

Обратные итерации при решении интегральных уравнений с полиномиальной нелинейностью

С. М. Ермаков, Т. О. Суровикина

Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Для цитирования: Ермаков С. М., Суровикина Т. О. Обратные итерации при решении интегральных уравнений с полиномиальной нелинейностью // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 1. С. 23–36. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.103>

Теория сопряженных операторов широко применяется при решении многомерных прикладных задач методом Монте-Карло. Для многих задач, описываемых линейными интегральными уравнениями второго рода, построены эффективные алгоритмы, использующие соотношение двойственности. С другой стороны, в работах Г. И. Марчука и его коллег сопряженные уравнения находят важные применения при планировании эксперимента. Ряд полученных в указанных областях результатов обобщен на случай нелинейных операторов. Г. И. Марчуком используется преимущественно метод приближенной линеаризации. В теории методов Монте-Карло имеются результаты для уравнений с полиномиальной нелинейностью типа Ляпунова — Шмидта, однако многие из интересных вопросов в этой области остаются открытыми. Предлагаемая работа содержит новые результаты относительно двойственных марковских процессов для решения полиномиальных уравнений методом Монте-Карло. В частности, в общем виде построен двойственный к ветвящемуся процессу марковский процесс и дана соответствующая несмещенная оценка функционала от решения уравнения. Изучен вопрос о возможности построения оператора, сопряженного к нелинейному.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, двойственная оценка, нелинейные уравнения Ляпунова — Шмидта, уравнение баланса, сопряженные уравнения.

1. Введение. Мотивацией к представленному результату послужили два направления исследований. Первое направление касается теории сопряженных уравнений, построенной Г. И. Марчуком и его учениками (см., например, монографию [1]). Напомним понятие сопряженного оператора: сопряженным к A называется такой оператор A^* , что для любых функций ϕ из области определения A , $D(A)$, и любых $\phi^* \in D(A^*)$ выполняется равенство $\int D(A) \cup D(A^*) \phi(x) A^* \phi^*(y) dx dy = \int D(A) \cup D(A^*) A \phi(x) \phi^*(y) dx dy$ (так называемое тождество Лагранжа).

Теория Г. И. Марчука строится вокруг сопоставления основному функциональному уравнению вида $A\phi = f$ сопряженного уравнения $A^*\phi^* = p$, где A и A^* — сопряженные в смысле Лагранжа операторы, а p , вообще говоря, — произвольная функция, то есть в зависимости от решаемой задачи p можно варьировать.

Относительно метода Монте-Карло данная теория находит свое применение следующим образом. Если нас интересует вычисление функционала $\int_D h(x)\phi(x)\mu(dx)$, где $\phi(x)$ является решением основного уравнения, то, оказывается, что выполняется

уравнение баланса, дающее второй способ вычисления данного функционала:

$$\int_D \phi(x)h(x)\mu(dx) = \int_D \phi^*(x)f(x)\mu(dx). \quad (1.1)$$

Второе направление относится к связи ветвящихся марковских процессов и так называемых уравнений Ляпунова — Шмидта, то есть уравнений с полиномиальной нелинейностью вида

$$\phi(x) = f(x) + \sum_{l=1}^N \int_{D^l} d\mu^l k_l(x, x_1, \dots, x_l) \prod_{j=1}^l \phi(x_j), \quad (1.2)$$

установленной С. М. Ермаковым в статье [2] (см. формулу (1.1) и условия 1–3 в приведенном тексте ниже).

Для линейного случая известен результат, позволяющий строить двойственную схему Неймана — Улама. Оказывается, что такая схема представляет собой для случайного процесса просто обращение прямого марковского процесса во времени. Кроме того, в статье В. В. Некруткина [3] был описан способ построения сопряженной схемы для полиномиального уравнения при помощи некоторой особой линейаризации: предлагается заменять исходное уравнение бесконечной системой линейных уравнений относительно произведений $\prod_{i=1}^n \phi(x_i)$, $n = 1, 2, \dots$ (такие уравнения получаются перемножением левых и правых частей (1.2)).

Этот подход очевидным образом обобщает известные в теории разностных уравнений (см., например, книгу [4]) связи между линейными уравнениями и характеристическими полиномиальными уравнениями.

Поскольку построение сопряженного в смысле Лагранжа оператора к матричному оператору тривиально (сводится к транспонированию), то можно было предполагать, что на этом пути возможно построить сопряженный к полиномиальному оператор. Простейший пример показывает, что это не так.

Рассмотрим простейшее кубическое уравнение вида $ax^3 + bx^2 + cx + d = x$. После проведения процедуры линейаризации мы получаем систему бесконечных линейных уравнений с матрицей коэффициентов

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} c & b & a & 0 & 0 & 0 & \dots \\ d & c & b & a & 0 & 0 & \dots \\ 0 & d & c & b & a & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Таким образом, мы имеем дело с матрицей, у которой только четыре диагонали отличны от нуля.

Система уравнений имеет вид $X = \mathbb{A}X + D$, где $X = (x, x^2, x^3, x^4, \dots)^T$, $D = (d, 0, 0, 0, \dots)^T$. Для того чтобы перейти к сопряженному процессу, мы используем сопряженный оператор $\mathbb{A}^* = \mathbb{A}^T$:

$$\mathbb{A}^* = \begin{pmatrix} c & d & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ b & c & d & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a & b & c & d & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a & b & c & d & 0 & \dots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Тогда формально сопряженное линейное уравнение $Y = \mathbb{A}^*Y + H$, где $H = (h, 0, 0, \dots)^T$ имеет структуру, отличную от уравнения $X = \mathbb{A}X + D$, и ему не удается сопоставить полиномиальное уравнение.

