] *Wagner W.* Unbiased Monte Carlo evaluation of certain functional integrals // J. Comput. Phys. Vol. 71. 1987. P. 21–33.
- [45] *Wagner W.* Undiased monte carlo estimators for functionals of weak solutions of stochastic diffretial equations // Stochastics and Stochastic Reports. 1989. Vol. 28:1. P. 1–20.
- [46] *Wagner W.* Unbiased Multi-step Estimators for the Monte Carlo Evaluation of Certain Functional Integrals // Journal of computational physics. 1988. Vol. 79. P. 336–352.
- [47] *Wagner W.* Monte Carlo evaluation of functionals of solutions of stochastic differential equations. Variance reduction and numerical examples // Stochastic analysis and applications. 1988. Vol. 6(4). P. 447–468.

ПОСЛЕСЛОВИЕ

Заинтересованный читатель, прочитав или просто пролистав эту книгу, вероятно, захочет войти в интернет и набрать слова «Метод Монте-Карло». Он обнаружит, что имеется много методов Монте-Карло, как например: Markov Chain Monte Carlo (MCMC), Multi Level Monte Carlo (MLMC), Весовой метод Монте-Карло, метод квази Монте-Карло (MQMC) и др.

Полезно пояснить, с каким методом Монте-Карло имели дело авторы. Они имели дело просто с методом Монте-Карло, который, как известно, основан на численных методах моделирования распределений. Если моделируется цепь Маркова, а тем более, используется метод Метрополиса, тогда это MCMC. MLMC использует свойства гладкости функций для уменьшения вычислительной работы при использовании непараметрических оценок кривых (поверхностей). Сравните этот метод с методами, использующими функции класса Φ_m (стр. 39). Весовые методы — это, как правило, использование производной Радона—Никодима. Наиболее просто и красиво обстоит дело, когда вес совпадает с этой производной «истинной» меры по отношению к выбранной «фиктивной» (стр. 35). Наконец, методы квази Монте-Карло — это совсем не Монте-Карло. Некоторые основные особенности MQMC освещены в главе 3.

Благодаря современным возможностям интернета можно не приводить длиннейший список литературы, посвященной упомянутым модификациям МК-метода.

И еще несколько слов собственно о книге. Когда книга написана и уже немного полежала, она обычно перестаёт нравиться авторам. Возможно, и читатель подумает, что она местами сложновата и несколько разнородна.

Параметрическая разделимость алгоритмов, которой так много внимания уделяется в первой части книги, — это, в известной степени, синоним параллелизма. Очевидно, что для всякого алгоритма, допускающего распараллеливание, можно определить соответствующий разделяющий параметр. Имелось в виду, что для ПР-алгоритмов параметрическое множество задаётся явно и в удобной форме.

Интересной оказывается связь между ПР-свойствами и представимостью решения задачи в виде интеграла (может быть непрерывно-

го). Наличие этой связи позволяет изучать свойства параллелизма широкого класса алгоритмов и даже получать оценки возможного числа независимых процессоров, которые можно привлечь к решению задачи (при изучении стохастической устойчивости алгоритмов).

Представляется, что результаты такого рода будут весьма полезны в связи с бурным развитием современной вычислительной техники.

Если в первой части упомянутые выше вопросы доминировали, иногда в ущерб общности изложения (рассматривались лишь дискретные аналоги векторных задач и т. п.), то вторая часть устроена прямо противоположным образом. В этой части рассмотрен ряд задач математической физики в достаточно общей постановке — изучаются представления решений уравнений в частных производных с переменными коэффициентами в виде интегралов по траекториям случайных процессов. Возможность такого представления строго обосновывается, и строятся соответствующие алгоритмы. Вопрос о параллелизме даже не обсуждается. Представление в виде интегралов обеспечивает ПР-свойство.

Благодаря контрасту такого рода читатель может получить достаточно полное представление о некоторой части математического аппарата, используемого для конструирования и обоснования метода Монте-Карло. Безусловно, речь идет лишь о некоторой части, ибо не затрагивались теоретико-числовые методы, методы анализа сложности алгоритмов и методы исследования уравнений, описывающих процессы переноса излучения, газовой динамики, теории упругости и др.

