

БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ

284

Тодор Василев Тодоров

ДИПЛОМАТИЧЕСКИ
ДИПЛОМАТИЧЕСКИ

ЦЕНТРАЛНА ЛАБОРАТОРИЯ ПО ПАРАЛЕЛНА
ОБРАБОТКА НА ИНФОРМАЦИЯТА

БАЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ

Тодор Василев Гюров

МОНТЕ КАРЛО АЛГОРИТМИ ЗА НЯКОИ ЗАДАЧИ
ЗА ПРЕНОС

ДИ С Е Р Т А Ц И Я

за присъждане на
образователната и научна степен „Доктор“

Научен ръководител:

Ст.н.с. I ст., д.н. Иван Томов Димов

София, 1999

Този дисертационен труд посвещавам
на четири годишната ми дъщеря
Силви-Мария.

1 юни 1999 г.

Съдържание

Увод	5
1 Итерационен Монте Карло алгоритъм за гранични задачи за елиптични частни диференциални уравнения	27
1.1 Постановка на задачата	27
1.2 Локално – интегрално представяне	28
1.3 Метод Монте Карло и алгоритъм на селекцията	37
1.4 Оценка за изчислителната сложност на итерационния Монте Карло алгоритъм	46
1.5 Числени експерименти и паралелна реализация	56
1.6 Изводи	61
2 Монте Карло алгоритми за интегрални уравнения с полиномиална нелинейност	63
2.1 Постановка на задачата	63
2.2 Връзка между интегралните уравнения с полиномиална нелинейност и разклонените стохастични процеси	66

2.3	Монте Карло метод	71
2.4	Минимизация на дисперсията	75
2.5	Монте Карло алгоритми с почти оптимални плътности	94
2.6	Решаване на системи нелинейни алгебрични уравнения от специален тип	96
2.7	Числени експерименти и паралелна реализация	100
2.8	Изводи	104
3	Приложение на Монте Карло алгоритмите за симулиране на квантов транспорт на електрони в полупроводници	105
3.1	Постановка на задача	105
3.2	Монте Карло метод	108
3.3	Монте Карло алгоритми	115
3.4	Числени резултати	121
3.5	Изводи	128
	Заклучение	129
	Литература	131

Увод

В настоящия дисертационен труд са предложени и изследвани алгоритми от типа Монте Карло за решаване на две задачи за пренос, а именно: решаване на елиптична гранична задача, описваща пренос на замърсители и решаване на интегрални уравнения, възникващи при квантов транспорт на електрони в полупроводници.

Названието „Монте Карло“ идва от града Монте Карло /княжество Монако/, известен в цял свят с многото си казина, а един от най-простите механични прибори за получаване на случайни числа всъщност е рулетката. За създатели на Монте Карло (МК) метода се считат американските математици - Нойман и Улам, а за рожденна дата се приема 1949 г., когато се появява статията на Метрополис и Улам [47] „Монте Карло метод“.

Обаче до появата на електронно изчислителните машини методите Монте Карло не успяха да се наложат като универсалните числени методи, тъй като моделирането на случайна величина се оказва труден процес с тогава съществуващата изчислителна техника.

Бурното развитие на изчислителните технологии през последните 20 години доведе до засилен интерес към тези методи. Важна предпоставка за тяхното приложение е както високата им степен на паралелност, така и факта, че те позволяват да се решават големи (large-scale) задачи в сложни области, описващи

реални процеси, нерешими с класическите числени методи.

Поради стохастическата си природа предимствата на МК методите в сравнение с детерминистичните числени методи са следните:

1. Връзката между размерността на задачата и необходимата компютърната памет, като правило е линейна, което позволява да се решават задачи с големи размерности.
2. Не е необходимо да се намира решението в цялата област: методите МК дават възможност да се пресметне непосредствено интересуващия ни функционал от решението, например решението в произволна точка, производната и интеграла от решението, в стохастическите задачи - вероятността за определено състояние, интензивността на флукуацията в зададена точка и т.н.
3. Алгоритмите МК са достатъчно прости за реализация и дават възможност оперативно да се решават задачи със сложни граници.
4. Вероятностната природа на тези методи позволява да се намира в известен смисъл обобщено решение на различни задачи, свързани с решаване на уравнения (частни диференциални уравнения, интегрални уравнения), а алгоритмите практически не се усложняват при решаване на задачи с особености на граничните условия, негладки граници, сложни десни части.
5. Алгоритмите МК притежават вътрешно-присъщ паралелизъм: изчисления по различни траектории могат да се осъществяват независимо, но поради наличието на различни типове паралелни архитектури, въпросът за избор на конкретна паралелна реализация не е тривиален.
6. В хода на изчисленията оценяването на грешката на метода е без съществени допълнителни затруднения.

В резултат на посочените предимства методите МК се разглеждат като едни от най-надеждните методи за моделиране на електронен транспорт в полупровод-

ниците. Те решават уравнението на Болцман [42, 50, 51, 60], което, бидейки в областта на полукласическата физика, позволява вероятностна интерпретация на транспортните процеси. От друга страна, моделирането на физични прибори през последните години включва толкова малки пространствени и времеви скали, че е невъзможно да се приложи полукласическия транспорт, поради което се налага използването на квантови описания [52, 59, 63]. Броя на променливите, респективно уравненията, включени в квантовия модел нараства в сравнение с полукласическия случай и следователно се увеличават трудностите при получаване на решенията числено. Ето защо, прилагането на МК методите за такъв тип задачи е за предпочитане пред останалите (класическите) числени методи.

Също така ще отбележим, че МК методите успешно се прилагат при решаване на екологични задачи, свързани с определяне на източници на замърсявания [28, 29], тъй като не е необходимо да се намира решението в цялата област, а се пресмята само интересувания ни функционал от решението.

Тези методи, станали вече класически в теорията на преноса, са свързани с имената на руските учени Г.И. Марчук [7, 8], Г.А. Михайлов [10, 46], С.М. Ермаков [4], И.М. Соболев [14], К.К. Сабельфельд [62], американските учени - Д. Къртис [19], Х. Кан [43], Холтън [39], английските и италианските учени - Хамерслей и Хандскомб [40], К. Якобони и Л. Рота [42, 59, 60] и др.

Едно сериозно потвърждение на актуалността на темата на дисертацията е големият брой публикации в тази област в специализираните научни списания и трудове на международни конференции.

Общоприетата дефиниция на МК методите за сега няма. Най-общо може да се приеме, че МК методите *са числени методи за решаване на математически задачи с помощта на моделиране на случайни величини.*

При така въведената дефиниция е необходимо към методите МК да причислим и някои други методи, като например, стохастическите приближения

или случайното търсене, които по традиция се разглеждат отделно. Обаче специалистите, занимаващи се с тези методи, сами ги наричат Монте Карло методи.

Необходимо е да подчертаем две неща:

а/ МК методите са числени методи, т.е. те дават приближени решения на различни математически задачи и могат да се конкурират с класическите числени методи, а не с аналитичните методи за решаване на задачи;

б/ Чрез тях могат да се решават произволни математически задачи, а не само задачи с вероятностен произход, свързани със случайни величини.

Да разгледаме основната идея на методите. Да предположим, че случайната величина (сл.в.) θ е с математическо очакване $M\theta$, което съвпада с решението на дадена задача u или с линеен функционал от решението $J(u)$. (Ще напомним, че по определение математическото очакване $M\theta$ съществува тогава и само тогава когато съществува $M|\theta|$). За да оценим $J(u)$, разглеждаме N независими случайни величини $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N$, разпределението на които съвпада с разпределението на θ . Полагаме

$$\bar{\theta}_N = \left(\frac{1}{N}\right) \sum_{i=1}^N \theta_i.$$

Тъй като редицата $\{\bar{\theta}_N\}_{N=1}^{\infty}$ е редица от независими и еднакво разпределени случайни величини, то съществуването на математическото очакване, първо: е достатъчно условие редицата да удовлетворява закона за големите числа (ЗГЧ), теорема на Хинчин [13], второ: е необходимо и достатъчно условие да удовлетворява усиления закон за големите числа (УЗГЧ), теорема на Колмогоров [13, 11], т.е. при $N \rightarrow \infty$ ¹

$$\bar{\theta}_N \longrightarrow J(u) \left\{ \begin{array}{l} (p.) \\ (a.s.) \end{array} \right\}.$$

¹Абревиатурата "р." означава сходимост по вероятност "in probability" (при теоремата на Хинчин); "a.s." означава почти сигурна сходимост "almost sure" (при теоремата на Колмогоров).

Следователно, когато N е достатъчно голямо е в сила оценката $\bar{\theta}_N \approx a$.

Каква е грешката на метода? Да предположим допълнително, че сл.в. θ е с крайна дисперсия, т.е.

$$(0.1) \quad D\theta = M(\theta^2) - (M\theta)^2 < \infty.$$

Тъй като редицата $\{\theta_i\}_{i=1}^{\infty}$ е редица от независими и еднакво разпределени случайни величини с крайни дисперсии, то тя удовлетворява централната гранична теорема (ЦГТ) [11, 13, 14], т.е. за произволни реални числа $x_1 < x_2$

$$(0.2) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} Pr \left\{ x_1 < \left(\frac{1}{\sqrt{ND\theta}} \right) \sum_{i=1}^N (\theta_i - J(u)) < x_2 \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{x_1}^{x_2} \exp(-t^2/2) dt.$$

Нека да положим $x_2 = x_1 = x$. Тогава от равенство (0.2) получаваме, че

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\theta_i - J(u)) \right| < x \sqrt{D\theta/N} \right\} = \mathcal{F}(x),$$

където

$$\mathcal{F}(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x \exp(-t^2/2) dt.$$

Следователно, за достатъчно големи стойности на N

$$(0.3) \quad Pr \left\{ |(\bar{\theta}_N - J(u))| < x \sqrt{D\theta/N} \right\} \approx \mathcal{F}(x).$$

Формула (0.3) съдържа в себе си цял клас от оценки, зависещи от параметъра x .

Ако зададем произволен коефициент на доверие β , то от уравнението $\mathcal{F}(x) = \beta$ може да се намери корена $x = x_\beta$. Следователно, вероятността неравенството:

$$(0.4) \quad |(\bar{\theta}_N - J(u))| < x_\beta \sqrt{D\theta/N}$$

да е изпълнено е равна на β . Ще отбележим, че сл. в. $\bar{\theta}_N$ е приблизително нормално разпределена със средно квадратично отклонение $\sigma = \sqrt{D\theta/N}$. Най-често използваните коефициенти на доверие са: $\beta = 0.997$ и $\beta = 0.95$ съответстващи при стойности на корена $x_\beta = 3$ и $x_\beta = 1.96$. Първият случай е известен в литературата като *правилото на трите сигми*.

Друг подход за оценяване на грешката е свързан с понятието *вероятна грешка* [14], т.е.

$$(0.5) \quad r_N = c\sigma(\theta)N^{-1/2},$$

където константата $c \approx 0.6745$, величината $\sigma(\theta)$ е стандартното отклонение ($\sigma(\theta) = (D\theta)^{1/2}$), а N е броя на изпитанията (реализациите на сл.в.). Константата c в равенство (0.5) е в същност стойността на x_β съответстваща на $\beta = 0.50$. Понятието *вероятна грешка* се дефинира чрез следното вероятностно неравенство:

$$Pr\{|\bar{\theta}_N - J(u)| \leq r_N\} \approx \frac{1}{2} \approx Pr\{|\bar{\theta}_N - J(u)| > r_N\},$$

т.е. еднакво вероятно е грешката да бъде по-малка от r_N , както и по-голяма от r_N . В практиката величината r_N се използва като характеристика за порядъка на грешката. А като оценка на действителната грешка $|(\bar{\theta}_N - J(u))|$ (т.е. намиране горна граница на грешката, с коефициент на доверие β) използваме неравенство (0.4). От това неравенство се вижда, че за да оценим грешката, трябва да имаме оценка и за дисперсията. Обаче рядко се отдава да получим добра теоретична оценка за нея. Обикновено дисперсията $D\theta$ се оценява емпирически в хода на оценяване на величината u . Достатъчно е едновременно при пресмятане на $\sum_{i=1}^N \theta_i$ да пресмятаме също и $\sum_{i=1}^N (\theta_i)^2$, тъй като при достатъчно големи N е в сила приближението:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\theta_i)^2 \approx M(\theta^2).$$

Като вземем предвид равенство (0.1) получаваме следната емпирична оценка за дисперсията:

$$D\theta \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\theta_i)^2 - \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\theta_i) \right]^2.$$

От равенство (0.4) се вижда, че в случай, когато $D\theta < \infty$ грешката намалява както $N^{-1/2}$. В случай обаче на безкрайна дисперсия, т.е. $D\theta = \infty$ порядъка на намаляване на грешката се оказва твърде лош. Това е причината да се

препоръчва да не се прилага метода МК, когато дисперсията на осредняваната величина е безкрайна или много голяма.

В зависимост от подхода, в резултат на който се подобрява вероятната грешка, различаваме два вида методи МК - *суперсходящи* и *ефективни*.

Суперсходящ МК метод е метод, при който за вероятната грешка е изпълнено равенството:

$$r_N = O(N^{-1/2-\varepsilon}), \quad \varepsilon > 0,$$

т.е. увеличена е скоростта на сходимост.

Един метод от този тип за първи път е предложен от Дупач [33], като е използван подхода за разделяне на областта на *равномерни малки* подобласти. Суперсходящите МК методи са изследвани още в работите на Димов и Тонев [22], Хайнрих и Матхе [41]. Към този тип методи може да се отнесат и квази-Монте Карло методите, при които грешката е от порядък $O(N^{-1+\varepsilon})$ (виж [14, 68]), където $0 < \varepsilon \ll 1$.

При *ефективните* МК методи целта е да се търси сл.в. с малка по големина дисперсия. Да предположим, че $\hat{\theta}$ е друга сл.в. с математическо очакване равно на $J(u)$, т.е.

$$M\hat{\theta} = J(u)$$

и условията за съществуване и ограниченост на дисперсията $D\hat{\theta}$ са изпълнени. Тогава метод, за който $D\hat{\theta} < D\theta$ се нарича *ефективен* Монте Карло метод.

Ефективността на методите МК е свързана и с понятието *трудоемкост* на алгоритмите, създадени на основата на тези методи. Като дефиниция на трудоемкостта се приема произведението $tD\theta$ (виж [14]), където t е времето за пресмятане на една стойност на сл.в., а $D\theta$ е дисперсията. Тогава времето за пресмятане, необходимо за достигане на зададена вероятна грешка се оказва пропорционално на трудоемкостта. Използвайки понятието трудоемкост Рубин-

шайн в [61] е въвел следната дефиниция за ефективност.

Дефиниция 0.0.1 : Ще казваме, че Монте Карло метода, при който е измерена сл.в. $\hat{\theta}$, е по-ефективен от метода със сл.в. θ , ако е изпълнено неравенството:

$$\frac{t_2 D\hat{\theta}}{t_1 D\theta} < 1,$$

където t_2 е времето, необходимо за пресмятане на една реализация на $\hat{\theta}$, а t_1 е съответно времето, необходимо за пресмятане на една реализация на θ .

Ясно е, че ако времената за пресмятане стойностите на случайните величини са приблизително равни, то минимизирането на дисперсията води до създаването на ефективен МК метод.

За първи път метод от този тип е предложен от Кан [43] за пресмятане на интеграли. Ефективни МК методи са предложени и от Михайлов [10] и Димов [24] за пресмятане на интегрални уравнения. Най-често използваните подходи за създаване на такива методи са свързани с понятията: *важна извадка*; *интегриране по части на областта*; *симетризация на подинтегралната функция*; *отделяне на главна част* и др.

Съществуват два класа алгоритми, основаващи се на числените методи Монте Карло – *директни* и *итерационни*.

Директните МК алгоритми притежават само вероятностна грешка. При тях решението на задачата се оценява като се използват N реализации на сл.в. и всяка реализация се състои от детерминиран брой стъпки (операции). *Директните* МК алгоритми са представените алгоритми в [40, 61] за оценяване на интеграли.

Итерационните Монте Карло (ИМК) алгоритми притежават два типа грешки – систематична и вероятностна. Систематичната грешка зависи от броя на

итерациите в използвания итерационен метод и от скоростта на сходимост на итерационния процес, докато вероятностната грешка зависи от стохастичната природа на методите Монте Карло.

Итерационните Монте Карло алгоритми се прилагат при решаване на задачи, свеждащи се до интегрални уравнения или до системи линейни алгебрични уравнения (виж [23, 39]). Разновидност на ИМК алгоритми са *разклонените* Монте Карло (РМК) алгоритми, при които сл.в. се конструира с помощта на разклонени Марковски процеси.

Да разгледаме в общия случай получаване на ИМК алгоритъм за приближено пресмятане на функционал от следния тип:

$$(0.6) \quad J(u) = (g, u) = \int_{\Omega} g(x)u(x)dx,$$

където областта $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, а d е размерността на Евклидовото пространство \mathbb{R}^d . Функциите $u = u(x) \in \mathbf{X}$ и $g = g(x) \in \mathbf{X}^*$ са дефинирани в \mathbb{R}^d . Пространствата \mathbf{X} и \mathbf{X}^* са взаимно спрегнати Банахови пространства от интегрируеми функции.

При това, нека функцията $u(x)$ е решение на интегралното уравнение на Фредхолм от втори род:

$$(0.7) \quad u = \mathbb{K}(u) + f,$$

където

$$\mathbb{K}(u) = \int_{\Omega} k(x, y)u(y)dy.$$

Случаят, когато $g(x) = \delta(x - x_0)$ е от специален интерес, защото се пресмята стойността на функцията $u(x)$ в x_0 , където $x_0 \in \Omega$ е фиксирана точка.

Дефинираме итерационен метод от ред i като функция от следния вид:

$$u^{(l+1)} = F_l(\mathbb{K}, f, u^{(l)}, u^{(l-1)}, \dots, u^{(l-i+1)}),$$

където $u^{(l)}$ е функцията получена на l -тата итерация. Очевидно:

$$u^{(l)} \rightarrow u = \mathbb{K}(u) + f \quad \text{когато } l \rightarrow \infty.$$

Методът се нарича *стационарен*, ако $F_l = F$ за всяко l , т.е. F_l е независима от l .

Итерационният процес се нарича *линеен*, ако F_l е линейна функция на $u^{(l)}, \dots, u^{(l-i+1)}$.

Да разгледаме следния *стационарен линеен итерационен процес от първи ред* за интегралното уравнение (0.7):

$$(0.8) \quad u_l = K(u_{l-1}) + f, \quad l = 1, 2, \dots,$$

където l е броя на итерациите.

Фактически, равенство (0.8) дефинира следния *ред на Нойман*:

$$(0.9) \quad u_l = f + K(f) + \dots + K^{l-1}(f) + K^l(u_0), \quad l > 1,$$

където с K^l е означена l -тата итерация на K .

