Сибирский математический журнал
Сентябрь—октябрь, 2003. Том 44, № 5

УДК 519.245

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ И ОПТИМИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ БЛУЖДАНИЯ ПО РЕШЕТКЕ, ПРИМЕНЯЕМЫХ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА

Е. В. Шкарупа

Аннотация: Рассмотрены алгоритмы блуждания по решетке, применяемые при глобальном решении задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца (прямой и сопряженный методы). В метрике пространства **C** построены верхние границы погрешности и получены оптимальные в смысле верхней границы погрешности значения параметров алгоритмов (числа узлов и объема выборки).

Ключевые слова: методы Монте-Карло, случайные блуждания, уравнение Гельмгольца, функциональные алгоритмы, оценка погрешности, оптимизация.

Введение

Хорошо известно, что методы Монте-Карло позволяют вычислять отдельные функционалы от решений интегральных и дифференциальных уравнений, в том числе значения решений в выбранных точках. Однако в последние годы активно развиваются также подходы к построению и оптимизации алгоритмов метода Монте-Карло для глобального решения уравнений [1–8]. Такие алгоритмы статистического моделирования мы будем называть *функциональными алгоритмами* или *дискретно-стохастическими численными методами* глобальной аппроксимации функций. Эти методы связаны с предварительной дискретизацией задачи (введением сетки), оцениванием решения в узлах сетки методом Монте-Карло с последующим восполнением решения по полученным приближенным значениям в узлах.

Особенностью исследуемых численных процедур является наличие детерминированной и стохастической составляющих погрешности алгоритма, что приводит к некоторым сложностям при исследовании сходимости и оптимизации упомянутых процедур. В частности, возможны различные подходы к выбору вероятностной меры оценки погрешности и критерия оптимальности алгоритма [3, 5]. Наибольшую трудность составляет построение верхних границ для стохастических компонент погрешностей функциональных алгоритмов статистического моделирования. Здесь играют роль как свойства соответствующего восполнения, так и особенности используемых стохастических оценок

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 02–01–00958, 03–01–00040, 03–01–06023-мас), программы НШ–1271.2003.1 и INTAS (YSF 2001/2–53).

значений решения в узлах, а именно зависимые, независимые или слабо зависимые между собой оценки. Построение верхних границ для стохастических компонент погрешностей функциональных численных методов с различными стохастическими оценками в узлах проводилось в работах [4, 5, 7], для нелинейных задач — в [8].

Важной является проблема выбора оптимальных значений параметров дискретно-стохастических численных методов, а именно числа узлов сетки и числа реализаций стохастических оценок в узлах сетки. Здесь используется предложенный в работе [1] подход к оптимизации. Предполагается, что верхняя граница погрешности достаточно точно воспроизводит зависимость этой погрешности от параметров и эта граница приравнивается к заданному уровню погрешности. При этом условии минимизируется функция трудоемкости, аргументами которой являются выбираемые параметры.

С другой стороны, на основе идей Н. С. Бахвалова [9] была построена и развивается теория информационной сложности [10], которая позволяет сравнивать эффективность детерминированных и стохастических алгоритмов решения той или иной задачи. В рамках этой теории в работах [11, 12] были предложены новые многоуровневые методы глобального решения интегральных уравнений второго рода, сочетающие в себе достоинства как детерминированных, так и стохастических методов. В частности, было показано, что с точки зрения теории информационной сложности они оптимальны и дают больший порядок сходимости, чем оптимальные детерминированные. Таким образом, стохастические методы могут конкурировать с детерминированными и при глобальном решении задач. Однако предложенные многоуровневые методы существенно используют при построении гладкость ядра и свободного члена интегрального уравнения, что редко выполняется для задач математической физики, в том числе и для рассматриваемой в данной работе.

1. Постановка задачи

Речь пойдет о функциональных алгоритмах метода Монте-Карло глобального решения задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца, а именно о методах блуждания по решетке [13, 14]. Рассмотрим задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца:

$$\Delta u - cu = -g, \quad u|_\Gamma = \psi \tag{1.1}$$

в области $D \subset \mathbb{R}^d$ с границей Γ, где $c \geq 0$ — постоянный или переменный параметр. Предполагается, что выполнены все условия регулярности функций c, g, ψ и границы Γ, обеспечивающие существование и единственность решения данной задачи.

В области D построим равномерную прямоугольную сетку с шагом h:

$$\{x^{(i)}\}_{i=1}^M \subset \overline{D} = D \cup \Gamma.$$

Для простоты изложения будем предполагать, что все граничные узлы сетки лежат на границе Γ (M пропорционально h^{-d}). Переход к общему случаю не представляет труда, способ аппроксимации граничных условий в этом случае приведен в [13].

В качестве приближения к решению u исходной задачи (1.1) в узлах сетки рассмотрим решение разностной задачи

$$\Delta_h u^h - c^h u^h = -g^h \text{ в } D_h, \quad u^h = \psi^h \text{ на } \Gamma_h, \tag{1.2}$$

где Δ_h — стандартный разностный аналог оператора Лапласа, D_h, Γ_h — множества внутренних и граничных узлов сетки соответственно, u^h — сеточная функция, определенная на $D_h \cup \Gamma_h$, g^h, c^h, ψ^h — значения функций g, c, ψ в узлах сетки. Будем считать, что u^h, g^h, c^h, ψ^h — функции номера узла. Итак, имеем приближение

$$u(x^{(i)}) \approx u^h(i).$$

Разностная задача (1.2) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений:

$$u^h = Au^h + f,$$

которую можно также записать в виде [13, 14]

$$u^h(i) = q_i \sum_{j=1}^{M} p_{ij} u^h(j) + f(i), \tag{1.3}$$

где $i, j \in \{1, \dots, M\}$ — номера узлов сетки. Здесь $p_{ij} = \frac{1}{2d}$, если i — внутренний узел, а j — соседний с ним; $p_{ii} = 1$ для граничных узлов; $p_{ij} = 0$ в остальных случаях,

$$q_i = \begin{cases} \left(1 + \frac{c^h(i)h^2}{2d}\right)^{-1}, & x^{(i)} \in D_h, \\ 0, & x^{(i)} \in \Gamma_h. \end{cases} \tag{1.4}$$

Свободный элемент f определяется соотношением

$$f(i) = \begin{cases} \frac{g^h(i)h^2}{2d + c^h(i)h^2}, & x^{(i)} \in D_h, \\ \psi^h(i), & x^{(i)} \in \Gamma_h. \end{cases}$$

Известно [13], что спектральный радиус матрицы A меньше единицы: $\rho(A) < 1$, поэтому для решения системы (1.3) можно применять метод статистического моделирования. В [13, 14] предложены два статистических алгоритма решения этой системы, основанные на использовании одних и тех же траекторий «блуждания по решетке» для оценки решения сразу во всех узлах: сопряженный и прямой методы.

Сопряженный метод основан на соотношении (в дальнейшем для простоты будем полагать, что $c = \mathrm{const} \geq 0$)

$$u^h(i) = (u^h, \delta_i), \tag{1.5}$$

где δ_i — «индикатор» узла:

$$\delta_i(j) = \begin{cases} 1, & \text{если } i = j, \\ 0, & \text{если } i \neq j. \end{cases}$$

Здесь $(. , .)$ — скалярное произведение,

$$(a, b) = \sum_{i=1}^{M} a(i) b(i).$$

Пусть $k_0, \dots, k_L$ — номера узлов случайной траектории цепи Маркова с начальным распределением p, равномерным в сеточной области $D_h \cup \Gamma_h$ ($p \equiv 1/M$, где M — число узлов), и вероятностями перехода p_{ij}, L — случайный номер первого попадания на границу Γ_h. Тогда для решения разностной задачи (1.3) имеем вероятностное представление [13, 14]

$$u^h(i) = \mathbf{E}\xi^{(i)}, \quad \xi^{(i)} = \frac{f(k_0)}{p(k_0)} \sum_{l=0}^{L} q^l \delta_i(k_l). \tag{1.6}$$

Таким образом, одни и те же траектории используются для оценки решения системы сразу во всех узлах.

