ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 2, с. 249–254

УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

УДК 519.245, 519.632.4

СТОХАСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ПЕРВОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА С РАЗРЫВНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ[1)]

А. Н. Кузнецов[1,*], А. С. Сипин[1,]**

[1] 160000 Вологда, ул. Ленина, 15, Вологодский государственный университет, Россия

*e-mail: pm_kan@mail.ru

**e-mail: cac1909@mail.ru

Поступила в редакцию 11.02.2021 г.
Переработанный вариант 23.06.2021 г.
Принята к публикации 12.10.2021 г.

Рассматриваются стохастические алгоритмы решения первой краевой задачи для эллиптического уравнения второго порядка, коэффициенты которого имеют разрыв на гладкой поверхности. Предполагаются непрерывность решения и согласованность его нормальных производных с разных сторон поверхности разрыва коэффициентов. Предложена и доказана формула среднего значения в шаре (или эллипсоиде), которая позволяет определить случайное блуждание внутри области и статистические оценки (на его траекториях) для определения решения краевой задачи в начальной точке блуждания методом Монте-Карло. Библ. 7.

Ключевые слова: эллиптический оператор, краевая задача, формула среднего значения, случайное блуждание, стохастический алгоритм, несмещенная оценка.

DOI: 10.31857/S0044466922020107

ВВЕДЕНИЕ

Для решения краевых задач используются различные численные методы, в том числе методы статистического моделирования, т.е. методы Монте-Карло (см., например, [1], [2]). Разработаны эффективные процедуры статистического моделирования для решения уравнений переноса излучения, уравнений газовой динамики, ряда задач в области электростатики, теории упругости и др. Статистические алгоритмы позволяют решать краевые задачи как внутри, так и вне ограниченной области, граница которой может иметь сложную структуру. Для широкого класса задач вычислительная работа в таких алгоритмах линейно зависит от размерности области.

При построении статистического алгоритма решение краевой задачи записывается в виде математического ожидания некоторой случайной величины ξ, т.е. случайная величина ξ является несмещенной оценкой решения задачи. Обычно несмещенные оценки для решения краевых задач строятся на траекториях марковского случайного процесса с дискретным временем (случайного блуждания). Само случайное блуждание происходит в замкнутой ограниченной области $D \subset \mathbb{R}^m$, в которой решается краевая задача. Вероятность перехода $P(x, A)$ из точки $x \in D$ в множество $A \subset D$ является субстохастическим ядром. Исходная краевая задача при этом заменяется эквивалентным ей интегральным уравнением в пространстве непрерывных функций $C(D)$:

$$u(x) = \int_D P(x, dy)u(y) + F(x), \qquad x \in D, \tag{0.1}$$

где правая часть $F(x)$ уравнения (0.1) определяется через правую часть дифференциального уравнения и граничные условия. Пусть $x(0) = x, x(1), x(2), \ldots$ — цепь Маркова с переходными вероятностями $P(x, B)$. Вообще говоря, это обрывающаяся цепь. На траекториях цепи стандартным образом строится последовательность $\xi(n)$, $n = 0, 1, \ldots$, несмещенных оценок для $u(x)$. Пусть N — мо-

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 19-11-00020).

мент обрыва цепи ($N = \infty$, если цепь не обрывается), $N \wedge n$ — минимум из N и n, $\eta(i)$ — несмещенная оценка для $F(x(i))$, тогда

$$\xi(n) = u(x(N \wedge n)) + \sum_{i=0}^{N \wedge n-1} \eta(i), \quad n = 1, 2, \ldots. \tag{0.2}$$

Из марковского свойства цепи и уравнения (0.1) следует

Лемма 1. *Пусть* $F(x) \ge 0$, $u(x)$ *— ограниченное решение уравнения* (0.1) *и оценки* $\eta(i)$ *неотрицательны. Тогда последовательность несмещенных оценок* (0.2) *образует мартингал. Если он равномерно интегрируемый, то он сходится с вероятностью* 1 *к случайной величине* $\xi(\infty)$*, имеющей конечное математическое ожидание. Для любого марковского момента* τ *случайная величина* $\xi(\tau)$ *является несмещенной оценкой* $u(x)$.

Поведение траекторий процесса характеризует

Лемма 2. *Пусть координатные функции* x_i, $i = 1, 2, \ldots m$, *являются супергармоническими для ядра* $P(x, A)$*, тогда цепь* $x(n)$ *сходится с вероятностью* 1 *к некоторому случайному вектору* $x(\infty)$.

