

УДК 004.94

Расчет процессов, описываемых эллиптическими дифференциальными уравнениями, на основе графа вероятности переходов

*Агеев Д. Б., студент
Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Программное обеспечение ЭВМ и информационные технологии»*

*Научный руководитель: Градов В.М., д.т.н, профессор
Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана
gradov@bmstu.ru*

Введение

Наиболее известными эллиптическими дифференциальными уравнениями, описывающими различные физические процессы [1], являются уравнение Лапласа, Пуассона, стационарное уравнение Шредингера и уравнение Стокса. Расчет целевой функции даже для таких уравнений может занимать нескольких часов или даже дней. Это зависит от области, на которой рассчитывается целевая функция. Часто для такого вида расчета используется метод конечных разностей. Но он имеет существенный недостаток – расчет всех значений в рассматриваемой области. Метод Монте-Карло лишен данного недостатка, так как позволяет рассчитать значения только в определенных точках пространства. В тоже время для расчета одного значения требуется намного больше временных ресурсов, чем для расчета одного значения методом конечных разностей.

Как правило, решение дифференциальных эллиптических уравнений требуется для моделирования более сложных задач, а как следствие метод Монте-Карло для решения находит применение в совершенно различных областях, так, например, данный метод используется при моделировании полупроводниковых приборов для расчета электрофизических свойств [2].

В данной работе предложен модификация метода Монте-Карло, которая позволит сократить время расчета значений целевой функции для некоторой области пространства.

Описание процессов в многомерном пространстве

В рамках данной работы рассмотрим дифференциальное уравнение второго порядка следующего вида:

$$\sum_{i=0}^{n-1} a_i \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} - 2 \sum_{i,j=0, i>j}^{n-1} b_{i,j} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = -c$$

Данное уравнение справедливо для некоей области G , при этом она ограничена поверхностью G^0 , каждое значение которой равно $g(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$.

Если коэффициенты данного уравнения $a_i, i = \overline{0, n-1}, i \neq j, b_{i,j}, i, j = \overline{0, n-1}, i \neq j$ и c в разных точках области G имеют разные значения, то поверхность является неоднородной. При двумерной размерности пространства ($n=2$) и $a_0=a_1, b_{1,0}=b_{0,1}=0$ данное уравнение является уравнение Пуассона.

Воспользуемся подходом, который применяется для уравнения Пуассона [3]. Представим область в виде n -мерная решетка Θ , состоящая из узлов $\theta(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$, расстояние между которыми по все направлением равно h . Для каждого узла $\theta(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$ определены коэффициенты $a_i(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}), b_{i,j}(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$ и $c_i(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$. Если $\theta(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$ является граничным узлом, то дополнительно определено значение целевой функции $u(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) = g(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$. Множество Θ^0 содержит все граничные узлы решетки.

Запишем уравнение в виде разностной схемы:

$$\sum_{i=0}^{n-1} a_i \frac{u(\dots, x_i + h, \dots) - 2u(\dots, x_i, \dots) + u(\dots, x_i, \dots)}{h^2} - 2 \sum_{i,j=0, i>j}^{n-1} b_{i,j} \frac{u(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots)}{h^2} -$$

$$- 2 \sum_{i,j=0, i>j}^{n-1} b_{i,j} \frac{u(\dots, x_i + h, \dots, x_j + h, \dots) - u(\dots, x_i + h, \dots, x_j, \dots) - u(\dots, x_i, \dots, x_j + h, \dots)}{h^2} = -c$$

Перепишем данное уравнение и получим:

$$u(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) = \frac{1}{\sum_{i=0}^{n-1} 2a_i + \sum_{i,j=0, i>j}^{n-1} 2b_{i,j}} \cdot$$

$$\cdot \left(\sum_{i=0}^{n-1} \left(a_i + \sum_{j=0, i>j}^{n-1} 2b_{i,j} \right) u(\dots, x_i + h, \dots) + \sum_{i=0}^{n-1} a_i u(\dots, x_i - h, \dots) + h^2 c \right)$$

