Математическое моделирование

УДК 519.245; 519.632.4

ОЦЕНКИ МЕТОДОМ МОНТЕ—КАРЛО ИТЕРАЦИЙ ОПЕРАТОРА ГРИНА И СОБСТВЕННЫХ ЧИСЕЛ ПЕРВОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА

А. Н. Кузнецов, И. А. Рытенкова, А. С. Сипин

Вологодский государственный педагогический университет,
160035 Вологда, ул. С. Орлова, 6.

E-mails: pm_kan@uni-vologda.ac.ru, profyservis@mail.ru, cac@uni-vologda.ac.ru

Рассмотрен алгоритм вычисления степеней оператора Грина методом Монте—Карло на траекториях марковской цепи. Полученные статистические оценки используются для нахождения первого собственного числа первой краевой задачи. Проведено численное моделирование и сделан сравнительный анализ эффективности алгоритмов.

Ключевые слова: *метод Монте—Карло, собственные числа первой краевой задачи, функция Грина, оператор Грина, распределённые вычисления.*

1. Постановка задачи. Рассмотрим задачу на собственные значения

$$\left.\begin{aligned} \Delta\varphi + \lambda\varphi = 0;\\ \varphi\big|_{\Gamma} = 0;\\ \varphi \in C^2(\mathcal{D}) \cap C(\bar{\mathcal{D}}), \quad \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n. \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

Множество собственных значений $\{\lambda_k\}$ этой задачи не имеет конечных предельных точек, $\lambda_k > 0$, λ_1 — простое ($\lambda_1 < \lambda_2 \leqslant \lambda_3 \leqslant \ldots$). Собственная функция $\varphi_1(x)$ неотрицательна, φ_k можно выбрать вещественными и ортонормированными в $\mathcal{L}_2(\mathcal{D})$.

Пусть $\mathrm{G}(x,y)$ — функция Грина для задачи (1), тогда (1) эквивалентно задаче на собственные значения для интегрального оператора $\mathbb{G}$ с ядром $\mathrm{G}(x,y)$:

$$u(x) = \lambda \int_{\mathcal{D}} \mathrm{G}(x,y)u(y)dy, \quad u \in C(\bar{\mathcal{D}}).$$

Интегральный оператор $\mathbb{G}$ будем назвать *оператором Грина*, норму в $\mathcal{L}_2(\mathcal{D})$ будем обозначать $\|\cdot\|$, в $C(\bar{\mathcal{D}})$ — $\|\cdot\|_C$.

Для определения λ_1 можно использовать *метод Келлога* [1]. Пусть $\varphi^{(0)}(x)\geqslant 0$; $\|\varphi^{(0)}\|=1$; $\varphi^{(p)}=\mathbb{G}^p\varphi^{(0)}$; $\varphi_{(p)}=\varphi^{(p)}/\|\varphi^{(p)}\|$; $\lambda_{(p)}=\|\varphi^{(p-1)}\|/\|\varphi^{(p)}\|$. Тогда последовательность $\{\lambda_{(p)}\}$ сходится, монотонно убывая, к λ_1, а последовательность $\{\varphi_{(p)}\}$ сходится к φ_1 в $\mathcal{L}_2(\mathcal{D})$ и в $C(\bar{\mathcal{D}})$, причём справедливы

Андрей Николаевич Кузнецов, старший преподаватель, каф. прикладной математики. *Ирина Александровна Рытенкова,* магистрант, каф. прикладной математики. *Александр Степанович Сипин* (к.ф.-м.н., доц.), доцент, каф. прикладной математики.

оценки

$$0 \leqslant \lambda_{(p)} - \lambda_1 \leqslant \frac{\lambda_1}{2}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{2p-2}\frac{1-c_1^2}{c_1^2}, \quad p = 2,3,\dots;$$

$$\left\|\varphi_{(p)} - \varphi_1\right\| \leqslant \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{p}\frac{\sqrt{1-c_1^2}}{c_1}, \qquad p = 2,3,\dots;$$

$$\left\|\varphi_{(p)} - \varphi_1\right\|_C \leqslant L\lambda_2\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{p}\frac{\sqrt{1-c_1^2}}{c_1}, \quad p = 2,3,\dots,$$

где $c_1 = \left(\varphi^{(0)},\ \varphi_1\right)$, $L^2 = \max\limits_{x\in\bar{D}}\displaystyle\int_D (\mathrm{G}(x,y))^2\,dy$.

Построению стохастических алгоритмов для определения λ посвящено много работ. Наиболее общие результаты представлены в статье [3]. В данной работе анализируются проблемы реализации лишь одного стохастического алгоритма. В определённом смысле она является продолжением работы [4].