Доказательство лемм можно найти в [3]. При этом мы пользуемся терминологией и результатами из книги П. Мейера [4]. Вектор $x(\infty)$, как правило, распределен на границе области D. В качестве марковского момента τ обычно выбирается момент первого попадания траектории блуждания в ε-окрестность границы области D.

Интегральное уравнение (0.1) обычно получают по формуле Грина, используя функцию Грина или функцию Леви для семейства областей $T(x) \subset D$, $x \in D$. При этом носителем меры $P(x, A)$ будет либо граница области, либо сама область $T(x)$. Вид носителя меры $P(x, A)$ определяет название блуждания и название статистического метода решения задачи: *блуждание по сферам, блуждание по шарам, блуждание по эллипсоидам, блуждание по полусферам, блуждание по границе*.

Таким образом, в статье рассматриваются стохастические алгоритмы вычисления значения решения краевой задачи $u(x)$ в точке x ограниченной области по известным значениям этой функции в граничных точках.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ТЕОРЕМЫ О СРЕДНЕМ ЗНАЧЕНИИ

Пусть D — ограниченная область в $\mathbb{R}^m$, $m \ge 3$, с границей Γ, которая состоит из двух подобластей D_1, D_2 и их общей кусочно-гладкой границы γ. Для функций $u \in C^2(D_1 \cup D_2) \cap C(\bar{D})$ определим оператор M равенством

$$Mu = \sum_{i,j=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_j}\left(a_{ij}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}u\right), \tag{1.1}$$

где матрица $\|a_{i,k}(x)\|_{i,k=1}^m$ — симметричная, а ее элементы $a_{i,k} \in C^1(D_1 \cup D_2)$, причем их производные первого порядка непрерывны вплоть до границы в каждой подобласти. Предположим также, что матрица коэффициентов — положительно-определенная, т.е. для некоторой постоянной $\nu > 0$ при всех $x \in D$ и всех $z \in \mathbb{R}^m$ справедливо неравенство

$$\sum_{i,j=1}^{m} a_{ij} z_i z_j \ge \nu \|z\|.$$

Таким образом, M — эллиптический оператор.

Рассмотрим краевую задачу

$$Mu(x) = 0, \quad x \in D_1 \cup D_2, \tag{1.2}$$

$$\lim_{y \in D_1, y \to x} \sum_{i,j=1}^{m} n_i(x) a_{ij}(y) \frac{\partial}{\partial y_j} u(y) = \lim_{y \in D_2, y \to x} \sum_{i,j=1}^{m} n_i(x) a_{ij}(y) \frac{\partial}{\partial y_j} u(y), \quad x \in \gamma, \tag{1.3}$$

где $n(x) = (n_1(x), \ldots, n_m(x))$ — внешняя нормаль к границе области D_1. На внешней границе области D функция $u(x)$ известна и равна $\varphi(x)$.

Практически важным примером поставленной задачи является задача для уравнения

$$\operatorname{div}(\varepsilon(x)\operatorname{grad}u(x)) = 0, \quad x \in D_1 \cup D_2, \tag{1.4}$$

с условиями согласования нормальных производных

$$\lim_{y\in D_1, y\to x} \varepsilon_1(y)\frac{\partial}{\partial n}u(y) = \lim_{y\in D_2, y\to x} \varepsilon_2(y)\frac{\partial}{\partial n}u(y), \quad x \in \gamma. \tag{1.5}$$

Функции $\varepsilon_1(y)$ и $\varepsilon_2(y)$ предполагаются ограниченными снизу постоянной $\nu > 0$ и непрерывно дифференцируемыми в $\bar{D}_1$ и $\bar{D}_2$ соответственно.

В случае, когда функции $\varepsilon_1(y)$ и $\varepsilon_2(y)$ являются различными положительными постоянными ε_1 и ε_2 и граница раздела сред плоская, несмещенные оценки решения задачи (1.4), (1.5) построены в [3]. Аналогичные, но смещенные оценки, в областях с произвольной границей построены в работах Н.А. Симонова (см. [5], [6]).

Для построения несмещенных и малосмещенных оценок поставленной краевой задачи (1.4), (1.5) с переменными коэффициентами нам потребуется представление решения $u(x)$ для точек $x \in \gamma$ в интегральной форме. Для этого мы воспользуемся формулами Грина для подобласти T с кусочно-гладкой границей, расположенной в $\bar{D}_1$ или $\bar{D}_2$:

$$\int_T (v(y)Mu(y) - u(y)Mv(y))\,dy = \int_{\partial T} \varepsilon(y)\left(v(y)\frac{\partial u(y)}{\partial n} - u(y)\frac{\partial v(y)}{\partial n}\right)d_yS,$$

справедливой для $u, v \in C^2(T) \cap C(\bar{T})$. Нормаль в этой формуле внешняя по отношению к области.