Из результатов работы [3] следует, что матрице \mathbb{A} может быть сопоставлен ветвящийся процесс, а матрице \mathbb{A}^* — обратный во времени (столкновительный) процесс, с помощью которого можно строить алгоритм метода Монте-Карло для решения уравнений с полиномиальной нелинейностью.

Предварительно, однако, полезно напомнить о решении линейного интегрального уравнения методом Монте-Карло.

Рассмотрим некоторые известные результаты для линейного уравнения. Кратко напомним алгоритм решения линейного интегрального уравнения второго рода

$$\phi(x) = \int_D k(x, y)\phi(y)\mu(dy) + f(x) \quad (1.3)$$

с помощью моделирования цепи Маркова. Здесь функции $f(x)$ и $k(x, y)$ заданы на носителях мер μ и $\mu \otimes \mu$ соответственно, (D, A) — область в евклидовом пространстве и сигма-алгебра на ней, μ задана на A .

Предполагается выполнение следующих условий:

1) условие мажорируемой сходимости, то есть сходимости итераций

$$\bar{\phi}_0 = |f|, \quad \bar{\phi}_m = \int_D |k(x, y)|\bar{\phi}(y)_{m-1}\mu(dy) + |f(x)|$$

и, следовательно, последовательных приближений

$$\phi_0 = f, \quad \phi_m = \int_D k(x, y)\phi(y)_{m-1}\mu(dy) + f(x);$$

2) задана некоторая функция $h(x)$ такая, что существует и конечен интеграл $\int_D \phi(x)h(x)\mu(dx)$.

Учитывая предположения выше, несмещенную оценку функционала $(\phi, h) = \int_D h(x)\phi(x)\mu(dx)$ можно построить как функцию на траекториях однородной марковской цепи с дискретным временем, некоторыми начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной плотностью $p(x, y)$, определенными также на носителях мер μ и $\mu \otimes \mu$ и удовлетворяющих ряду условий. Несмещенных оценок для (ϕ, h) указанного типа существует великое множество, причем условия согласования зависят от вида оценки.

Сам алгоритм состоит в N -кратном моделировании независимых траекторий цепи Маркова x_0, \dots, x_t и вычислении функции $\mathfrak{J}(x_0, \dots, x_t)$.

Для оценки функционала (ϕ, h) с помощью такой процедуры необходимо выполнение равенства $E\mathfrak{J} = (\phi, h)$. Известно много такого рода несмещенных оценок, и, как правило, они имеют вид

$$\mathfrak{J} = \sum_{m=0}^t \frac{h_0}{\pi_0} Q_m f_m.$$

Простейшим примером такой оценки, построенной на траектории $\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_t$, где t — момент обрыва цепи, является «оценка по поглощению»:

$$\mathfrak{J} = \frac{h_0}{\pi_0} \frac{K_{0,1}}{p_{0,1}} \dots \frac{K_{t-1,t}}{p_{t-1,t}} \frac{f_t}{g_t}, \quad (1.4)$$

где индексы при функциях и вероятностях обозначают индексы соответствующих состояний в траектории, то есть $h_0 = h(\xi_0)$, $\pi_0 = \pi(\xi_0)$, $K_{0,1} = k(\xi_0, \xi_1)$ и так далее. Наконец, g_t — вероятность обрыва цепи в ξ_t .

Для оценки по поглощению условия согласования марковской цепи с уравнением имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \pi(x) > 0, \text{ если } h(x) \neq 0, \\ p(x, y) > 0, \text{ если } k(x, y) \neq 0, \\ g(x) > 0, \text{ если } f(x) \neq 0. \end{cases}$$

Наряду с исходным уравнением (1.3) во многих случаях удобно рассматривать сопряженное уравнение $\phi^*(x) = \int_D k^*(x, y)\phi^*(y)\mu(dy) + h(x)$, где $k^*(x, y) = k(y, x)$ — сопряженный к $k(x, y)$ оператор, и может рассматриваться оценка

$$\mathfrak{J}^* = \sum_{m=0}^t \frac{f_0}{\pi_0^*} Q_m^* h_m.$$

Значит, для оценки по поглощению сопряженной будет являться оценка, построенная на траектории $\eta_0, \eta_1, \dots, \eta_\tau$, где τ — момент обрыва цепи, и имеющая вид

$$\mathfrak{J}^* = \frac{f_0}{\pi_0^*} \frac{K_{1,0}}{p_{0,1}^*} \dots \frac{K_{t,t-1}}{p_{t-1,t}^*} \frac{h_\tau}{g_\tau^*}. \quad (1.5)$$

Как и раньше, $f_0 = f(\eta_0)$, $K_{1,0} = k(\eta_1, \eta_0)$ и так далее. Условия согласования для данной оценки имеют вид

$$\begin{cases} \pi^*(x) > 0, \text{ если } f(x) \neq 0, \\ p^*(x, y) > 0, \text{ если } k(y, x) \neq 0, \\ g^*(x) > 0, \text{ если } h(x) \neq 0. \end{cases}$$

Так как условия согласования для цепей Маркова, на траекториях которых строятся оценки (1.4) и (1.5), различны, то, как правило, мы имеем дело с двумя различными цепями Маркова.