При этом на границе данная функция принимает значение равное:

$$u(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) = g(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$$

Отсюда следует, что вероятность перехода частицы из неграничного узла вдоль оси x_i для положительного направления:

$$p(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})_{i+} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} (a_i + \sum_{j=0, i>j}^{n-1} 2b_{i,j})}{\sum_{i=0}^{n-1} 2a_i + \sum_{i,j=0, i>j}^{n-1} 2b_{i,j}}$$

Вероятность для противоположного направления:

$$p(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})_{i-} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} a_i}{\sum_{i=0}^{n-1} 2a_i + \sum_{i,j=0, i>j}^{n-1} 2b_{i,j}}$$

При этом соблюдается условие нормировки, то есть $\sum_{i=0}^{n-1} (p_{i+} + p_{i-}) = 1$.

Свободный член неграничного узла равен:

$$\xi(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})_{i-} = \frac{h^2 c}{\sum_{i=0}^{n-1} 2a_i + \sum_{i,j=0, i>j}^{n-1} 2b_{i,j}}$$

Построив марковскую цепь, получим, что значение в каждой точке решетки рассчитывается как сумма свободных членов неграничных узлов пути блуждания и граничные значения в конечной точке.

Граф вероятности переходов

Расчет значения в каждом узле решетки потребляет огромное количество временных ресурсов, при этом каждый рассчитанный узел в дальнейшем можно рассматривать как граничный. Если перед вычислительной машиной стоит задачи рассчитать несколько значений решетки, то от того, в каком порядке были взяты узлы, зависит общее время расчета.

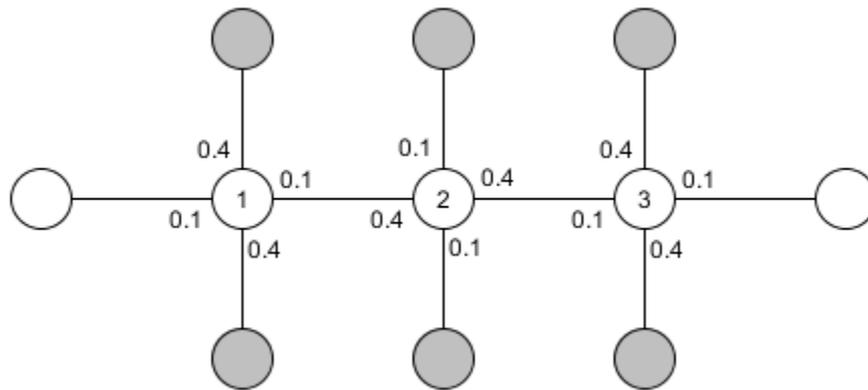


Рис.1 Фрагмент сетки с граничными и неграничными узлами

На рис.1 представлен фрагмент сетки. Рассмотрим данный пример. Необходимо найти значения в трех пронумерованных узлах. Закрашенные узлы являются граничными. Между узлами цифрами обозначена вероятность перехода. Как видно из рисунка вероятность частицы, вышедшей из узла 1 или узла 3, попасть на граничный узел за один скачек выше, чем попасть на другие узлы.

При этом выйдя из узла 2, частица с наибольшей вероятностью попадет на соседний неграничный узел, а только потом с вероятностью 0.8 перейдет на границу.

Если рассчитывается значение сначала в узле 2, а потом в оставшихся узлах, то средняя длина наиболее вероятного пути составит 2 скачка для узла 2. Если же рассчитать сначала значения в крайних узлах, а потом со средним, то средняя длина пути для узла 2 составит один скачек, так как с вероятностью 0.8 частица, вышедшая из него, перейдет на узел 1 или на узел 3, который к тому времени станут уже граничными.