От равенства (0.7) и (0.9) може да се оцени грешката от прекъсване. Ако $u_0 = f$, тогава

$$u_l - u = K^l(f - u).$$

За много приложения $\mathbf{X} = \mathbf{L}_1$ и $\mathbf{X}^* = \mathbf{L}_\infty$, като

$$\begin{aligned} \|f\|_{\mathbf{L}_1} &= \int_{\Omega} |f(x)| dx, \\ \|K\|_{\mathbf{L}_1} &= \sup_x \int_{\Omega} |k(x, x')| dx', \\ \|g\|_{\mathbf{L}_\infty} &= \sup |g(x)|, \quad x \in \Omega. \end{aligned}$$

Едно достатъчно условие за сходимост на реда на Нойман е

$$\|K^l\|_{\mathbf{L}_1} < 1.$$

Очевидно, всеки итерационен алгоритъм използва краен брой итерации l . Практически, параметърът l не е зададен предварително, а се определя от разликата

между две итерации. В представените алгоритми броя на МК итерациите се определя, като се използват следните правила: разликата между две стохастични итерации да бъде по-малка от предварително зададен достатъчно малък параметър ε или стохастичната итерация е попаднала в състояние (вероятност) за прекъсване на веригата.

Разглеждаме пространствата \mathbf{T}_i получени при Декартовото произведение на \mathbb{R}^d :

$$\mathbf{T}_{i+1} = \underbrace{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \dots \times \mathbb{R}^d}_{i \text{ пъти}}, \quad i = 1, 2, \dots, l.$$

Нека $J(u_l)$ да е линейния функционал, който ще изчисляваме.

Случайните величини Θ_i , $i = 0, 1, \dots, l$, дефинирани върху пространствата \mathbf{T}_{i+1} имат условно математическо очакване:

$$M\Theta_0 = J(u_0), \quad M(\Theta_1/\Theta_0) = J(u_1), \dots, M(\Theta_l/\Theta_0) = J(u_l).$$

Задачата се превръща в задача за пресмятане на независими реализации на Θ_l и натрупването им в подходящ оценител. Като приближена стойност на линейния функционал $J(u_l)$ се взима осреднената стойност на реализациите, т.е.

$$J(u_l) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \{\Theta_l\}_i,$$

където $\{\Theta_l\}_i$ е i -тата реализация на сл.в. Θ_l .

Вероятната грешка се дава с формула (0.5), характерна за традиционния МК метод, който не използва никаква априорна информация.

Както всеки алгоритъм, така и МК алгоритмите се състоят от а) вход (входни данни); б) поредица от правила (рецепта); и с) изход (резултат). Без да се претендира за изчерпателност, основните аспекти, характеризиращи алгоритмите от тип МК са следните:

1. Вероятностна функция на разпределение (в.ф.р.);

Както вече отбелязахме, решаването на дадена задача по метода МК се състои в намиране на сл.в., чието математическо очакване съвпада с решението на разглежданата задача. Известно е (например [6, 11]), че съществуват безброй много сл.в. с търсеното математическо очакване и всяка от тях се характеризира с в.ф.р. От първостепенно значение е, с каква в.ф.р. (или функция на плътност (ф.п.)) е сл.в. Така възниква задачата за оптимизация на алгоритмите МК, изследвана в редица публикации [10, 24, 36], която се състои в минимизация на дисперсията на сл.в., чрез подходящ избор на в.ф.р. (или ф.п.).

2. Генератор на случайни числа: - устройство (или програма) за получаване на равномерно разпределени случайни числа в интервала $(0, 1)$;

Числата, които се получават чрез тези генератори се наричат псевдо-случайни. Създаден е разнообразен софтуер от генератори на случайни числа (сл.ч.) (виж [44, 69]), при които основно се държи на дължината на интервала на апериодичност и на дължината на периода на повторение на редицата от сл.ч. Използват се различни статистически критерии [14] за изследване до колко тези редици са равномерно разпределени в разглеждания интервал. В последното десетилетие на основата на специалните редици на Соболев и Нидерайтер [14, 55, 56, 64] се създадоха така наречените *квази-Монте Карло алгоритми*. При тях очакваната грешка [14, 56, 68] може да се доближи до порядъка $O(N^{-1})$.

3. Правило на извадката: - предписанието, алгоритъма за получаване на извадката от съответните стойности на в.ф.р., като се използват равномерно разпределени сл.ч. в интервала $(0, 1)$;

Тук ще отбележим едни от най-прилаганите алгоритми за *моделиране* на сл.в., а това са: метода на *обратните функции*, метод на *селекцията* (или метод на Нюман), метод на Метрополис или техни модификации.

4. *Отчитане на резултата:*

Този компонент от МК алгоритмите е свързан с акумулиране на стойностите на сл.в.

5. *Оценка на грешката и трудоемкостта:*

Оценките за статистическата грешка и трудоемкостта се определят като функция на броя на реализациите на сл.в. или други величини. При ИМК алгоритми от особено значение е балансирането на двете грешки - систематичната и статистическата.

6. *Техники за редуциране на дисперсията:*

Това са методи за намаляване на дисперсията, при които се подобрява оценката за решението.

7. *Паралелизация и векторизация.*

За пълното изследване (или подобрене) на даден МК алгоритъм, трябва да се следи до каква степен са използвани и подобрени някои от тези основни аспекти.

Алгоритмите МК, както вече подчертахме, са с висока паралелна ефективност и успешно се прилагат върху различни съвременни компютърни архитектури [16, 26, 27, 30, 32]. В последните години усилено се работи и върху създаване на софтуер за паралелни генератори на случайни числа [65, 70] за още по-ефективното им прилагане.

Фактически, ако разглеждаме пресмятането на реализациите на сл.в. като самостоятелен изчислителен процес, то е естествено да разглеждаме МК алгоритмите като асинхронни процеси включени паралелно. Ясно е, че MIMD (multiple instruction, multiple data)- машините са „естествената“ хардуерна платформа

за изпълнение на такива алгоритми. Интересна, която възниква, е да се изследва възможността за реализиране на алгоритмите върху такъв тип машини. Две са основните причини:

1/ МК алгоритмите обикновено се пишат на широко разпространени езици (най-вече на FORTRAN, C/C++), а леснотата на програмирането води до използването на MIMD- машините.

2) Скоростта на изпълнение на всеки процесор при MIMD-машините не е голяма, но когато голям брой процесори се използват ефективно, то скоростта при изпълнение на алгоритъма е значително по-висока отколкото при използване на последователна компютърна архитектура.

За оценка на качеството на паралелните алгоритми от типа Монте Карло се използват следните мерки:

Нека за решаване на дадена задача съществува паралелен алгоритъм A . Нека A е детерминистичен алгоритъм, а $T_p(A)$ е времето (или броя операции), необходимо за реализация на алгоритъма A върху p процесора. Ако съществува алгоритъм B за решаване на същата задача, такъв, че за произволен алгоритъм A е изпълнено:

$$T_1(B) \leq T_1(A),$$

то алгоритъмът B се нарича *най-добър последователен алгоритъм* за дадената задача.

Обикновено, за алгоритъма A се въвеждат следните два параметъра:

$$\text{ускорение: } S_p(A) = \frac{T_1(A)}{T_p(A)}; \quad S_1(A) = 1$$

и

$$\text{ефективност: } E_p(A) = \frac{S_p(A)}{p}; \quad E_1(A) = 1.$$

Ако A е МК алгоритъм, то не може да бъде получена точна теоретична оценка за $T_p(A)$, тъй като всяка конкретна реализация на алгоритъма ще дава различни

(в общия случай) стойности на $T_p(A)$. Теоретично може да бъде оценено точно математическото очакване $MT_p(A)$. Тогава, за ускорение на МК алгоритъм [25] следва да се разглежда величината:

$$S_p(A) = \frac{MT_1(A)}{MT_p(A)}.$$

Очевидно е, че ако един алгоритъм C е детерминистичен, то $MT_p(C) = T_p(C)$ за $\forall p = 1, 2, \dots$. За много детерминистични алгоритми се наблюдава рязко снижаване на паралелната ефективност при $p \geq 6$. В общия случай, паралелната ефективност на детерминистичните алгоритми съществено зависи от броя процесори p . В същото време за някои МК алгоритми и конкретни изчислителни архитектури се достигат теоретични стойности за паралелната ефективност близки до 1 и независещи от p .

В настоящия дисертационен труд са предложени и изследвани итерационни алгоритми от типа Монте Карло за решаване на две задачи за пренос, а именно: решаване на елиптична гранична задача, описваща пренос на замърсители и решаване на интегрални уравнения, възникващи при квантов транспорт на електрони в полупроводници. Характерно за това изследване е, че съществено са подобрени някои от основните аспекти на МК алгоритмите.

Представени са паралелни реализации на описаните алгоритми, които водят до висока изчислителна ефективност.

Числените експерименти са реализирани за тестови примери върху суперкомпютри като CRAY Origin 2000 и IBM SP1 с 32 процесора, а така също и върху SUN Sparkstation.

Паралелните тестове, представени в Глави 1 и 2 са върху MIMD (multiple instruction, multiple data)-машина IBM SP1 с 32 процесора. Средата за паралелно програмиране се нарича ATHAPASCAN и е разработена от изследователска група по паралелно програмиране в Лабораторията по моделиране и изчисления

към Института по информатика и математически алгоритми в Гренобъл, Франция. Програмната среда ATHAPASCAN е създадена на базата на алгоритмичния език C^{++} , а специалните библиотеки за предаване на съобщения са подобни на добре известните в паралелното програмиране MPI (Message Passing Interface) и PVM (Parallel Virtual Machine). ATHAPASCAN позволява разпределянето на изчислителната задача дори върху различен тип от процесори и/или компютри. Тази среда има възможности за динамично разпределяне на общите ресурси и реализира високо ниво на паралелна ефективност, ако алгоритъмът е добре разпаралелен (виж, например Бр. Плато [57]).

В Глава 1, параграф 1.1, има въвеждащ характер. Дефинирана е задачата, която се решава с метод МК, като частното диференциално уравнение (ЧДУ) включва дифузионен, конвективен и депозиционен член. Такава математическа задача се получава при моделиране пренос на замърсители във въздуха [28, 29]. Предложеният алгоритъм използва локално интегрално представяне на решението на граничната задача чрез функцията на Грийн. Интегралното трансформационно ядро се получава, като се прилага спрегнатия оператор върху функцията на Леви. Това е направено в параграф 1.2.

Този подход води до случаен процес, който се нарича *блуждаене по кълба* и е подобен на известния в специализираната литература *блуждаене по сфери* [4, 62], използван за решаване на задачата на Дирихле. Разликата е, че вместо случайната точка да се избира върху повърхността на сферата, то тя се избира във вътрешността на максималното кълбо, вписано в разглежданата област.

За първи път Сипин в [12] е предложил ИМК алгоритъм за решаване на разглежданата гранична задача и е доказал сходимост на процеса *блуждаене по кълба*. По-късно в [5] е продължено изследването на предложения алгоритъм, като е доказано ограниченост на дисперсията на случайната величина. Намерени са условия, за които ядрото при локалното интегрално представяне на гранич-

ната задача е неотрицателно и може да се използва за преходна плътност във веригата на Марков.

При решаване на задачата по метода МК на практика е трудно директното конструиране на необходимата случайна величина. В този случай най-подходящ се оказва подхода на прилагане на *метода на селекцията*. Най-съществен в случая е подходящият избор на мажорираща функция, която трябва да е близка до изходната функция в разглежданата норма и същевременно да дава възможност за лесно моделиране на съответната случайна величина.

В [5] е намерена оценка за ефективността на метода на *селекцията*, използван при *правилото на извадката* за моделиране на случайната величина, а в [21] Димов е предложил мажорираща функция, за която ефективността на метода на *селекцията* се подобрява.

За същата мажорираща функция в параграф 1.3 е доказана оптимална по порядък оценка за ефективността на метода на *селекцията*.

В параграф 1.4 успешно е решена задачата за снижаване на изчислителната сложност на предложения ИМК алгоритъм. За целта е намерена връзка между параметрите на елиптическия диференциален оператор и радиуса на максималното кълбо, което може да се впише в областта на разглежданата задача. Определени са условията за баланс на систематичната и статистическа грешки.

Представените числени тестове в параграф 1.5 потвърждават теоретичните оценки и показват висока паралелна ефективност на ИМК алгоритъм при използване на MIMD-машината IBM SP1 с 32 процесора.

В Глава 2 е предложен ефективен МК метод за решаване на интегрални уравнения с полиномиална нелинейност, като се използва разклонен Марковски процес. Разклонените случайни процеси представляват математически модел на развитие във времето на съвкупности от частици, които се размножават и за-

гиват в съответствие със случайни закони. Частиците могат да притежават и различни свойства: възраст, енергия и т.н., в резултат на което да бъдат класифицирани в отделни групи. С помощта на разклонени случайни процеси се описва поведението на неутроните в ядрен реактор [7], поведението на космическото лъчение [8], на биологичните популации [67], на разпространението на епидемични заболявания [66] и т.н.

Между разклонените марковски процеси и интегралните уравнения с полиномиална нелинейност съществува връзка, подобна на връзката между линейните интегрални уравнения и веригите на Марков. Тази връзка е описана от Ермаков в [4, 34, 35] при прилагането на методите Монте Карло за решаване на този тип интегрални уравнения.

Параграфи 2.1 и 2.2 имат въвеждащ характер. В тях е поставена задачата за числено пресмятане на функционала $J(u) = (g(x), u(x))$ по метода МК, където $g(x) \in L_\infty(\Omega)$ е дадена функция, а $u(x)$ е решение на интегралното уравнение с полиномиална нелинейност:

$$u(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m u(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x), \quad m \geq 2,$$

Функциите $k(x, y_1, \dots, y_m)$ и $f(x)$ са дадени, $k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \in L_1(\underbrace{\Omega \times \dots \times \Omega}_{m+1})$ и $f(x) \in L_1(\Omega)$. Описана е връзката между итерационното представяне на решението на това уравнение и разклонен стохастичен процес. Конструирана е случайна величина, за която в параграф 2.3 е доказано, че математическото и очакване съвпада с функционала $J(u)$.

В параграф 2.4 успешно е решена задачата за минимизация на дисперсията на случайната величина. Намерената *оптимална* плътност наистина минимизира дисперсията, но практически е невъзможно да се използва такава оптимална плътност, защото трябва да е известно самото решение или някоя негова априорна оценка. Самото определяне вида на тази плътност понякога ни дава въз-

можност да намираме плътности, „близки“ в някакъв смисъл до *оптималната* (например пропорционалност на функции), които наричаме *почти оптимални* плътности.

За първи път Димов в [20, 24] е използвал *почти оптимални* плътности за решаване на линейни интегрални уравнения и системи от линейни алгебрични уравнения.

В параграф 2.4 е предложена плътност, която при определени условия е пропорционална на оптималната. Такава плътност се нарича *почти оптимална*. С помощта на нея, в параграф 2.5 е описан *разклонен* Монте Карло алгоритъм, решаващ поставената задача. Алгоритъмът, след модификация, може да се използва за приближено пресмятане на функционала (0.6), когато $u(x)$ е решение на следното интегрално уравнение:

$$u(x) = \sum_{m=1}^s \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m u(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x), \quad s \geq 2.$$

В параграф 2.6 е предложен метод МК за решаване на система от нелинейни алгебрични уравнения (СНАУ) от специален тип, а именно:

$$u_j = \sum_{\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_d = m} k_{\beta_1 \beta_2 \dots \beta_d}^{(j)} u_1^{\beta_1} u_2^{\beta_2} \dots u_d^{\beta_d} + f_j, \quad j = 1, 2, \dots, d.$$

Показано е, че тази задача се явява дискретен случай на задача за решаване на интегрални уравнения с полиномиална нелинейност и получените оценки в параграфи 2.3 и 2.4 са в сила и за нея, като се отчита дискретността на въведената случайна величина.

И накрая, в параграф 2.7 на Глава 2 са представени числени експерименти с РМК алгоритъм. Тестовите примери показват висока паралелна ефективност на алгоритъма и висока точност на приближеното решение към точното, в случай че се използва *почти оптимална* плътност.

В Глава 3 са предложени два Монте Карло алгоритми за моделиране на пространствено хомогенен квантов транспорт на носители в полупроводник за

фемтосекундни еволюционни времена. По този начин се показва, че квантовото уравнение, описващо ултракъсовременната релаксация на фотогенерирани носители взаимодействащи с LO фонони [18] успешно се решава с Монте Карло метод.

Предизвикателството да се използват методите МК за решаване на задачи, произтичащи от квантов транспорт на носители в полупроводник, се постави с успеха при получаването на функцията на Вигнер [52, 53], описваща едночастичен квантов транспорт в пространствено-зависими системи, какъвто се наблюдава в съвременните наноелектронни устройства.

Физическия модел в поставената задача за решаване в параграф 3.1, отговаря на първоначално генерирани чрез лазерен пулс, на носители, които релаксират в резултат на взаимодействие с вибрациите на полупроводниковата решетка. Изведеното уравнение в [54], описва кинетиката на носителите и характеризира, както линейния, така и нелинейния случай при квантов транспорт на електрони в полупроводници.

В параграф 3.2 е предложен метод МК за решаване на уравнението. Разгледани са двата случая. При линейния случай е доказана сходимост на реда на Нойман за линейното интегрално уравнение и е конструирана сл.в., оценяваща решението. При нелинейния случай, интегралното уравнение е с полиномиална нелинейност и е предложен подходящ разклонен стохатичен процес, с помощта на който е конструирана съответната сл.в., оценяваща решението.

В параграф 3.3 са описани ИМК алгоритъм и РМК алгоритъм за решаване на поставената задача, съответно при използване на линейното интегрално уравнение и на уравнението с полиномиална нелинейност. За опростяване на уравненията е използвана сферична смяна на променливите.

В параграф 3.4 са представени числени резултати за решението за еволюционен интервал до 150 фемтосекунди. На базата на тези резултати са направени

изводи за физическите особености на квантовия процес. Предложените алгоритми дават възможност за получаване на решението в произволна фазова точка или област за даден еволюционен момент, което е предимство пред използваните до сега Рунге-Кута методи [63], за решаване на подобни уравнения.

Основните резултати по дисертацията са публикувани в работите на автора [36, 37], в съвместните работи с И.Т. Димов [31, 32], както и в съвместните работи с М.Х. Недялков и И.Т.Димов [54, 38].

Резултатите, включени в дисертацията, са докладвани на семинара на секция „Паралелни алгоритми“, ЦЛПОИ – БАН, на семинара на групата по паралелни алгоритми на проекта ”APACHE” – IMAG, Гренобъл, Франция и на семинара на катедра „Теоритична физика“, Университета във Франкфурт на Майн, Германия. Част от публикуваните резултати са представени на специализирани международни конференции, както следва:

- Third International Conference on Numerical Methods & Applications – $\mathcal{O}(h^3)$, София, Август 21-26, 1994 г. ;
- First IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, ULB Brussels, Belgium, April 1-3, 1997 г. ;
- 9-th International Summer School on Probability Theory & Mathematical Statistical, Созопол, Юни 7-14, 1997 г. ;
- Fourth International Conference on Numerical Methods & Applications – $\mathcal{O}(h^4)$, София, Август 19-23, 1998 г.