Прямой метод, в свою очередь, основан на соотношении

$$(u^h, \delta_i) = (f, u_i^*), \tag{1.7}$$

где u_i^* — решение сопряженного уравнения

$$u_i^* = A^* u_i^* + \delta_i. \tag{1.8}$$

Пусть $k_0 = i, k_1, \ldots, k_L$ — номера узлов случайной траектории цепи Маркова с начальным распределением δ_i и вероятностями перехода p_{ij}, а L — случайный номер первого попадания на границу Γ_h. Тогда для решения разностной задачи (1.3) справедливо другое вероятностное представление [13, 14]

$$u^h(i) = \mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{L} q^l f(k_l)\right]. \tag{1.9}$$

В прямом методе для оценки решения $u^h(i)$ в разных точках i предлагается использовать одни и те же траектории, считая при этом, что траектория началась в узле i, если она попадет в него на каком-то этапе блуждания. Известно [13, 14], что среднее число посещений точек будет постоянной величиной, не зависящей от номера узла, если начальное состояние выбирать равновероятно по границе сеточной области. Таким образом, для глобальной оценки решения системы предложен следующий алгоритм. Начальное состояние цепи Маркова выбирается равновероятно по границе, затем с вероятностью единица траектория попадает в ближайший внутренний узел, после чего двигается согласно вероятностям перехода p_{ij} до первого попадания на границу, а оценка решения имеет вид

$$u^h(i) = \mathbf{E}_i\zeta^{(i)}, \quad \zeta^{(i)} = \sum_{l=m_i}^{L} q^{(l-m_i)} f(k_l), \tag{1.10}$$

где $\mathbf{E}_i$ — среднее по траекториям, прошедшим через узел i, m_i — момент первого в него попадания.

Стандартный алгоритм метода Монте-Карло состоит в реализации N независимых (своих для каждого метода) траекторий цепи Маркова $\{k_{0,n}, \ldots, k_{L_n,n}\}$, $n = 1, \ldots, N$, подсчета соответствующих значений $\xi_n^{(i)}$ или $\zeta_n^{(i)}$ по формулам (1.6), (1.10) и эмпирических средних

$$\tilde{u}(i) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \xi_n^{(i)} \quad \text{или} \quad \tilde{u}(i) = \frac{1}{N_i}\sum_{n=1}^{N_i} \zeta_n^{(i)}, \tag{1.11}$$

которые и рассматриваются в качестве приближений величин $u^h(i)$. Здесь N_i — число траекторий, прошедших через узел i.

Теперь для того, чтобы получить приближение в целом к решению u исходной задачи (1.1), рассмотрим восполнение, основанное на разложении по базисным функциям $\{\chi_i\}$, построенным на исходной сетке:

$$u(x) \approx L_{(M)}\tilde{u}(x) = \sum_{i=1}^{M} \tilde{u}(i)\chi_i(x). \tag{1.12}$$

В качестве восполнения будем использовать мультилинейную интерполяцию [5], т. е. интерполяцию Стренга — Фикса с кусочно-линейной финитной «производящей» функцией:

$$\chi_i(x) = \chi_{(i_1,\dots,i_d)}(x_1,\dots,x_d) = \chi\left(\frac{x_1}{h} - i_1\right)\dots\chi\left(\frac{x_d}{h} - i_d\right),$$

где $(i_1,\dots,i_d)$ — мультииндекс, соответствующий узлу $x^{(i)}$, так что $x^{(i)} = (i^{(1)}h,\dots,i^{(d)}h)$, а

$$\chi(s) = \begin{cases} 1+s & \text{при } -1 \le s \le 0, \\ 1-s & \text{при } 0 \le s \le 1, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Заметим, что выбирать более гладкое восполнение нецелесообразно (подробнее об этом в следующем пункте).

Для исследования погрешности аппроксимации (1.12) будем использовать так называемый **C**-подход [4–7], связанный с получением выражений вида

$$\mathbf{P}\{\delta = \sup_{x\in D} |u(x) - L_{(M)}\tilde{u}(x)| < T(M,N)\} > 1 - \theta, \tag{1.13}$$

где $T(M,N) \to 0$ при $M,N \to \infty$, а $\theta > 0$ — малое число. Отметим, что в работах [13, 14] построена верхняя граница погрешности рассматриваемого метода только в метрике пространства $\mathbf{L}_2$.

На основе верхней границы погрешности из (1.13) можно строить задачу выбора оптимальных значений параметров рассмотренного алгоритма (числа узлов M и объема выборки N). Такая оптимизационная задача [1] состоит в минимизации трудоемкости алгоритма при фиксированном уровне погрешности:

$$\min_{M,N} S(M,N) \quad \text{при условии} \quad T(M,N) = \alpha, \tag{1.14}$$

где S — функция трудоемкости, α — фиксированное малое положительное число, а T — верхняя граница погрешности из (1.13).

Далее в пп. 2, 3 будут построены верхние границы погрешностей вида (1.13) сопряженного и прямого алгоритмов соответственно, в п. 4 получены оптимальные значения параметров, приведены выводы из результатов численных экспериментов.

2. Верхняя граница погрешности сопряженного алгоритма

По неравенству треугольника имеем разложение погрешности аппроксимации (1.12) на три компоненты:

$$\delta \le \sup_{x\in D}\left|u(x) - L_{(M)}u(x)\right| + \sup_{x\in D}\left|L_{(M)}u(x) - L_{(M)}u^h(x)\right| + \sup_{x\in D}\left|L_{(M)}u^h(x) - L_{(M)}\tilde{u}(x)\right| = \delta_1 + \delta_2 + \delta_3. \tag{2.1}$$

Здесь

$$L_{(M)}u(x) = \sum_{i=1}^{M} u(x^{(i)})\chi_i(x), \quad L_{(M)}u^h(x) = \sum_{i=1}^{M} u^h(i)\chi_i(x).$$

Первые две компоненты погрешности в (2.1) детерминированные, а третья случайная. Первое слагаемое δ_1 — это погрешность мультилинейной интерполяции функции u по точным значениям в узлах. При выполнении условия [15, 16]

$$u \in \mathbf{C}^{(2)}(\overline{D})$$

существует положительная константа $H_{\rm int}^{(d)}$ такая, что

$$\delta_1 \le H_{\rm int}^{(d)} M^{-2/d}. \tag{2.2}$$

Второе слагаемое δ_2 — это погрешность аппроксимации решения исходного уравнения (1.1) решением разностной задачи (1.2). Из свойства «сноса погрешности в узлы» для мультилинейной интерполяции [5] имеем

$$\delta_2 \le \max_{i=1,\dots,M} |u(x^{(i)}) - u^h(i)|.$$

Здесь $|u(x^{(i)}) - u^h(i)|$ — величина погрешности в i-м узле. Известно [9], что если $u \in \mathbf{C}^{(4)}(\overline{D})$, то существует положительная константа $H_{\rm dif}^{(d)}$ такая, что

$$|u(x^{(i)}) - u^h(i)| \le H_{\rm dif}^{(d)} M^{-2/d}. \tag{2.3}$$

Отметим, что так как погрешности δ_1 и δ_2 имеют одинаковый порядок по M, выбирать более гладкое, чем мультилинейное, восполнение в (1.12) нецелесообразно.