Для определения, в каком порядке выбирать узлы, предлагается использовать графа вероятностей переходов Ω . Граф Ω состоит из вершин $\omega_i, i \neq 0$, которая определена для любого неграничного узла решетки Θ и ω_0 , соответствующая всем граничным узлам. Тогда дуги определяются следующим образом: $\forall i = \overline{0, n-1}, \forall j, k: j \neq 0, k \neq 0, j \neq k, \omega_j \rightarrow \theta(x_0, \dots, x_i, \dots, x_{n-1}), \omega_k \rightarrow \theta(x_0, \dots, x_i \pm h, \dots, x_{n-1}), \exists (\omega_k, \omega_j): \phi(\omega_k, \omega_j) = p_{i\pm}$, где ϕ - функция веса для графа Ω .

Дуги, исходящие из граничного узла ω_0 , строятся по следующему правилу: $\exists (\omega_0, \omega_j) \leftrightarrow \omega_j \rightarrow \theta(x_0, \dots, x_i, \dots, x_{n-1}), \theta(x_0, \dots, x_i \pm h, \dots, x_{n-1}) \in \Theta^0$. При этом вес дуги $\phi(\omega_0, \omega_j), j \neq 0$ равен вероятности перехода с предграничного узла на границу.

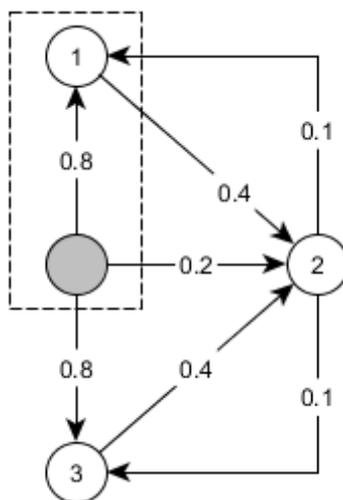


Рис. 2 Граф вероятностей переходов для фрагмента сетки

Построив граф вероятностей переходов Ω можно определить узел решетки Θ , в котором расчет значения целевой функции займет наименьшее время за счет сокращения длины пути блуждания частиц. Вершина будет соответствовать $\omega_i: \max_{i \neq 0} \phi(\omega_0, \omega_i)$. Затем необходимо рассчитать значение целевой функции для данной вершины. Теперь узел решетки, соответствующий данной вершине, стал новым граничным узлом, поэтому требуется слияние данной вершины с граничной вершиной. Слияние ω_0 и $\omega_i, i \neq 0$ требует удаления всех дуг $(\omega_j, \omega_i), j \geq 0$, так как невозможен переход между неграничными узлами и переход от граничного узла к неграничному. Значение дуг $(\omega_i, \omega_j), j > 0$ необходимо

объединить со значениями дуг $(\omega_0, \omega_j), j \geq 0$, то есть $\phi'(\omega_0, \omega_j) = \phi(\omega_0, \omega_j) + \phi(\omega_i, \omega_j)$, так как вероятность попадания на границу частицы с узла j увеличивается, если для данного узла определен переход на новый граничный узел. Процесс повторяется до тех пор, пока все вершины не сольются в одну.

На рис.2 представлен граф вероятностей переходов для рассмотренного ранее фрагмента сетки. Все граничные узлы сетки объединены в одну граничную вершину графа, выделенную на рисунке серым цветом. Вершины графа пронумерованы, в соответствии с приведенным ранее примером. Так, например, вероятность попадания частицы, находящейся в узле 2, в узел 1 равна 0.4, что соответствует дуге $(1,2)$ с весом 0.4.

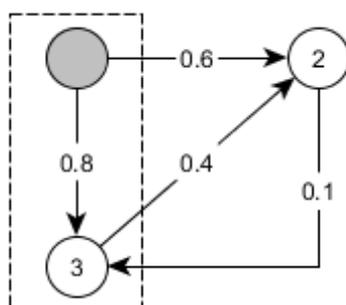


Рис. 3 Граф с объединенными вершинами

Рассмотрим на данном примере выбор узла, выходя из которого частица с максимальной вероятностью попадет на границу. Анализ значений начинается с вершины, соответствующей граничным узлам. Необходимо рассмотреть все дуги и найти дугу с максимальным весом. В данном случае таких дуг две. Выберем дугу, которая упирается в вершину с минимальным порядковым номером. Таким образом, узел для расчета выбран. Им стал узел 1. После расчета значения в нем, он стал новым граничным узлом, поэтому его следует объединить с граничным узлом, что отображает пунктирная линия на рисунке. На рис.3 представлен граф с объединенными вершинами.