Част от резултатите на автора са включени в отчета на съвместния проект между LMC – IMAG, Гренобъл и ЦЛПОИ – БАН, София, финансиран от министерството на образованието на Франция, в отчетите на пректите ММ-449/94 (с ръководител автора) и И-501/95 с Националния Фонд „Научни изследвания“ при МОН.

Считам за свой приятен дълг да изразя искрена признателност към научния си ръководител ст.н.с. I ст., д.н. И.Т. Димов, под чието непрекъснато и ефективно ръководство беше написана тази дисертация.

Искам да благодаря на моя колега д-р М.Х. Недялков за ценните съвети, относно решаването на поставената физична задача в трета глава.

Изказвам дълбока благодарност и на всички колеги от секция „Паралелни алгоритми“ към ЦЛПОИ-БАН за творческата атмосфера и отличните условия за работа.

Глава 1

Итерационен Монте Карло

алгоритъм за гранични задачи за

елиптични частни

диференциални уравнения

1.1 Постановка на задачата

Разглеждаме задачата за числено пресмятане на функционала $J(u)$ по метода МК:

$$(1.1) \quad J(u) \equiv (g, u) = \int_{\Omega} g(x)u(x)dx,$$

където $g(x)$ е зададена функция, а $u(x)$ е решение на следната гранична задача:

$$(1.2) \quad \Delta u = -\phi(x), \quad x \in \Omega, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^3$$

$$(1.3) \quad u = \psi(x), \quad x \in \partial\Omega,$$

а областта $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Точка $x \equiv (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$ е точка от Евклидовото пространство \mathbb{R}^3 .

Диференциалният оператор \mathbf{M} има вида:

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + c(x).$$

Да дефинираме следния клас от области $\mathbf{A}^{(k,\lambda)}$:

Дефиниция 1.1.1 : Казваме, че областта Ω принадлежи на класа $\mathbf{A}^{(k,\lambda)}$, ако за всяка точка $x \in \partial\Omega$ границата $\partial\Omega$ може да се представи като функция $z_3 = \sigma(z_1, z_2)$ в достатъчно малка околност на x , за която (k) -тата производна $\sigma^{(k)}(z_1, z_2) \in \mathbf{C}^{(0,\lambda)}$, т.е.

$$|\sigma^{(k)}(y) - \sigma^{(k)}(y')| \leq C|y - y'|^\lambda,$$

където $y \equiv (z_1, z_2)$ и $y' \equiv (z'_1, z'_2)$ са вектори, C е константа и параметъра $\lambda \in (0, 1]$.

Ако в затворената област $\bar{\Omega} \in \mathbf{A}^{(1,\lambda)}$ коефициентите на диференциалния оператор \mathbf{M} удовлетворяват следните условия

$$c(x) \leq 0, \quad c(x) \in \mathbf{C}^{(0,\lambda)}(\bar{\Omega}) \quad \text{и} \quad b_j \in \mathbf{C}^{(0,\lambda)}(\bar{\Omega}), \quad j = 1, 2, 3,$$

както и

$$\phi \in \mathbf{C}^{(0,\lambda)}(\Omega) \cap \mathbf{C}(\bar{\Omega}) \quad \text{и} \quad \psi \in \mathbf{C}(\partial\Omega),$$

границната задачата (1.2), (1.3) притежава единствено регулярно решение $u(x)$ в $\mathbf{C}^2(\Omega) \cap \mathbf{C}(\bar{\Omega})$. Условиата за единственост на решението могат да се намерят в [9, 17].

1.2 Локално – интегрално представяне

Като първа стъпка за решаване на поставената задача по метода МК е необходимо да се получи интегрално представяне на решението $u(x)$ на границната

задача във вида:

$$(1.4) \quad u(x) = \int_{B(x)} k(x, y)u(y)dy + f(x),$$

където $B(x) \subset \Omega$ е област в Ω .

Подходът, чрез функцията на Грийн е за стандартни области, изцяло лежащи в областта Ω (например - кълбо или елипсоид). От алгоритмична гледна точка, областта $B(x)$ трябва да се избира по такъв начин, че координатите на граничните точки $y \in \partial B(x)$ да могат да се изчисляват лесно. Това води до намаляване на изчислителната сложност.

За получаване на интегралното представяне (1.4) се използва резултата на Миранда [48]. Взема се предвид, че операторът \mathbf{M} е от елиптичен тип и областта $B(x)$ е от класа $\mathbf{A}^{(1,\lambda)}$.

Интегралното трансформационно ядро $k(x, y)$ се търси, като се прилага спрегнатия оператор \mathbf{M}^* върху функцията на Леви. В сила е следната Лема:

Лема 1.2.1 : Ако компонентите на вектор-функцията $\underline{b}(x)$ удовлетворяват следните условия:

$$b_j(x) \in C^{(1)}(\Omega), \quad j = 1, 2, 3,$$

$$\operatorname{div} \underline{b}(x) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial b_i(x)}{\partial x_i} = 0,$$

то спрегнатият оператор \mathbf{M}^* приложен към коя да е функция $v(x) \in C^2(\Omega)$ със свойството

$$\frac{\partial v(x)}{\partial x_i} = v(x) = 0 \quad \text{за всяко } x \in \partial\Omega, \quad i = 1, 2, 3$$

има следния вид:

$$\mathbf{M}^* = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + c(x).$$

Доказателство: Необходимо и достатъчно условие операторът \mathbf{M}^* да е спрегнат на оператора \mathbf{M} , е да е в сила следното равенство:

$$(1.5) \quad \int_{\Omega} v(x) \mathbf{M}u(x) dx = \int_{\Omega} u(x) \mathbf{M}^*v(x) dx.$$

За да проверим (1.5) използваме следните две формули на Грийн:

$$\int_{\Omega} u(x) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v(x)}{\partial x_i} dx = - \int_{\Omega} v(x) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} dx + \int_{\partial\Omega} \sum_{i=1}^3 u(x)v(x)n_i d_x S$$

и

$$\int_{\Omega} u(x) \Delta v(x) dx = - \int_{\Omega} \text{grad } u(x) \text{grad } v(x) dx + \int_{\partial\Omega} u(x) \sum_{i=1}^3 n_i \frac{\partial v(x)}{\partial x_i} d_x S,$$

където

$$\Delta = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}, \quad \text{grad } u(x) \equiv \left(\frac{\partial u(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial u(x)}{\partial x_2}, \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \right).$$

С вектора $\underline{n} \equiv (n_1, n_2, n_3)$ сме означили външната нормала, спусната към границата $\partial\Omega$. Като вземем предвид, че са в сила условията:

$$\text{div } \underline{b}(x) = 0, \quad \text{за всяко } x \in \Omega, \quad i = 1, 2, 3,$$

и

$$\frac{\partial v(x)}{\partial x_i} = v(x) = 0, \quad \text{за всяко } x \in \partial\Omega, \quad i = 1, 2, 3,$$

получаваме:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v(x) \mathbf{M}u(x) dx &= \int_{\Omega} v(x) (\Delta u(x) + \underline{b}(x) \text{grad } u(x) + c(x)u(x)) dx \\ &= - \int_{\Omega} \text{grad } v(x) \text{grad } u(x) dx + \int_{\partial\Omega} v(x) \sum_{i=1}^3 n_i \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} d_x S \\ &\quad + \int_{\Omega} v(x) \underline{b}(x) \text{grad } u(x) dx + \int_{\Omega} v(x) c(x) u(x) dx \\ &= - \int_{\Omega} \text{grad } v(x) \text{grad } u(x) dx + \int_{\Omega} v(x) \sum_{i=1}^3 b_i(x) \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} dx + \int_{\Omega} v(x) c(x) u(x) dx. \end{aligned}$$

От друга страна

$$\int_{\Omega} u(x) \mathbf{M}^*v(x) dx = \int_{\Omega} u(x) [\Delta v(x) - \underline{b}(x) \text{grad } v(x) + c(x)v(x)] dx =$$

$$\begin{aligned}
&= - \int_{\Omega} \operatorname{grad} u(x) \operatorname{grad} v(x) dx + \int_{\partial\Omega} u(x) \sum_{i=1}^3 n_i \frac{\partial v(x)}{\partial x_i} d_x S \\
&\quad - \int_{\Omega} u(x) b(x) \operatorname{grad} v(x) dx + \int_{\Omega} u(x) c(x) v(x) dx \\
&= - \int_{\Omega} \operatorname{grad} u(x) \operatorname{grad} v(x) dx - \int_{\Omega} u(x) \sum_{i=1}^3 b_i(x) \frac{\partial v(x)}{\partial x_i} dx + \int_{\Omega} u(x) c(x) v(x) dx \\
&= - \int_{\Omega} \operatorname{grad} u(x) \operatorname{grad} v(x) dx + \int_{\Omega} v(x) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial (u(x) b_i(x))}{\partial x_i} dx \\
&\quad - \int_{\partial\Omega} \sum_{i=1}^3 n_i b_i(x) u(x) v(x) dx + \int_{\Omega} v(x) c(x) u(x) dx \\
&= - \int_{\Omega} \operatorname{grad} u(x) \operatorname{grad} v(x) dx + \int_{\Omega} v(x) \sum_{i=1}^3 b_i(x) \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} dx + \int_{\Omega} v(x) c(x) u(x) dx.
\end{aligned}$$

Последният резултат доказва Лема 1.2.1.

Съгласно [2, 5], функцията на Леви за задачата (1.2), (1.3) може да се запише във вида:

$$(1.6) \quad L_p(y, x) = \mu_p(R) \int_r^R (1/r - 1/\rho) p(\rho) d\rho, \quad r \leq R,$$

където са въведени следните означения:

$$r = |x - y| = \left(\sum_{i=1}^3 (x_i - y_i)^2 \right)^{1/2};$$

$$\mu_p(R) = [4\pi q_p(R)]^{-1};$$

$$q_p(R) = \int_0^R p(\rho) d\rho, \quad p(\rho) \geq 0.$$

Ясно е, че функцията на Леви $L_p(y, x)$ и параметрите $q_p(R)$ и $\mu_p(R)$ зависят от избора на функцията на плътността (ф.п.) $p(\rho)$. Фактически, равенство (1.6) дефинира фамилия от функции, зависещи от ф.п. Следователно, може да се формулира задачата като търсене на такъв избор на $p(\rho)$, който води до интегралното представяне (1.4), и при това, ядрото на интегралната трансформация да е неотрицателно, т.е. $k(x, y) \geq 0$.

Да означим чрез $B(x)$ кълбото:

$$(1.7) \quad B(x) = B_R(x) = \{y : r = |y - x| \leq R(x)\},$$

където $R(x)$ е радиуса му.

Използвайки функцията на Леви следното интегрално представяне (виж [48]) е в сила:

$$(1.8) \quad u(x) = \int_{T(x)} (u(y)\mathbf{M}_y^* L_p(y, x) + L_p(y, x)\phi(y)) dy \\ + \int_{\partial T(x)} \sum_{i=1}^3 n_i \left[\left(\frac{L_p(y, x)\partial u(y)}{\partial y_i} - \frac{u(y)\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} \right) - b_i(y)u(y)L_p(y, x) \right] d_y S,$$

където $\underline{n} \equiv (n_1, n_2, n_3)$ е външната нормала към границата $\partial T(x)$.

Формула (1.8) е в сила за произволна област $T(x) \in \mathbf{A}^{(1,\lambda)}$, съдържаща се в Ω , в частност и когато областта е кълбо. Очевидно, $B(x) \in \mathbf{A}^{(1,\lambda)}$, и следователно за всяко кълбо в областта Ω интегралното представяне (1.8) е в сила.

Да изразим решението $u(x)$, използвайки функцията на Грийн $G(x, y)$. Известно е [1], че функцията на Грийн е решение на следната гранична задача:

$$(1.9) \quad \mathbf{M}_y^* G(x, y) = 0, \quad y \in \Omega \setminus \partial\Omega \setminus \{x\},$$

$$(1.10) \quad G(x, y) = 0, \quad y \in \partial\Omega, \quad x \in \Omega \setminus \partial\Omega.$$

В същност функцията на Грийн е функция на Леви, $L_p(y, x)$, за която задача (1.9), (1.10) е в сила.

Ако извършим субституцията $L_p(y, x) = G(x, y)$, то от равенство (1.8) се получава представянето:

$$(1.11) \quad u(x) = \int_{B(x)} G(x, y)\phi(y)dy - \int_{\partial B(x)} \sum_{i=1}^3 n_i \frac{\partial G(x, y)}{\partial y_i} u(y)d_y S.$$

Последното интегрално уравнение (1.11) е основа за прилагането на метода МК. Условието, интегралното ядро да е неотрицателно, е достатъчно за да може

да се използва като преходна плътност във веригата на Марков. Ще докажем, че е възможно да се избере плътността $p(\rho)$ по такъв начин, че функцията на Леви и първите и частни производни да са равни на нула върху повърхността на кълбото, т.е.

$$L_p(y, x) = \partial L_p(y, x) / \partial y_i = 0, \quad \text{за всяко } y \in \partial B(x), \quad i = 1, 2, 3.$$

При тези условия ядрото $\mathbf{M}_y^* L_p(y, x)$ е неотрицателно в $B(x)$.

Да означим с b^* и c^* максималните стойности на $\underline{b}(x)$ и $c(x)$, т.е.

$$(1.12) \quad b^* = \max_{x \in \Omega} | \underline{b}(x) |, \quad c^* = \max_{x \in \Omega} | c(x) |,$$

а с R радиуса на максималното кълбо, което може да се впише в затворената област, т.е. $B(x) \subset \bar{\Omega}$. В сила е следната Лема:

Лема 1.2.2 : *Предполагаме, че $p(r)$ удовлетворява равенството:*

$$p(r) = e^{-kr},$$

където

$$k \geq b^* + Rc^*.$$

Тогав са в сила условията:

$$(i) \quad \mathbf{M}_y^* L_p(y, x) \geq 0, \quad \text{за всяко } y \in B(x);$$

$$(ii) \quad L_p(y, x) = \partial L_p(y, x) / \partial y_i = 0, \quad \text{за всяко } y \in \partial B(x), \quad i = 1, 2, 3.$$

Доказателство: Условието

$$L_p(y, x) = 0, \quad \text{за всяко } y \in \partial B(x)$$

очевидно е изпълнено. То следва от равенства (1.6) и (1.7), защото в случая когато $y \in \partial B(x)$, тогава $r = R$ и $L_p(y, x) = 0$.

Втората част на условие (ii), т.е.

$$\frac{\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} = 0, \quad \text{за всяко } y \in \partial B(x), \quad i = 1, 2, 3,$$

може да бъде проверено непосредствено. Наистина,

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} &= \frac{\partial L_p}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y_i} = \mu_p(R) \frac{\partial}{\partial r} \left(\int_r^R (1/r - 1/\rho) p(\rho) d\rho \right) \frac{\partial r}{\partial y_i} \\ &= \mu_p(R) \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \int_r^R p(\rho) d\rho - \int_r^R \frac{1}{\rho} p(\rho) d\rho \right) \frac{\partial r}{\partial y_i} \\ &= \mu_p(R) \left[-\frac{1}{r^2} \int_r^R p(\rho) d\rho + \frac{1}{r} (-p(r)) - \left(-\frac{1}{r} p(r) \right) \right] \frac{\partial r}{\partial y_i} \\ &= \mu_p(R) \left(-\frac{1}{r^2} \int_r^R p(\rho) d\rho \right) \frac{\partial r}{\partial y_i}. \end{aligned}$$

Като вземем предвид, че

$$\frac{\partial r}{\partial y_i} = \frac{-(x_i - y_i)}{r}$$

получаваме:

$$(1.13) \quad \frac{\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} = \mu_p(R) \frac{(x_i - y_i)}{r^3} \int_r^R p(\rho) d\rho.$$

Последният израз е равен на нула, когато $r = R$. Следователно, втората част на условие (ii) е вярна за всяка гранична точка $y \in \partial B(x)$, т.е.

$$\partial L_p(y, x) / \partial y_i = 0, \quad \text{за всяко } y \in \partial B(x), \quad i = 1, 2, 3.$$

Да проверим условие (i), т.е. да пресметнем ядрото $\mathbf{M}_y^* L_p(y, x)$ и да покажем, че е неотрицателно. Съгласно Лема 1.2.1, оператора \mathbf{M}_y^* може да се запише в следната форма:

$$\mathbf{M}_y^* = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial y_i^2} \right) - \sum_{i=1}^3 \left(b_i(y) \frac{\partial}{\partial y_i} \right) + c(y).$$

Прилагаме оператора към функцията на Леви $L_p(y, x)$ и получаваме:

$$(1.14) \quad \mathbf{M}_y^* L_p(y, x) = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2 L_p(y, x)}{\partial y_i^2} \right) - \sum_{i=1}^3 \left(b_i(y) \frac{\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} \right) + c(y) L_p(y, x).$$

Второто събираемо в равенство (1.14) може да се пресметне, като се използва равенство (1.13):

$$(1.15) \quad \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} = \mu_p(R) \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{(x_i - y_i)}{r^3} \int_r^R p(\rho) d\rho.$$

Да пресметнем първото събираемо в равенство (1.14). Това може да се направи лесно, като въведем сферични координати, т.е.

$$y_1 - x_1 = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y_2 - x_2 = r \sin \theta \sin \varphi, \quad y_3 - x_3 = r \cos \theta,$$

където $0 < r < R(x)$, $\theta \in [0, \pi)$ и $\varphi \in [0, 2\pi)$.