Пусть граница γ гладкая в окрестности $x \in \gamma$. Рассмотрим шар $T(x) \subset D$ с центром в точке x и радиуса $R = R(x)$. Рассмотрим два его полушара $T_1(x) = T(x) \cap D_1$ и $T_2(x) = T(x) \cap D_2$ и шар T_δ с центром в точке x и радиуса δ. В качестве функции $v(y)$ рассмотрим функцию Леви

$$\mathcal{L}(y, x) = \int_r^R \left(\frac{1}{r^{m-2}} - \frac{1}{\rho^{m-2}}\right)d\rho,$$

где $r = |y - x|$ – расстояние между точками x и y. Применяя формулу Грина к области $T = T_1 \backslash T_\delta$, при $\delta \to 0$ получаем вторую формулу Грина

$$-\int_{T_1} u(y)Mv(y)dy = \int_{\partial T_1} \varepsilon_1(y)\left(v(y)\frac{\partial u(y)}{\partial n} - u(y)\frac{\partial v(y)}{\partial n}\right)d_yS - \sigma_m R(m-2)\varepsilon_1(x)u(x), \tag{1.6}$$

в которой σ_m обозначает “площадь поверхности” единичной сферы в $\mathbb{R}^m$. Аналогично получаем вторую формулу Грина для области T_2

$$-\int_{T_2} u(y)Mv(y)dy = \int_{\partial T_2} \varepsilon_2(y)\left(v(y)\frac{\partial u(y)}{\partial n} - u(y)\frac{\partial v(y)}{\partial n}\right)d_yS - \sigma_m R(m-2)\varepsilon_2(x)u(x).$$

Заметим, что

$$\operatorname{grad}(v(y)) = (R - r)\operatorname{grad}(r^{2-m}) = (R - r)(2 - m)r^{-m}(y - x)$$

равен нулю на сферической части границы, сама функция $v(y)$ – тоже. Пусть $\gamma(x) = T(x) \cap \gamma$ – часть границы γ, лежащая в шаре. Упрощая формулы, получаем равенства

$$-\int_{T_1} u(y)Mv(y)dy = \int_{\gamma(x)} \varepsilon_1(y)\left(v(y)\frac{\partial u(y)}{\partial n} - u(y)\frac{\partial v(y)}{\partial n}\right)d_yS - \frac{\sigma_m}{2}R(m-2)\varepsilon_1(x)u(x),$$

$$-\int_{T_2} u(y)Mv(y)dy = \int_{\gamma(x)} \varepsilon_2(y)\left(v(y)\frac{\partial u(y)}{\partial n} - u(y)\frac{\partial v(y)}{\partial n}\right)d_yS - \frac{\sigma_m}{2}R(m-2)\varepsilon_2(x)u(x).$$

Нормали в этих формулах являются противоположными векторами. При сложении этих формул, используя условие на нормальные производные решения, получаем

$$
\begin{gathered}
-\int_{T_1} u(y)Mv(y)dy - \int_{T_2} u(y)Mv(y)dy = \\
= \int_{\gamma(x)} (\varepsilon_2(y) - \varepsilon_1(y))u(y)\frac{\partial v(y)}{\partial n}d_yS - \frac{\sigma_m}{2}R(m-2)(\varepsilon_1(x) + \varepsilon_2(x))u(x).
\end{gathered} \tag{1.7}
$$

Для плоской границы γ нормальная производная в этих формулах равна нулю. После несложных вычислений находим значение оператора

$$
Mv(y) = \varepsilon(y)(m-2)r^{1-m}[1 - (R-r)(\operatorname{grad}(\ln\varepsilon(y)), \operatorname{grad}(r))]
$$

и получаем формулу среднего значения

$$
\begin{gathered}
u(x) = \frac{2}{R\sigma_m(\varepsilon_1(x) + \varepsilon_2(x))}\left(\int_{T_1} \varepsilon_1(y)r^{1-m}[1 - (R-r)(\operatorname{grad}\ln\varepsilon_1(y), \operatorname{grad} r)]u(y)dy + \right. \\
\left. + \int_{T_2} \varepsilon_2(y)r^{1-m}[1 - (R-r)(\operatorname{grad}(\ln(\varepsilon_2(y)), \operatorname{grad}(r))]u(y)dy\right).
\end{gathered} \tag{1.8}
$$

Отметим, что осредняющее ядро в формуле (1.8) неотрицательно при выполнении условия

$$
R\sup_{y\in D}\left|\operatorname{grad}(\ln(\varepsilon(y))\right| \le 1,
$$

которое справедливо при достаточно малых R в силу сделанных предположений о параметрах краевой задачи. Кроме того, оно стохастическое, так как после подстановки в формулу (1.8) решения краевой задачи $u(x) \equiv 1$ получим, что интеграл от ядра равен единице.