Погрешность вычислений

Недостатком метода Монте-Карло по сравнению с методом разностных схем является меньшая точность. Если рассчитывается значение целевой функции в узле решетки, а затем этот узел рассматривается в качестве нового граничного, то при расчете значений в новых узлах необходимо учитывать, что погрешность накапливается.

Рассмотрим самый худший случай, когда значения целевой функции в соседних узлах уже рассчитано и все эти узлы стали новыми граничными. В таком случае в текущем узле погрешность будет рассчитываться по следующей формуле:

$$\varepsilon = \varepsilon' + \varepsilon_0 p_0 + \varepsilon_1 p_1 + \varepsilon_2 p_2 + \varepsilon_3 p_3$$

В данной формуле ε - результирующая погрешность, ε' - погрешность метода Монте-Карло для текущего узла, ε_i - погрешность в i -ом соседнем узле, p_i - вероятность перехода частицы в соседний узел.

В рамках эксперимента по определению погрешности рассмотрим уравнение Пуассона для двумерного пространства и реализуем три метода: Классический метод Монте-Карло, модифицированный метод Монте-Карло и Либмана. Модификация в данном случае подразумевает переопределение граничных узлов после каждого расчета значения целевой функции в узле. Результаты метода Либмана примем за эталон. В таком случае погрешность рассчитывается по формуле $\varepsilon = \frac{\sum_{i,j} |u_{i,j} + \tilde{u}_{i,j}|}{\sum_{i,j} |u_{i,j}|}$, где $u_{i,j}$ - значение, рассчитанное стохастическим методом, $\tilde{u}_{i,j}$ - значение, полученное в результате работы метода Либмана.

Сравнение точностей классического и модифицированного метода Монте-Карло

Количество частиц	Классический	Модифицированный
10	3,28E-006	1,40E-006
100	1,17E-006	4,90E-007
1000	3,36E-007	1,39E-007
10000	1,12E-007	7,49E-008
100000	5,28E-008	5,74E-008
1 000000	3,89E-008	6,06E-008

В приведенной далее таблице представлены результаты эксперимента по нахождению средней погрешности стохастических методов в зависимости от разных значениях числа частиц. В эксперименте использовалось дифференциальное уравнение $\frac{\partial^2 u(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} = e^{-100((x_1-0.5)^2 + (x_2-0.5)^2)}$, с граничными условиями $u(0, x_1) = u(1, x_1) = u(x_0, 0) = u(x_0, 1) = 300$. Результаты приведены для области размером 1 на 1. Для аппроксимации выбрана решетка, состоящая из 625 узлов.

Как видно из приведенной таблицы, классический метод продемонстрировал наихудший результат при малом количестве частиц. При увеличении количестве частиц данный метод оказался лучше по точности, чем модифицированный метод.

Вычислительный эксперимент

В рамках вычислительного эксперимента рассматривается двумерно пространство ($n=2$), описываемое дифференциальным уравнением вида:

$$a_0(x_0, x_1) \frac{\partial^2 u(x_0, x_1)}{\partial x_0^2} - 2b_{0,1}(x_0, x_1) \frac{\partial^2 u(x_0, x_1)}{\partial x_0 \partial x_1} + a_1(x_0, x_1) \frac{\partial^2 u(x_0, x_1)}{\partial x_1^2} = -c(x_0, x_1)$$

Область G представлена в виде единичного квадрата. Граничные условия имеют следующий вид:

$$u(0, x_1) = \mu_0(x_1)$$

$$u(1, x_1) = \mu_1(x_1)$$

$$u(x_1, 0) = \mu_2(x_0)$$

$$u(x_1, 1) = \mu_3(x_0)$$

Не теряя общности суждений, представим, что граничные функции $\mu_0(x) = \mu_1(x) = \mu_2(x) = \mu_3(x) = 0$, а коэффициенты $a_0(x_0, x_1)$, $b_{0,1}(x_0, x_1)$, $a_1(x_0, x_1)$ и $c(x_0, x_1)$ для каждой точки пространство определены произвольным образом и их значения колеблется в интервале $[0;1]$.