Така оператора на Лаплас

$$\Delta_y = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial y_i^2} \right)$$

записан в сферични координати (виж [15]) има вида:

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Ще отбележим, че функцията на Леви в сферични координати зависи само от радиуса r (вижте равенство (1.6)). Следователно

$$\begin{aligned} \Delta_y L_p(y, x) &= \Delta_{r,\theta,\varphi} L_p(r) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial L_p(r)}{\partial r} \right) \\ &= \mu_p(R) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\int_r^R (1/r - 1/\rho) p(\rho) d\rho \right) = \mu_p(R) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \left(-\frac{1}{r^2} \right) \int_r^R p(\rho) d\rho \right) \\ &= \mu_p(R) \left(-\frac{1}{r^2} \right) \frac{\partial}{\partial r} \int_r^R p(\rho) d\rho = \mu_p(R) \frac{p(r)}{r^2}. \end{aligned}$$

Като вземем предвид (1.14) и (1.15) получаваме:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_y^* L_p(y, x) &= \mu_p(R) \frac{p(r)}{r^2} - \mu_p(R) c(y) \int_r^R \frac{p(\rho)}{\rho} d\rho \\ &+ \frac{\mu_p(R)}{r^2} \left[c(y)r + \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{y_i - x_i}{r} \right] \int_r^R p(\rho) d\rho. \end{aligned}$$

Остана да докажем, че $\mathbf{M}_y^* L_p(y, x)$ е неотрицателно за всяка точка от кълбото $B(x)$. Записваме $\mathbf{M}_y^* L_p(y, x)$ в следния вид:

$$\mathbf{M}_y^* L_p(y, x) = \frac{\mu_p(R)}{r^2} \Gamma_p(y, x),$$

където

$$\Gamma_p(y, x) = p(r) + c(y)r \left(\int_r^R p(\rho) d\rho - \int_r^R \frac{p(\rho)r}{\rho} d\rho \right) + \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{y_i - x_i}{r} \int_r^R p(\rho) d\rho.$$

Сега е достатъчно да проверим, че за всяка точка $y \in B(x)$ функцията $\Gamma_p(y, x)$ е неотрицателна. Като използваме условието $c(y) \leq 0$ и факта, че:

$$\int_r^R p(\rho) d\rho \geq \int_r^R \frac{p(\rho)r}{\rho} d\rho,$$

и тъй като $p(\rho) \geq 0$ и $\rho \geq r$, записваме функцията $\Gamma_p(y, x)$ в следния вид:

$$(1.16) \quad \Gamma_p(y, x) = p(r) - |c(y)|r \left(\int_r^R p(\rho) d\rho - \int_r^R \frac{p(\rho)r}{\rho} d\rho \right) + \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{y_i - x_i}{r} \int_r^R p(\rho) d\rho.$$

Достатъчно е да докажем, че $\Gamma_p(y, x) \geq 0$, като използваме равенство (1.16). За функцията на плътността

$$p(r) = e^{-kr}$$

е изпълнено неравенството:

$$p(r) \geq e^{-kr} - e^{-kR} = k \int_r^R p(\rho) d\rho.$$

Избираме параметъра k , така че да е вярно неравенството от условието на лемата:

$$k \geq b^* + Rc^*.$$

В резултат на този избор получаваме:

$$(1.17) \quad p(r) \geq \left(\max_{x \in \Omega} | \underline{b}(x) | + R \max_{x \in \Omega} | c(x) | \right) \int_r^R p(\rho) d\rho \geq$$

$$\begin{aligned} &\geq |c(y)|r \int_r^R p(\rho)d\rho + |b(y)| \int_r^R p(\rho)d\rho \\ &\geq |c(y)|r \left(\int_r^R p(\rho)d\rho - \int_r^R \frac{p(\rho)r}{\rho}d\rho \right) + \left| \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{y_i - x_i}{r} \right| \int_r^R p(\rho)d\rho. \end{aligned}$$

Тъй като е вярно последното неравенство (1.17), то следва, че е вярно и неравенство $\Gamma_p(y, x) \geq 0$.

С това Лема 1.2.2 е доказана.

Сега интегралното представяне (1.4) може да се запише във вида:

$$(1.18) \quad u(x) = \int_{B(x)} \mathbf{M}_y^* L_p(y, x) u(y) dy + \int_{B(x)} L_p(y, x) \phi(y) dy,$$

където

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_y^* L_p(y, x) &= \mu_p(R) \frac{p(r)}{r^2} - \mu_p(R) c(y) \int_r^R \frac{p(\rho)}{\rho} d\rho \\ &+ \frac{\mu_p(R)}{r^2} \left[c(y)r + \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{y_i - x_i}{r} \right] \int_r^R p(\rho) d\rho. \end{aligned}$$

1.3 Метод Монте Карло и алгоритъм на селекцията

Нека запишем задачата за числено пресмятане на функционала (1.1) по метода МК в еквивалентна на нея (в съответната подобласт) задача, използвайки локалното интегрално представяне.

И така, поставена е задачата за числено пресмятане на функционала

$$(1.19) \quad J(u) \equiv (g, u) = \int_{\Omega} g(x) u(x) dx,$$

където $g(x)$ е зададена функция, а $u(x)$ е решение на локалното интегрално уравнение

$$(1.20) \quad u(x) = \int_{B(x)} k(x, y) u(y) dy + f(x).$$

Случайната величина, която има математическо очакване равно на функционала (1.19), се записва по следния начин (виж [4, 14, 19]):

$$\Theta[g] = \frac{g(\xi_0)}{\pi_0(\xi_0)} \sum_{j=0}^{\infty} W_j f(\xi_j),$$

където

$$W_0 = 1, \quad W_j = W_{j-1} \frac{k(\xi_{j-1}, \xi_j)}{p(\xi_{j-1}, \xi_j)}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

а ξ_0, ξ_1, \dots е верига на Марков в Ω с начална плътност $\pi_0(x)$ и преходна плътност $p(x, y)$, които са допустими¹ относно функциите $g(x)$ и $k(x, y)$.

Сравняваме интегралното представяне (1.18) и интегралното уравнение (1.20). Получаваме

$$k(x, y) = \begin{cases} \mathbf{M}_y^* L_p(y, x), & \text{когато } x \in \Omega \setminus \partial\Omega, \\ 0, & \text{когато } x \in \partial\Omega, \end{cases}$$

и

$$f(x) = \begin{cases} \int_{B(x)} L_p(y, x) \phi(y) dy & \text{когато } x \in \Omega \setminus \partial\Omega, \\ \psi(x), & \text{когато } x \in \partial\Omega. \end{cases}$$

Случайната величина $\Theta[g]$ се явява неизместена оценка за задача (1.19), (1.20), т.е. $M\Theta[g] = J(u)$, а ядрото $k(x, y)$ (виж [5]) удовлетворява условието:

$$\int_{B(x)} k(x, y) dy \rightarrow 1, \quad \text{когато } x \rightarrow x_0 \in \partial\Omega.$$

Също така (виж [5]), вероятността за прекъсване на веригата на Марков с плътност $p(x, y) = k(x, y)$, $y \in B(x)$ е равна на следната функция:

$$h(x) = 1 - \int_{B(x)} k(x, y) dy$$

и клони към нула, когато $x \rightarrow \partial\Omega$. Затова и веригата на Марков може да бъде безкрайно дълга.

В работата на Елепов и Михайлов [3] при решаване на задачата на Дирихле за уравнението на Хелмхолц се въвежда ε -околност на областта, в която е

¹ $\pi_0(x)$ е допустима относно $g(x)$ ако $\pi_0(x) > 0$, когато $g(x) \neq 0$ и $\pi_0(x) \geq 0$, когато $g(x) = 0$.

дефинирана задачата и се променя граничното условие. С други думи, използва се факта, че при ограничени първи производни на решението $u(x)$ за всяко $\varepsilon > 0$ е в сила неравенството:

$$(1.21) \quad |u(x) - u(y)| \leq c_1 \varepsilon, \text{ когато } |x - y| \leq \varepsilon.$$

Използвайки неравенство (1.21), граничното условие на задача (1.2), (1.3) се променя по следния начин:

$$(1.22) \quad u = \psi(x), \quad x \in \partial\Omega_\varepsilon,$$

където $\partial\Omega_\varepsilon$ се нарича ε - околност на границата на областта.

Дефиниция 1.3.1 : *Казваме, че подобластта $\partial\Omega_\varepsilon \subset \Omega$ е ε - околност на границата $\partial\Omega$, ако за всяка точка $y \in \partial\Omega_\varepsilon$, съществува точка $x \in \Omega$ и кълбо, съдържащо се в затворената област $\bar{\Omega}$, с център точката x и максимален радиус $\varepsilon/2$, т.е.*

$$\partial\Omega_\varepsilon = \{y \in \Omega : \exists x, B_{\varepsilon/2}(x) \cap \bar{\Omega} \neq \emptyset, |y - x| \leq \varepsilon/2\}.$$

Така задачата, която решаваме се променя по следния начин:

Числено оценяваме функционала (1.19) по метода МК, където $u(x)$ е решение на уравнението (1.20), което от своя страна се явява локално представяне на граничната задача (1.2), с новото гранично условие (1.22). Така променената задача ще наричаме апроксимираща задача.

Случайната величина (сл.в.) $\Theta_\varepsilon[g]$, която се явява изместена оценка за функционала (1.19), т.е.

$$|M\Theta_\varepsilon[g] - J(u)|^2 \leq C\varepsilon^2$$

(вижте [46]), се записва по следния начин:

$$\Theta_\varepsilon[g] = \frac{g(\xi_0)}{\pi_0(\xi_0)} \sum_{j=0}^{l_\varepsilon} W_j f(\xi_j),$$

където

$$W_0 = 1, \quad W_j = W_{j-1} \frac{k(\xi_{j-1}, \xi_j)}{p(\xi_{j-1}, \xi_j)}, \quad j = 1, 2, \dots, l_\varepsilon,$$

а $\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_{l_\varepsilon}$ е верига на Марков в Ω с начална плътност $\pi_0(x)$ и преходна плътност $p(x, y) = k(x, y)$. Ще отбележим, че когато положим $g(x) = \delta(x - x_0)$ и за начална плътност изберем $\pi_0(x) = \delta(x - x_0)$, всъщност оценяваме решението $u(x)$ в точка x_0 .

Описаният по-долу итерационен МК алгоритъм за решаване на апроксимиращата задача, използва процеса *блуждаене по кълба*. Този процес е подобен на известния в специализираната литература *блуждаене по сфери* [2, 3, 49], който успешно се прилага при решаване на задачата на Дирихле за уравнението на Хелмхолц [45, 46, 58].

Процесът *блуждаене по кълба* стартира в точка $\xi_0 = x \in \Omega$, избрана с начална плътност $\pi_0(x)$. Следващата случайна точка ξ_1 се избира с преходна плътност $p(x, y)$, пропорционална на полученото ядро, във вътрешността на максималното кълбо $B(x) \subset \bar{\Omega}$. Ясно е, че при така избраната плътност, функцията на разпределение зависи от коефициентите на елиптическия оператор.

Всяко следващо преместване във веригата на Марков се извършва по описания начин, но за център на максималното кълбо се избира намерената вече точка. Процесът спира при достигане въведената ε - околност на границата на областта.

Съгласно [5], въвеждането на ε - околност на границата на областта, е достатъчно условие за сходимост на *кълбовидния процес*.

Проблем възниква с използването на подинтегалното ядро като функция на плътност. Директното реализиране на стойности на сл.в. с такава плътност се оказва практически невъзможно. Като *просто правило* за разиграване на сл.в. $\Theta_\varepsilon[g]$ се използва метода на Нойман, известен още като метод на *селекцията*.

Да опишем в общия случай този метод. Предполагаме, че $v_1(x)$ и $v_2(x)$ са дадени неотрицателни функции ($0 \leq v_1(x) \leq v_2(x)$) и

$$\int_{\Omega} v_1(x) dx = V_1, \quad \int_{\Omega} v_2(x) dx = V_2 < \infty,$$

където $\Omega \subset \mathbb{R}^3$.

Предполагаме, че знаем алгоритъм за симулиране на сл.в. с плътност $v_2(x)/V_2$ и търсим алгоритъм за симулиране на сл.в. с плътност $v_1(x)/V_1$. Нека сме получили реализацията ξ на сл.в. с плътност $v_2(x)/V_2$ и реализацията γ на сл.в. равномерно разпределена в интервала $(0, 1)$. Проверяваме неравенството:

$$\gamma v_2(\xi) \leq v_1(\xi).$$

Ако неравенството е вярно, ξ е търсената реализация. В противен случай я отхвърляме и повтаряме процедурата. Ефективността на метода на Нойман е $E = V_1/V_2$.

Естествено възниква въпроса за ефективността на метода на селекцията при решаване на нашата задача.

Разглеждаме неотрицателните функции:

$$p(x, y) = k(x, y) = \mathbf{M}_y^* L_p(y, x) \geq 0$$

и

$$p_0(x, y) = \mathbf{M}_y^* L_p(y, x), \quad \text{когато} \quad c(y) \equiv 0.$$

Като вземем предвид, че $c(y) < 0$, получаваме:

$$p(x, y) \leq p_0(x, y).$$

Лема 1.3.1 : *Функцията $p_0(x, y)$ удовлетворява условията за преходна плътност на разглежданата верига на Марков, т.е.*

$$p_0(x, y) \geq 0 \quad \text{и} \quad \int_{B(x)} p_0(x, y) dy = 1.$$

Доказателство: Наистина,

$$\begin{aligned}
 \int_{B(x)} p_0(x, y) dy &= \int_{B(x)} \mathbf{M}_y^* L_p(y, x) \Big|_{c(y) \equiv 0} dy \\
 (1.23) \quad &= \int_{B(x)} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 L_p(y, x)}{\partial y_i^2} dy - \int_{B(x)} \sum_{i=1}^3 \left(b_i(y) \frac{\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} \right) dy.
 \end{aligned}$$

Прилагаме следната формула на Грийн:

$$\int_{\Omega} u(x) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v(x)}{\partial x_i} dx = - \int_{\Omega} v(x) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} dx + \int_{\partial \Omega} \sum_{i=1}^3 u(x) v(x) n_i d_x S$$

за втория интеграл на (1.23) и получаваме:

$$\begin{aligned}
 &\int_{B(x)} \sum_{i=1}^3 \left(b_i(y) \frac{\partial L_p(y, x)}{\partial y_i} \right) dy \\
 &= \int_{\partial B(x)} \sum_{i=1}^3 n_i b_i(y) L_p(y, x) d_y S - \int_{B(x)} L_p(y, x) \operatorname{div} \underline{b}(y) dy = 0,
 \end{aligned}$$

защото

$$\operatorname{div} \underline{b}(y) = 0 \quad \text{и} \quad L_p(y, x) \Big|_{y \in \partial B(x)} = 0,$$

където вектора $\underline{n} \equiv (n_1, n_2, n_3)$ е външната нормала към границата $\partial B(x)$.

Пресмятаме първия интеграл в (1.23), използвайки сферични координати.

$$\begin{aligned}
 &\int_{B(x)} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 L_p(y, x)}{\partial y_i^2} dy \\
 &= \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{r^2 \sin \theta}{4\pi q_p(R)} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\int_r^R (1/\rho - 1/\rho) p(\rho) d\rho \right) dr d\theta d\varphi \\
 &= \frac{1}{q_p(R)} \int_0^R \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\int_r^R (1/\rho - 1/\rho) p(\rho) d\rho \right) dr \\
 &= \frac{1}{q_p(R)} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \int_r^R (1/\rho - 1/\rho) p(\rho) d\rho \right) \Big|_{r=0}^{r=R} \\
 &= \frac{1}{q_p(R)} (-1) \int_r^R p(\rho) d\rho \Big|_{r=0}^{r=R} = \frac{q_p(R)}{q_p(R)} = 1.
 \end{aligned}$$

С това Лема 1.3.1 е доказана.

Функцията $p_0(x, y)$, записана в Декартови координати е

$$p_0(x, y) = \frac{\mu_p(R)}{r^2} \left[p(r) + \sum_{i=1}^3 b_i(y) \frac{y_i - x_i}{r} \right] \int_r^R p(\rho) d\rho.$$

Като вземем предвид, че при смяна на променливите имаме

$$dy_1 dy_2 dy_3 = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \text{ и } y_i - x_i = r w_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

то разглежданата функция в сферични координати се записва по следния начин:

$$p_0(r, \underline{w}) = \mu_p(R) \sin \theta \left[p(r) + \sum_{i=1}^3 b_i(x + r\underline{w}) w_i \right] \int_r^R p(\rho) d\rho,$$

или

$$p_0(r, \underline{w}) = \frac{\sin \theta}{4\pi q_p(R)} \left[p(r) + \sum_{i=1}^3 b_i(x + r\underline{w}) w_i \right] \int_r^R p(\rho) d\rho.$$

В последния израз с $\underline{w} \equiv (w_1, w_2, w_3)$ сме означили единичен изотропен вектор в \mathbb{R}^3 с координати: $w_1 = \sin \theta \cos \varphi$, $w_2 = \sin \theta \sin \varphi$ и $w_3 = \cos \theta$.

Нека запишем същата функция $p_0(r, \underline{w})$ в следния вид:

$$p_0(r, \underline{w}) = p_0(r) p_0(\underline{w}/r),$$

където

$$p_0(r) = \frac{p(r)}{q_p(R)} = \frac{ke^{-kr}}{1 - e^{-kR}}$$

е функция на плътността и

$$(1.24) \quad p_0(\underline{w}/r) = \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{|\underline{b}(x + r\underline{w})| \cos(\underline{b}, \underline{w})}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho \right]$$

е условна плътност. В [5] е намерена оценката $E \geq \frac{1}{2}$ за ефективността на метода на *селекцията* като е използвана същата плътност (1.24) за граничната задача, но дефинирана в област от \mathbb{R}^m ($m \geq 2$).

В случая, при който елиптичната задача е дефинирана в област от \mathbb{R}^3 (виж [21]) е намерена мажорираща функция $h_r(\underline{w})$ за (1.24) и е доказана следната теоретична оценка за алгоритмичната ефективност на метода на Нойман:

$$(1.25) \quad E \geq \frac{1 + \alpha}{2 + \alpha}, \text{ където } \alpha = \frac{c^* R}{b^*},$$

R е радиуса на максималното кълбо, което може да се впише в областта Ω .

Ще отбележим, че b^* и c^* са дефинирани в (1.12).

Нека предположим, че параметъра k е избран по следния начин:

$$k = b^* + Rc^*.$$

Тогав следната теорема (виж [31]) подобрява оценка (1.25).

Теорема 1.3.1 : *Функцията*

$$h_r(\underline{w}) = \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{\max_{x \in \Omega} |\underline{b}(x)|}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho \right]$$

е мажоранта за условната плътност (1.24). В този случай за ефективността на метода на селекцията е в сила следната оценка:

$$E \geq \frac{1 + \alpha}{2 + \alpha - \varepsilon_R}, \quad 0 < \varepsilon_R < 1.$$

Доказателство: Да оценим от горе условната плътност $p_0(\underline{w}/r)$:

$$\begin{aligned} p_0(\underline{w}/r) &= \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{|\underline{b}(x + r\underline{w})| \cos(\underline{b}, \underline{w})}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho \right] \\ &\leq \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{b^*}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho \right] = h_r(\underline{w}). \end{aligned}$$

От друга страна

$$\begin{aligned} h_r(\underline{w}) &= \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{b^*}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho \right] = \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{b^*}{k} (1 - e^{-k(R-r)}) \right] \\ (1.26) \quad &= \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{b^*}{k} \left(1 - \frac{e^{kr}}{e^{kR}} \right) \right] \leq \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[1 + \frac{b^*}{k} \left(1 - \frac{1}{e^{kR}} \right) \right] = H(\underline{w}). \end{aligned}$$

Ясно е, че функциите $h_r(\underline{w})$ и $H(\underline{w})$ са мажоранти за $p_0(\underline{w}/r)$. За ефективността на метода на селекцията в случая когато $c(y) \equiv 0$ получаваме:

$$E = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi p_0(\underline{w}/r) d\theta d\varphi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi H(\underline{w}) d\theta d\varphi} = \frac{1}{1 + \frac{b^*}{k} \left(1 - \frac{1}{e^{kR}} \right)} =$$

$$= \frac{k}{k + b^*(1 - \frac{1}{e^{kR}})} = \frac{b^* + Rc^*}{2b^* + Rc^* - \frac{b^*}{e^{kR}}} = \frac{1 + \alpha}{2 + \alpha - \varepsilon_R},$$

където

$$\alpha = \frac{c^* R}{b^*} \text{ и } \varepsilon_R = \frac{1}{e^{kR}}.$$

Вземайки предвид (1.26), получаваме:

$$E \geq \frac{1 + \alpha}{2 + \alpha - \varepsilon_R},$$

когато $h_r(\underline{w})$ е мажорантната функция. Това доказва теоремата.