2. Вероятностный смысл метода Келлога для оператора Грина. С оператором Лапласа связан винеровский процесс, а именно, $\frac{1}{2}\Delta$ является характеристическим оператором процесса. Пусть $\tau = \tau(x)$ — момент первого выхода винеровского процесса $\xi(t)$ из множества $\bar{\mathcal{D}}$, если $\xi(0) = x$, тогда справедлива

Лемма. *Пусть* $\varphi^{(0)}(x) = \varphi_0 = \mathrm{const} > 0$, *тогда* $\varphi^{(p)}(x) = \frac{\varphi_0}{2^p p!}\,\mathtt{E}_x\,\tau^p$.

Доказательство. Пусть $\lambda < 0$ и $|\lambda| < \lambda_1$, тогда для решения краевой задачи

$$\Delta v + \lambda v = -\varphi_0, \quad v\big|_\Gamma = 0 \tag{2}$$

справедливо вероятностное представление

$$v(x) = \frac{1}{2}\,\mathtt{E}_x\int_0^\tau e^{\lambda t/2}\varphi_0 dt = \frac{\varphi_0}{2}\,\mathtt{E}_x\sum_{p=0}^{\infty}\left(\frac{\lambda}{2}\right)^p\frac{\tau^{p+1}}{(p+1)!}.$$

В последнем ряде можно поменять местами знаки математического ожидания и суммы, т. к. $\mathtt{E}_x\,e^{|\lambda|\tau/2} < +\infty$. Тогда

$$v(x) = \frac{\varphi_0}{2}\sum_{p=0}^{\infty}\left(\frac{\lambda}{2}\right)^p\frac{\mathtt{E}_x\,\tau^{p+1}}{(p+1)!}.$$

С другой стороны, задача (2) эквивалентна интегральному уравнению $v(x) = \lambda\,\mathbb{G}\,v + \mathbb{G}\,\varphi_0$, которое имеет решение, представимое при малых λ рядом

$$v(x) = \sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p\,\mathbb{G}^{p+1}\,\varphi_0.$$

Сравнивая коэффициенты при λ^p, имеем $\varphi^{(p)} = \mathbb{G}^p\,\varphi_0 = \varphi_0\frac{\mathtt{E}_x\,\tau^p}{2^p p!}$. $\square$

Следствие.

$$\lambda_1 = \lim_{p\to\infty} 2p\left[\frac{\displaystyle\int_{\mathcal{D}}\left(\mathtt{E}_x\,\tau^{p-1}\right)^2 dx}{\displaystyle\int_{\mathcal{D}}\left(\mathtt{E}_x\,\tau^{p}\right)^2 dx}\right]^{1/2}; \quad \varphi_1(x) = \lim_{p\to\infty}\frac{\mathtt{E}_x\,\tau^p}{\left[\displaystyle\int_{\mathcal{D}}\left(\mathtt{E}_x\,\tau^p\right)^2 dx\right]^{1/2}}.$$

Лемма. *Пусть* $\lambda_{(p)}(x) = 2p\frac{\mathtt{E}_x\,\tau^{p-1}}{\mathtt{E}_x\,\tau^{p}}$, *тогда* $\lim\limits_{p\to\infty}\lambda_{(p)}(x) = \lambda_1$.

Доказательство.

$$\lambda_{(p)}(x) = \frac{\varphi^{(p-1)}(x)}{\varphi^{(p)}(x)} = \frac{\varphi_{(p-1)}(x)}{\varphi_{(p)}(x)}\frac{\left\|\varphi^{(p-1)}\right\|}{\left\|\varphi^{(p)}\right\|} = \frac{\varphi_{(p-1)}(x)}{\varphi_{(p)}(x)}\lambda_{(p)};$$

$\lim\limits_{p\to\infty}\varphi_{(p)}(x) = \varphi_1(x) > 0$, $\lim\limits_{p\to\infty}\lambda_{(p)} = \lambda_1$, поэтому $\lim\limits_{p\to\infty}\lambda_{(p)}(x) = \frac{\varphi_1(x)}{\varphi_1(x)}\lambda_1 = \lambda_1$. $\square$

3. Построение статистических оценок итераций оператора Грина. Один из вариантов метода Монте—Карло для вычисления λ_1 может быть основан на определении функции

$$v_n(x) = (\mathbb{G}^n\,\mathbf{1})(x) = \frac{1}{2^n n!}\,\mathtt{E}_x\,\tau^n,$$

т. е. на оценке моментов случайной величины τ. Займёмся получением несмещённых оценок величин v_n.