Получим верхнюю границу для стохастической компоненты погрешности по аналогии с тем, как это делалось в [4–7]. Как и в случае с δ_2, погрешность «сносится в узлы», т. е.

$$\delta_3 \le \max_{i=1,\dots,M} |\tilde{u}(i) - u^h(i)|.$$

Из (1.6), (1.11) следует, что

$$\delta_3 \le \max_{i=1,\dots,M} \left| \sum_{n=1}^{N} \frac{\xi_n^{(i)} - \mathbf{E}\xi^{(i)}}{N} \right|.$$

В работе [13] показано, что существует положительная константа H_v такая, что в асимптотике при $M \to \infty$ будет

$$\mathbf{V}\xi^{(i)} \lesssim H_v M,$$

где $\mathbf{V}$ обозначает дисперсию случайной величины. Обозначим $\sigma_i = \sqrt{\mathbf{V}\xi^{(i)}}$. Тогда

$$\delta_3 \lesssim \sqrt{\frac{H_v M}{N}} \max_{i=1,\dots,M} \left| \sum_{n=1}^{N} \frac{\xi_n^{(i)} - \mathbf{E}\xi^{(i)}}{\sigma_i \sqrt{N}} \right|.$$

В силу центральной предельной теоремы суммы

$$\omega_N^{(i)} = \sum_{n=1}^{N} \frac{\xi_n^{(i)} - \mathbf{E}\xi^{(i)}}{\sigma_i \sqrt{N}}$$

сходятся (по распределению) к стандартным совместно нормальным случайным величинам $\gamma^{(i)}$ при $N \to +\infty$. Следовательно, при достаточно большом M для любого $\theta > 0$ найдется такое $\widehat{N}(\theta, M) \in \mathbb{N}$, что при $N > \widehat{N}(\theta, M)$ выполнено

$$\mathbf{P}\left\{\delta_3 \leq \sqrt{\frac{H_v M}{N}} \max_{i=1,\ldots,M} |\gamma^{(i)}|\right\} > 1 - \theta. \tag{2.4}$$

В работах [4, 5] при построении верхней границы погрешности дискретно-стохастических процедур с независимыми оценками в узлах для оценивания $\max\limits_{i=1,\ldots,M} |\gamma^{(i)}|$ использовался результат теории порядковых статистик [17, теорема 1.5.3]. В нашей ситуации случайные величины $\{\gamma^{(i)}\}$ зависимы. Однако если эта зависимость слабая, то, как и в работе [7], на основе теории экстремумов нормальных последовательностей можно получить аналогичное распределение $\max\limits_{i=1,\ldots,M} |\gamma^{(i)}|$ [7, теорема 2, с. 621].

Проведем исследование ковариаций случайных величин $\{\gamma^{(i)}\}$. В [7] показано, что

$$\operatorname{cov}(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)}) = \operatorname{cov}\bigl(\omega_N^{(i)}, \omega_N^{(j)}\bigr) = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j}(\mathbf{E}\xi^{(i)}\xi^{(j)} - \mathbf{E}\xi^{(i)}\mathbf{E}\xi^{(j)}). \tag{2.5}$$

Утверждение 1. *Имеет место равенство*

$$\mathbf{E}\xi^{(i)}\xi^{(j)} = (\mu, \delta_i u_j^*) + (\mu, \delta_j u_i^*), \quad i \neq j, \tag{2.6}$$

где μ *— ряд Неймана для уравнения*

$$\mu(i) = \frac{f^2(i)}{p(i)} + \sum_{j=1}^{M} \frac{a_{ij}^2}{p_{ij}} \mu(j), \tag{2.7}$$

а u_i^* *— решение сопряженного уравнения* (1.8).

Доказательство. Будем предполагать, что $i \neq j$. Дополним сумму

$$\xi^{(i)} = \frac{f(k_0)}{p(k_0)} \sum_{l=0}^{L} q^l \delta_i(k_l)$$

до бесконечной. Для этого введем индикатор Δ_l такой, что $\Delta_l = 1$ до поглощения на границе и $\Delta_l = 0$ после. Следовательно, можно записать

$$\xi^{(i)} = \frac{f(k_0)}{p(k_0)} \sum_{l=0}^{\infty} \Delta_l q^l \delta_i(k_l).$$

Тогда можно получить выражение (2.6) путем соответствующего объединения членов двойной суммы, выражающей $\xi^{(i)}\xi^{(j)}$, и повторного осреднения этих членов. Действительно,

$$\begin{aligned}\mathbf{E}\xi^{(i)}\xi^{(j)} &= \mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \Delta_l \Delta_m \left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{l+m} \delta_i(k_l)\delta_j(k_m)\right] \\ &= \mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty} \Delta_l \left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{2l} \delta_i(k_l)\delta_j(k_l)\right]\end{aligned}$$

$$+\mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=l+1}^{\infty}\Delta_l\Delta_m\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{l+m}\delta_i(k_l)\delta_j(k_m)\right]$$

$$+\mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=l+1}^{\infty}\Delta_l\Delta_m\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{l+m}\delta_j(k_l)\delta_i(k_m)\right].$$

Первое слагаемое в правой части равно нулю, так как $\delta_i(k_l)\delta_j(k_l)=0$ при $i\neq j$. Второе и третье слагаемые отличаются только перестановкой индексов i и j. Рассмотрим одно из них, используя выражение

$$u_j^*(k)=\delta_j(k)+\mathbf{E}\sum_{l=1}^{L}q^l\delta_j(k_l),$$

где $k,k_1,\dots,k_L$ — номера узлов случайной траектории цепи Маркова с начальным распределением δ_k и вероятностями перехода p_{ij}. Это выражение следует из (1.6) и (1.7) путем формальной подстановки δ_k вместо f и p.

Далее,

$$\mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=l+1}^{\infty}\Delta_l\Delta_m\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{l+m}\delta_i(k_l)\delta_j(k_m)\right]$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty}\mathbf{E}_{(k_0,\dots,k_l)}\Delta_l\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{2l}\delta_i(k_l)\cdot\mathbf{E}\left[\sum_{m=l+1}^{\infty}\Delta_m q^{m-l}\delta_j(k_m)|k_0,\dots,k_l\right]$$
$$=\mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty}\Delta_l\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{2l}\delta_i(k_l)\left(u_j^*(k_l)-\delta_j(k_l)\right)\right]$$
$$=\mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty}\Delta_l\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{2l}\delta_i(k_l)u_j^*(k_l)\right]$$
$$-\mathbf{E}\left[\sum_{l=0}^{\infty}\Delta_l\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{2l}\delta_i(k_l)\delta_j(k_l)\right]=\left(\mu,\delta_i u_j^*\right).$$

Здесь $\left(\frac{f(k_0)}{p(k_0)}\right)^2 q^{2l}$ можно рассматривать как вес для уравнения (2.7). Таким образом, получим (2.6). Утверждение 1 доказано.

В [13] установлено равенство

$$\mathbf{E}(\xi^{(i)})^2=(\mu,\delta_i(2u_i^*-\delta_i)). \tag{2.8}$$

Расписав скалярное произведение в (2.6) и (2.8), получим

$$\mathbf{E}\xi^{(i)}\xi^{(j)}=\mu(i)u_j^*(i)+\mu(j)u_i^*(j),\ i\neq j,\quad \mathbf{E}(\xi^{(i)})^2=\mu(i)(2u_i^*(i)-1).$$

Тогда из (2.5) получим следующее выражение для ковариаций (далее для упрощения записи формул индекс h в записи $u^h(i)$ будем опускать):

$$\operatorname{cov}(\gamma^{(i)},\gamma^{(j)})=\frac{\mu(i)u_j^*(i)+\mu(j)u_i^*(j)-u(i)u(j)}{\sqrt{(\mu(i)(2u_i^*(i)-1)-u^2(i))(\mu(j)(2u_j^*(j)-1)-u^2(j))}}.$$

Оценим сверху ковариации:

$$\operatorname{cov}(\gamma^{(i)},\gamma^{(j)})\le\frac{\max\limits_i\mu(i)}{\min\limits_i\mu(i)}\frac{u_j^*(i)+u_i^*(j)}{\sqrt{((2u_i^*(i)-1)-\frac{u^2(i)}{\mu(i)})((2u_j^*(j)-1)-\frac{u^2(j)}{\mu(j)})}}.$$

В [13] показано, что при $M \to \infty$

$$\mu(i) \sim Kh^{-d} \sim K'M.$$

Кроме того, из вида уравнения (2.7) ясно, что существует положительная константа K_1 такая, что

$$\frac{\max\limits_{i=1,\dots,M} \mu(i)}{\min\limits_{i=1,\dots,M} \mu(i)} \le K_1.$$