Легко видеть, что оценка (1.4) удобна при оценивании одного конкретного функционала, в то время как оценка (1.5) использует значения h только на заключительном этапе и может применяться для оценки многих функционалов при расчете одной траектории.

В линейном случае мы имеем равенство $(\phi, h) = (f, \phi^*)$ — соотношение баланса. Как следует из примера для кубического уравнения, можно ожидать, что в нелинейном случае такое соотношение не будет иметь место. Рассмотрим простейший случай уравнения с квадратичной нелинейностью вида

$$\phi(x) = f(x) + \int_{D^2} k_2(x, y, z)\phi(y)\phi(z)\mu(dy)\mu(dz).$$

Оператор с ядром $k_2(x, y, z)$ может быть формально представлен как оператор K_2 , действующий на функцию двух переменных $\psi(y, z)$, с ядром $k_2(x, u, y, z)$, где u является свободной или фиктивной переменной (оператор от нее не зависит). Мы вводим фиктивную переменную для того, чтобы аналогично линейному случаю

можно было бы получить сопряженный оператор простой перестановкой аргументов. Тогда сопряженным оператором к K_2 будет являться оператор K_2^* с ядром $k_2(y, z, x, u)$.

Попытки действовать по аналогии с линейным случаем и рассмотреть уравнение

$$\phi^*(x) = h(x) + \int_{D^2} k_2(y, z, x, u) \phi^*(y) \phi^*(z) \mu(dy) \mu(dz)$$

не позволяют, однако, получить соотношение баланса.

Действительно, домножим обе части прямого уравнения на $\phi^*(x)\phi^*(u)$, а уравнения с сопряженными операторами — на $\phi(x)\phi(u)$. После вычитания одного из другого получается равенство

$$(\phi, \phi^*) \left(\int_D \phi^*(u) \mu(du) - \int_D \phi(u) \mu(du) \right) = (f, \phi^*) \int_D \phi^*(u) \mu(du) - (h, \phi) \int_D \phi(u) \mu(du), \quad (1.6)$$

и соотношение баланса $(\phi, h) = (\phi^*, f)$ имеет место лишь в случае равенства интегралов $\int_D \phi^*(u) \mu(du)$ и $\int_D \phi(u) \mu(du)$ в предположении, что они отличны от нуля.

Таким образом, мы видим существенное отличие нелинейного случая от линейного в плане выполнения соотношения баланса. Заметим, что ряд интересных результатов, полученных Г. И. Марчуком и его учениками (см. книгу [1]) в линейном случае использует соотношение $(h, \phi) = (\phi^*, f)$, а в нелинейном — это же соотношение для приближенно линеаризованного оператора. Вопрос о пользе соотношения вида (1.6) в задачах планирования эксперимента требует отдельного рассмотрения.

2. Ветвящиеся процессы и нелинейные уравнения.

2.1. Нелинейные уравнения Ляпунова — Шмидта и методы их решения. Можно выделить класс нелинейных уравнений, для которых возможно построение алгоритмов, обобщающих описанные выше алгоритмы. Это уравнения с полиномиальной нелинейностью.

Рассмотрим уравнения Ляпунова — Шмидта вида

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^M \int_{D^i} k_i(x, y_1, \dots, y_i) \prod_{j=1}^i \phi(y_j) d\mu_i + f(x), \quad (2.1)$$

где (D, \mathfrak{A}) — область в евклидовом пространстве и сигма-алгебра на D , μ — мера, заданная на \mathfrak{A} , набор функций $\{k_i(x, y_1, \dots, y_i)\}$, $i \in 1 : M$, и свободный член $f(x)$ измеримы.

Для краткости будем использовать следующую форму записи уравнения (2.1): $\phi = \sum_{i=1}^M K_i \phi^i + f$, где $\phi^i = \prod_{j=1}^i \phi(y_j)$, а $(K_i \phi^i)(x) = \int_D k_i(x, y_1, \dots, y_i) \prod_{j=1}^i \phi(y_j) d\mu_i$.

В дальнейшем считаются выполненными следующие предположения:

1) последовательные приближения

$$\phi_0 = f, \quad \phi_n = \sum_{i=1}^M K_i \phi_{n-1}^i + f \quad (2.2)$$

сходятся к решению уравнения (2.1);

2) (условие мажорируемой сходимости) также сходятся последовательные приближения

$$\bar{\phi}_0 = |f|, \quad \bar{\phi}_n = \sum_{i=1}^M |K_i \bar{\phi}_{n-1}^i + |f||,$$

где $|f| = |f(x)|$ и $(|K_i \bar{\phi}^i|)(x) = \int_{D^i} |k_i(x, y_1, \dots, y_i)| \prod_{j=1}^i \bar{\phi}(y_j) d\mu_i$.