3.1. Преобразование сдвига. Для построения несмещённых оценок для $v_n(x)$ используем уравнение

$$\Delta u + \lambda u = 0, \quad u\big|_{\Gamma} = 1. \tag{3}$$

При $|\lambda| < \lambda_1$ решение этого уравнения имеет вид

$$u(x,\lambda) = \mathtt{E}_x\,e^{\lambda\tau/2} = \sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n v_n(x), \quad v_0(x) = 1.$$

Пусть $c > 0$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^3$. Свяжем с задачей (3) интегральное уравнение. Для шара $K_R(x)$ радиуса R с центром в точке x ($K_R(x) \subset \mathcal{D}$) имеем [2]:

$$u(x) = q\int_{S_R} u(y)d\omega + (1-q)\int_{K_R} p(x,y)\Big(1 + \frac{\lambda}{c^2}\Big)u(y)dy, \tag{4}$$

где $q = \frac{Rc}{\operatorname{sh} Rc}$, ω — равномерное распределение на сфере, $p(x,y) = \frac{c^2}{4\pi|x-y|} \times \times \frac{\operatorname{sh}((R-|x-y|)c)}{(\operatorname{sh} cR - cR)}$ — переходная плотность.

Соотношение (4) позволяет строить несмещённые оценки для $u(x,\lambda)$ на траекториях $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ случайного процесса, для которого $x_0 = x$, x_{i+1} распределено с вероятностью q_i равномерно на сфере $S_{R(x_i)}$ и с вероятностью $(1-q_i)$ в шаре с плотностью $p(x_i, y)$. Нетрудно доказать, что с вероятностью 1 существует $x_\infty = \lim\limits_{i\to\infty} x_i$ и $x_\infty \in \Gamma$.

С процессом $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ естественно связать мартингал несмещённых оценок для $u(x,\lambda)$: $\xi_n = \left(1 + \lambda/c^2\right)^{N_n} u(x_n)$, $n = 1, 2, \ldots$, где N_n — число переходов в шар на траектории $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Известно [2], что п. н. существует $N = = \lim\limits_{n\to\infty} N_n < +\infty$, причём конечны моменты $\mathtt{E}_x\,N^s$, $s = 1, 2, \ldots$.

Лемма. *Пусть* $|\lambda| < \rho < \lambda_1/3$ *и* $\rho < c^2$, *тогда мартингал* ξ_n *квадратично интегрируемый.*

Доказательство.

$$\left|\xi_n^2\right| \leqslant \left(1+\frac{\rho}{c^2}\right)^{2N_n} |u(x_n)|^2 \leqslant \left(1+\frac{2\rho}{c^2}+\frac{\rho^2}{c^4}\right)^{N_n} |u(x_n)|^2 \leqslant \left(1+\frac{3\rho}{c^2}\right)^{N_n} |u(x_n)|^2;$$

$\left|u^2(x)\right| = \left|\left(\mathtt{E}_x\, e^{\lambda\tau/2}\right)^2\right| \leqslant \left(\mathtt{E}_x\, e^{\tau\rho/2}\right)^2 \leqslant \mathtt{E}_x\, e^{\rho\tau} \leqslant \mathtt{E}_x\, e^{3\rho\tau/2} = u(x,3\rho)$. Тогда $\left|\xi_n^2(x,\lambda)\right| \leqslant \left(1+3\rho/c^2\right)^{N_n} u(x_n,3\rho)$, значит, $\left|\mathtt{E}_x\, \xi_n^2(x,\lambda)\right| \leqslant u(x,3\rho) < \infty$. □

Следствие. *Случайная величина* $\xi = \left(1+\lambda/c^2\right)^N$ *является несмещённой оценкой для* $u(x,\lambda)$.

Доказательство. Действительно, квадратично интегрируемый мартингал равномерно интегрируем, поэтому

$$u(x,\lambda) = \mathtt{E}_x\, \xi_n(x,\lambda) = \lim_{n\to\infty} \mathtt{E}_x\, \xi_n(x,\lambda) = \mathtt{E}_x \lim_{n\to\infty} \xi_n(x,\lambda) = \\ = \mathtt{E}_x\, \xi \cdot \lim_{n\to\infty} u(x_n,\lambda) = \mathtt{E}_x\, \xi. \ \square$$

Представим ξ в другой форме:

$$\xi = \left(1+\frac{\lambda}{c^2}\right)^N = \sum_{n=0}^{N} C_N^n \frac{\lambda^n}{c^{2n}}.$$

Обозначим $N^{[n]} = N(N-1)\cdots(N-n+1)$, тогда

$$\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \frac{N^{[n]}}{n!c^{2n}}, \tag{5}$$

причём ряд (5) мажорируется рядом $\sum\limits_{n=0}^{\infty} \rho^n \frac{N^{[n]}}{n!c^{2n}}$, поэтому

$$u(x,\lambda) = \mathtt{E}_x\, \xi = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n\, \mathtt{E}_x\left(\frac{N^{[n]}}{n!c^{2n}}\right),$$

следовательно, справедлива

Теорема. *Случайная величина* $\frac{N^{[n]}}{n!c^{2n}}$ *является несмещённой оценкой* $v_n(x)$ *с конечной дисперсией.*

Доказательство. Осталось проверить конечность дисперсии. Оценим дисперсию величины $\zeta_n = \frac{N^{[n]}}{n!c^{2n}}$. Можно считать, что $N \geqslant n$, иначе $\zeta_n = 0$.