Поэтому в асимптотике при $M \to \infty$ для ковариаций имеем оценку сверху

$$\operatorname{cov}\left(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)}\right) \lesssim K_2 \frac{u_j^*(i) + u_i^*(j)}{\sqrt{(2u_i^*(i)-1)(2u_j^*(j)-1)}}.$$

Кроме того, учитывая, что $u_i^*(i) \ge 1$, получим

$$\operatorname{cov}(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)}) \lesssim K_2(u_j^*(i) + u_i^*(j)) \quad \text{при } M \to \infty. \tag{2.9}$$

Напомним, что u_i^* — решение сопряженного уравнения (1.8). Рассмотрим уравнение

$$w_i = \widehat{A}^* w_i + \delta_i,$$

в котором элементы матрицы $\widehat{A}^*$ задаются формулой $\hat{a}_{ij}^* = \hat{q}_j p_{ij}$,

$$\hat{q}_j = \begin{cases} 1, & \text{если } j \text{ — внутренний узел,} \\ 0, & \text{если } j \text{ — граничный узел,} \end{cases}$$

а p_{ij} определены выше для уравнения (1.3). Так как $c \ge 0$, из (1.4) следует, что $q_j \le \hat{q}_j$, и тогда

$$a_{ij}^* = a_{ji} = q_j p_{ji} \le \hat{q}_j p_{ij} = \hat{a}_{ij}^*.$$

Поэтому

$$u_i^* \le \hat{A}^* u_i^* + \delta_i$$

и, следовательно [18],

$$u_i^*(j) \le w_i(j). \tag{2.10}$$

Заметим, что $w_i(j)$ есть математическое ожидание числа попаданий частицы в узел j при простом случайном блуждании в области D_h при условии, что частица стартует из узла i и поглощается на границе Γ_h. В свою очередь,

$$w_i(j) \le G(i,j), \tag{2.11}$$

где $G(i,j)$ — функция Грина простого случайного блуждания [19] на бесконечной решетке, которая и определяется как математическое ожидание числа попаданий частицы в узел j при старте из узла i.

Известно [19], что для трехмерного простого случайного блуждания ($d = 3$)

$$G(i,j) = G(0, i-j) \;\sim\; \frac{3}{2\pi} \frac{1}{|i-j|_2} \quad \text{при } |i-j|_2 \to \infty,$$

где $|i|_2 = \sqrt{\sum\limits_{l=1}^{d} i_l^2}$. А так как все нормы в конечномерном пространстве эквивалентны, то

$$G(i,j) \sim K_3 \frac{1}{|i-j|_1} \quad \text{при } |i-j|_1 \to \infty, \tag{2.12}$$

где $|i|_1 = \sqrt{\sum\limits_{l=1}^{d} |i_l|}$.

Далее ограничимся случаем $d = 3$. Итак, из (2.9)–(2.12) следует, что

$$\operatorname{cov}(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)}) \lesssim \frac{K_4}{|i-j|_1} \quad \text{при } M \to \infty,\ |i-j|_1 \to \infty. \tag{2.13}$$

Кроме того, максимальными будут ковариации у двух соседних узлов, поэтому существует λ такое, что

$$|\operatorname{cov}(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)})| \le \lambda < 1, \quad \text{для любых } i, j. \tag{2.14}$$

Докажем аналогичное утверждению 3 из [7]

Утверждение 2. *Пусть $\gamma^{(1)}, \dots, \gamma^{(M)}$ — стандартные нормальные случайные величины с ковариациями $r_{ij} = \operatorname{cov}(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)})$, удовлетворяющими условиям* (2.13), (2.14), *а числовая последовательность v_M такова, что*

$$M(1 - \Phi(v_M)) \to \tau < \infty \quad \text{при } M \to \infty,$$

где $\Phi(u)$ — функция стандартного нормального распределения. Тогда

$$\sum_{1 \le i < j \le M} |r_{ij}| \exp\left\{-\frac{u_M^2}{1 + |r_{ij}|}\right\} \to 0 \quad \text{при } M \to \infty.$$

Доказательство. В доказательстве теоремы 1.5.3 из [17] показано, что если

$$M(1 - \Phi(v_M)) \to \tau, \quad \tau < \infty,$$

то

$$\exp\left\{-\frac{v_M^2}{2}\right\} \sim \frac{K_5 v_M}{M}, \quad v_M \sim (2 \ln M)^{\frac{1}{2}}.$$

Воспользуемся этим результатом и оценим сумму

$$\sum_{1 \le i < j \le M} |r_{ij}| \exp\left\{-\frac{v_M^2}{1 + |r_{ij}|}\right\} \sim K_6 \sum_{1 \le i < j \le M} |r_{ij}| \left(\frac{v_M}{M}\right)^{\frac{2}{1+|r_{ij}|}}$$
$$\sim K_7 \sum_{1 \le i < j \le M} |r_{ij}| \left(\frac{\sqrt{\ln M}}{M}\right)^{\frac{2}{1+|r_{ij}|}}.$$

Дополним и перенумеруем сумму в предыдущем выражении, учитывая, что асимптотическая верхняя граница ковариаций зависит только от $i - j$:

$$K_7 \sum_{1 \le i < j \le M} |r_{ij}| \left(\frac{\sqrt{\ln M}}{M}\right)^{\frac{2}{1+|r_{ij}|}} \le K_9 \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=1}^{K_8 M^{\frac{1}{3}}} \sum_{|i-j|_1 = k} |r_{ij}| \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+|r_{ij}|}}}.$$

Здесь константа K_8 определяется диаметром сеточной области D_h.

Далее, из условия (2.13) следует, что при достаточно большом M для любого вещественного $0 < \beta < 1$ существует натуральное k_0 такое, что для любого $k > k_0$ выполнено неравенство

$$|r_{ij}| \le \beta \quad \text{при} \quad |i-j|_1 = k. \tag{2.15}$$

Зафиксируем некоторое $0 < \beta < 1$ (будет определено позднее) и разобьем сумму $\sum\limits_{k=1}^{K_8 M^{\frac{1}{3}}}$ на две части $\sum\limits_{k=1}^{k_0}$ и $\sum\limits_{k=k_0+1}^{K_8 M^{\frac{1}{3}}}$. Рассмотрим каждое слагаемое в отдельности.

Для первого, учитывая условие (2.14), получим

$$\Sigma_1 = K_9 \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=1}^{k_0} \sum_{|i-j|_1 = k} |r_{ij}| \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+|r_{ij}|}}}$$

$$\leq K_9 \lambda \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+\lambda}}} \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=1}^{k_0} \sum_{|i-j|_1 = k} 1 \leq K_{10} \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+\lambda}-1}}.$$

Здесь использовался тот факт, что для фиксированного узла i количество узлов j таких, что $|i-j|_1 = k$, конечно (для бесконечной решетки оно равно $\kappa(k) = 4k^2 + 2$), а $k_0 = \mathrm{const}$. Так как $\frac{2}{1+\lambda} - 1 > 0$, имеем

$$\Sigma_1 \to 0 \quad \text{при } M \to \infty.$$

Для второго слагаемого, используя (2.13) и (2.15), приходим к соотношению

$$\Sigma_2 = K_9 \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=k_0+1}^{K_8 M^{\frac{1}{3}}} \sum_{|i-j|_1 = k} |r_{ij}| \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+|r_{ij}|}}} \leq K_9 \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+\beta}}} \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=k_0+1}^{K_8 M^{\frac{1}{3}}} \sum_{|i-j|_1 = k} |r_{ij}|$$

$$\lesssim K_{10} \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+\beta}-1}} \sum_{k=k_0+1}^{K_8 M^{\frac{1}{3}}} \frac{\kappa(k)}{k} \leq K_{11} \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+\beta}-1}} M^{\frac{2}{3}} = K_{11} \frac{\ln M}{M^{\frac{2}{1+\beta}-\frac{5}{3}}}.$$

Выбирая β так, чтобы $\frac{2}{1+\beta} - \frac{5}{3} > 0$, получим, что

$$\Sigma_2 \to 0 \quad \text{при } M \to \infty.$$

Утверждение 2 доказано.