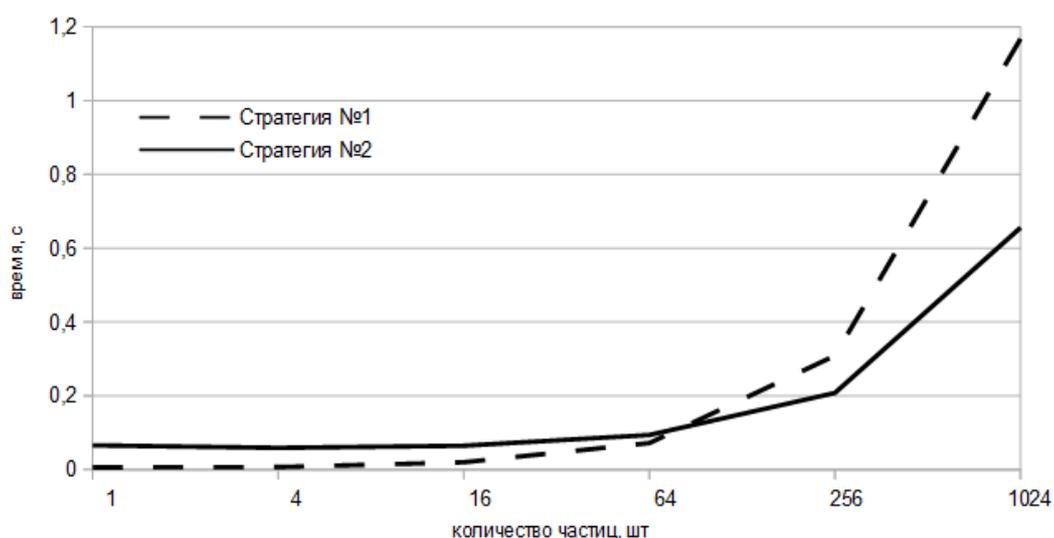


Рис. 4 Время расчета для параметра $s=50$

Необходимо рассчитать значения целевой функции на всей области G . Для расчета используется метод Монте-Карло. Для выбора порядка расчета значения используется две стратегии: взятие произвольного узла решетки и взятие узла в соответствии с графом наиболее вероятного перехода.

На рис.4 представлены результаты исследования, которые проведены для решетки Θ с параметром $s=50$, где параметр s – количество узлов вдоль одной оси.

В результате проведенного эксперимента видно, что стратегия, использующая граф наиболее вероятного перехода дает плохой результат при небольшом количестве частиц, но с увеличением количества частиц данная стратегия дает существенный выигрыш во времени. Чем больше параметр сетки s , тем критическая точка, по достижении которой стратегия с графом дает лучший результат, находится правее. Это объясняется увеличением накладными расходами на генерацию графа наиболее вероятного перехода при увеличении количества узлов в решетке.

Список литературы

1. Чеботарев А.М. Введение в теорию вероятностей и математическую статистику для физиков. М. : Изд-во МФТИ, 2009. 247 с.
2. Борздов В.М., Борздов А.В., Поздняков Д.В., Жевняк О.Г., Сперанский Д.С., Комаров Ф.Ф. Моделирование методом Монте-Карло приборных структур СБИС и УБИС // Международный конгресс по информатике «Информационные системы и технологии» (Минск, 31 окт. – 3 нояб. 2011 г.) В 2 ч. Ч. 1, Минск, 2011. С. 431–435.
3. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1973. 312 с.