$$\zeta_n^2 = \left[\frac{2N\cdot 2(N-1)\cdots 2(N-n+1)}{2n\cdot 2(n-1)\cdots 2}\right]^2 \cdot \frac{1}{c^{4n}} = \\ = \frac{(2N)^{[2n]}}{(2n)!c^{4n}} \cdot \frac{\frac{2N}{2N-1}\cdot\frac{2N-2}{2N-3}\cdots\frac{2N-2n+2}{2N-2n+1}}{\frac{2n}{2n-1}\cdot\frac{2n-2}{2n-3}\cdots\frac{2}{1}}.$$

Функция $\frac{2k}{2k-1}$ убывает, поэтому $\frac{2(N-k)}{2(N-k)-1} < \frac{2(n-k)}{2(n-k)-1}$, следовательно,

$$\zeta_n^2 \leqslant \frac{(2N)^{[2n]}}{(2n)!c^{2\cdot 2n}} = \eta_n.$$

Докажем, что $\mathtt{E}_x\,\eta_n < +\infty$. Действительно,

$$\left|\mathtt{E}_x\,\xi^2\right| \leqslant \left|\mathtt{E}_x\Big(1+\frac{\lambda}{c^2}\Big)^{2N}\right| \leqslant u(x,3\rho) \quad \text{и} \quad \mathtt{E}_x\,\xi^2 = \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\,\mathtt{E}_x\Big(\frac{(2N)^{[k]}}{k!c^{2k}}\Big),$$

отсюда

$$\mathtt{E}_x\,\frac{(2N)^{[k]}}{k!c^{2k}} < +\infty. \quad \square$$

3.2. Реализация оценки сдвига. Оценка ζ_n не является реализуемой в силу невозможности моделирования траектории бесконечной длины. Для получения реализуемой оценки остановим мартингал ξ_i в момент первого попадания процесса в ε-окрестность границы. Обозначим N_ε — число переходов в шар до попадания в ε-окрестность границы, x_ε — последнюю точку процесса, тогда $\xi_\varepsilon = \left(1+\lambda/c^2\right)^{N_\varepsilon} u(x_\varepsilon)$ является несмещённой оценкой $u(x,\lambda)$:

$$\xi_\varepsilon(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\frac{N_\varepsilon^{[k]}}{k!c^{2k}}\sum_{m=0}^{\infty}\lambda^m v_m(x_\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\sum_{k=0}^{n}\frac{N_\varepsilon^{[k]}}{k!c^{2k}}v_{n-k}(x_\varepsilon).$$

Отсюда

$$v_n(x) = \mathtt{E}_x\sum_{k=0}^{n}\frac{N_\varepsilon^{[k]}}{k!c^{2k}}v_{n-k}(x_\varepsilon). \tag{6}$$

Смещённая оценка $v_n(x)$ получится, если в (6) отбросить слагаемые, для которых $k<n$. Она имеет вид

$$\xi_{n,\varepsilon} = \frac{N_\varepsilon^{[n]}}{n!c^{2n}}. \tag{7}$$

3.3. Оценка смещения и трудоёмкость алгоритма. Оценим величину смещения $v_n(x) - \mathtt{E}_x\,\xi_{n,\varepsilon}$. Пусть $g(\varepsilon)$ — модуль непрерывности функции $v_1(x) = (\mathbb{G}\,\mathbf{1})(x)$, т. е. $|\mathbb{G}\,\mathbf{1}(x)| < g(\varepsilon)$, при $\operatorname{dist}(x,\Gamma) < \varepsilon$, значит, $v_k(x) = \mathbb{G}^{k-1}\,v_1(x) \leqslant \left\|\mathbb{G}^{k-1}\right\|_C g(\varepsilon)$. Тогда смещение v_n не превзойдёт

$$g(\varepsilon)\sum_{k=0}^{n-1}\left\|\mathbb{G}^{n-k-1}\right\|_C\cdot\left\|\mathbb{G}^k\right\|_C \leqslant g(\varepsilon)n\left\|\mathbb{G}\right\|_C^{n-1}.$$

Как правило, $g(\varepsilon) = g\cdot\varepsilon$, и для достижения смещения δ необходимо взять $\varepsilon = \delta/(ng\|\mathbb{G}\|_C^{n-1})$.

Для выпуклой области можно показать, что среднее число шагов процесса до попадания в ε-окрестность границы имеет порядок $|\ln\varepsilon|$.

4. Модельный пример.

4.1. Оценки итераций с помощью рядов. Рассмотрим задачу (1) в кубе $\mathcal{D} = [0,\,1]^3$. Собственные числа такой задачи известны:

$$\lambda_{k,l,m} = \pi^2(k^2 + l^2 + m^2), \quad k, l, m = 1, 2, 3, \ldots .$$

В частности, $\lambda_1 = 3\pi^2, \lambda_2 = 6\pi^2$, причём λ_2 имеет кратность 3.