Для вычисления функционала $\int_D \phi(x) h(x) \mu(dx)$ может моделироваться поглощающий (то есть такой, что его траектория обрывается за конечное число шагов почти наверное) ветвящийся случайный процесс с дискретным временем, определяемый начальной плотностью распределения $\pi(x)$ и переходной плотностью

$$\mathfrak{P}(x \rightarrow x_1, \dots, x_i) = p(1 \rightarrow i, x) p_i(x \rightarrow x_1, \dots, x_i),$$

удовлетворяющей условиям

$$\begin{cases} p_i(1 \rightarrow i, x) \geq 0, & p_i(x \rightarrow x_1, \dots, x_i) \geq 0, \\ \sum_{i=1}^M p_i(1 \rightarrow i, x) = 1 - p(1 \rightarrow 0, x), \\ \int_{D^i} p(x \rightarrow x_1, \dots, x_i) d\mu^i = 1. \end{cases}$$

Также предполагаются выполненными условия согласования, связывающие случайный процесс с уравнением (2.1):

$$\begin{cases} \pi(x) > 0, \text{ если } h(x) \neq 0, \\ p_i(1 \rightarrow i, x) > 0, \text{ если в уравнении представлено слагаемое с ядром } k_i(x, y_1, \dots, y_i), \\ p(x \rightarrow x_1, \dots, x_i) > 0, \text{ если } k_i(x, x_1, \dots, x_i) \neq 0, \\ p(1 \rightarrow 0, x) > 0, \text{ если } f(x) \neq 0. \end{cases}$$

В терминах размножающихся частиц моделирование процесса описывается следующим образом.

1. При $t = 0$ моделируется плотность $\pi(x)$, с помощью которой получаем частицу в точке x_0 . Вычисляется $Q_0 = h(x_0)/\pi(x_0)$.

2. В момент времени $t, t > 0$, может существовать n_t частиц, $n_t \geq 1$. Случайным образом выбирается одна из частиц. Если обозначить координату выбранной частицы x'_t , то далее моделируется случайная величина, принимающая значения $0 \leq i_t \leq N$ с вероятностью $p(1 \rightarrow i_t, x'_t)$.

Если $i_t = 0$, то $Q_{t+1} = Q_t f(x'_t)/p(1 \rightarrow 0, x'_t)$ и число частиц уменьшается на единицу.

Если $i_t > 0$, то рождается i_t новых частиц в точках $x_t^1, \dots, x_t^{i_t}$, распределенных с плотностью $p_{i_t}(x'_t \rightarrow x_t^1, \dots, x_t^{i_t})$, и вычисляется

$$Q_{t+1} = Q_t \cdot \frac{k_{i_t}(x'_t, x_t^1, \dots, x_t^{i_t})}{p_{i_t}(x'_t \rightarrow x_t^1, \dots, x_t^{i_t})}.$$

При этом частица с координатой x'_t погибает. Таким образом, число частиц увеличивается на $i_t - 1$ частицу.

3. Если число частиц обнуляется, то траектория процесса обрывается. Будем обозначать этот момент времени τ .

Известно, что при условии сходимости мажорантного итерационного процесса построенная таким образом оценка является несмещенной.

Структура деревьев, на которых вычисляются оценки, связана с итерационным процессом

$$\phi_n(x) = \sum_{i=1}^M \int_{D^i} k_i(x, y_1, \dots, y_i) \prod_{j=1}^i \phi_{n-1}(y_j) d\mu_i + f(x).$$

Чтобы получить в нелинейном случае аналог в каком-то смысле сопряженной оценки, следует анализировать «обратные итерации»

$$\phi_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^M \int_{D^i} k_i(x, y_1, \dots, y_i) \prod_{j=1}^i \phi_n(y_j) d\mu_i + f(x),$$

а это требует специальной нумерации деревьев. Вопрос такой нумерации мы подробно рассмотрим для случая $M = 2$.

2.2. Нумерация деревьев. Кратко напомним процедуру сопоставления итерационному решению уравнения (2.1) ветвящегося дерева.

Если переписать выражение для ϕ_n через ϕ_0 , то получившиеся слагаемые принято ассоциировать с деревьями таким способом: листья дерева должны отвечать начальному приближению f , а его узлы — соответствующим ядрам k_i .

Рассмотрим частный случай — простейшее квадратное нелинейное уравнение. Исходя из приведенной выше схемы, получаем, что ему соответствуют бинарные деревья. Таким образом, при решении уравнения вида $\phi = K\phi^2 + f$ нас интересуют способы нумерации и перебора бинарных деревьев.

Любое бинарное дерево можно закодировать при помощи двоичного кода: сопоставим корню число 0, а число каждой следующей вершины будем получать приписыванием числу r ее предка единицы ($r1$), если вершина является правым потомком, и нуля ($r0$), если левым. Известно следующее утверждение (см. книгу [5]):

Предложение 1. *Зафиксируем некоторое натуральное $s \geq 0$ и рекуррентным образом определим $\phi_s: \phi_0 = f, \phi_s = K\phi_{s-1}\phi_{s-1} + f$.*

Каждому поддереву γ_n сопоставим функцию $x(r)$, а каждой тройке бинарных чисел $(r, r0, r1)$ — функцию $k(x(r), x(r0), x(r1))I(x(r1))I(x(r0))$, где

$$I(x) = \begin{cases} f(x), & \text{если } x \text{ — лист дерева и он находится на уровне } k < n, \\ \phi_s(x), & \text{если } x \text{ — лист дерева и он находится на уровне } n, \\ 1, & \text{если } x \text{ — узел ветвления дерева.} \end{cases}$$

Тогда верно следующее разложение итерационного решения с начальным приближением $\phi_0 = f$:

$$\phi_{n+s} = \sum_{\gamma_n \in \Gamma_n} \int \mathcal{J}(\gamma_n) d\mu^{|\gamma_n|}, \quad (2.3)$$

где $\mathcal{J}(\gamma_n) = \prod_{r, r0, r1: (r, r0, r1) \in \gamma_n} k(x(r), x(r0), x(r1))I(x(r1))I(x(r0))$ и $d\mu^{|\gamma_n|}$ обозначает интегрирование по всем вершинам дерева кроме корневой.