Следующая теорема о распределении $\max\limits_{i=1,\dots,M} \gamma^{(i)}$ из (2.4) доказывается аналогично теореме 2 из [7, с. 621]. Различие состоит лишь в утверждении 3 из [7, с. 622], которое в [7] доказывается для других условий на ковариации, а его аналогом для нашего случая является уже доказанное утверждение 2.

Теорема 1. *Пусть* $\gamma^{(1)}, \dots, \gamma^{(M)}$ — *стандартные нормальные случайные величины с* $\operatorname{cov}(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)})$, *удовлетворяющими условиям* (2.13), (2.14). *Тогда для распределения* $Q_M = \max\limits_{i=1,\dots,M} \gamma^{(i)}$ *имеем*

$$\mathbf{P}\{a_M(Q_M - b_M) \leq x\} \to \exp\{-e^{-x}\},$$

где

$$a_M = (2 \ln M)^{\frac{1}{2}}, \quad b_M = (2 \ln M)^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(2 \ln M)^{-\frac{1}{2}}(\ln \ln M + \ln 4\pi).$$

Как и в [4, 5, 7], из теоремы 1 и симметрии нормального распределения следует, что для распределения $\overline{Q}_M = \max\limits_{i=1,\dots,M} |\gamma^{(i)}|$ имеет место неравенство

$$\mathbf{P}\{a_M(\overline{Q}_M - b_M) \leq x\} \to \exp\{-2e^{-x}\}.$$

Следовательно, для любого малого $\theta > 0$ существуют положительная константа $H_3(\theta)$ и $\widehat{M} \in \mathbb{N}$ такие, что для любого $M > \widehat{M}$ выполнено неравенство

$$\mathbf{P}\left\{\overline{Q}_M \leq \sqrt{2\ln M} + \frac{H_3(\theta) - \ln\ln M}{2\sqrt{2\ln M}}\right\} > 1 - \theta. \tag{2.16}$$

Заметим, что в доказательстве теоремы 1 лучше воспользоваться не окончательным, а промежуточным и более точным результатом теоремы 1.5.3 из [17]. Тогда в формуле (2.16) вместо выражения

$$\sqrt{2\ln M} + \frac{H_3(\theta) - \ln\ln M}{2\sqrt{2\ln M}}$$

можно использовать более точное выражение

$$\sqrt{2\ln M - \ln\ln M + H_3(\theta)}.$$

На основании формул (2.1)–(2.4), (2.16) получаем теорему о верхней границе погрешности метода.

Теорема 2. *Пусть $d = 3$ и выполнены все условия регулярности функций c, g, ψ и границы Γ, обеспечивающие существование и единственность решения задачи (1.1), и, кроме того, $u \in \mathbf{C}^{(4)}(\overline{D})$. Тогда для любого $\theta > 0$ существуют положительные константы H_1, H_2, $H_3(\theta)$ и $\widehat{M} \in \mathbb{N}$ такие, что для любого $M > \widehat{M}$ найдется $\widehat{N}(\theta, M) \in \mathbb{N}$ такое, что для всех $N > \widehat{N}(\theta, M)$ выполнено соотношение*

$$\mathbf{P}\left\{\delta \leq \frac{H_1}{M^{2/3}} + \frac{H_2\sqrt{M}}{\sqrt{N}}\sqrt{2\ln M - \ln\ln M + H_3(\theta)}\right\} > 1 - \theta. \tag{2.17}$$

3. Верхняя граница погрешности прямого алгоритма

Здесь, как и в предыдущем пункте, погрешность аппроксимации (1.12) разлагается на три компоненты. Детерминированная компонента и смещение оцениваются по формулам (2.2), (2.3). Отличие заключается в построении верхней границы для стохастической компоненты погрешности. Ограничимся случаем $d = 3$. Как и раньше, имеем

$$\delta_3 \leq \max_{i=1,\ldots,M}\left|\sum_{n=1}^{N_i}\frac{\zeta_n^{(i)} - \mathbf{E}\zeta^{(i)}}{N_i}\right|.$$

В [13] показано, что при $c \geq 0$ дисперсия оценок в прямом методе равномерно ограничена по h, т. е. существует положительная константа $\widetilde{H}_v$ такая, что

$$\mathbf{V}\zeta^{(i)} \leq \widetilde{H}_v.$$

Обозначим $\sigma_i = \sqrt{\mathbf{V}\zeta^{(i)}}$.

Кроме того, если начальное состояние цепи Маркова выбирается равновероятно из множества точек границы, то среднее число посещений заданного внутреннего узла одинаково для всех узлов [13]; обозначим его ρ. Для прямоугольной области ρ в точности равно $6/M_0$, где M_0 — число граничных узлов. Обозначим через ρ^1 среднее число первых посещений, т. е. вероятность того, что траектория хотя бы раз пройдет через данный узел. В [13] показано, что

$$\rho^1 \geq (1 - F_d)\rho,$$

где F_d — вероятность возврата траектории в данный узел после старта из него на d-мерной бесконечной решетке. Для $d = 3$ будет $F_3 = 0.35$.

Используя вышеизложенное, проведем следующие преобразования:

$$\delta_3 \le \sqrt{\frac{\widetilde{H}_v}{\rho^1 N}} \max_{i=1,\ldots,M} \left| \sqrt{\frac{\rho^1 N}{N_i}} \sum_{n=1}^{N_i} \frac{\zeta_n^{(i)} - \mathbf{E}\zeta^{(i)}}{\sigma_i \sqrt{N_i}} \right| \le \frac{\widetilde{H}_2 M^{1/3}}{\sqrt{N}} \max_{i=1,\ldots,M} \left| \sqrt{\frac{\rho^1}{N_i/N}} \sum_{n=1}^{N_i} \frac{\zeta_n^{(i)} - \mathbf{E}\zeta^{(i)}}{\sigma_i \sqrt{N_i}} \right|.$$

Так как для любого узла $N_i \to +\infty$ при $N \to +\infty$, то в силу центральной предельной теоремы суммы

$$\omega_N^{(i)} = \sum_{n=1}^{N_i} \frac{\zeta_n^{(i)} - \mathbf{E}\zeta^{(i)}}{\sigma_i \sqrt{N_i}}$$

сходятся (по распределению) к стандартным совместно нормальным случайным величинам при $N \to +\infty$. Кроме того, по теореме Бернулли частота события N_i/N сходится по вероятности к его вероятности ρ^1 при $N \to +\infty$, следовательно, случайные величины $\varphi_N^{(i)} = \sqrt{N_i/\rho^1 N}$ сходятся по вероятности к 1. Если последовательность $\omega_N^{(i)}$ асимптотически нормальна, а $\varphi_N^{(i)} \to 1$ по вероятности, то последовательность $\omega_N^{(i)}/\varphi_N^{(i)}$ также асимптотически нормальна [20, с. 109].

Следовательно, при фиксированном M для любого $\theta > 0$ найдется такое $\widehat{N}(\theta, M) \in \mathbb{N}$, что при $N > \widehat{N}(\theta, M)$ выполнено

$$\mathbf{P}\left\{ \delta_3 \le \frac{\widetilde{H}_2 M^{1/3}}{\sqrt{N}} \max_{i=1,\ldots,M} |\gamma^{(i)}| \right\} > 1 - \theta, \tag{3.1}$$

где $\gamma^{(i)}$ — стандартные совместно нормальные случайные величины.

Как и в предыдущем пункте, исследуем ковариации случайных величин $\{\gamma^{(i)}\}$. Для этой цели изучим поведение ковариаций случайных величин $\{\omega_N^{(i)}\}$ при $N \to +\infty$.