Собственные функции имеют вид $\varphi_{k,l,m}(x, y, z) = X_k(x)Y_l(y)Z_m(z)$, где $X_k(x) = \sqrt{2}\sin\pi kx$, Y_l и Z_m строятся аналогично.

Используя разложение $\mathbf{1}$ по собственным функциям, можно получить тождество

$$(\mathbf{1},\ \mathbb{G}^p\,\mathbf{1}) = \sum_{k,l,m=0}^{\infty} \frac{8^3}{\pi^6} \frac{1}{(2k+1)^2(2l+1)^2(2m+1)^2} \times \\ \times \frac{1}{\{\pi^2\,[(2k+1)^2 + (2l+1)^2 + (2m+1)^2]\}^p}. \qquad (8)$$

Для определения суммы ряда (8) можно вычислять его частичные суммы $S_n = \sum\limits_{k,l,m=0}^{n} \ldots$.

Воспользовавшись неравенством $a + b + c \geqslant 3\sqrt[3]{abc} \quad (a \geqslant 0, b \geqslant 0, c \geqslant 0)$, получим

$$\frac{1}{[(2k+1)^2 + (2l+1)^2 + (2m+1)^2]^p} \leqslant \frac{1}{[3\sqrt[3]{(2k+1)^2(2l+1)^2(2m+1)^2}]^p},$$

что влечёт оценку остатка $R_N = (\mathbf{1},\ \mathbb{G}^p\,\mathbf{1}) - S_N$. А именно, $R_N \leqslant \tilde{R}_N$, где $\tilde{R}_N$ построено для ряда

$$\sum_{k,l,m=0}^{\infty} \frac{8^3}{3^p\pi^{6+2p}} \frac{1}{(2k+1)^{2+2p/3}(2l+1)^{2+2p/3}(2m+1)^{2+2p/3}},$$

который распадается в произведение трёх рядов.

Пусть $A_p = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^{2+2p/3}}$, $B_p = \frac{8^3}{3^p\pi^{6+2p}}$, тогда

$$\tilde{R}_N = 3B_p\Big[A_p^2 \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^{2+2p/3}}\Big] = 3B_pA_p^2 r_N.$$

Нетрудно получить оценку для r_N и A_p:

$$r_N \leqslant \frac{1}{2}\frac{1}{(1+2p/3)(2N+1)^{1+2p/3}}; \quad A_p \leqslant 1 + r_0 = 1 + \frac{1}{2(1+2p/3)};$$

$$R_N \leqslant \tilde{R}_N \leqslant 3B_p\left(1 + \frac{3}{6+4p}\right)^2 \frac{3}{6+4p}\frac{1}{(2N+1)^{1+2p/3}}.$$

Таблица 1

Оценка итераций оператора Грина

P	E	N	$(\mathbf{1},\ \mathbb{G}^p\,\mathbf{1})$
1	10^{-4}	23	0,020 17
2	10^{-7}	25	$6{,}243\,6 \cdot 10^{-4}$
4	10^{-12}	18	$6{,}942\,341 \cdot 10^{-7}$
6	10^{-17}	16	$7{,}905\,050\,4 \cdot 10^{-10}$
8	10^{-22}	15	$9{,}015\,860\,062\,6 \cdot 10^{-13}$
10	10^{-22}	3	$1{,}028\,397\,598 \cdot 10^{-15}$

Таблица 2

Оценки $\boldsymbol{\lambda_{(p)}}$

n	$\lambda_{(0)}$	$\lambda_{(1)}$	$\lambda_{(2)}$	$\lambda_{(3)}$	$\lambda_{(4)}$
Точные значения					
	40,021	29,989	29,635	29,611	29,609
Расчёт на MPI-кластере					
10^5	39,576	29,522	30,233	32,835	36,919
10^6	40,048	30,222	30,797	33,055	36,796
10^7	40,020	30,008	29,820	30,381	31,703
10^8	40,011	29,976	29,657	29,843	30,458
10^9	40,021	29,996	29,673	29,768	30,092
Расчёт с использованием видеокарты					
10^5	40,500	30,157	29,014	28,494	29,761
10^6	40,115	29,966	29,726	30,452	32,402
10^7	40,057	30,010	29,779	30,296	31,580
10^8	40,025	29,996	29,663	29,778	30,213
10^9	40,021	29,989	29,635	29,638	29,763

По заданной точности E вычислялись N и итерации оператора. Результаты сведены в табл. 1.

Полученные на основе этих значений $\lambda_{(p)} = \sqrt{\frac{(\mathbf{1},\ \mathbb{G}^{2p}\,\mathbf{1})}{(\mathbf{1},\ \mathbb{G}^{2p+2}\,\mathbf{1})}}$ приведены в табл. 2. Истинное собственное число $\lambda_1 = 3\pi^2 = 29{,}608\,813$.