Ясно е, че оценка (1.25) се получава като следствие на Теорема 1.3.1 при $\varepsilon_R \rightarrow 0$.

Ще отбележим, че функцията

$$\bar{p}(x, y) = \frac{p(x, y)}{V},$$

където

$$\int_{B(x)} p(x, y) dy = V < 1$$

може да се използва като плътност в случая когато $c(y) \neq 0$. Да запишем $p(x, y)$ в сферични координати, а именно:

$$p(r, \underline{w}) = \frac{\sin \theta}{4\pi q_p(R)} \times \\ \times \left[p(r) + \left(\sum_{i=1}^3 b_i(x + r\underline{w})w_i + c(x + r\underline{w})r \right) \int_r^R p(\rho) d\rho - c(x + r\underline{w})r^2 \int_r^R \frac{p(\rho)}{\rho} d\rho \right].$$

Следното неравенство е в сила:

$$p(r, \underline{w}) \leq p_0(r, \underline{w}) \leq \frac{p(r)}{q_p(R)} h_r(\underline{w}) \\ = \frac{\sin \theta p(r)}{4\pi q_p(R)} \left[1 + \frac{\max_{x \in \Omega} |b(x)|}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho \right] \equiv h(r, \underline{w}).$$

Като вземем предвид Теорема 1.3.1 лесно се проверява, че $h(r, \underline{w})$ е мажоранта на функцията $p(r, \underline{w})$ и ефективността на метода на Нойман е

$$E \geq V \frac{1 + \alpha}{2 + \alpha - \varepsilon_R}.$$

От последната оценка се вижда, че ефективността E зависи и от нормата на ядрото $k(x, y)$, тъй като $p(x, y) = k(x, y)$.

1.4 Оценка за изчислителната сложност на итерационния Монте Карло алгоритъм

Функцията $p(r, \underline{w})$ може да бъде записана във вида:

$$\begin{aligned} p(r, \underline{w}) &= \frac{\sin \theta}{4\pi q_p(R)} p(r) \\ &\times \left\{ 1 + \left[\frac{|\underline{b}(x + r\underline{w})| \cos(\underline{b}, \underline{w}) + c(x + r\underline{w})r}{p(r)} \right] \int_r^R p(\rho) d\rho - \frac{c(x + r\underline{w})r^2}{p(r)} \int_r^R \frac{p(\rho)}{\rho} d\rho \right\} \\ &= \frac{\sin \theta}{4\pi q_p(R)} p(r) \times \bar{p}_r(\underline{w}). \end{aligned}$$

На практика при прилагане на метода на селекцията се търсят реализациите на случайна величина с плътност

$$\begin{aligned} \bar{p}_r(\underline{w}) &= 1 + \left[\frac{|\underline{b}(x + r\underline{w})| \cos(\underline{b}, \underline{w}) + c(x + r\underline{w})r}{p(r)} \right] \int_r^R p(\rho) d\rho \\ &\quad - \frac{c(x + r\underline{w})r^2}{p(r)} \int_r^R \frac{p(\rho)}{\rho} d\rho. \end{aligned}$$

Тъй като е изпълнено неравенството:

$$\bar{p}_r(\underline{w}) \leq 1 + \frac{b^*}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho = h(r),$$

то функцията $h(r)$ се използва като мажорираща плътност на друга сл.в., чиито реализации лесно се получават, като се използва метода на обратните функции.

Да опишем итерационния МК алгоритъм, който решава апроксимиращата задача, използвайки процеса *блуждаене по кълба* и прилагайки метода на Нойман. Процесът стартира в точка $x \in \Omega$ зададена с начална плътност $\pi_0(x)$. Предполагаме, че $\pi_0(x)$ е допустима относно функцията $g(x)$.

Алгоритъмът за една реализация на процеса *блуждаене по кълба* се описва по стъпки както следва:

Алгоритъм 1.4.1 :

1. Намираме радиуса $R(x)$ на максималното кълбо, вписано в областта Ω с център точка x ;
2. Пресмятаме стойността r на сл.в. τ с плътност:

$$(1.27) \quad \frac{p(r)}{q_p(R)} = \frac{ke^{-kr}}{1 - e^{-kR}}$$

по метода на обратните функции;

3. Пресмятаме функцията

$$h(r) = 1 + \frac{b^*}{p(r)} \int_r^R p(\rho) d\rho = 1 + \frac{b^*}{k} (1 - e^{-k(R-r)});$$

4. Конструираме единичен изотропен вектор \underline{w}^j в \mathbb{R}^3 . Този вектор определя посоката на преместване;
5. Пресмятаме стойността γ_j на сл.в., равномерно разпределена в интервала $(0, 1)$;
6. Изпълняваме стъпки 4 и 5 докато определим параметъра j_0 от формулата:

$$j_0 = \min\{j : h(r)\gamma_j \leq \bar{p}_r(\underline{w}^j)\}.$$

Така случайният вектор \underline{w}^{j_0} е с търсената плътност $\bar{p}_r(\underline{w})$;

7. Намираме точката y , използвайки формулата:

$$y = x + r\underline{w}^{j_0}.$$

Фактически, стойността $r = |y - x|$ е големината на радиус на сфера, лежаща в максималното кълбо и имаща за център точка x ;

8. Ако точка y не принадлежи на ε -околността на границата, т.е. $y \notin \partial\Omega_\varepsilon$, повтаряме алгоритъма за $x = y$;
9. Спираме алгоритъма, когато случайният процес достигне до ε -околността на границата, т.е. $y \in \partial\Omega_\varepsilon$.

Изчислителната сложност или алгоритмичната ефективност зависи от средния брой стъпки (кълба), които са необходими за достигане до ε -околността $\partial\Omega_\varepsilon$. От друга страна построяването на всяко следващо кълбо зависи от позицията на точка y , т.е. когато тя е разположена по-близо до повърхността на кълбото, процесът блуждаене по кълба се сходя по-бързо към $\partial\Omega_\varepsilon$. Точка y всъщност се определя от сл.в. τ с плътност (1.27). Следователно, важно е да имаме оценка за математическото очакване на сл.в. τ .

Нека изчислим математическото очакване на сл.в. τ , т.е.

$$M\tau = \int_0^R r \frac{p(r)}{q_p(R)} dr = \int_0^R \frac{rke^{-kr}}{1 - e^{-kR}} dr = \frac{1}{k} + \frac{R}{1 - e^{kR}}.$$

Да изследваме функцията

$$g_1(z) = \frac{1}{z} + \frac{1}{1 - e^z} = \frac{M\tau}{R},$$

където сме положили $z = kR > 0$.

Лема 1.4.1 : *Непрекъснатата функция $g_1(z)$ е ограничена и монотонно намаляваща в интервала $(0, \infty)$. Нещо повече, в сила са неравенствата:*

$$0 < g_1(z) < \frac{1}{2}.$$

Доказателство: Функцията $g_1(z)$ може да бъде представена като частно на следните две функции: $h_1(z) = 1 - e^z + z$ и $h_2(z) = z(1 - e^z)$. Прилагаме правилото на Лопитал, а именно:

$$\lim_{z \rightarrow 0} g_1(z) = \frac{\lim_{z \rightarrow 0} h_1''(z)}{\lim_{z \rightarrow 0} h_2''(z)}$$

и намираме границата на функцията $g_1(z)$, когато $z \rightarrow 0$. Получаваме

$$\lim_{z \rightarrow 0} g_1(z) = \frac{1}{2}.$$

В случая, когато $z \rightarrow \infty$ за границата на функцията имаме

$$\lim_{z \rightarrow \infty} g_1(z) = 0.$$

Остана да покажем, че

$$g_1(z) = \frac{1}{z} + \frac{1}{1 - e^z}$$

е монотонно намаляваща. Достатъчно е да докажем, че първата производна е отрицателна за всяко $z \in (0, \infty)$, т.е.

$$g_1'(z) = -\frac{1}{z^2} + \frac{e^z}{(e^z - 1)^2} < 0,$$

или, че е вярно неравенството:

$$\frac{1}{e^z} + e^z > z^2 + 2.$$

Представяме функциите e^z и e^{-z} в степенни редове и получаваме:

$$2\frac{z^4}{4!} + 2\frac{z^6}{6!} + \dots > 0.$$

Последното неравенство е вярно за всяко $z \in (0, \infty)$. Следователно функцията $g_1(z)$ е монотонно намаляваща, като

$$0 < g_1(z) < \frac{1}{2}.$$

С това Лема 1.4.1 е доказана.

Следствие 1.4.1 : Математическото очакване на сл.в. τ принадлежи на интервала $(0, R/2)$, т.е. $0 < M\tau < R/2$, където R е радиусът на максималното кълбо, вписано в затворената област $\bar{\Omega}$.

От Следствие 1.4.1 се разбира, че когато математическото очакване на сл.в. τ е по-близко до нулата, трудоемкостта на задачата се увеличава, т.е. редицата от центровете на кълбата ще е бавно сходяща към границата на областта.

Съществува, обаче връзка между параметрите на диференциалния оператор и радиуса на максималното кълбо, подобряваща тази сходимост. В сила е следната теорема:

Теорема 1.4.1 : *Нека $\alpha_0 \in (0, 1/2)$. Математическото очакване на сл.в. τ принадлежи на интервала $(\alpha_0 R, R/2)$ тогава и само тогава, когато радиусът R на максималното кълбо, което може да се впише в затворената област $\bar{\Omega}$ удовлетворява неравенството:*

$$(1.28) \quad R < \frac{-b^* + \sqrt{(b^*)^2 + 4c^*\beta_0}}{2c^*\beta_0},$$

където β_0 е решение на уравнението $g_1(z) = \alpha_0$, а b^* и c^* са дефинирани с изразите от (1.12).

Доказателство: Функцията $g_1(z)$ е непрекъснатата и намаляваща в интервала $(0, \infty)$. Следователно съществува точно едно решение β_0 на уравнението:

$$g_1(z) = \frac{1}{z} + \frac{1}{1 - e^z} = \alpha_0.$$

Условието $z < \beta_0$ води до $g_1(z) \in (\alpha_0, 1/2)$. Остана да решим неравенството $(b^* + Rc^*)R < \beta_0$ за което получаваме:

$$R < \frac{-b^* + \sqrt{(b^*)^2 + 4c^*\beta_0}}{2c^*\beta_0}.$$

С това Теорема 1.4.1 е доказана.

Да разгледаме следния пример: Полагаме $\beta_0 = 1$. Тогава, ако е вярно неравенството:

$$(1.29) \quad R < \frac{-b^* + \sqrt{(b^*)^2 + 4c^*}}{2c^*},$$

то следва, че за математическото очакване на сл.в. τ е изпълнено

$$(1.30) \quad M\tau \in \left(\frac{e-2}{e-1}R, \frac{R}{2} \right).$$

Нека пресметнем сега дисперсията на сл.в. τ и да докажем, че е ограничена.

$$\begin{aligned} D\tau &= M\tau^2 - (M\tau)^2 = \int_0^R r^2 \frac{p(r)}{q_p(R)} dr - \left(\int_0^R r \frac{p(r)}{q_p(R)} dr \right)^2 = \\ &= \frac{1}{k^2} + \frac{R^2}{1 - e^{kR}} - \frac{R^2}{(1 - e^{kR})^2} = \frac{1}{k^2} - \frac{R^2 e^{kR}}{(1 - e^{kR})^2} = \sigma^2. \end{aligned}$$

Разглеждаме помощната функция

$$g_2(z) = \frac{1}{z^2} - \frac{e^z}{(1 - e^z)^2} = \frac{\sigma^2}{R^2},$$

където сме положили $z = kR > 0$.

Лема 1.4.2 : *Непрекъснатата функция $g_2(z)$ е ограничена и монотонно намаляваща в интервала $(0, \infty)$. Нещо повече, в сила са неравенствата:*

$$0 < g_2(z) < \frac{1}{12}.$$

Доказателство: Функцията $g_2(z)$ също може да се представи като частно на следните две функции $h_3(z) = (1 - e^z)^2 - z^2 e^z$ и $h_4(z) = z^2(1 - e^z)^2$. Прилагаме правилото на Лопитал, а именно:

$$\lim_{z \rightarrow 0} g_2(z) = \frac{\lim_{z \rightarrow 0} h_3^{(iv)}(z)}{\lim_{z \rightarrow 0} h_4^{(iv)}(z)}$$

и намираме границата на функцията $g_2(z)$, когато $z \rightarrow 0$. Получаваме

$$\lim_{z \rightarrow 0} g_2(z) = \frac{1}{12}.$$

В случая, когато $z \rightarrow \infty$ за границата на функцията получаваме:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} g_2(z) = 0.$$

Остана да покажем, че $g_2(z)$ е монотонно намаляваща. Достатъчно е да докажем, че първата и производна е отрицателна за всяко $z \in (0, \infty)$, т.е.

$$g_2'(z) = -\frac{2}{z^3} + \frac{e^{2z} + e^z}{(e^z - 1)^3} < 0,$$

или, че е вярно неравенството:

$$(1.31) \quad \frac{(e^z - 1)^3}{e^{2z} + e^z} > \frac{z^3}{2}.$$

Неравенство (1.31) може да се запише в следната форма:

$$(1.32) \quad e^z - e^{-z} + \frac{8}{e^z + 1} > \frac{z^3}{2} + 4.$$

За да докажем (1.32) използваме хиперболичните функции $\sinh(z)$ и $\cosh(z)$. След няколко опростявания неравенство (1.32) се записва във вида:

$$2e^{2z} + 6 - (z^3 + 4)e^z - 4 \cosh(z) - z^3 > 0.$$

Представяме функциите e^{2z} , e^z и $\cosh(z)$ в степенни редове и получаваме:

$$\frac{1}{5!}z^7 + \frac{3}{6!}z^8 + O(z^9) > 0.$$

Последното неравенство е вярно за всяко $z \in (0, \infty)$. Следователно функцията $g_2(z)$ е монотонно намаляваща, като

$$0 < g_2(z) < \frac{1}{12}.$$

С това Лема 1.4.2 е доказана.

Следствие 1.4.2 : *Дисперсията на сл.в. τ е крайна, нещо повече $D\tau = \sigma^2 < R^2/12$, където R е радиусът на максималното кълбо вписано в затворената област $\bar{\Omega}$.*

Изчислителната сложност на Алгоритъм 1.4.1 може да се изрази с величината

$$S_0 = N t_0 M l_\varepsilon,$$

където N е броя на реализираните траектории; величината t_0 е времето за моделиране на точка в максималното кълбо, вписано в затворената област $\bar{\Omega}$; величината Ml_ε е средния брой кълба, реализирани за една траектория.

Да означим с $\bar{\theta}_\varepsilon[\delta]$ статистическата оценка за решението $u(x)$ на апроксимиращата задача, т.е.

$$\bar{\theta}_\varepsilon[\delta] = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \theta_\varepsilon^{(i)}[\delta].$$

Грешката на метода се оценява както следва:

$$M(\bar{\theta}_\varepsilon[\delta] - u(x))^2 = \frac{D\theta_\varepsilon[\delta]}{N} + (u(x) - M\theta_\varepsilon[\delta])^2 \leq \frac{d}{N} + C\varepsilon^2 = \mu^2.$$

Фактически, за да получим грешка от ред μ величините N и ε трябва да бъдат

$$N = O(\mu^{-2}), \quad \varepsilon = O(\mu).$$

Ще отбележим, че величината d е една горна граница на $D\theta_\varepsilon[\delta]$. Тук няма да се спираме на факта, че дисперсията на сл.в. $\theta_\varepsilon[\delta]$ е крайна. Това е доказано от Сипин в [5, 12].

За да оценим изчислителната сложност на алгоритъма, трябва да оценим величината Ml_ε , т.е. средния брой кълба за една реализация във веригата на Марков. За целта ще използваме намерената вече оценка за средния брой сфери при процеса *блуждаене по сфери* [2, 4, 62], а именно:

$$(1.33) \quad Ml_{sp} \leq A|\ln \varepsilon|.$$

Тук с величината Ml_{sp} сме означили средния брой сфери за една траектория.

Процесът *блуждаене по сфери* може да се запише като редица от центровете на максималните сфери, получаващи се от следната рекурентна връзка:

$$(1.34) \quad \xi_n = \xi_{n-1} + \underline{\omega}^{(n)} R(\xi_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots, \quad \xi_0 = x_0,$$

където $\underline{\omega}^{(n)}$ е редица от независими изотропни вектори с единична дължина, началната плътност е $\pi_0(x) = \delta(x - x_0)$, а вероятността за прекъсване на редицата е $h(x) = 0$, при $x \in \partial\Omega_\varepsilon$ и $h(x) = 1$, при $x \in \partial\Omega_\varepsilon$.

Фактически, оценката (1.33) се отнася за дефинирания процес (1.34), при който всяка следваща точка се избира равномерно върху повърхността на максималната сфера вписана в областта [4]. Тази оценка се явява една долна граница на разглеждания *кълбовиден процес*.

По-общо процесът *блуждаене по сфери* се нарича *блуждаене по малки сфери* [62] и се записва така:

$$(1.35) \quad \xi_n = \xi_{n-1} + \underline{\omega}^{(n)} \alpha R(\xi_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots, \quad \alpha \in (0, 1].$$

При $\alpha = 1$ получаваме обикновения процес *блуждаене по сфери* (1.34).

Сабелъфелд в [62] е получил оценка за средния брой сфери $Ml_{s sph}$ при процеса *блуждаене по малки сфери* (1.35), за фиксиран малък радиус r_0 , където $r_0/R = \alpha \in (0, 1]$, а именно:

$$(1.36) \quad Ml_{s sph} = \frac{4R |\ln \varepsilon|}{r_0^2} + O(r_0^4).$$

Тук с R сме означили радиуса на най-голямата сфера, вписана в разглежданата област Ω .

Поставяме си задачата: Колко малък да изберем радиуса r_0 или по-точно величината α , че да е изпълнено неравенството $Ml_\varepsilon \leq Ml_{s sph}$.

Нека с N_1 означим реализациите на сл.в. τ .

Теорема 1.4.2 : *Разглеждаме процес блуждаене по кълба, при който радиусът R на максималното кълбо, което може да се впише в затворената област $\bar{\Omega}$ удовлетворява неравенството:*

$$R < \frac{-b^* + \sqrt{(b^*)^2 + 4c^*\beta_0}}{2c^*\beta_0},$$

където β_0 е решение на уравнението $g_1(z) = \alpha_0$, а $\alpha_0 \in (0, 1/2)$.