Введем индикатор

$$\Delta_n^{(i)} = \begin{cases} 1, & \text{если траектория прошла через узел } i, \\ 0 & \text{иначе} \end{cases}$$

и случайные величины

$$\eta_n^{(i)} = \frac{\zeta_n^{(i)} - \mathbf{E}\zeta_n^{(i)}}{\sigma_i}.$$

Тогда ковариации случайных величин $\{\omega_N^{(i)}\}$ запишутся в виде

$$\operatorname{cov}(\omega_N^{(i)}, \omega_N^{(j)}) = \mathbf{E}\left(\frac{\sum\limits_{n_1=1}^{N} \sum\limits_{n_2=1}^{N} \Delta_{n_1}^{(i)} \eta_{n_1}^{(i)} \Delta_{n_2}^{(j)} \eta_{n_2}^{(j)}}{\sqrt{\left(\sum\limits_{n=1}^{N} \Delta_n^{(i)}\right)\left(\sum\limits_{n=1}^{N} \Delta_n^{(j)}\right)}} \right).$$

Заметим, что $\eta_{n_1}^{(i)}$ и $\eta_{n_2}^{(j)}$ относятся к разным траекториям при $n_1 \ne n_2$, следовательно, они независимы и

$$\mathbf{E}(\eta_{n_1}^{(i)} \eta_{n_2}^{(j)}) = 0 \quad \text{при } n_1 \ne n_2.$$

Учитывая последнее, распишем выражение для ковариаций по формуле полного математического ожидания

$$\operatorname{cov}\left(\omega_N^{(i)}, \omega_N^{(j)}\right) = \mathbf{E}\left(\frac{\sum\limits_{n=1}^{N} \Delta_n^{(i)} \eta_n^{(i)} \Delta_n^{(j)} \eta_n^{(j)}}{\sqrt{\left(\sum\limits_{n=1}^{N} \Delta_n^{(i)}\right)\left(\sum\limits_{n=1}^{N} \Delta_n^{(j)}\right)}}\right)$$
$$= \sum_{n_1+n_2+n_3 \le N} \frac{n_1 \mathbf{E}_{ij}(\eta^{(i)}\eta^{(j)})}{\sqrt{(n_1+n_2)(n_1+n_3)}} P^N_{n_1 n_2 n_3}.$$

Здесь $\mathbf{E}_{ij}$ обозначает математическое ожидание при условии, что траектория прошла через узлы i и j, $P^N_{n_1 n_2 n_3}$ — вероятность того, что из N траекторий ровно n_1 пройдут через оба узла i и j, n_2 — только через узел i, n_3 — только через узел j, остальные не пройдут ни через один из них. Сумма берется по всем возможным комбинациям n_1, n_2, n_3. Запишем эту сумму в следующем виде:

$$\operatorname{cov}\left(\omega_N^{(i)}, \omega_N^{(j)}\right)$$
$$= \sum_{n_1=0}^{N} \sum_{n_2=0}^{N-n_1} \sum_{n_3=0}^{N-n_1-n_2} \frac{N! P_1^{n_1} P_2^{n_2} P_3^{n_3} P_4^{N-n_1-n_2-n_3}}{n_1! n_2! n_3! (N-n_1-n_2-n_3)!} \frac{n_1 \mathbf{E}_{ij}(\eta^{(i)}\eta^{(j)})}{\sqrt{(n_1+n_2)(n_1+n_3)}},$$

где P_1 — вероятность того, что траектория пройдет через оба узла i и j, P_2 (соответственно P_3) — вероятность того, что траектория пройдет только через узел i (j), P_4 — вероятность того, что траектория не пройдет ни через один из узлов i и j.

Очевидно, что $|\mathbf{E}_{ij}(\eta^{(i)}\eta^{(j)})| \le 1$, $P_4 = 1 - P_1 - P_2 - P_3$. Исследуем ряд

$$S(N) = \sum_{n_1=0}^{N} \sum_{n_2=0}^{N-n_1} \sum_{n_3=0}^{N-n_1-n_2} \frac{N! P_1^{n_1} P_2^{n_2} P_3^{n_3} P_4^{N-n_1-n_2-n_3}}{n_1! n_2! n_3! (N-n_1-n_2-n_3)!} \frac{n_1}{\sqrt{(n_1+n_2)(n_1+n_3)}}.$$

Утверждение 3. *Имеет место оценка*

$$\lim_{N\to\infty} S(N) \le \frac{P_1}{P_2} + \frac{P_1}{P_3}.$$

Доказательство. Рассмотрим внутренний ряд

$$S_0(N-n_1) = \sum_{n_2=0}^{N-n_1} \sum_{n_3=0}^{N-n_1-n_2} \frac{P_2^{n_2} P_3^{n_3} P_4^{N-n_1-n_2-n_3}}{n_2! n_3! (N-n_1-n_2-n_3)!} \frac{1}{\sqrt{(n_1+n_2)(n_1+n_3)}}.$$

Заметим, что

$$\frac{1}{\sqrt{(n_1+n_2)(n_1+n_3)}} \le \frac{1}{n_1+n_3} \quad \text{при} \quad n_2 \ge n_3,$$

$$\frac{1}{\sqrt{(n_1+n_2)(n_1+n_3)}} \le \frac{1}{n_1+n_2} \quad \text{при} \quad n_2 \le n_3.$$

Используя эти неравенства, разобьем ряд $S_0(N-n_1)$ на два, дополним их до полных биномиальных рядов и свернем внутренний ряд. Таким образом, получим неравенство

$$S_0(N-n_1) \le \sum_{n_2=0}^{N-n_1} \frac{P_2^{n_2}(P_3+P_4)^{N-n_1-n_2}}{n_2!(N-n_1-n_2)!}\frac{1}{(n_1+n_2)} + \sum_{n_3=0}^{N-n_1} \frac{P_3^{n_3}(P_2+P_4)^{N-n_1-n_3}}{n_3!(N-n_1-n_3)!}\frac{1}{(n_1+n_3)}.$$

Воспользуемся известным равенством [21, с. 613]

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!}\frac{x^k}{(k+l)} = x^{-l}\int_0^x t^{l-1}(1+t)^n\,dt.$$

Легко заметить, что

$$x^{-l}\int_0^x t^{l-1}(1+t)^n\,dt \le \frac{(1+x)^{n+1}}{x(n+1)} \quad \text{при} \quad l \ge 1.$$

В итоге получаем неравенство

$$S_0(N-n_1) \le \left(\frac{1}{P_2}+\frac{1}{P_3}\right)\frac{(P_2+P_3+P_4)^{N-n_1+1}}{(N-n_1+1)!}.$$

Отметив, что $P_2+P_3+P_4 = 1-P_1$, подставим полученное во внешний ряд $S(N)$:

$$S(N) \le \left(\frac{1}{P_2}+\frac{1}{P_3}\right) P_1 \sum_{n_1=1}^{N} \frac{N!P_1^{n_1-1}(1-P_1)^{N-(n_1-1)}}{(n_1-1)!(N-(n_1-1))!} = \left(\frac{P_1}{P_2}+\frac{P_1}{P_3}\right)(1-P_1^N) \longrightarrow \frac{P_1}{P_2}+\frac{P_1}{P_3} \quad \text{при} \quad N\to\infty.$$

Утверждение 3 доказано.