4.2. Реализация оценки (7). Наибольшую трудность при реализации оценки (7) представляет моделирование плотности вероятности перехода $\tilde{p}(x, y) = q\delta_R(y) + (1 - q)p(x, y)$, где δ_R — равномерное распределение на сфере с центром в точке x, а $p(x, y) = \frac{c^2}{4\pi r}\frac{\operatorname{sh}(cR - cr)}{\operatorname{sh} cR - cR}$.

Моделирование $\tilde{p}(x, y)$ осуществлялось методом отбора.

Пусть $a = cR$ и $p(r)$ — плотность на $[0, a]$, η — случайная величина с плотностью $p(r)$.

Лемма. *Пусть* $\frac{r \operatorname{sh}(a-r)}{\operatorname{sh} a} < p(r)$, *тогда метод отбора моделирует смесь*

$$\frac{a}{\operatorname{sh} a}\delta(a - r) + \frac{r \operatorname{sh}(a - r)}{\operatorname{sh} a}. \tag{9}$$

Доказательство. Определим случайную величину ζ условиями:

$$\zeta = \begin{cases} \eta, & \text{если } \alpha p(\eta) < \frac{\eta \operatorname{sh}(a-\eta)}{\operatorname{sh} a}; \\ a, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Далее

$$P(\zeta = a) = P\Big(\alpha p(\eta) \geqslant \frac{\eta \operatorname{sh}(a-\eta)}{\operatorname{sh} a}\Big) = \int_0^a p(r)\Big(1 - \frac{r \operatorname{sh}(a-r)}{\operatorname{sh} a \cdot p(r)}\Big)dr = \\ = 1 - \int_0^a \frac{r \operatorname{sh}(a-r)}{\operatorname{sh} a} dr = \frac{a}{\operatorname{sh} a}.$$

Пусть $x < a$, тогда

$$F_\zeta(x) = P(\zeta < x) = P\Big(\eta < x,\, \alpha p(\eta) < \frac{\eta \operatorname{sh}(a-\eta)}{\operatorname{sh} a}\Big) = \\ = \int_0^x p(r) \frac{r \operatorname{sh}(a-r)}{\operatorname{sh} a \cdot p(r)} dr = \int_0^x \frac{r \operatorname{sh}(a-r)}{\operatorname{sh} a} dr. \quad \square$$

В качестве $p(r)$ можно выбрать $p(r) = r \operatorname{ch}(a-r)/(\operatorname{ch} a - 1)$, тогда, очевидно,

$$\frac{r \operatorname{sh}(a-r)}{\operatorname{sh} a} < \frac{r \operatorname{ch}(a-r)}{\operatorname{ch} a - 1}.$$

Лемма. *Пусть ξ_1 и ξ_2 независимые случайные величины, имеющие экспоненциальное распределение с плотностью e^{-x}, $x > 0$, $z_1 = \xi_1 - a\,[\xi_1/a]$, $z_2 = \xi_2 - a[\xi_2/a]$, тогда случайная величина*

$$\eta = \begin{cases} z_1 + z_2, & \text{если } z_1 + z_2 < a; \\ 2a - (z_1 + z_2), & \text{если } z_1 + z_2 \geqslant a; \end{cases}$$

имеет плотность $p(r)$.

Доказательство. Ясно, что $0 \leqslant z_1 < a$. Далее

$$P(z_1 < x) = \sum_{k=0}^{\infty} P(ka \leqslant \xi_1 < x + ka) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-ka} - e^{-ka-x} = \frac{1 - e^{-x}}{1 - e^{-a}};$$

$$P(z < x) = P(z_1 + z_2 < x) + P(2a - (z_1 + z_2) < x,\, z_1 + z_2 \geqslant a) = \\ = \frac{1}{(1 - e^{-a})^2} \left(1 - (x+1)e^{-x} + (x-1)e^{x-2a} + e^{-2a}\right);$$

$$p_z(x) = \frac{1}{(1 - e^{-a})^2} \left((x+1)e^{-x} - e^{-x} + e^{x-2a} + (x-1)e^{x-2a}\right) = \\ = \frac{1}{(1 - e^{-a})^2} \left(xe^{-x} + xe^{x-2a}\right) = \frac{2e^{-a} x \operatorname{ch}(a-x)}{1 - 2e^{-a} + e^{-2a}} = \frac{x \operatorname{ch}(x-a)}{\operatorname{ch} a - 1}. \quad \square$$

Моделирование переходной плотности $\tilde{p}(x, y)$ теперь не вызывает затруднений.

Лемма. *Пусть случайная величина* η *имеет плотность* (9) ($a = cR$), ω *— равномерно распределено на единичной сфере, тогда случайный вектор* $y = x + \eta\omega/c$ *имеет плотность распределения* $\tilde{p}(x, y)$.