Аналогичное, но более громоздкое утверждение можно сформулировать и относительно связи итерационного решения уравнения вида (2.2) с деревьями (уже не бинарными).

Идея следующего утверждения заключается в том, что можно «перевернуть» описанные выше бинарные деревья и рассмотреть суммы, в которых мы движемся не от корневой вершины к листьям, а в обратном направлении. Таким образом, построение начинается с вектора из набора функций $I(x)$.

Нам понадобятся следующие обозначения.

1. Рассмотрим способ нумерации деревьев, в котором двойкой будет обозначаться узел дерева, а нулем — лист и его «пустые потомки». Тогда, записывая двойки и нули по уровням дерева, начиная с корня и двигаясь слева направо, мы получаем биекцию между множествами бинарных деревьев и множеством двоичных чисел вида

$$\mathfrak{B} = \left\{ b_1 b_2 \dots b_m, \text{ где } m = \sum_{i=0}^n 2^i, n \in \mathbb{N}, b_j \in \{0, 2\}, \right.$$

$$\text{и таких, что, если } b_j = 0, j = \sum_{i=0}^k 2^i + s, \quad s < 2^{k+1}, m > \sum_{i=1}^{k+1} 2^i,$$

$$\left. \text{то } b_l = 0, b_r = 0, r = \sum_{i=0}^{k+1} 2^i + 2s, l = \sum_{i=0}^{k+1} 2^i + 2s - 1 \right\}.$$

Поясним схему такого построения: мы рассматриваем двоичные векторы длины m , где последовательно (слева направо) кодируются нулями и единицами вершины дерева. Таким образом параметр n соответствует высоте дерева, а условие, связывающее b_j, b_l и b_r , есть условие того, что у вершины без потомков все последующие поколения также являются вырожденными. В формулах для b_j величина k — это уровень, на котором расположена вершина, а s — ее порядковый номер при нумерации справа налево. Так как b_l и b_r являются потомками b_j , то l и r явно выражаются через параметры k и s .

2. $B^h = \{1, 2, \dots, 2^h\}$ — множество всевозможных вершин бинарного дерева на уровне h . Кроме того, под записью $b_{i,h}$ будем понимать i -ю вершину при нумерации слева направо на уровне h . Сразу заметим, что потомки вершины $b_{i,h}$ имеют индексы $2i - 1, h + 1$ и $2i, h + 1$.

3. Каждому поддереву дерева высоты n соответствует некоторый бинарный вектор $b_1 \dots b_m$, где $m = \sum_{i=0}^n 2^i$. Таким образом, по аналогии с известным утверждением каждому поддереву γ_n мы сопоставляем функцию $x(b_1 \dots b_m)$, а каждой тройке бинарных чисел $(b_{i,h}, b_{2i-1,h+1}, b_{2i,h+1})$ — функцию $I(x(b_{2i-1,h+1}))I(x(b_{2i,h+1}))K(b(x_{i,h}), x(b_{2i-1,h+1}), x(b_{2i,h+1}))$, где

$$I(x) = \begin{cases} f(x), & \text{если } x(b_{i,h}) \text{ — лист дерева и он находится на уровне } k < n, \\ & \text{то есть } h < n \text{ и } b_{i,h} = 0, \\ \phi_s(x), & \text{если } x \text{ — лист дерева и он находится на уровне } n, \\ 1, & \text{если } x \text{ — узел ветвления дерева и он не является корнем,} \\ x, & \text{если } x \text{ — узел ветвления дерева и корень дерева.} \end{cases}$$

Предложение 2. *Обозначим*

$$\begin{aligned}
 V(x(b_{1,h}, \dots, b_{2^h,h})) &= \sum_{b_{1,h} \in \{0,2\}} \dots \\
 &\dots \sum_{b_{2^h,h} \in \{0,2\}} \prod_{i=1}^{2^h} I(x(b_{2^{i-1},h+1})) I(x(b_{2^i,h+1})) K(x(b_{i,h}), x(b_{2^{i-1},h+1}), x(b_{2^i,h+1})), \\
 W(x(b_{1,h}, \dots, b_{2^h,h})) &= \\
 &= \prod_{i=1}^{2^h} \left(1 - \mathbb{1}\{b_{i,h} = 0 \text{ и } (h = 0 \text{ или } b_{2^{i-1},h+1} = 2 \text{ или } b_{2^i,h+1} = 2)\} \right).
 \end{aligned}$$

Формально доопределим $I(x(b_{2^{i-1},h+1}))I(x(b_{2^i,h+1}))K(x(b_{i,h}), x(b_{2^{i-1},h+1}), x(b_{2^i,h+1})) = 1$, если вершина $b_{i,h}$ потомков не имеет, то есть $b_{i,h} = 0$. Тогда

$$\begin{aligned}
 \phi_{n+s}(x(b_{1,0})) &= f(x(b_{1,0})) + \int V(x(b_{1,n-1}, \dots, b_{2^{n-1},n-1})) \times \\
 &\times \left(W(x(b_{1,n-2}, \dots, b_{2^{n-2},n-2})) V(x(b_{1,n-2}, \dots, b_{2^{n-2},n-2})) \right) \times \dots \times \\
 &\times \left(W(x(b_{1,0})) V(x(b_{1,0})) \right) d\mu^{b_{1,n-1}, \dots, b_{2,1}},
 \end{aligned}$$

где $d\mu^{b_{1,n-1}, \dots, b_{2,1}}$ обозначает интегрирование по всем вершинам дерева, кроме корневой, а $x(b_{1,0})$ — корень дерева.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Прежде чем приступить к доказательству утверждения, заметим, что суммирование по всем возможным состояниям вершин (0 или 2) позволяет получить поддереву дерева высоты n любой высоты, меньшей или равной n . Действительно, для того чтобы получить поддерево высоты l , достаточно рассмотреть слагаемое с $b_{i,m} = 0$ для $\forall i$ при любых $m > l$ и хотя бы с одной ненулевой вершиной на уровне l .