Используя доказанное утверждение, получим оценку для ковариаций

$$|\operatorname{cov}(\gamma^{(i)},\gamma^{(j)})| = \lim_{N\to\infty}\left|\operatorname{cov}\left(\omega_N^{(i)},\omega_N^{(j)}\right)\right| \le \frac{P_1}{P_2}+\frac{P_1}{P_3}.$$

Далее, P_1 можно представить в виде $P_1 = \rho^1 P_i^j$, где P_i^j — вероятность того, что частица хотя бы раз попадет в узел j при старте из узла i или, что то же самое, среднее число первых посещений узла j при старте из узла i. Тогда

$$P_i^j \le G(i,j),$$

где $G(i,j)$ — функция Грина простого случайного блуждания [19] на бесконечной решетке, которая есть математическое ожидание числа попаданий частицы в узел j при старте из узла i. Вероятность P_2, в свою очередь, представима в виде $P_2 = \rho^1\overline{P}_i^j$, где $\overline{P}_i^j$ — вероятность того, что частица ни разу не попадет в узел j при старте из узла i. Отметим, что $\overline{P}_i^j$ будет минимальной для двух соседних узлов, поэтому существует константа $H>0$ такая, что

$$\overline{P}_i^j \ge H \quad \text{для любых } i,j.$$

Тогда для отношения P_1/P_2 имеем

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{P_i^j}{\overline{P}_i^j} \le \frac{G(i,j)}{H} \lesssim \frac{H_g}{|i-j|_1} \quad \text{при } |i-j|_1 \to \infty.$$

Следовательно,

$$|\operatorname{cov}(\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)})| \lesssim \frac{2H_g}{|i-j|_1} \quad \text{при } |i-j|_1 \to \infty. \tag{3.2}$$

Итак, для ковариаций получено аналогичное (2.13) выражение, поэтому для построения верхней границы максимума стандартных нормальных случайных величин из (3.1) можно воспользоваться результатами предыдущего пункта (утверждением 2 и теоремой 1).

На основании формул (2.1)–(2.3), (3.1), (2.16) получаем теорему о верхней границе погрешности метода.

Теорема 3. *Пусть $d = 3$ и выполнены все условия регулярности функций c, g, ψ и границы Γ, обеспечивающие существование и единственность решения задачи (1.1), и, кроме того, $u \in \mathbf{C}^{(4)}(\overline{D})$. Тогда для любого $\theta > 0$ существуют положительные константы H_1, H_2, $H_3(\theta)$ и $\widehat{M} \in \mathbb{N}$ такие, что для любого $M > \widehat{M}$ найдется $\widehat{N}(\theta, M) \in \mathbb{N}$ такое, что для всех $N > \widehat{N}(\theta, M)$ выполнено соотношение*

$$\mathbf{P}\left\{\delta \le \frac{H_1}{M^{2/3}} + \frac{H_2 M^{1/3}}{\sqrt{N}}\sqrt{2\ln M - \ln\ln M + H_3(\theta)}\right\} > 1 - \theta. \tag{3.3}$$

4. Оптимизация

На основе построенных верхних границ погрешности рассмотрим для двух исследуемых алгоритмов задачи оптимизации вида (1.14). Найти значения $M = M_{\text{opt}}$ и $N = N_{\text{opt}}$, для которых достигается минимум функции трудоемкости алгоритма при заданном уровне погрешности α:

$$\min_{M,N} S(N, M) \quad \text{при условии } T(M, N) = \alpha,$$

где $T(M, N)$ — правая часть неравенства, стоящего под знаком вероятности в выражениях (2.17), (3.3).

Функция трудоемкости обоих алгоритмов имеет вид

$$S(M, N) = t_1 M + t_2 N \mathbf{E} L, \tag{4.1}$$

где t_1 — время вычисления функций g, c, ψ в одном узле, t_2 — время моделирования одного перехода в цепи «блуждания по решетке», а L — случайное число переходов в цепи до попадания на границу сеточной области.

В [13, 14] показано, что *для сопряженного метода*

$$\mathbf{E} L = O(M^{2/3}).$$

Таким образом, имеем следующую задачу оптимизации:

$$\min_{M,N}(t_1 M + t_2 N M^{2/3}) \tag{4.2}$$

при условии

$$\frac{H_1}{M^{2/3}} + \frac{H_2\sqrt{M}}{\sqrt{N}}\sqrt{2\ln M - \ln\ln M + H_3} = \alpha. \tag{4.3}$$

Приравнивая в (4.3) компоненты погрешности к α по порядку величины, получим

$$M_{\text{opt}} = O(\alpha^{-3/2}), \quad N_{\text{opt}} = O(\alpha^{-7/2}).$$

Подставляя эти выражения в (4.2), заметим, что первое слагаемое трудоемкости существенно меньше второго в асимптотике при $\alpha \to 0$, поэтому его можно опустить.

Полученная задача отличается от соответствующей задачи для метода полигона частот с оценками по столкновениям из [7] только функцией трудоемкости, поэтому решается аналогично. При этом используется следующее вспомогательное

Утверждение 4. *Для любого $M_0 \geq 3$ существуют $\nu, \mu \in \mathbb{R}$, $\nu, \mu > 0$, такие, что для $M \geq M_0$ выполнено неравенство*

$$\sqrt{2\ln M - \ln\ln M + H_3} \leq \mu M^{\nu}.$$

Используя это утверждение, получаем, что вместо (4.3) можно рассматривать условие

$$\frac{H_1}{M^{2/3}} + \frac{H_2\sqrt{M}}{\sqrt{N}}\mu M^{\nu} = \alpha.$$

При решении этой задачи получены следующие оптимальные в смысле построенной верхней границы погрешности значения параметров алгоритма

$$M_{\text{opt}} = \left(\frac{H_1(6\nu+9)}{6\nu+5}\right)^{3/2}\alpha^{-3/2}, \tag{4.4}$$

$$N_{\text{opt}} = \left(\frac{H_2(6\nu+9)}{4}\right)^{2} M_{\text{opt}}\left(2\ln M_{\text{opt}} - \ln\ln M_{\text{opt}} + H_3\right)\alpha^{-2}. \tag{4.5}$$

Здесь для малого параметра ν имеем

$$\nu \leq \frac{1}{2\ln 3 + H_3} = \nu_0,$$

поэтому можно полагать, что $\nu = \nu_0$. Заметим, что в реальных расчетах $\nu \approx 0.1$.

Таким образом, оптимальное в смысле построенной верхней границы погрешности значение трудоемкости имеет следующий порядок по α:

$$S_{\text{opt}} = O(\alpha^{-9/2}|\ln\alpha|). \tag{4.6}$$

Рассмотрим для сопряженного метода два частных случая краевой задачи (1.1), в которых учет особенностей моделирования и поведения дисперсии позволяет снизить трудоемкость: (а) задача с нулевыми граничными условиями $\psi \equiv 0$ и (б) задача с нулевой правой частью $g \equiv 0$.

Известно [13, 14], что в случае (а) дисперсия стохастических оценок в узлах имеет меньший порядок по M, а именно существует положительная константа H_v такая, что в асимптотике при $M \to \infty$

$$\mathbf{V}\xi^{(i)} \lesssim H_v M^{1/3}.$$

Тогда вместо верхней границы погрешности (2.17) в теореме 2 получим

$$\mathbf{P}\left\{\delta \le \frac{H_1}{M^{2/3}} + \frac{H_2 M^{1/6}}{\sqrt{N}}\sqrt{2\ln M - \ln\ln M + H_3(\theta)}\right\} > 1-\theta,$$

а вместо оптимальных значений параметров (4.4), (4.5) —

$$M_{\text{opt}} = \left(\frac{H_1(6\nu+7)}{6\nu+3}\right)^{3/2}\alpha^{-3/2}, \tag{4.7}$$

$$N_{\text{opt}} = \left(\frac{H_2(6\nu+7)}{4}\right)^2 M_{\text{opt}}^{1/3}(2\ln M_{\text{opt}} - \ln\ln M_{\text{opt}} + H_3)\alpha^{-2}.$$

В этом случае оптимальное значение трудоемкости будет меньше:

$$S_{\text{opt}} = O(\alpha^{-7/2}|\ln\alpha|). \tag{4.8}$$

Отметим, что, как предложено в [22, с. 124], краевую задачу с неоднородными граничными условиями (1.1) можно свести к задаче с $\psi \equiv 0$ с помощью метода R-функций для широкого класса задач и, таким образом, снизить трудоемкость рассматриваемого алгоритма.