4.3. Практическая реализация. От значения параметра c зависят средняя длина траектории и количество переходов в шар (табл. 3). Экспериментальным путём было выбрано значение $c = 15$; использованное значение $\varepsilon = 10^{-18}$. Описанный алгоритм был реализован на языке `C++`.

Таблица 3

Зависимость длины траектории l и среднего количества переходов в шар n от c

c	l	n
5	121	0
10	123	2
15	125	4
20	128	8
25	132	12

Как показывают результаты вычислений (табл. 2, 4), для получения приемлемой точности требуется моделирование порядка 10^9 траекторий, что требует значительных вычислительных ресурсов. При моделировании на одном ядре процессора `Intel® Core™2 Quad CPU Q8400@2,66 ГГц` необходимое процессорное время превысило бы 27 часов.

Для получения значений, указанных в первой части таблиц, использовались распределённые вычисления с использованием технологии `MPI` (`http://www.mpi-forum.org`) в реализации `MPICH2` (`http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpich2/`). С применением 13 ПК на базе `Intel® Core™2 Quad CPU Q8400@2,66 ГГц`, были запущены 50 вычислительных и один распределяющий процесс, что позволило сократить время расчёта до 36 минут. Для обеспечения независимости псевдослучайных чисел использовался параллельный 128-битный генератор псевдослучайных чисел [5]. Значения во второй части таблицы получены при вычислении на видеокарте с графическим процессором `NVIDIA® GeForce® 9600 GT` с применением технологии `CUDA`. Время расчёта составило 10 минут. Для компиляции использовался пакет `CUDA Toolkit v4.0 RC2` (`http://developer.nvidia.com/cuda-toolkit-40`), псевдослучайные числа генерировались с помощью входящей в него библиотеки `CURAND`. В зависимости от возможностей видеокарты вычисления с плавающей точкой могут вестись с одинарной или двойной точностью (использованная видеокарта обладает «вычислительными возможностями» 1.1 и поддерживает лишь одинарную точность). В случае, если работа с двойной точностью не поддерживается, при моделировании большого количества траекторий нужно использовать те или иные способы уменьшения вычислительной погрешности при суммировании. Эксперименты показали, что для данной задачи применимы следующие методы:

- суммирование с компенсацией по формуле Кахана [6];
- вычисление на графическом процессоре за один раз не очень большого количества траекторий (10^4–10^5) с последующим суммированием и осреднением на ПК с двойной точностью (это также помогает производит вычисления в случае, если нет возможности отключить монитор от видеокарты, чтобы избежать двухсекундного ограничения на время выполнения ядра).
- использование достаточного количества блоков (thread block) в сетке (grid) с последующим суммированием и осреднением результатов, полученных различными потоками сетки, не на видеокарте, а на ПК с двойной точностью.

Таблица 4

Оценки $g_p = (1,\ \mathbb{G}^p 1)$

n	g_1	g_2	g_4	g_6	g_8	g_{10}
Точные значения						
	0,020 170	$6{,}243\,6 \cdot 10^{-4}$	$6{,}942\,3 \cdot 10^{-7}$	$7{,}905\,0 \cdot 10^{-10}$	$9{,}015\,8 \cdot 10^{-13}$	$1{,}028\,3 \cdot 10^{-15}$
Расчёт на MPI-кластере						
10^5	0,020 344	$6{,}384\,5 \cdot 10^{-4}$	$7{,}325\,7 \cdot 10^{-7}$	$8{,}014\,6 \cdot 10^{-10}$	$7{,}433\,7 \cdot 10^{-13}$	$5{,}453\,8 \cdot 10^{-16}$
10^6	0,020 177	$6{,}235\,1 \cdot 10^{-4}$	$6{,}826\,4 \cdot 10^{-7}$	$7{,}197\,2 \cdot 10^{-10}$	$6{,}586\,9 \cdot 10^{-13}$	$4{,}865\,0 \cdot 10^{-16}$
10^7	0,020 168	$6{,}243\,7 \cdot 10^{-4}$	$6{,}933\,9 \cdot 10^{-7}$	$7{,}797\,5 \cdot 10^{-10}$	$8{,}447\,8 \cdot 10^{-13}$	$8{,}405\,2 \cdot 10^{-16}$
10^8	0,020 172	$6{,}246\,6 \cdot 10^{-4}$	$6{,}951\,9 \cdot 10^{-7}$	$7{,}904\,1 \cdot 10^{-10}$	$8{,}874\,9 \cdot 10^{-13}$	$9{,}566\,5 \cdot 10^{-16}$
10^9	0,020 169	$6{,}243\,5 \cdot 10^{-4}$	$6{,}938\,9 \cdot 10^{-7}$	$7{,}880\,5 \cdot 10^{-10}$	$8{,}892\,9 \cdot 10^{-13}$	$9{,}820\,4 \cdot 10^{-16}$
Расчёт с использованием видеокарты						
10^5	0,019 944	$6{,}096\,8 \cdot 10^{-4}$	$6{,}703\,9 \cdot 10^{-7}$	$7{,}963\,4 \cdot 10^{-10}$	$9{,}808\,5 \cdot 10^{-13}$	$1{,}107\,4 \cdot 10^{-15}$
10^6	0,020 101	$6{,}214\,4 \cdot 10^{-4}$	$6{,}920\,4 \cdot 10^{-7}$	$7{,}831\,6 \cdot 10^{-10}$	$8{,}445\,3 \cdot 10^{-13}$	$8{,}043\,8 \cdot 10^{-16}$
10^7	0,020 142	$6{,}232\,3 \cdot 10^{-4}$	$6{,}920\,0 \cdot 10^{-7}$	$7{,}803\,3 \cdot 10^{-10}$	$8{,}501\,9 \cdot 10^{-13}$	$8{,}525\,1 \cdot 10^{-16}$
10^8	0,020 167	$6{,}242\,3 \cdot 10^{-4}$	$6{,}937\,9 \cdot 10^{-7}$	$7{,}885\,1 \cdot 10^{-10}$	$8{,}892\,5 \cdot 10^{-13}$	$9{,}741\,7 \cdot 10^{-16}$
10^9	0,020 170	$6{,}243\,5 \cdot 10^{-4}$	$6{,}942\,3 \cdot 10^{-7}$	$7{,}904\,7 \cdot 10^{-10}$	$8{,}998\,7 \cdot 10^{-13}$	$1{,}015\,8 \cdot 10^{-15}$