Как известно, никто необъятное объять не может и разумно ограничиться теми вопросами, которыми авторы сами занимались.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Δ^2 -распределение, 23
Американский опцион, 65
Центральная предельная теорема, 9, 12
Дискрепанс, 55
Экранировка
 электростатическая, 211
Эллиптическое уравнение, 180
 первая краевая задача, 184
 интегральное представление решения, 192
 несмещенные оценки решения, 193
Формула
 Грина, 211
 вторая, 96
 Пуссона, 212
Функция
 Грина, 182
 Леви, 171, 182, 187, 189, 192
Класс функций Φ_m , 39
Конструктивная размерность, 54
Краевые задачи для оператора Лапласа, 193
 задача Дирихле
 в многограннике, 195
 вычислительные эксперименты, 203, 204
 внешняя, 205
 задача с разрывом нормальной производной, 199
 задача со смешанными граничными условиями, 201
Лемма Сю, 10
Линейные интегральные уравнения, 32
Метод
 Метрополиса, 21
 Монте-Карло, 91
 бессеточный, 91
 многосеточный, 91
Ньютона, 62
композиции, 19
квази Монте-Карло, 51, 57
мажорант, 19
случайных блужданий, 91
случайного поиска, 28
стохастической аппроксимации, 223
существенной выборки, 31
Минимизация дисперсии, 32, 35, 45
Моделирование
 бета распределения, 232
 гамма распределения, 231
 изотропного вектора
 в полупространстве, 230
 в пространстве, 229
Моделирование блуждания
 по эллипсоидам, 234
 по сферам, 233
 для внешней задачи Дирихле, 236
Моделирование дискретных распределений, 14
 метод Уокера, 16
Несмещенные оценки решений уравнений, 34
Оператор
 дифференциальный
 формально сопряженный, 96, 181
ПР-алгоритмы, 6
Параболическое уравнение, 93
 дискретизация времени, 169
 фундаментальное решение, 94
 интегральное представление, 94
 постоянные коэффициенты, 95
 интегральное представление решения, 96, 100, 166
 в цилиндре, 100
 в шароиде, 105, 107, 108
 первая краевая задача, 144
 несмещенные оценки решения, 149, 162, 165, 169
 разностно-интегральные уравнения, 171
 с переменными коэффициентами, 155
 с постоянными коэффициентами, 145, 151
Параллелизм, 48, 65, 79
Параметрикс, 182
Полиномиальная нелинейность, 60
Псевдослучайные числа, 8
Равномерно распределенные последовательности, 9
Равномерное распределение в области, 18

- Разностные схемы, 49
- СГСЭ, 209
- Сфероид, 105
- Схема Неймана—Улама, 223
 - для краевых задач
 - дисперсия несмещенных оценок, 115
 - интегральное уравнение, 109
 - несмещенные оценки, 110
 - свойства траекторий цепи Маркова, 110
 - для задачи Коши, 122
- Случайные квадратурные формулы, 32
- Случайное блуждание
 - по цилиндрам, 114, 149, 162
 - по эллипсоидам, 112, 188
 - по полусферам, 194, 195
 - моделирование, 198
 - по сферам, 112, 186
 - оценка ёмкостей, 215
 - по сферам и границе области, 202
 - по сферам и полусферам, 207
 - по сферам и шарам, 187
 - по сфероидам, 113, 152
 - по шароидам, 166, 168
- Спектр линейного оператора, 75
- Стохастическая устойчивость, 41, 73
- Субстохастическое ядро, 109
 - эксцессивная функция, 110
 - инвариантная функция, 110
 - потенциал, 110
- Шароид, 105
- Трудоемкость, 48
- Ветвление траекторий, 46
- Вычисление интегралов, 30
- Выделение главной части
 - интегрального оператора, 218
 - уравнений теории потенциала, 227
- Ёмкостной коэффициент, 211
 - собственный, 211
- Ёмкость
 - уединённого проводника, 210
 - взаимная, 211
- Задача Неймана
 - для уравнения Пуассона, 216
 - внешняя, 221
- Задача Коши, 118
 - для уравнений с дифференцируемыми коэффициентами, 138
 - интегральное представление решения, 103, 120
 - несмещенные оценки функционалов
 - дисперсия, 136
 - прямая схема, 129
 - сопряженная схема, 129, 134, 136
 - несмещенные оценки решения, 121, 124, 125
- Задача Неймана
 - для уравнения Пуассона
 - внутренняя, 218
- Задача Стефана—Больцмана
 - интегральное уравнение, 174
 - несмещенная оценка решения
 - линейный случай, 179
 - нелинейный случай, 179
- Задача Стефана—Больцмана, 174
 - несмещенная оценка решения
 - линейный случай, 177
- Задача электростатики
 - основная
 - обратная постановка, 210
 - прямая постановка, 209
- Закон больших чисел, 12
- ВВР-алгоритмы, 6
- D-оптимальный план, 23