В случае (б) свободный элемент $f(i)$ в системе линейных алгебраических уравнений (1.3) равен нулю всюду, кроме граничных узлов, поэтому моделирование начальной точки траектории следует осуществлять равномерно по границе, а не по всей области. При этом для дисперсии в асимптотике при $M \to \infty$ выполняется

$$\mathbf{V}\xi^{(i)} \lesssim H_v M^{2/3},$$

а среднее число переходов в цепи до попадания на границу сеточной области совпадает со средним числом переходов для прямого метода [13, 14]

$$\mathbf{E}L = O(M^{1/3}).$$

Тогда задача оптимизации будет иметь вид

$$\min_{M,N}(t_1 M + t_2 N M^{1/3})$$

при условии

$$\frac{H_1}{M^{2/3}} + \frac{H_2 M^{1/3}}{\sqrt{N}}\sqrt{2\ln M - \ln\ln M + H_3} = \alpha. \tag{4.9}$$

При ее решении вместо оптимальных значений параметров (4.4), (4.5) получены (4.7) и

$$N_{\text{opt}} = \left(\frac{H_2(6\nu+9)}{4}\right)^2 M_{\text{opt}}^{2/3}(2\ln M_{\text{opt}} - \ln\ln M_{\text{opt}} + H_3)\alpha^{-2}.$$

В этом случае оптимальное значение трудоемкости тоже будет иметь порядок (4.8).

Заметим, что *для прямого алгоритма* задача оптимизации в точности совпадает с задачей (4.9) оптимизации сопряженного алгоритма в случае (б) и соответственно совпадают выражения для оптимальных значений параметров, однако константы в этих выражениях имеют другой смысл. Оптимальное значение трудоемкости для прямого алгоритма тоже будет иметь порядок (4.8).

Сравнивая (4.6), (4.8), можно сделать вывод, что для двух рассмотренных частных случаев (a) ($\psi \equiv 0$) и (b) ($g \equiv 0$) прямой и сопряженный алгоритмы блуждания по решетке имеют одинаковый порядок трудоемкости, а в общем случае прямой алгоритм более эффективен. Численные эксперименты, проведенные с использованием оптимальных значений параметров для нескольких уровней погрешности α, показали, что

• полученная полная погрешность для обоих алгоритмов не превышает задаваемого уровня,

• при одинаковом уровне погрешности в общем случае задачи фактическая трудоемкость (т. е. время вычислений) прямого метода существенно меньше, причем по мере уменьшения α сопряженный алгоритм проигрывает все больше, что подтверждает теоретические выводы,

• в частном случае (a) ($\psi \equiv 0$) при одинаковом уровне погрешности время вычислений для обоих методов практически совпадает, а в частном случае (б) ($g \equiv 0$) прямой алгоритм выигрывает.

К недостаткам прямого метода следует отнести необходимость иметь большие массивы для хранения информации о траектории.

Для сравнения приведем также полученное в работе [23] оптимальное значение трудоемкости для функционального алгоритма, в котором в качестве стохастических оценок в узлах взяты независимые смещенные оценки, построенные методом блуждания по сферам ($d = 3$):

$$S_{\mathrm{opt}} = O(\alpha^{-7/2}|\ln\alpha|^2). \tag{4.10}$$

Что касается функционального алгоритма блуждания по сферам, то, как показывает практика, само моделирование блужданий по сферам существенно более трудоемко, чем моделирование блуждания по решетке. Кроме того, в алгоритме блуждания по сферам вычисление правой части уравнения (функции g) производится при каждом переходе в цепи блужданий, в то время как в алгоритме блуждания по решетке значения функции g в узлах вычисляются заранее. Поэтому для задач со сложной правой частью функциональный алгоритм блуждания по сферам более трудоемок по сравнению с алгоритмом блуждания по решетке. Как показали численные эксперименты, проведенные с использованием оптимальных значений параметров, даже в случае с нулевой правой частью ($g \equiv 0$) функциональный алгоритм блуждания по сферам значительно более трудоемок по сравнению с обоими алгоритмами блуждания по решетке.

В связи с этим, представляется интересным сравнение указанных алгоритмов в рамках теории информационной сложности [9, 10], в которой критерием качества алгоритма является минимальный объем информации об элементах задачи (здесь это функции g и ψ), используемый алгоритмом для достижения заданной погрешности. С точки зрения этой теории, функциональные алгоритмы блуждания по решетке, несомненно, предпочтительнее, так как используют только порядка $\alpha^{-3/2}$ вычислений функции, в то время как алгоритм блуждания по сферам использует порядка $\alpha^{-7/2}|\ln\alpha|^2$ вычислений функции. У функционального алгоритма блуждания по сферам только одно преимущество по сравнению с алгоритмами блуждания по решетке — это возможность вычислять решение на небольшой подобласти области D. Причем эта возможность сохраняется и в случае неограниченной области D, лишь бы процесс блуждания по сферам сходился.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Mikhailov G. A.* Minimization of computational costs of non-analogue Monte Carlo methods. Singapore: World Sci., 1991. (Soviet East European Math.; V. 5).

2. *Войтишек А. В., Пригарин С. М.* О функциональной сходимости оценок и моделей в методе Монте-Карло // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1992. Т. 32, № 10. С. 1641–1651.

3. *Mikhailov G. A.* Parametric estimates by the Monte Carlo method. Utrecht: VSP, 1995.

4. *Войтишек А. В.* Асимптотика сходимости дискретно-стохастических численных методов глобальной оценки решения интегрального уравнения второго рода // Сиб. мат. журн. 1994. Т. 35, № 4. С. 728–736. (См. также «Письмо в редакцию». Сиб. мат. журн. 1996. Т. 37, № 3. С. 714).

5. *Voytishek A. V.* On the errors of discretely stochastic procedures in estimating globally the solution of an integral equation of the second kind // Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1996. V. 11, N 1. P. 71–92.

6. *Shkarupa E. V., Voytishek A. V.* Optimization of discretely stochastic procedures for globally estimating the solution of an integral equation of the second kind // Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1997. V. 12, N 6. P. 525–546.

7. *Шкарупа Е. В.* Оценка погрешности и оптимизация метода полигона частот для глобального решения интегрального уравнения второго рода // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1998. Т. 38, № 4. С. 612–627.

8. *Plotnikov M. Yu., Shkarupa E. V.* Error estimation and optimization in **C**-space of Monte Carlo iterative solution of nonlinear integral equations // Monte Carlo Methods and Application. 1998. V. 4, N 1. P. 53–70.

9. *Бахвалов Н. С.* Численные методы. М.: Наука, 1975.

10. *Traub J. F., Wasilkowski G. W., Wozniakowski H.* Information Based Complexity. New York: Acad. Press, 1988.

11. *Heinrich S.* A multilevel version of the method of dependent tests // Proc. Third Petersburg Workshop on simulation. St. Peterburg, 1998. P. 31–35.

12. *Heinrich S.* Monte Carlo complexity of global solution of integral equations // J. Complexity. 1998. V. 14. P. 151–175.

13. *Михайлов Г. А.* Весовые методы Монте-Карло. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.

14. *Михайлов Г. А., Чешкова А. Ф.* Решение разностной задачи Дирихле для многомерного уравнения Гельмгольца методом Монте-Карло // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1996. Т. 38, № 1. С. 99–106.

15. *Марчук Г. И., Агошков В. И.* Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981.

16. *Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л.* Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.

17. *Литбеттер М., Ротсен Х., Линдгрен Г.* Экстремумы случайных последовательностей и процессов. М.: Мир, 1989.

18. *Михайлов Г. А.* Оптимизация весовых методов Монте-Карло. М.: Наука, 1987.

19. *Спицер Ф.* Принципы случайного блуждания. М.: Мир, 1969.

20. *Розанов Ю. А.* Теория вероятностей, случайные процессы и математическая статистика. М.: Наука, 1989.

21. *Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И.* Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981.

22. *Сабельфельд К. К.* Методы Монте-Карло в краевых задачах. Новосибирск: Наука, 1989.

23. *Шкарупа Е. В.* Оценка погрешности и оптимизация функциональных алгоритмов метода Монте-Карло решения задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца // Тр. конф. молодых ученых ИВМ и МГ СО РАН. Новосибирск, 2002. С. 157–163.

Статья поступила 15 октября 2002 г.

Шкарупа Елена Валерьевна
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
пр. Академика М. А. Лаврентьева, 6, Новосибирск 630090
sev@osmf.sscc.ru