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 11–01–00769–а).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1967. 436 с. [*Vladimirov V. S.* The equations of mathematical physics. Moscow: Nauka, 1967. 436 pp.]
2. *Ермаков С. М., Некруткин В. В., Сипин А. С.* Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. М.: Наука, 1984. 208 с. [*Ermakov S. M., Nekrutkin V. V., Sipin A. S.* Random processes for solving classical equations of mathematical physics. Moscow: Nauka, 1984. 206 pp.]
3. *Михайлов Г. А., Макаров Р. Н.* Параметрическое дифференцирование и оценки собственных чисел методом Монте-Карло // *Сиб. матем. журн.*, 1998. Т. 39, № 4. С. 931–941; англ. пер.:*Mikhaylov G. A., Makarov R. N.* Parametric differentiation and estimation of eigenvalues by the Monte Carlo method // *Siberian Mathematical Journal*, 1998. Vol. 39, no. 4. Pp. 806–815.
4. *Кузнецов А. Н., Сипин А. С.* Статистические оценки для степеней оператора Грина // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2009. № 2(19). С. 114–123. [*Kuznetsov A. N., Sipin A. S.* Statistical estimates for the degrees of Green operator // *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ. Ser. Fiz.-Mat. Nauki*, 2009. no. 2(19). Pp. 114–123].
5. *Михайлов Г. А., Марченко М. А.* Параллельная реализация статистического моделирования и генераторов случайных чисел: Препринт РАН; Сибирское отделение; Институт вычислительной математики и математической геофизики; № 1154. Новосибирск, 2001. 20 с. [*Mikhaylov G. A., Marchenko M. A.* Parallel realization of statistical simulation and random number generators: Preprint of RAS; Siberian Branch; Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics; No. 1154. Novosibirsk, 2001. 20 pp.]
6. *Kahan W.* Pracniques: further remarks on reducing truncation errors // *CACM*, 1965. Vol. 8, no. 1. Pp. 40.

Поступила в редакцию 11/V/2011;
в окончательном варианте — 15/XI/2011.

MSC: 65C05; 35J08

MONTE–CARLO ESTIMATIONS FOR POWERS OF GREEN OPERATOR AND THE FIRST EIGENVALUE FOR DIRICHLET BOUNDARY VALUE PROBLEM

A. N. Kuznetsov, I. A. Rytenkova, A. S. Sipin

Vologda State Pedagogical University,
6, S. Orlova st., Vologda, 160035, Russia.

E-mails: pm_kan@uni-vologda.ac.ru, profyservis@mail.ru, cac@uni-vologda.ac.ru

In this paper, we examine the algorithm for computing the powers of a Green operator and the first eigenvalue for the Dirichlet boundary value problem using Monte-Carlo method. The efficiency of numerical realization of these algorithms is also discussed.

Key words: *Monte–Carlo method, eigenvalues of the Dirichlet boundary value problem, Green function, Green operator, distributed computing .*

Original article submitted 11/V/2011;
revision submitted 15/XI/2011.

Andrey N. Kuznetsov, Senior Teacher, Dept. of Applied Mathematics. *Irina A. Rytenkova*, Master Student, Dept. of Applied Mathematics. *Aleksandr S. Sipin* (Ph. D. (Phys. & Math.)), Associate Professor, Dept. of Applied Mathematics.