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	3
ЧАСТЬ I. ПАРАМЕТРИЧЕСКИ РАЗДЕЛИМЫЕ АЛГОРИТМЫ	
Введение	5
Глава 1. Моделирование распределений	8
1.1. Параметрическое множество метода Монте-Карло	—
1.2. Моделирование неравномерных распределений	13
1.3. Примеры	22
Глава 2. Интегралы и линейные уравнения	30
2.1. Вычисление интегралов	—
2.2. Линейные интегральные уравнения	32
Глава 3. Стохастическая устойчивость и метод квази Монте-Карло	41
3.1. Стохастическая устойчивость	—
3.2. Метод квази Монте-Карло	51
Глава 4. Нелинейные задачи	60
4.1. Теоретические основы. Параллелизм	—
4.2. Примеры	65
Литература	87
ЧАСТЬ II. МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (БЕССЕТОЧНЫЕ МЕТОДЫ)	
Введение	91
Глава 5. Статистические алгоритмы решения краевых задач для параболистических уравнений второго порядка	93
5.1. Необходимые сведения о параболических уравнениях	—
5.1.1. Фундаментальное решение параболического уравнения	94
5.1.2. Формально-сопряженный оператор и формулы Грина	96
5.1.3. Представление решения параболического уравнения в цилиндре	100
5.1.4. Интегральное представление решения задачи Коши ..	103
5.1.5. Представление решения параболического уравнения в шароиде	105
5.2. Применение схемы Неймана—Улама к решению краевых за- дач	109
5.2.1. Свойства траекторий цепи Маркова	110
5.2.2. Статистические оценки	115
5.3. Задача Коши	118
5.3.1. Несмещенные оценки решения задачи Коши	120
5.3.2. Определение постоянных s и C	126
5.3.3. Оценка функционалов	129
5.3.4. Задача Коши для уравнений с дифференцируемыми коэффициентами	138
5.4. Первая краевая задача в ограниченной области	144
5.4.1. Блуждание по цилиндрам для уравнения с постоянны- ми коэффициентами	145
5.4.2. Блуждание по сфероидам для уравнения с постоянны- ми коэффициентами	151

5.4.3. Блуждание по цилиндрам для уравнения с переменными коэффициентами	155
5.4.4. Блуждание по шароидам для уравнения с переменным коэффициентом при неизвестной функции	166
5.4.5. Алгоритмы, связанные с дискретизацией времени	169
5.5. Одна нелинейная краевая задача	173
Глава 6. Статистические алгоритмы решения краевых задач для эллиптических уравнений второго порядка	180
6.1. Необходимые сведения об эллиптических уравнениях	—
6.1.1. Фундаментальное решение и функции Леви	181
6.2. Первая краевая задача для эллиптического оператора	184
6.2.1. Блуждание по эллипсоидам	188
6.3. Краевые задачи для оператора Лапласа	193
6.3.1. Блуждания по полусферам	194
6.3.2. Внешняя задача Дирихле для уравнения Лапласа	205
6.3.3. Вычисление электростатических емкостей	209
6.3.4. Задача Неймана для уравнения Пуассона	216
6.4. О сочетании схемы Неймана—Улама и метода стохастической аппроксимации	223
6.4.1. Выделение главной части для уравнений теории потенциала	227
Приложение. Алгоритмы моделирования некоторых распределений	229
П.1. Моделирование изотропного вектора в R^n	—
П.1.1. Изотропный вектор в пространстве	—
П.1.2. Изотропный вектор в полупространстве	230
П.1.3. Неравномерное распределение на эллипсоиде	—
П.2. Гамма и бета распределение	231
П.3. Краевые задачи для параболического уравнения	233
П.3.1. Моделирование геометрического распределения	—
П.4. Первая краевая задача для эллиптического уравнения	—
П.4.1. Моделирование величины ρ в блуждании по сферам .	—
П.4.2. Моделирование блуждания по эллипсоидам	234
П.4.3. Моделирование величины Z_1 для внешней задачи Дирихле	236
Литература	238
Послесловие	242
Предметный указатель	244

Научное издание

*Сергей Михайлович Ермаков,
Александр Степанович Сипин*

**МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО
И ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ РАЗДЕЛИМОСТЬ АЛГОРИТМОВ**

Редактор *Т. В. Семёнова*
Компьютерная верстка *А. М. Вейшторт*

Подписано в печать 05.12.2014. Формат $60 \times 90^{1/16}$. Бумага офсетная.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 15,5. Тираж 300 экз. Заказ № 201

Издательство СПбГУ. 199004, С.-Петербург, В. О., 6-я линия, 11/21

Тел./факс (812) 328-44-22

E-mail: info@unipress.ru www.unipress.ru

Типография Издательства СПбГУ.
199061, С.-Петербург, Средний пр., 41