Перейдем к доказательству утверждения.

Доказывать будем индукцией по n . При $n = 1$ утверждение очевидно, так как, по сути, прямой и обратный порядок совпадают.

Пусть утверждение верно для некоторого n , покажем, что из этого следует выполнение равенства для $n + 1$. Для этого достаточно выразить ϕ_{n+1} через ϕ_{n-1} и проверить, соответствуют ли слагаемые прямой сумме.

Вырожденное дерево (ему соответствует слагаемое f), очевидно, в сумме присутствует.

Дереву с одним узлом разветвления отвечает слагаемое с $b_{i,1} = 0$ для всех $i \in X^1$ и $b_{1,0} = 2$. Наконец, рассмотрим сумму поддеревьев, соответствующую высоте $h = 2$. Для $V(x(b_{1,2}, b_{1,2}))$ возможны три варианта: $V(x(2, 2))$, $V(x(2, 0))$ и $V(x(0, 2))$, которые и задают нужные конфигурации деревьев. \square

Аналогично можно доказать утверждение и для произвольного интегрального уравнения с полиномиальной нелинейностью вида (2.1), то есть для итераций типа (2.2).

На основе приведенного способа нумерации или перечисления деревьев можно построить алгоритм их моделирования, который при правильном подборе весов будет соответствовать обращению времени в ветвящемся процессе.

2.3. Построение обратного процесса. Рассмотрим поглощающий марковский процесс с начальным распределением $\pi^*(x)$ и переходной плотностью

$$\mathfrak{P}^*(x_1, \dots, x_i \rightarrow x) = p(i \rightarrow 1, x_1, \dots, x_i) p_i(x_1, \dots, x_i \rightarrow x), \quad \mathfrak{P}_0^*(x) = p(0 \rightarrow 1) \pi^*(x). \quad (2.4)$$

Пусть выполнено $\int_D p_i(x_1, \dots, x_M \rightarrow x) \mu(dx) = 1, 1 \leq i \leq M$. Здесь вероятность $p(0 \rightarrow 1)$ отвечает за рождение новой частицы, а плотность $\pi^*(x)$ — за координату, в которой новая частица возникает.

Состояние марковского процесса определяется числом частиц m и их местоположениями: x_1, \dots, x_m . В любой момент времени частицы считаются равноправными, то есть при необходимости выбрать i частиц, $i \in 1 : M$, каждая частица может быть выбрана с одинаковой вероятностью. Кроме того, для каждого $s = \min(m, M)$ выбранных случайно частиц выполняется равенство

$$\sum_{i=0}^s p_i(i \rightarrow 1, x_1, \dots, x_i) = 1.$$

Опишем процедуру вычисления на траекториях двойственного (столкновительного) процесса функционала Q_t^* . В начальный момент времени $Q_0^* = 1$, а переход от Q_t^* к Q_{t+1}^* происходит по следующему правилу:

- 1) если рождается новая частица в точке x' , то $Q_{t+1}^* = Q_t^* \frac{f(x')}{\pi^*(x')}$;
- 2) если происходит столкновение частиц $x'_1, \dots, x'_m, m \leq N$, в ходе которого m частиц преобразуются в одну с координатой x' , то

$$Q_{t+1}^* = Q_t^* \frac{k_m(x', x'_1, \dots, x'_m)}{\mathfrak{P}^*(x'_1, \dots, x'_m \rightarrow x')}$$

- 3) если траектория обрывается в точке x' , то $Q_{t+1}^* = Q_t^* \frac{h(x')}{g(x')}$, где $g(x')$ определяется равенством $1 - p_0(0 \rightarrow 1, x')$.

При этом во всех описанных выше случаях предполагается, что выполнены условия согласования, то есть знаменатели отличны от нуля, если отличны от нуля числители.

Теорема 1. При выполнении условий согласования построенная оценка является несмещенной, то есть

$$EQ_\tau^* = (h, \phi), \quad (2.5)$$

где τ — момент обрыва траектории двойственного процесса, а ϕ — решение исходного уравнения.

2.4. Идея доказательства. Случайный процесс, определяемый переходной плотностью \mathfrak{P}^* , имеет своими траекториями деревья, аналогичные по своей структуре траекториям ветвящегося процесса. При этом выполнение условий согласования означает в том числе то, что для всех значений x, x_1, \dots, x_N значения плотностей $\mathfrak{P}(x \rightarrow x_1, \dots, x_N)$ и $\mathfrak{P}^*(x_1, \dots, x_N \rightarrow x)$ одновременно отличны от нуля. Это приводит к тому, что множества траекторий обоих процессов совпадают.