Разглеждаме и процес блуждаене по малки сфери при фиксиран малък радиус r_0 , където $r_0/R = \alpha \in (0, 1]$. Тогава, ако изберем

$$\alpha = \alpha_0 - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{N_1}}$$

неравенството $Ml_\epsilon \leq Ml_{ssph}$ ще е изпълнено с вероятност по-голяма от 0.997.

Доказателство: Да използваме правилото на трите сигми при оценка на грешката $|M\tau - \bar{\tau}_{N_1}|$, а именно

$$Pr \left\{ |M\tau - \bar{\tau}_{N_1}| < \frac{3\sigma}{\sqrt{N_1}} \right\} \approx 0.997$$

или

$$(1.37) \quad Pr \left\{ M\tau - \frac{3\sigma}{\sqrt{N_1}} < \bar{\tau}_{N_1} < M\tau + \frac{3\sigma}{\sqrt{N_1}} \right\} \approx 0.997.$$

Смисълът на това правило е, че практически е невъзможно при едно изпитание на сл.в. τ стойността и да напусне посочения интервал. Вероятността да са изпълнени неравенствата в (1.37) може да бъде увеличена като се увеличи посочения интервал. Това се постига като се вземе предвид, че

$$M\tau \in \left(\alpha_0 R, \frac{R}{2} \right) \text{ и } \sigma^2 < \frac{R^2}{12}.$$

Следователно с вероятност по-голяма от 0.997 може да се твърди, че за $\bar{\tau}_{N_1}$ е изпълнено неравенството:

$$\bar{\tau}_{N_1} > \alpha_0 R - \frac{R\sqrt{3}}{2\sqrt{N_1}}.$$

Разглеждаме процеса блуждаене по малки сфери при фиксиран малък радиус:

$$r_0 = \alpha_0 R - \frac{R\sqrt{3}}{2\sqrt{N_1}}.$$

При така избрания радиус, с вероятност по-голяма от 0.997 всяка реализация r на сл.в. τ в процеса блуждаене по кълба ще бъде по-голяма от r_0 , което означава, че оценката за средния брой сфери (1.36) при процеса блуждаене по малки сфери

с фиксирания малък радиус r_0 , се явява една горна граница на оценката Ml_ϵ , т.е. с вероятност по-голяма от 0.997 е изпълнено неравенството:

$$Ml_\epsilon \leq Ml_{ssph} = \frac{4R|\ln \epsilon|}{r_0^2} + O(r_0^4).$$

С това Теорема 1.4.2 е доказана.

Очевидно алгоритмичната ефективност зависи от условие (1.28). Нещо повече, това условие оказва влияние и върху точността на решението. Представените числени резултати в параграф 1.5 за тестова гранична задача при различни стойности на b^* и c^* потвърждават получените теоретични резултати.

1.5 Числени експерименти и паралелна реализация

Да разгледаме задачата за числено пресмятане на функционала (1.1), използвайки представения в секция 1.4 итерационен МК алгоритъм, където функцията $u(x)$ е решение на следната гранична задача:

$$(1.38) \quad \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} + b_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) + c(x)u = 0, \quad x \in \Omega, \quad \Omega = [0, 1]^3,$$

$$(1.39) \quad u(x_1, x_2, x_3) = e^{a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3}, \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in \partial\Omega_\epsilon.$$

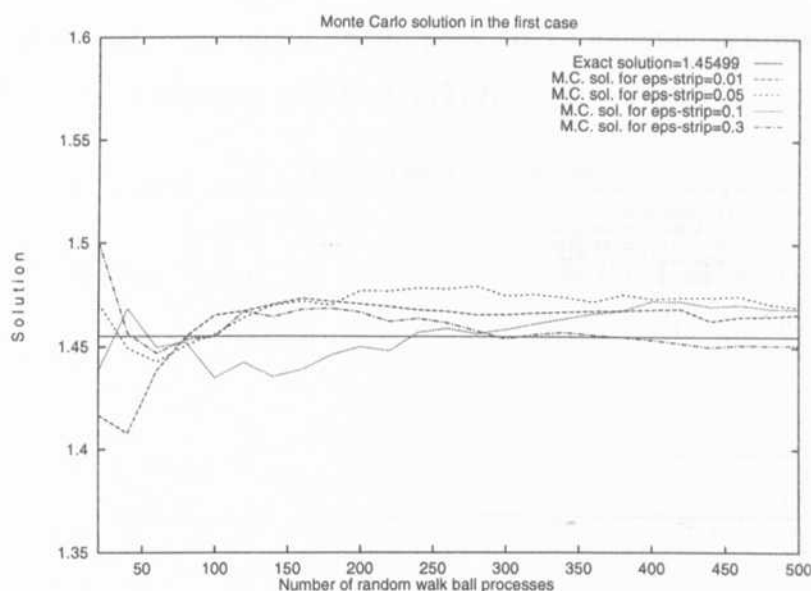
При числените експерименти вектора $\underline{b}(x)$ е зададен със следните координати

$$b_1(x) = a_2 a_3 (x_2 - x_3), \quad b_2(x) = a_3 a_1 (x_3 - x_1), \quad b_3(x) = a_1 a_2 (x_1 - x_2),$$

а функцията на елиптичност $c(x)$ има вида:

$$c(x) = -(a_1^2 + a_2^2 + a_3^2),$$

където a_1, a_2, a_3 са реални числа.



Фигура 1.1: Първи случай: коефициентите са равни на 0.25.

Ще отбележим, че условието $\operatorname{div} \underline{b}(x) = 0$ е изпълнено.

Числени резултати са получени за три случая на коефициентите a_1 , a_2 и a_3 , а именно:

Първи случай: $a_1 = 0.25$, $a_2 = 0.25$, $a_3 = 0.25$;

Втори случай: $a_1 = 0.5$, $a_2 = 0.5$, $a_3 = 0.5$;

Трети случай: $a_1 = -1$, $a_2 = -1$, $a_3 = -1$;

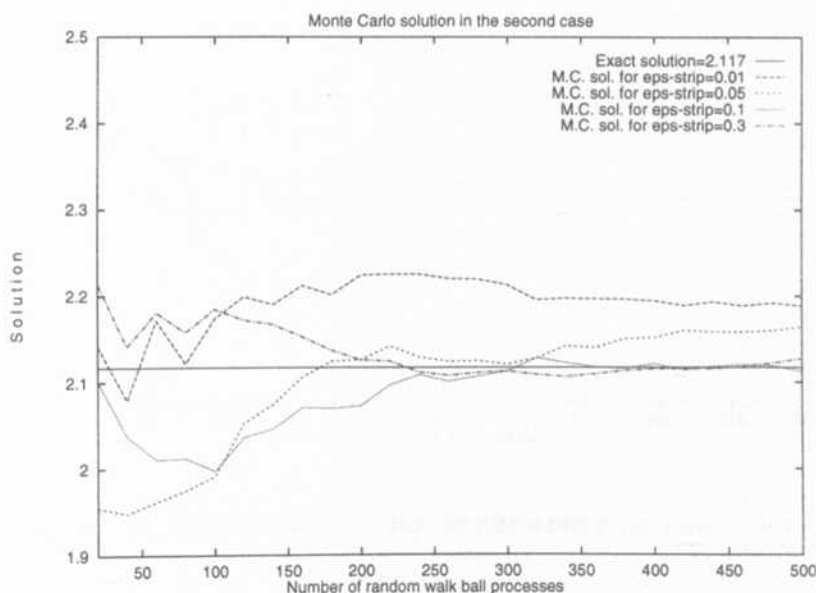
и за четири различни ε -околности на границата на областта:

$$\varepsilon = 0.01; \quad \varepsilon = 0.05; \quad \varepsilon = 0.1; \quad \varepsilon = 0.3.$$

Представеният Алгоритъм 1.4.1 е реализиран в програмната среда ATHAPAS-CAN върху IBM SP1 с 32 процесора. Числените резултати за приближено пресмятане на линейния функционал (1.1) са показани на Фигури 1.1–1.3, когато функцията $g(x)$ е избрана да е δ -функция, т.е.

$$g(x) = \delta[(x_1 - 1/2), (x_2 - 1/2), (x_1 - 1/2)].$$

Фактически, ние намираме приближено решението на елиптичната гранична задача (1.38), (1.39) в точка $x = (1/2, 1/2, 1/2)$.

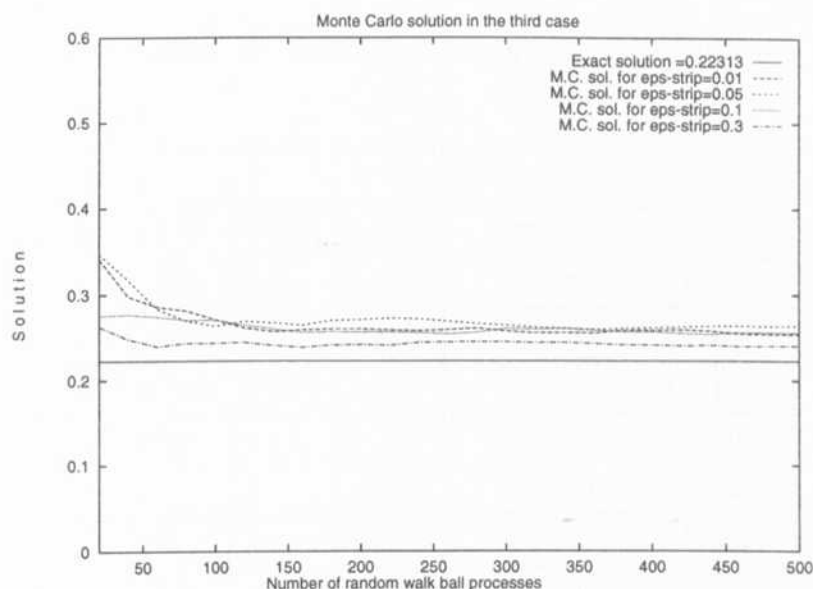


Фигура 1.2: Втори случай: коефициентите са равни на 0.5.

На Фигури 1.1 и 1.2 са показани как се изменя приближеното решение при нарастване на броя на траекториите, за различни ε -околности на границата на областта. Стойностите на коефициентите a_1 , a_2 и a_3 , са посочените в случаи 1 и 2. Ще отбележим, че в тези два случая са удовлетворени условията (1.29) и (1.30), произтичащи от Теорема 1.4.1, при $\beta_0 = 1$. Ясно е, че съществува връзка между статистическата грешка, ε -околността на границата и параметрите на елиптичния оператор.

Числените резултати при третия случай са изобразени на Фигура 1.3. Тук се наблюдава влошаване на статистическата грешка и причината е, че не са изпълнени условията (1.29) и (1.30).

От Таблица 1.1 се вижда, че числените експерименти за ефективността на метода на селекцията потвърждават теоретичния резултат, получен в Теорема 1.3.1. Тази ефективност не зависи от броя на траекториите.



Фигура 1.3: Трети случай: коефициентите са равни на -1 .

Средният брой на преходите в процеса *блуждаене по кълба* (виж Таблица 1.1) е пропорционален на $|\ln \varepsilon|$. В случая, когато условията (1.29) и (1.30), произтичащи от Теорема 1.4.1 са изпълнени, този процес се сходя по-бързо към ε -околността на границата на областта.

За разлика от изпълнението на алгоритъма върху последователен компютър, където всяка стъпка се изпълнява итеративно, то при паралелната платформа на IBM SP1 всяка реализация на процеса *блуждаене по кълба* се изпълнява едновременно. Тестовите примери при паралелната реализация на алгоритъма са главно за два случая, когато пресмятаме приближено решението на граничната задача (1.38) и (1.39) в две различни точки, а именно когато сме положили:

$$h(x) = \delta[(x_1 - 1/4), (x_2 - 1/4), (x_1 - 1/4)],$$

$$h(x) = \delta[(x_1 - 1/2), (x_2 - 1/2), (x_1 - 1/2)].$$

Коефициентите сме избрали по следния начин:

$$a_1 = 1, a_2 = -0.5, a_3 = -0.5 \text{ и } \varepsilon = 0.01, 0.05, 0.15.$$

Таблица 1.1: Ефективност на метода на селекцията и осреднен брой кълба до границата на областта

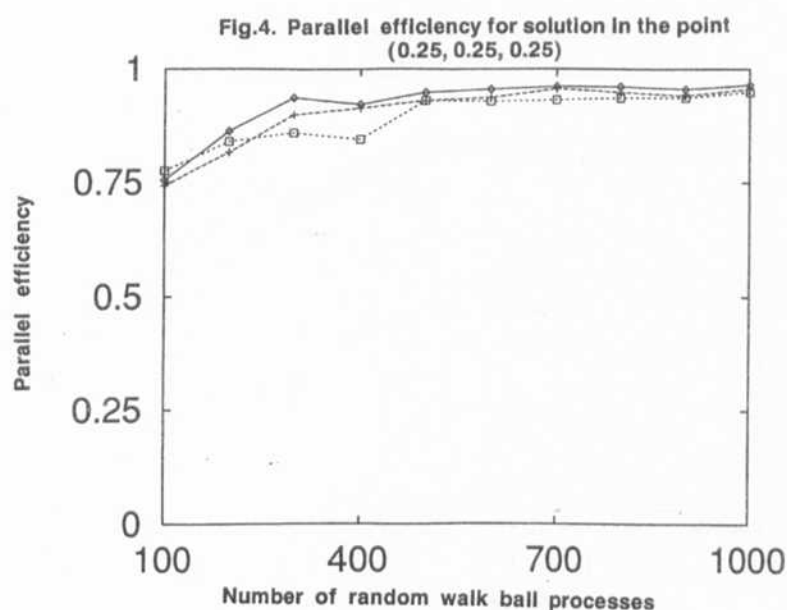
$\partial\Omega_\varepsilon$	b^*	c^*	R^*	Number of Balls	E
0.01	$\sqrt{3}/16$	0.1875	2.039	36 - 37	0.99
0.01	$\sqrt{3}/4$	0.75	0.9016	35 - 36	0.97123
0.01	$\sqrt{3}$	3	0.3568	43 - 44	0.91071
0.05	$\sqrt{3}/16$	0.1875	2.039	17 - 18	0.99
0.05	$\sqrt{3}/4$	0.75	0.9016	17 - 18	0.9596
0.05	$\sqrt{3}$	3	0.3568	20 - 21	0.85829
0.10	$\sqrt{3}/16$	0.1875	2.039	8 - 9	0.9887
0.10	$\sqrt{3}/4$	0.75	0.9016	9 - 10	0.95371
0.10	$\sqrt{3}$	3	0.3568	12 - 13	0.83596
0.30	$\sqrt{3}/16$	0.1875	2.039	1 - 2	0.97
0.30	$\sqrt{3}/4$	0.75	0.9016	2 - 3	0.92583
0.30	$\sqrt{3}$	3	0.3568	2 - 3	0.75561

Забележки:

1. Теоретическа ефективност на метода на селекцията:
Първи тест: $E = 0.95104$; Втори тест: $E = 0.84882$; Трети тест: $E = 0.69958$;
2. Брой траектории при процеса *блуждаене по кълба* $N = 600$;
3. Параметри съгласно Теорема 1.4.1: $\beta_0 = 1$ и $R^* = (-b^* + \sqrt{(b^*)^2 + 4c^*})/(2c^*)$;
4. Радиус на максималното кълбо $R = 0.5$;

На Фигури 1.4 и 1.5 е представена паралелната ефективност на Алгоритъм 1.4.1.

Използвани са максималния брой процесори 32. С нарастване на броя на реализациите на процеса *блуждаене по кълба* се вижда, че паралелната ефективност се подобрява и е близка до единицата. Това се дължи на факта, че времето за комуникации между процесорите относително намалява в сравнение с времето, за което работи един процесор.

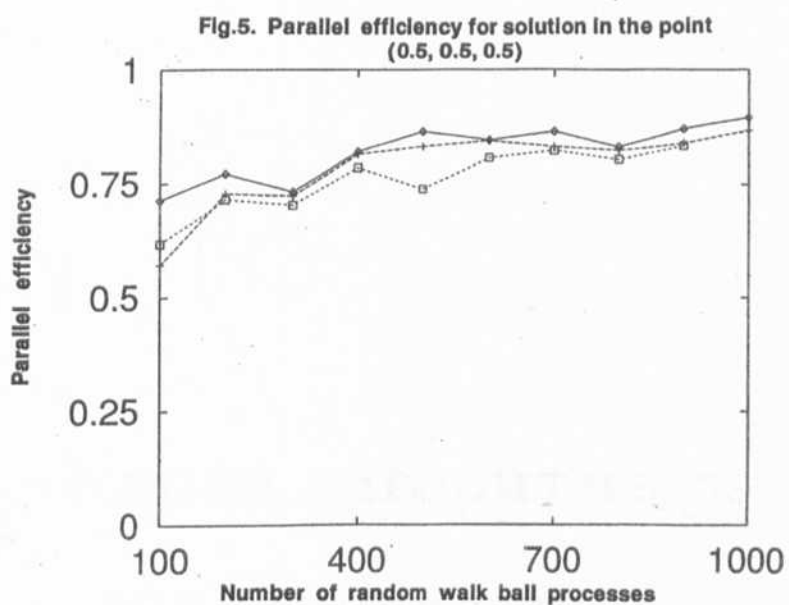


Фигура 1.4: Паралелната ефективност при намиране на решението в точка $x = (1/4, 1/4, 1/4)$.

1.6 Изводи

В тази глава е представен итерационен МК алгоритъм за числено решаване на функционал от решението на гранична задача (1.2) и (1.3). Полученото ядро в локалното интегрално представяне може да се използва като преходна плътност при процеса на Марков. Реализиран е процеса *блуждаене по кълба* и се използва метода на Нойман като *просто правило* за получаване на стойностите на търсената сл.в. Подобрена е оценката за ефективността на метода на селекцията. Получената връзка между параметрите на диференциалния оператор съществено влияе, както върху статистическата грешка, така и върху изчислителната сложност на алгоритъма. Независимо от това ограничение този алгоритъм е приложим за широк клас гранични задачи.

Числените тестови показатели показват, че представения итерационен МК алгоритъм е ефективен при изпълнение върху MIMD-машини.



Фигура 1.5: Паралелната ефективност при намиране на решението в точка $x = (1/2, 1/2, 1/2)$.

Високата паралелна ефективност на МК алгоритъма и навлизането на все по-нови компютърни технологии водят до естествената необходимост от прилагането на този тип алгоритми при решаване на редица важни задачи при пренос на замърсители.

Глава 2

Монте Карло алгоритми за интегрални уравнения с полиномиална нелинейност

2.1 Постановка на задачата

Разглеждаме задачата за числено пресмятане на функционала $J(u)$ по метода Монте Карло (МК):

$$(2.1) \quad J(u) \equiv (g, u) = \int_{\Omega} g(x)u(x)dx,$$

където областта $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, а точка $x \in \Omega$ е точка от Евклидовото пространство \mathbb{R}^d . Функциите $u(x)$ и $g(x)$ принадлежат съответно на пространствата от интегрируеми функции $L_1(\Omega)$ и $L_{\infty}(\Omega)$. Освен това функцията $u(x)$ е решение на следното интегрално уравнение с полиномиална нелинейност:

$$(2.2) \quad u(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m u(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x), \quad m \geq 2,$$

или в операторен вид:

$$u = \mathbb{K}(u^{(m)}) + f, \quad u^{(m)} = \prod_{i=1}^m u(y_i).$$

Функциите $k(x, y_1, \dots, y_m)$ и $f(x)$ са дадени и $k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \in L_1(\underbrace{\Omega \times \dots \times \Omega}_{m+1})$ и $f(x) \in L_1(\Omega)$.