Для точек, не лежащих на границе $\Gamma \cup \gamma$, верны формулы среднего значения в шаре, а именно, справедлива следующая лемма.

Лемма 3. *Если точка $x \in D_1$ и $T(x) \subset D_1$, то*

$$
u(x) = \frac{1}{\sigma_m R(m-2)\varepsilon_1(x)}\int_T u(y)Mv(y)dy, \quad x \in D_1. \tag{1.9}
$$

Аналогично, если $x \in D_2$ и $T(x) \subset D_2$, то

$$
u(x) = \frac{1}{\sigma_m R(m-2)\varepsilon_2(x)}\int_T u(y)Mv(y)dy, \quad x \in D_2. \tag{1.10}
$$

Доказательство леммы непосредственно следует из формулы (1.6) и равенства нулю на границе шара как самой функции $v(y)$, так и ее градиента.

2. СТОХАСТИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ В СЛУЧАЕ ПЛОСКОЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ОБЛАСТИ

В случае переменных ε_1 и ε_2 для построения малосмещенной оценки решения краевой задачи предлагается следующий алгоритм.

1. Задаем призвольное $\delta > 0$, которое будет определять порядок погрешности приближенного решения задачи.

2. Определяем две δ-окрестности границы $\gamma_{1,\delta}$ и $\gamma_{2,\delta}$ как множества точек из D_1 и D_2 соответственно, отстоящих от границы γ не более, чем на δ. Также определяем Γ_δ – окрестность внешней границы.

3. Для каждой точки x из произвольной δ-окрестности границы определяем точку x^* как ближайшую к x точку границы.

4. Фиксируем начальную точку x, для которой будет строиться статистическая оценка $\xi(x)$ для значения $u(x)$ и полагаем $x_0 := x$.

5. Если $x_0 \in \Gamma_\delta$, то полагаем $\xi(x) := \varphi(x^*)$ и останавливаемся.

6. Если $x_0 \in \gamma_{1,\delta}$ или $x_0 \in \gamma_{2,\delta}$, то $x_0 := x_0^*$ и переходим из точки x_0 в точку x_1, распределенную внутри области $T(x_0)$ с плотностью, которая является ядром в формуле (1.8). Полагаем $x_0 := x_1$, переходим к пункту 5.

7. Переходим из точки x_0 в точку x_1, распределенную внутри области $T(x_0)$ с плотностью, которая является ядром в формуле (1.9) или формуле (1.10). Полагаем $x_0 := x_1$, переходим к пункту 5.

Назовем построенное случайное блуждание *блужданием по шарам*. Все переходы в этом блуждании легко моделируются методом отбора. Процедура моделирования подробно описана в [2].

Работоспособность алгоритма обеспечивается следующими его свойствами.

– Блуждание по шарам в области D_1 (в области D_2) достигает ее δ границы за конечное число шагов. При этом среднее число шагов конечно. (Эти свойства доказаны для любого блуждания по эллипсоидам, в том числе и для блуждания по шарам в [2].)

– Среднее число посещений границы блужданием по шарам конечно. Этот факт является очевидным следствием строго марковского свойства блуждания и ограниченности снизу вероятности события, состоящего в том, что процесс попадет впервые в Γ_δ раньше, чем в γ_δ. (Асимптотика этих средних при $\delta \to 0$ конечно важна, но ее удается определить крайне редко.)

Замечание 1. Как известно (см. [3]), в случае постоянных коэффициентов ε_1 и ε_2 для обеспечения выхода блуждания на плоскую границу раздела γ можно использовать обычную функцию Грина для оператора Лапласа в полусфере. В алгоритме блуждания по полусферам существенно меньше смещение статистической оценки, поскольку оно определяется лишь заменой точного значения функции в последней точке блуждания на значение в ближайшей к ней точке границы Γ.

3. СТОХАСТИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ В СЛУЧАЕ ГЛАДКОЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ОБЛАСТИ

В случае гладкой границы γ вместо формулы (1.8) приходится использовать формулу (1.7), которая не имеет вероятностного смысла в связи с присутствием интеграла

$$\int_{\gamma(x)} (\varepsilon_2(y) - \varepsilon_1(y))u(y)\frac{\partial v(y)}{\partial n} d_yS.$$

Чтобы его убрать, нужно его оценить сверху величиной

$$\sup_{y\in\gamma}\left|(\varepsilon_2(y) - \varepsilon_1(y))u(y)\right| \int_{\gamma(x)} \left|\frac{\partial v(y)}{\partial n}\right| d_yS,$$

которая должна быть меньше $\delta\frac{\sigma_m}{2}R(m-2)(\varepsilon_1(x)+\varepsilon_2(x))$. Фактически получается неравенство на величину телесного угла, под которым граница $\gamma(x)$ видна из точки x. Выбор радиуса шара теперь зависит от кривизны поверхности в окрестности точки x. После выбрасывания интеграла получаем формулу

$$u(x) \approx \frac{2}{R\sigma_m(\varepsilon_1(x)+\varepsilon_2(x))}\left(\int_{T_1} \varepsilon_1(y)r^{1-m}[1-(R-r)(\operatorname{grad}\ln\varepsilon_1(y), \operatorname{grad} r)]u(y)dy + \right.$$
$$\left. + \int_{T_2} \varepsilon_2(y)r^{1-m}[1-(R-r)(\operatorname{grad}(\ln(\varepsilon_2(y)), \operatorname{grad}(r))]u(y)dy\right),$$

применение которой позволяет построить статистическую оценку решения $u(x)$.

В случае постоянных ε_1 и ε_2 можно использовать функцию Леви

$$\mathcal{L}(y,x) = \frac{1}{r^{m-2}} - \frac{1}{R^{m-2}}.$$

Тогда получится процесс *блуждания по сферам*.

Замечание 2. Используя формулу (1.6), можно совсем легко построить и обосновать для уравнения (1.4) алгоритм решения задачи со смешанными граничными условиями в областях с кусочно-гладкой границей, на одной части которой задано условие Неймана, а на другой – условие Дирихле. Такие алгоритмы рассматривались для уравнений Пуассона и Лапласа в [3], [5]–[7].

4. ЗАДАЧА ДЛЯ ПРОИЗВОЛЬНОГО ОПЕРАТОРА

Вернемся теперь к задаче для произвольного самосопряженного эллиптического оператора (1.1). Введем необходимые обозначения. Матрицу коэффициентов оператора будем обозначать через $A(x)$, а ее определитель – $|A(x)|$. Рассмотрим квадратичную форму $\sigma^2(y,x) = (y-x)'A^{-1}(x)(y-x)$, где $(y-x)'$ обозначает строку, транспонированную к столбцу $(y-x)$. Для точек $x \in D_1 \cup D_2$ определим функцию $\mathcal{L}(y,x)$ равенством

$$\mathcal{L}(y,x) = \int_{\sigma}^{R} (\sigma^{2-m} - \rho^{2-m}) d\rho.$$

Рассматривая в качестве множеств $T(x)$ области $T(x) = \{y \in D : \sigma^2(y,x) < R^2\}$, можно определить процесс *блуждания по эллипсоидам* и на его траекториях уже описанным методом построить статистические оценки для решения задачи (1.2), (1.3).

Авторы выражают благодарность рецензенту за замечания, способствовавшие улучшению работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sabelfeld K.K.* Monte Carlo methods in boundary value problems. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1991.
2. *Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С.* Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. М.: Наука, 1984. *Ermakov S.M., Nekrutkin V.V., Sipin A.S.* Random processes for classical equations of mathematical physics. Dordrecht/Boston/London: Kluwer Acad. Publ., 1989.
3. *Ермаков С.М., Сипин А.С.* Процесс “блуждания по полусферам” и его применение к решению краевых задач // Вестн. СПбГУ. Сер. 1. 2009. Вып. 3. С. 9–18.
4. *Мейер П.А.* Вероятность и потенциалы. М.: Мир, 1973.
5. *Симонов Н.А.* Методы Монте-Карло для решения эллиптических уравнений с граничными условиями, включающими в себя нормальную производную // Докл. АН. 2006. Т. 410. № 2. С. 1–4.
6. *Симонов Н.А.* Алгоритмы случайного блуждания по сферам для решения смешанной краевой задачи и задачи Неймана // Сиб. журн. вычисл. матем. 2007. Т. 10. № 2. С. 209–220.
7. *Сипин А.С.* О стохастических алгоритмах решения краевых задач для оператора Лапласа // Вероятность и статистика. 23. Зап. научн. сем. ПОМИ. СПб.: ПОМИ, 2015. Т. 442. С. 133–142; *Sipin A.S.* J. Math. Sci. (N.Y.). 2017. V. 225:5. P. 812–817.