Осталось заметить, что при вычислении математического ожидания знаменатель у Q_τ^* сокращается, а числитель совпадает с числителем прямой оценки Q_τ . При этом в алгоритме реализуемы все возможные поддеревья, что и доказывает равенство (2.5).

Таким образом, касательно второго вопроса, поставленного нами во введении, можно отметить, что, моделируя столкновительный процесс, мы очевидным образом имеем возможность одновременно вычислять оценки многих функционалов (h_i, ϕ) .

2.5. Численный эксперимент. Ниже приведена иллюстрация изложенного алгоритма на численном примере уравнения с квадратичной нелинейностью.

Рассмотрим уравнение

$$\Delta u - a^2 u + \alpha u^2 = f \quad \text{с краевым условием } u(\Gamma) = 0 \quad (2.6)$$

в области $D^2 = [0, 1]^2$. Уравнения такого вида $(\Delta u - P(u) = 0$, где $P(u)$ — полином от u) изучались в работе [6].

Для того чтобы решать данное уравнение при помощи метода Монте-Карло, перейдем к разностной схеме. Для простоты будем считать, что шаг по сетке равен s и он одинаков по обоим переменным. Таким образом, нас интересует решение разностного аналога уравнения (2.6):

$$u_{i,j} = \frac{1}{4 + a^2 s^2} \left(u_{i+1,k} + u_{i-1,k} + u_{i,k+1} + u_{i,k-1} + \alpha s^2 u_{i,k}^2 - s^2 f_{i,k} \right). \quad (2.7)$$

Зададим значения $a^2 = 5$, $\alpha = 0.1$ и положим

$$f(x, y) = (y^3 - 1.2y^2 + 0.2y)(6x - 2.6) + (x^3 - 1.3x^2 + 0.3x)(6y - 2.4) - a^2(x^3 - 1.3x^2 + 0.3x)(y^3 - 1.2y^2 + 0.2y) + \alpha(x^3 - 1.3x^2 + 0.3x)^2(y^3 - 1.2y^2 + 0.2y)^2.$$

В этом случае решение уравнения имеет вид $u(x, y) = x(1-x)(x-0.3)y(1-y)(y-0.2)$, а уравнение (2.7) удовлетворяет условию мажорантной сходимости и, следовательно, к нему может быть применен метод Монте-Карло.

Нас будет интересовать вычисление функционала $\int_{[0,1]^2} u(x, y) dx dy$, то есть $h(x, y) = 1$ для $\forall x, y \in [0, 1]$. Истинное значение интеграла до сеточной аппроксимации равно 0.001(6) (в данном случае сетка не вносит существенной погрешности). В табл. 1 и 2 приведены вычисленные оценки при прямой и сопряженной схеме моделирования соответственно. Здесь шаг $s = 0.01$, $p_0 = 0.000025$, $p_1 = 0.249$. Можно видеть, что точность оценки, полученной при помощи столкновительного процесса, не хуже, чем точность оценки на траекториях ветвящегося процесса. Предполагалось, что второй момент оценки конечен, что не противоречит данным моделирования. Поскольку вероятность обрыва в прямой схеме пропорциональна произведению значений вероятности поглощения, то в обратной схеме целесообразно использовать в качестве начального распределения геометрическое.

2.6. Прямая схема моделирования. Алгоритм. В начальный момент времени моделируется равномерно распределенная случайная точка на решетке, не включая границу. После этого происходят следующие случайные блуждания: с вероятностью p_0 частица погибает (оценка умножается на $-f(x, y)s^2/(p_0(4 + a^2 s^2))$); с равными вероятностями p_1 она переходит в соседнюю точку на сетке, а оценка умножается на $1/((4 + a^2 h^2)p_1)$; наконец, с вероятностью $1 - 4p_1 - p_0$ происходит

Таблица 1. Вычисление интеграла от решения уравнения (2.7) при помощи ветвящегося процесса

N	10^2	10^4	10^6
\widehat{Q}	0	0.0019	0.00164
Sd	0	0.23	0.22
Доверительный интервал	–	(–0.0026, 0.0065)	(0.0012, 0.0021)

ветвление, то есть в той же точке рождается еще одна частица и оценка умножается на $\alpha s^2 / (4 + a^2 s^2)$ и делится на эту вероятность. Далее случайным образом выбирается одна из существующих частиц и разыгрывается, что с ней происходит. Процедура повторяется, пока не погибнет последняя частица.

Таблица 2. Вычисление интеграла от решения уравнения (2.7) при помощи столкновительного процесса

N	10^2	10^4	10^6
\widehat{Q}	0	0.0033	0.00156
Sd	0	0.1659	0.1635
Доверительный интервал	–	(0, 0.0065)	(0.0012, 0.0019)

2.7. Обратная схема моделирования. Алгоритм. Разыгрывается геометрическая вероятность числа частиц. Далее с весами w_i , согласованными с $f(x_i, y_i)$, выбирается, из каких точек в области и на границе (так как f на границе не нуль) стартуют частицы. В начальный момент времени в алгоритме участвует n частиц, а

$$Q_0^* = \frac{1}{p(1-p)^{(n-1)}} \prod_{i=1}^n f(x_i, y_i) / w_i.$$

Далее с теми же вероятностями и весами, как и в первом алгоритме, происходит блуждание в области. С вероятностью p_0 происходит рождение новой частицы и домножение оценки на $f(x_i, y_i) / w_i$. С вероятностью $1 - 4p_1 - p_0$ происходят либо столкновение двух случайных частиц (из рассматриваемого множества) и гибель первой из них, либо, если есть всего одна частица в области, гибель этой частицы и обрыв траектории. При этом оценка домножается на отношение соответствующих коэффициентов к вероятности данного события.