Задачата, която разглеждаме може да се формулира и така: За дадените функции $k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \in L_1(\underbrace{\Omega \times \dots \times \Omega}_{m+1})$ и $f(x) \in L_2(\Omega)$ да се пресметне функционала (2.1) по метода Монте Карло, където функцията $u(x)$ е решение на интегралното уравнение с полиномиална нелинейност (2.2). Случая, при който ако положим $g(x) = \delta(x - x_0)$, т.е дадената функция $g(x)$ да е функцията на Дирак, пресмятането на функционала (2.1) се свежда до пресмятане стойността на u в точка $x_0 \in \Omega$.

Предполагаме, че условията за съществуване и единственост на решението на уравнението (2.2) са изпълнени и решението може да се получи по метода на последователните приближения:

$$(2.3) \quad u_l(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} k(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m u_{l-1}(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x), \quad l = 1, 2, \dots,$$

$$u_0(x) = f(x),$$

или

$$u_l = \mathbb{K}(u_{l-1}^{(m)}) + f, \quad u_{l-1}^{(m)} = \prod_{i=1}^m u_{l-1}(y_i), \quad u_0 = f.$$

Известно е, че ако уравнението

$$u(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |k(x, y_1, \dots, y_m)| \prod_{i=1}^m u(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + |f(x)|, \quad m \geq 2.$$

има единствено решение и следният итерационен процес е сходящ:

$$u_l(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |k(x, y_1, \dots, y_m)| \prod_{i=1}^m u_{l-1}(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + |f(x)|, \quad l = 1, 2, \dots,$$

$$u_0(x) = |f(x)|,$$

то е сходящ и итерационният процес (2.3).

Нека да отбележим (като пример), че едно достатъчно условие за съществуване и единственост на решението на уравнение:

$$(2.4) \quad u(x) = \int_{\Omega} k(x, y)u^m(y)dy + f(x), \quad m \geq 2$$

е следното неравенство да е изпълнено:

$$(2.5) \quad K_m < \min \left(\frac{D - F}{D^m}, \frac{1}{mD^{m-1}} \right),$$

където сме положили

$$(2.6) \quad K_m = \max_{x \in \Omega} \int_{\Omega} |k(x, y)|dy, \quad F = \max_{x \in \Omega} |f(x)|$$

и константата D удовлетворява неравенствата:

$$(2.7) \quad D > F, \quad \|u_0\| \leq D.$$

Наистина, нека да разгледаме итерационния процес:

$$(2.8) \quad u_l(x) = \int_{\Omega} k(x, y)u_{l-1}^m(y)dy + f(x), \quad l = 1, 2, \dots, \quad m \geq 2$$

$$u_0(x) = f(x).$$

Ще покажем, че редицата u_l , $l = 1, 2, \dots$, равномерно се сходя към решението на уравнение (2.4). Съгласно условия (2.5), (2.6) и (2.7) последователно са изпълнени неравенствата:

$$\|u_1\| \leq K_m \|u_0\|^m + f \leq K_m D^m + F \leq \frac{D - F}{D^m} D^m + F = D,$$

т.е. $\|u_1\| \leq D$. Аналогично се показва, че $\|u_l\| \leq D$.

Да оценим нормата $\|u_l - u_{l-1}\|$, при $l \geq 2$. Получаваме

$$\|u_l - u_{l-1}\| \leq K_m \|u_{l-1}^m - u_{l-2}^m\| \leq K_m m D^{m-1} \|u_{l-1} - u_{l-2}\|.$$

Като вземем предвид условие (2.5), а именно че $K_m m D^{m-1} < 1$ следва, че редицата u_l , $l = 1, 2, \dots$, е сходяща, т.е. $u_l \rightarrow u_*$, където u_* е точното решение на уравнение (2.4). Нещо повече, тъй като всички членове на редицата $\|u_l\| \leq D$ следва, че е в сила и неравенството

$$\|u_*\| \leq D.$$

Използвайки последното неравенство лесно получаваме, че

$$\|u_l - u_*\| \leq K_m m D^{m-1} \|u_{l-1} - u_*\|.$$

Следователно итерационният процес (2.8) е сходящ, ако са в сила условията (2.5), (2.6) и (2.7).

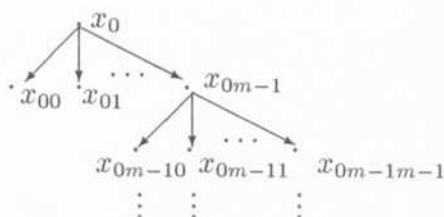
2.2 Връзка между интегралните уравнения с полиномиална нелинейност и разклонените стохастични процеси

При решаване на интегрални уравнения с полиномиална нелинейност съществено се използва връзката им с разклонените стохастични процеси. Целта е да се докаже, че математическото очакване на случайна величина, която се конструира в съответствие с такъв стохастичен процес, съвпада с функционал от решението на съответстващото интегрално уравнение.

Нека разгледаме връзката между разклонените Марковски процеси и итерационния процес (2.3), установена от Ермаков в [34] и подробно описана в [4].

Предполагаме, че произволна частица се появява в областта $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ в точката x_0 , разпределена с начална плътност

$$\pi_0(x) \geq 0, \text{ и } \int_{\Omega} \pi_0(x) dx = 1.$$



Фигура 2.1:

В следващия момент от време тази частица или умира (изчезва) с вероятност $h(x_0)$ ($0 \leq h(x_0) < 1$), или образува потомство от m ($m \geq 2$) аналогични частици в точките $x_{00}, x_{01}, \dots, x_{0m-1}$ с вероятност

$$p_m(x_0) = 1 - h(x_0)$$

и разпределени с преходна плътност

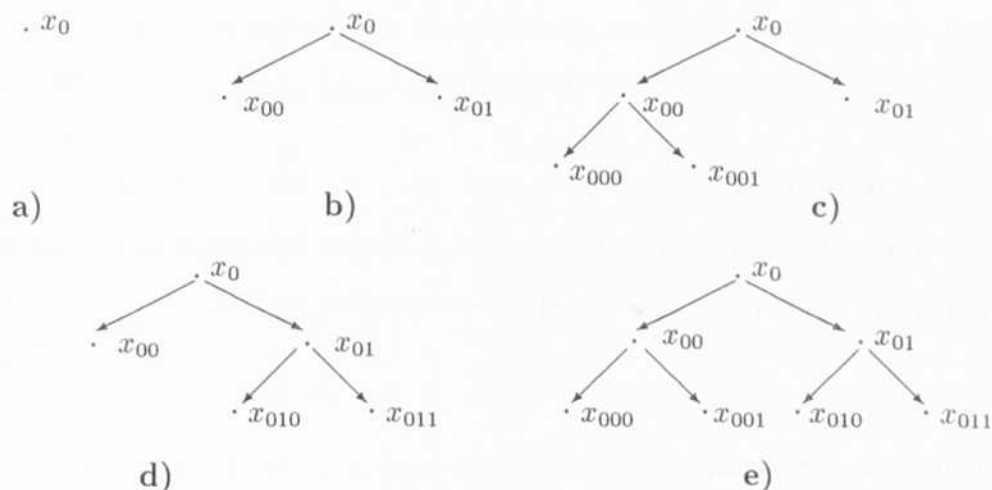
$$p(x_0, x_{00}, \dots, x_{0m-1}) \geq 0,$$

където

$$\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} p(x_0, x_{00}, x_{01}, \dots, x_{0m-1}) \prod_{i=0}^{m-1} dx_{0i} = 1 - h(x_0).$$

Поведението на генерираните частици в следващия момент от време е като на техния родител, или изчезват, или създават ново потомство от m аналогични частици. Фактически, това е разклонен стохастичен процес, следата на който е дървовидна структура представена на Фигура 2.1. Всеки връх на стохастичното дърво може със съответната вероятност да създаде m на брой нови клонове.

Използваните индекси за инициализиране на точките във Фигура 2.1 се наричат *мулти-индекси*. Ако точката (частицата), която принадлежи към нулевата генерация е номерирана с нулев индекс, т.е. x_0 , то директните и наследници се номерират с индексите $00, 01, \dots, 0m-1$, т.е. точките $x_{00}, x_{01}, \dots, x_{0m-1}$ са от първа генерация. Ако точка от q -тата генерация на стохастичното дърво γ е с *мулти-индекс* $\gamma[q]$, тогава *мулти-индекса* на s -тия наследник на тази точка е с *мулти-индекс* за $q+1$ -вата генерация и има вида $\gamma[q+1] = \gamma[q]s$. Фактически, *мулти-индексите* са числа записани в m -ична система.



Фигура 2.2:

Да разгледаме първите две итерации на итерационния процес (2.3), в случая, когато параметъра $m = 2$.

$$u_0(x_0) = f(x_0),$$

$$\begin{aligned}
 (2.9) \quad u_1(x_0) &= f(x_0) + \int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_0, x_{00}, x_{01}) f(x_{00}) f(x_{01}) dx_{00} dx_{01}, \\
 u_2(x_0) &= f(x_0) + \int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_0, x_{00}, x_{01}) f(x_{00}) f(x_{01}) dx_{00} dx_{01} \\
 &+ \int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_0, x_{00}, x_{01}) f(x_{01}) \left(\int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_{00}, x_{000}, x_{001}) f(x_{000}) f(x_{001}) dx_{000} dx_{001} \right) dx_{00} dx_{01} \\
 &+ \int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_0, x_{00}, x_{01}) f(x_{00}) \left(\int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_{01}, x_{010}, x_{011}) f(x_{010}) f(x_{011}) dx_{010} dx_{011} \right) dx_{00} dx_{01} \\
 &+ \int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_0, x_{00}, x_{01}) \left(\int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_{01}, x_{010}, x_{011}) f(x_{010}) f(x_{011}) dx_{010} dx_{011} \right) \\
 &\quad \times \left(\int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x_{00}, x_{000}, x_{001}) f(x_{000}) f(x_{001}) dx_{000} dx_{001} \right) dx_{00} dx_{01}.
 \end{aligned}$$

На Фигура 2.2 са представени всички двоични дървета, които могат да се появят до второ поколение на разклонения стохастичен процес и ги съпоставяме на събираемите в дясната част на уравнение (2.9).

Очевидно е, че броя на събираемите в структурата на u_1 отговаря на броя на всевъзможните стохастични дървета, които се появяват до първа генерация, включително, Фигура 2.2a и Фигура 2.2b. Ако разгледаме втората итерация

(2.9), то броя на събираемите в израза за u_2 съответстват на броя на всички дървета, които се появяват включително до втората генерация (виж Фигура 2.2).

Дефиниция 2.2.1 : *Ще казваме, че пълно дърво с l поколения (генерации) се нарича стохастичното дърво Γ_l , при което не се наблюдават умирания на частици от нулево до $l-1$ -то поколение, но всички частици от l -то поколение умират.*

Фактически, стохастичното дърво γ_0 (виж Фигура 2.2e) съгласно Дефиниция 2.2.1 представлява пълно дърво Γ_2 , състоящо се от две поколения.

Да разгледаме следната плътност, съответстваща на γ_0 :

$$p_{\gamma_0} = \pi_0(x_0)p(x_0, x_{00}, x_{01})p(x_{00}, x_{000}, x_{001})p(x_{01}, x_{010}, x_{011}) \\ \times h(x_{000})h(x_{001})h(x_{010})h(x_{011}).$$

Случайната величина съответстваща на γ_0 и имаща за плътност функцията p_{γ_0} се записва по следния начин:

$$(2.10) \quad \Theta_{[g]}(\gamma_0) = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \frac{k(x_0, x_{00}, x_{01})}{p(x_0, x_{00}, x_{01})} \frac{k(x_{00}, x_{000}, x_{001})}{p(x_{00}, x_{000}, x_{001})} \\ \times \frac{k(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{p(x_{01}, x_{010}, x_{011})} \frac{f(x_{000})f(x_{001})f(x_{010})f(x_{011})}{h(x_{000})h(x_{001})h(x_{010})h(x_{011})}.$$

Случайната величина, дефинирана в (2.10) оценява последното събираемо в структурата на u_2 в (2.9), ако реализацията на разклонения стохастичен процес е дърво от вида γ_0 . Фактически, може да се конструират различни случайни величини, съответстващи на стохастичните дървета, които се появяват при реализацията на разклонения Марковски процес.

Нека означим с **A** множеството от точки, които генерират нови точки, т.е. създават поколение, а с **B** множеството от точки, които умират (изчезват).

Разглеждаме разклонен стохастичен процес с l -поколения по описания по-горе начин в случая, когато $m \geq 2$. На него съпоставяме итерационен процес с

l -итерации (2.3). Съществува еднозначно обратимо съответствие (вижте [4]) между броя на под-дърветата на *пълното дърво* Γ_l и броя на събираемите на итерационния процес с l -итерации. Това съответствие ни позволява да конструираме процедура за случаен избор на дърво и да пресмятаме стойностите на сл.в., съответстваща на това дърво.

Практически, при различни реализации на стохастическия процес ние получаваме произволни стохастични дървета γ . На всяко едно от тях ние съпоставяме сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$, която се конструира по следния начин:

$$(2.11) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l) = \frac{g(x_0) f(x_0)}{\pi_0(x_0) h(x_0)},$$

ако дървото се състои само от началната точка $x = x_0$. Ако дървото се състои и от други точки, тогава сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ се конструира едновременно с реализацията на γ .

Когато дадена частица, съответстваща на случайната точка $x_{\gamma[q]}$ създава ново поколение от частици, съответстващи на точките:

$$x_{\gamma[q]0}, x_{\gamma[q]1}, \dots, x_{\gamma[q]m-1},$$

тогава изразът в дясната част на равенство (2.11) се умножава с

$$\frac{k(x_{\gamma[q]}, x_{\gamma[q]0}, \dots, x_{\gamma[q]m-1})}{p(x_{\gamma[q]}, x_{\gamma[q]0}, \dots, x_{\gamma[q]m-1})}.$$

Ако частицата, съответстваща на точка $x_{\gamma[r]}$ умира, изразът в дясната част на равенство (2.11) се умножава с

$$\frac{f(x_{\gamma[r]})}{h(x_{\gamma[r]})}.$$

Така описаната процедура спира, когато всички частици загинат. Случайната величина $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$, съответстваща на произволно γ се записва във вида:

$$(2.12) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l) = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} \frac{K(x_{\gamma[q]})}{P(x_{\gamma[q]})} \prod_{x_{\gamma[r]} \in \mathbf{B}} \frac{f(x_{\gamma[r]})}{h(x_{\gamma[r]})}$$

и има плътност:

$$(2.13) \quad p_\gamma = \pi_0(x_0) \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} P(x_{\gamma[q]}) \prod_{x_{\gamma[r]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma[r]}),$$

$$1 \leq q \leq l-1, \quad 1 < r \leq l,$$

където сме означили

$$K(x_{\gamma[q]}) = k(x_{\gamma[q]}, x_{\gamma[q]0}, \dots, x_{\gamma[q]m-1});$$

$$P(x_{\gamma[q]}) = p(x_{\gamma[q]}, x_{\gamma[q]0}, \dots, x_{\gamma[q]m-1}).$$

Предполагаме с вероятност единица, че всички дървета, които се получават при реализацията на стохастичния процес притежават краен брой поколения и средният брой частици, които се раждат на всяко поколение е краен брой. Едно такова условие е

$$p_m(x) < \frac{1}{m}, \quad \text{където } x \in \Omega.$$

2.3 Монте Карло метод

Да разгледаме сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ дефинирана с равенство (2.12). В същност тя е асоциирана с кое да е произволно под-дърво γ на *пълното дърво* Γ_l . Практически, ако фиксираме $\gamma = \gamma_i$, ние получаваме конкретна реализация на сл.в. (2.12), а именно:

$$(2.14) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i) = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \frac{K(x_{\gamma_i[q]})}{P(x_{\gamma_i[q]})} \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} \frac{f(x_{\gamma_i[r]})}{h(x_{\gamma_i[r]})},$$

с плътност

$$p_{\gamma_i}(\cdot | \gamma = \gamma_i) = \pi_0(x_0) \frac{\prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} P(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma_i[r]})}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}},$$

$$1 \leq q \leq l-1, \quad 1 < r \leq l,$$

която от своя страна е също случайна величина. В известен смисъл, сл.в. (2.12) обобщава в себе си всички случайни величини, които се асоциират с конкретни

под-дървета. Ето защо, може да се каже, че $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ характеризира разклонения стохастичен процес до l -то поколение.

Нека с n означим броя на всички под-дървета, на *пълното дърво* Γ_l . Толкова ще бъде и броят на събираемите на величината u_l при итерационния процес (2.3). Вземайки предвид взаимно-еднозначното съответствие, че на всяко под-дърво се съпоставя точно определено събираемо от разглеждания итерационния процес (2.3), сме готови да докажем следната теорема.

Теорема 2.3.1 : *Математическото очакване на случайната величина $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ е равна на функционала $J(u_l) = (g, u_l)$, т.е.*

$$M\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l) = J(u_l) = (g, u_l).$$

Доказателство: Предполагаме, че фиксираното под-дърво $\gamma_i \in \Gamma_l$ се състои от $s_1 + s_2 + 1$ точки, такива че $x_0, x_1, \dots, x_{s_1} \in \mathbf{A}$ и $x_{s_1+1}, x_{s_1+2}, \dots, x_{s_1+s_2} \in \mathbf{B}$, т.е. без ограничение на общността сме извършили преномерация на точките в множествата \mathbf{A} и \mathbf{B} .

Ще отбележим, че има и други под-дървета със същия брой точки, но те се различават от γ_i по редица характеристики, например: брой поколения; различен брой точки към всяко поколение; различен брой точки, принадлежащи към множествата \mathbf{A} и \mathbf{B} и т.н.