3. Заключение. В настоящей работе рассмотрен вопрос возможности построения сопряженного уравнения к исходному уравнению с полиномиальной нелинейностью. Показано, что путем использования формально сопряженного оператора добиться выполнения уравнения баланса не получается.

Столкновительный процесс, описанный в работе В. В. Некруткина [3], позволяет решать уравнения с полиномиальной нелинейностью. Как известно, существует два основных метода обработки деревьев ветвящегося процесса: «по поколениям» и лексикографический. Они различаются по объему памяти, используемой для хранения промежуточных результатов, что может быть очень важным для конкретных задач. Процесс из статьи [3] соответствует обращению процесса по поколениям.

В статье впервые в явном виде указаны переходные плотности, соответствующие прямому и двойственному процессам, что дает возможность обрабатывать траектории и по поколениям, и лексикографически, а также строить другие несмещенные оценки функционалов.

Литература

1. Марчук Г. И. *Сопряженные уравнения и анализ сложных систем*. Москва, Наука (1992).
2. Ермаков С. М. Об аналоге схемы Неймана — Улама в нелинейном случае. *Журнал вычисл. матем. и матем. физики* **13** (3), 564–573 (1973).
3. Некруткин В. В. Прямая и сопряженная схема Неймана — Улама для решения нелинейных интегральных уравнений. *Журнал вычисл. матем. и матем. физики* **14** (6), 1409–1415 (1974).
4. Гельфонд А. О. *Исчисление конечных разностей*. Москва, URSS (2018).
5. Ермаков С. М. *Метод Монте-Карло в вычислительной математике: Вводный курс*. Санкт-Петербург, Невский Диалект (2009).
6. Мысовских И. П. О сходимости метода Л. В. Канторовича для решения нелинейных функциональных уравнений и его применениях. *Вестник Ленинградского университета. Серия 1. Математика. Механика. Астрономия*, вып. 11, 25–48 (1953).

Статья поступила в редакцию 26 июля 2021 г.;
доработана 1 сентября 2021 г.;
рекомендована к печати 2 сентября 2021 г.

Контактная информация:

Ермаков Сергей Михайлович — д-р физ.-мат. наук, проф.; sergej.ermakov@gmail.com
Суровикина Тамара Олеговна — аспирант; tamara.surovikina@gmail.com

Backward iterations for solving integral equations with polynomial nonlinearity

S. M. Ermakov, T. O. Surovikina

St Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St Petersburg, 199034, Russian Federation

For citation: Ermakov S. M., Surovikina T. O. Backward iterations for solving integral equations with polynomial nonlinearity. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 1, pp. 23–36.
<https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.103> (In Russian)

The theory of adjoint operators is widely used in solving applied multidimensional problems with Monte Carlo method. Efficient algorithms are constructed using the duality principle for many problems described in linear integral equations of the second kind. On the other hand, important applications of adjoint equations for designing experiments were suggested by G. Marchuk and his colleagues in their respective works. Some results obtained in these fields are also generalized to the case of nonlinear operators. Linearization methods were mostly used for that purpose. Results for Lyapunov — Schmidt nonlinear polynomial equations were obtained in the theory of Monte Carlo methods. However, many interesting questions in this subject area are remained open. New results about dual processes used for solving polynomial equations with Monte Carlo method are presented. In particular, an adjoint Markov process for the branching process and the corresponding unbiased estimate of the functional of the solution to the equation are constructed in a general form. The possibility of constructing an adjoint operator to a nonlinear one is discussed.

Keywords: Monte Carlo method, dual estimate, Lyapunov — Schmidt nonlinear equations, balance equation, adjoint equations.

References

1. Marchuk G. I. *Sopriazhennyye uravneniia i analiz slozhnykh sistem*. Moscow, Nauka Publ. (1992). (In Russian) [Eng. transl.: Marchuk G. I. *Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems*. Netherlands, Springer (1995)].
2. Ermakov S. M. An Analogue of Neumann—Ulam Scheme in a Nonlinear Case. *Journal of Numerical Mathematics and Mathematical Physics* **13** (3), 564–573 (1973). (In Russian)
3. Nekrutkin V. V. Direct and Adjoint Neumann—Ulam Scheme for Solutions of Nonlinear Integral Equations. *Journal of Numerical Mathematics and Mathematical Physics* **14** (6), 1409–1415 (1974). (In Russian)
4. Gelfond A. O. *Calculus of Finite Differences*. Moscow, URSS Publ. (2018). (In Russian)
5. Ermakov S. M. *Monte Carlo Method in Numerical Mathematics: An Introductory Course*. St Petersburg, Nevskiy Dialect Publ. (2009). (In Russian)
6. Mysovskikh I. P. On the convergence of L. V. Kantorovich’s method for solving nonlinear functional equations and its applications. *Vestnik of Leningrad University. Series 1. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, iss. 11, 25–48 (1953). (In Russian)

Received: July 26, 2021
Revised: September 1, 2021
Accepted: September 2, 2021

Authors’ information:

Sergey M. Ermakov — sergej.ermakov@gmail.com

Tamara O. Surovikina — tamara.surovikina@gmail.com