Използвайки преномерацията на точките, сл.в. (2.14) се записва по следния начин:

$$(2.15) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i) = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \prod_{j=0}^{s_1} \frac{K(x_j)}{P(x_j)} \prod_{j=1}^{s_2} \frac{f(x_{s_1+j})}{h(x_{s_1+j})},$$

с плътност

$$\begin{aligned} p_\gamma(x_0, \dots, x_{s_1+s_2} | \gamma = \gamma_i) &= \frac{p_{\gamma_i}(x_0, x_1, \dots, x_{s_1}, x_{s_1+1}, \dots, x_{s_1+s_2})}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \\ &= \frac{\pi_0(x_0) \prod_{i=0}^{s_1} P(x_i) \prod_{i=1}^{s_2} h(x_{s_1+i})}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}}. \end{aligned}$$

Ще отбележим, че вероятността за получаване на под-дърво $\gamma = \gamma_i$ е

$$Pr\{\gamma = \gamma_i\} = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} p_{\gamma_i}(x_0, x_1, \dots, x_{s_1}, x_{s_1+1}, \dots, x_{s_1+s_2}) dx_0 \dots dx_{s_1+s_2}.$$

Да пресметнем математическото очакване на сл.в. (2.15):

$$\begin{aligned} & M(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i)) \\ &= \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i) p_{\gamma}(x_0, \dots, x_{s_1+s_2} | \gamma = \gamma_i) dx_0 \dots dx_{s_1+s_2} \\ &= \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} g(x_0) \prod_{j=0}^{s_1} K(x_j) \prod_{j=1}^{s_2} f(x_{s_1+j}) \frac{dx_0 \dots dx_{s_1+s_2}}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \\ (2.16) \qquad &= \frac{(g, u_i^i)}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}}, \end{aligned}$$

където

$$u_i^i = u_i^i(x_0) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \prod_{j=0}^{s_1} K(x_j) \prod_{j=1}^{s_2} f(x_{s_1+j}) dx_1 \dots dx_{s_1+s_2},$$

т.е., с величината u_i^i сме означили събираемото от итерационния процес (2.3), което съответства на фиксираното γ_i .

Да изберем N за брой под-дървета на пълното дърво Γ_l , което означава, че сме извършили N реализации на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$. При условие, че $N \gg n$ всяко под-дърво ще се среща повече от веднъж. Нека N_{γ_i} е броя на реализациите на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$, които съответстват на γ_i . В сила е следната оценка:

$$\frac{N_{\gamma_i}}{N} \approx Pr\{\gamma = \gamma_i\}.$$

От друга страна при достатъчно голямо N_{γ_i} имаме

$$\begin{aligned} (2.17) \quad J(u_i^i) &= (g, u_i^i) \approx \frac{Pr\{\gamma = \gamma_i\}}{N_{\gamma_i}} \sum_{j=1}^{N_{\gamma_i}} (\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i))_j \\ &\approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N_{\gamma_i}} (\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i))_j. \end{aligned}$$

Съгласно формулата за пълната вероятност математическото очакване на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ се записва по следния начин:

$$M(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)) = \sum_{i=0}^n M(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i))Pr\{\gamma = \gamma_i\},$$

където с n сме означили броя на всички под-дървета на Γ_l .

Сега, използвайки равенство (2.16) получаваме:

$$M(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)) = \sum_{i=0}^n (g, u_i^i) = (g, u_l) = J(u_l).$$

С това Теорема 2.3.1 е доказана.

Ще отбележим, че когато $l \rightarrow \infty$, за математическото очакване на сл.в. ще е в сила равенството:

$$\lim_{l \rightarrow \infty} M(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)) = M(\Theta_{[g]}(\gamma)) = J(u) = \int_{\Omega} g(x)u(x)dx,$$

където $u(x)$ е решение на интегралното уравнение (2.2).

Фактически, като се използва (2.17) може приближено да се пресметне функционала:

$$(2.18) \quad J(u_l) = \sum_{i=0}^n (g, u_i^i) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=0}^n \sum_{j=1}^{N_{\gamma_i}} (\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i))_j = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l))_j.$$

За вероятната грешка е в сила оценката:

$$r_N \approx 0.6745\sigma(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l))N^{-1/2},$$

където $\sigma^2(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l))$ е дисперсията на случайната величина. По-нататък в нашите разсъждения ще предполагаме, че дисперсията е крайна. Съгласно [4], едно достатъчно условие за това е да съществува единствено решение на следното интегрално уравнение с полиномиална нелинейност:

$$u(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{k^2(x, y_1, y_2, \dots, y_m)}{p(x, y_1, y_2, \dots, y_m)} \prod_{i=1}^m u(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x), \quad m \geq 2.$$

По аналогичен начин се конструира сл.в. за оценка на функционала (2.1) по метода Монте Карло, когато $u(x)$ се явява итерационно решение на интегрално уравнение с полиномиална нелинейност от по-общ вид, а именно:

$$(2.19) \quad u(x) = \sum_{m=1}^s \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m u(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x), \quad s \geq 2.$$

Разликата при съответстващия разклонен Марковски процес е, че при всеки следващ момент от време с вероятност $p_m(x)$ ($m = 1, 2, \dots, s$) се раждат m частици, като е изпълнено равенството $\sum_{m=1}^s p_m(x) = 1 - h(x)$.

2.4 Минимизация на дисперсията

Задачата за създаване на ефективен МК алгоритъм за приближено решаване на функционала (2.1) се състои в минимизация на дисперсията или по-точно в минимизация на втория момент $M(\Theta_{[j]}^2(\gamma/\Gamma_l))$ на сл.в. $\Theta_{[j]}(\gamma/\Gamma_l)$. Това може да бъде направено посредством подходящ избор на плътността (2.13).

Както вече отбелязахме в Увода има различни методи за редуциране на дисперсията. Един от тях е *избора по важност*, известен още като *важна извадка*. Същественото при този подход е, че плътността се избира да бъде пропорционална на абсолютната стойност от решението на задачата. Практически обаче, е невъзможно да се използва такава оптимална плътност, защото трябва да бъде известно самото решение или някоя негова априорна оценка. Но самият метод понякога ни дава възможност да намираме плътности близки до оптималната, които наричаме *почти оптимални*. За първи път МК алгоритми с *почти оптимални* плътности е предложил Димов в [20, 24] за решаване на линейни интегрални уравнения на Фредхолм от 1-ви и 2-ри род и системи линейни уравнения. В този параграф предлагаме подход за намиране на *почти оптимални* плътности, които могат да се използват при РМК алгоритмите за решаване на интегрални уравнения с полиномиална нелинейности, както и на системи уравнения от

специален нелинеен тип.

Да въведем следните функции:

$$(2.20) \quad \Phi(x) = \left(\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, y_2, \dots, y_m)}{\tilde{p}(x, y_1, y_2, \dots, y_m)} \prod_{i=1}^m \Phi^2(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i \right)^{\frac{1}{2}};$$

$$(2.21) \quad \hat{\Phi}(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i,$$

където

$$\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) = \frac{k(x, y_1, \dots, y_m)}{(p_m(x))^{\frac{1}{2}}}$$

и

$$(2.22) \quad \tilde{p}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) = \tilde{P}(x) = \frac{p(x, y_1, y_2, \dots, y_m)}{p_m(x)}$$

е допустима плътност относно ядрото $\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m)$. Следните твърдения са в сила:

Лема 2.4.1 : *Функцията на плътността:*

$$(2.23) \quad \begin{aligned} \tilde{p}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) &:= \bar{p}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \\ &= \frac{|\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)|}{\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i} \end{aligned}$$

минимизира функция (2.20) за всяко $x \in \Omega$ и

$$\min_{\tilde{p}(\cdot)} \Phi(x) = \hat{\Phi}(x).$$

Доказателство: Заместваме така избраната плътност, равенство (2.23), в равенство (2.20) за функцията $\Phi(x)$:

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \left[\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi^2(y_i)}{|\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)|} \right. \\ &\quad \left. \times \left(\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i \right) \prod_{i=1}^m dy_i \right]^{\frac{1}{2}} = \end{aligned}$$

$$= \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i = \widehat{\Phi}(x).$$

Остана да покажем, че за всяка допустима относно ядрото $\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m)$ функция на плътността, е в сила неравенството:

$$\widehat{\Phi}(x) \leq \Phi(x).$$

Наистина, ако умножим и разделим подинтегралните функции в (2.21) с $\tilde{p}^{\frac{1}{2}}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) > 0$ и приложим неравенството на Коши-Буняковски-Шварц, получаваме:

$$\begin{aligned} & \widehat{\Phi}^2(x) \\ = & \left(\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| \tilde{p}^{-\frac{1}{2}}(x, y_1, \dots, y_m) \tilde{p}^{\frac{1}{2}}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m dy_i \right)^2 \\ \leq & \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \bar{k}^2(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi^2(y_i) \tilde{p}^{-1}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m dy_i \\ & \times \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \tilde{p}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m dy_i \\ = & \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \bar{k}^2(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi^2(y_i) \tilde{p}^{-1}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m dy_i = \Phi^2(x), \end{aligned}$$

защото

$$\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \tilde{p}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m dy_i = \frac{1 - h(x)}{p_m(x)} = 1,$$

за всяко $x \in \Omega$. С това Лема 2.4.1 е доказана.

Лема 2.4.2 : Ако за начална плътност изберем функцията:

$$\pi_0(x_0) := \bar{\pi}_0(x_0) = \frac{|g(x_0)\Phi(x_0)|}{\left(\int_{\Omega} |g(x_0)\Phi(x_0)| dx_0\right)},$$

то тя минимизира функционала:

$$\int_{\Omega} \frac{g^2(x_0)\Phi^2(x_0)}{\pi_0^{-1}(x_0)} dx_0.$$

Минимума на този функционал е равен на израза:

$$\left(\int_{\Omega} |g(x_0)\Phi(x_0)| dx_0\right)^2.$$

Доказателство: Доказателството е подобно на доказателството на Лема 2.4.1:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} g^2(x_0)\Phi^2(x_0)\pi_0^{-1}(x_0)dx_0 \\ &= \int_{\Omega} g^2(x_0)\Phi^2(x_0) |g(x_0)\Phi(x_0)|^{-1} \left(\int_{\Omega} |g(x_0)\Phi(x_0)| dx_0 \right) dx_0 \\ &= \left(\int_{\Omega} |g(x_0)\Phi(x_0)| dx_0 \right)^2. \end{aligned}$$

Предстои да установим, че за всяка друга допустима плътност относно функцията $g(x_0)$ е в сила неравенството:

$$\left(\int_{\Omega} |g(x_0)\Phi(x_0)| dx_0 \right)^2 \leq \int_{\Omega} g^2(x_0)\Phi^2(x_0)\pi_0^{-1}(x_0)dx_0.$$

Наистина,

$$\begin{aligned} & \left(\int_{\Omega} |g(x_0)\Phi(x_0)| dx_0 \right)^2 = \left(\int_{\Omega} |g(x_0)\Phi(x_0)| \pi_0^{-\frac{1}{2}}(x_0)\pi_0^{\frac{1}{2}}(x_0)dx_0 \right)^2 \\ & \leq \int_{\Omega} g^2(x_0)\Phi^2(x_0)\pi_0^{-1}(x_0)dx_0 \int_{\Omega} \pi_0(x_0)dx_0 = \int_{\Omega} g^2(x_0)\Phi^2(x_0)\pi_0^{-1}(x_0)dx_0, \end{aligned}$$

защото $\int_{\Omega} \pi_0(x_0)dx_0 = 1$, за всяко $x_0 \in \Omega$. С това Лема 2.4.2 е доказана.

Да разгледаме сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0)$ в случая, когато всяко ново поколение се състои от две частици, т.е. $m = 2$. Тази случайна величина се записва по следния начин:

$$(2.24) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0) = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \frac{k(x_0, x_{00}, x_{01})}{p(x_0, x_{00}, x_{01})} \frac{k(x_{00}, x_{000}, x_{001})}{p(x_{00}, x_{000}, x_{001})} \\ \times \frac{k(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{p(x_{01}, x_{010}, x_{011})} \frac{f(x_{000})f(x_{001})f(x_{010})f(x_{011})}{h(x_{000})h(x_{001})h(x_{010})h(x_{011})}$$

и има за плътност функцията:

$$(2.25) \quad p_{\gamma}(\cdot|\gamma = \gamma_0) = p_{\gamma}(x_0, x_{00}, x_{01}, x_{000}, x_{001}, x_{010}, x_{011}|\gamma = \gamma_0) \\ = \frac{p_{\gamma_0}(\cdot)}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} = \frac{p_{\gamma_0}(x_0, x_{00}, x_{01}, x_{000}, x_{001}, x_{010}, x_{011})}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \\ = \frac{\pi_0(x_0)p(x_0, x_{00}, x_{01})p(x_{00}, x_{000}, x_{001})p(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \times$$

$$\times h(x_{000})h(x_{001})h(x_{010})h(x_{011}).$$

Нека $\Phi(x)$ да бъде следната функция:

$$(2.26) \quad \Phi(x) = \frac{|f(x)|}{(h(x))^{\frac{1}{2}}},$$

а функцията $\hat{\Phi}(x)$ нека изразим с равенството:

$$\hat{\Phi}(x) = \int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2)| dy_1 dy_2,$$

където

$$(2.27) \quad \bar{k}(x, y_1, y_2) = \frac{k(x, y_1, y_2)}{(p_2(x))^{\frac{1}{2}}}.$$

Тъй като функция (2.26) е неотрицателна, в сила е следното равенство:

$$|\bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2)| = |\bar{k}(x, y_1, y_2)| \Phi(y_1) \Phi(y_2).$$

Да означим със c_0 следната константа:

$$c_0 = \left(\int_{\Omega} |g(x_0) \hat{\Phi}(x_0)| dx_0 \right)^{-1}.$$

В сила е следното твърдение:

Теорема 2.4.1 : *Плътността:*

$$(2.28) \quad \bar{p}_{\gamma}(\cdot | \gamma = \gamma_0) = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} c_0 |g(x_0)| \\ \times |p_2(x_0) \bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})| |p_2(x_{00}) \bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001})| |p_2(x_{01}) \bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011})| \\ \times \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011}) h(x_{000}) h(x_{001}) h(x_{010}) h(x_{011}),$$

минимизира втория момент на сл. в. (2.24), т.е.

$$\min_{p_{\gamma}(\cdot | \gamma = \gamma_0)} \left(M(\Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_0)) \right)^{\frac{1}{2}} = M(\hat{\Theta}_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_0)),$$

където сл. в. $\hat{\Theta}_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_0)$ се записва по следния начин:

$$\hat{\Theta}_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_0) = \frac{g(x_0)}{c_0 |g(x_0)|} =$$

$$= \frac{k(x_0, x_{00}, x_{01})}{|p_2(x_0)\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})|} \frac{k(x_{00}, x_{000}, x_{001})}{|p_2(x_{00})\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001})|} \frac{k(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{|p_2(x_{01})\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011})|} \\ \times \frac{f(x_{000})}{\Phi(x_{000})h(x_{000})} \frac{f(x_{001})}{\Phi(x_{001})h(x_{001})} \frac{f(x_{010})}{\Phi(x_{010})h(x_{010})} \frac{f(x_{011})}{\Phi(x_{011})h(x_{011})},$$

и има за плътност функцията (2.28).

Доказателство: Да оценим втория момент на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0)$, имаща за плътност функцията (2.25).

$$M(\Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0)) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0) p_{\gamma}(\cdot|\gamma = \gamma_0) dx_0 dx_{00} dx_{01} \dots dx_{011} \\ = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{g^2(x_0)k^2(x_0, x_{00}, x_{01})k^2(x_{00}, x_{000}, x_{001})k^2(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{\pi_0^2(x_0)p^2(x_0, x_{00}, x_{01})p^2(x_{00}, x_{000}, x_{001})p^2(x_{01}, x_{010}, x_{011})} \\ \times \frac{f^2(x_{000})f^2(x_{001})f^2(x_{010})f^2(x_{011})}{h^2(x_{000})h^2(x_{001})h^2(x_{010})h^2(x_{011})} \\ \pi_0(x_0)p(x_0, x_{00}, x_{01})p(x_{00}, x_{000}, x_{001})p(x_{01}, x_{010}, x_{011}) \\ \times h(x_{000})h(x_{001})h(x_{010})h(x_{011})dx_0 dx_{00} \dots dx_{011} \\ = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{g^2(x_0)k^2(x_0, x_{00}, x_{01})k^2(x_{00}, x_{000}, x_{001})k^2(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{\pi_0(x_0)p(x_0, x_{00}, x_{01})p(x_{00}, x_{000}, x_{001})p(x_{01}, x_{010}, x_{011})} \\ \times \Phi^2(x_{000})\Phi^2(x_{001})\Phi^2(x_{010})\Phi^2(x_{011})dx_0 dx_{00} \dots dx_{011} \\ = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} \frac{g^2(x_0)}{\pi_0(x_0)} \left\{ \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{k^2(x_0, x_{00}, x_{01})}{p(x_0, x_{00}, x_{01})} \right. \\ \times \left[\int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{k^2(x_{00}, x_{000}, x_{001})}{p(x_{00}, x_{000}, x_{001})} \Phi^2(x_{000})\Phi^2(x_{001})dx_{000}dx_{001} \right] \\ \times \left. \left[\int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{k^2(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{p(x_{01}, x_{010}, x_{011})} \Phi^2(x_{010})\Phi^2(x_{011})dx_{010}dx_{011} \right] dx_{00}dx_{01} \right\} dx_0.$$

Ако положим $p(x, y_1, y_2) = p_2(x)\tilde{p}(x, y_1, y_2)$ и като вземем предвид равенство (2.27) за вторият момент на сл.в. (2.24) получаваме:

$$M(\Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0)) \\ = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} \frac{g^2(x_0)}{\pi_0(x_0)} \left\{ \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x_0, x_{00}, x_{01})}{\tilde{p}(x_0, x_{00}, x_{01})} \times \right.$$

$$\times \left[\int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x_{00}, x_{000}, x_{001})}{\tilde{p}(x_{00}, x_{000}, x_{001})} \Phi^2(x_{000}) \Phi^2(x_{001}) dx_{000} dx_{001} \right] \\ \times \left[\int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{\tilde{p}(x_{01}, x_{010}, x_{011})} \Phi^2(x_{010}) \Phi^2(x_{011}) dx_{010} dx_{011} \right] dx_{00} dx_{01} \Big\} dx_0.$$

Да оценим сега втория момент на сл.в. $\hat{\Theta}_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0)$, имаща за плътност функцията (2.28).

$$M\hat{\Theta}_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \hat{\Theta}_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_0) \bar{p}_{\gamma}(\cdot|\gamma = \gamma_0) dx_0 dx_{00} d\dots dx_{011} \\ = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \left[\frac{g^2(x_0) k^2(x_0, x_{00}, x_{01})}{c_0^2 g^2(x_0) (p_2(x_0) \bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01}))^2} \right. \\ \times \frac{k^2(x_{00}, x_{000}, x_{001}) k^2(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{(p_2(x_{00}) \bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001}))^2 (p_2(x_{01}) \bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011}))^2} \\ \left. \times \frac{f^2(x_{000}) f^2(x_{001}) f^2(x_{010}) f^2(x_{011})}{(h(x_{000}) \Phi(x_{000}))^2 (h(x_{001}) \Phi(x_{001}))^2 (h(x_{010}) \Phi(x_{010}))^2 (h(x_{011}) \Phi(x_{011}))^2} \right] \\ \times c_0 |g(x_0)| |p_2(x_0) \bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})| |p_2(x_{00}) \bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001})| |p_2(x_{01}) \bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011})| \\ \times h(x_{000}) \Phi(x_{000}) h(x_{001}) \Phi(x_{001}) h(x_{010}) \Phi(x_{010}) h(x_{011}) \Phi(x_{011}) dx_0 dx_{00} \dots dx_{011} \\ = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \left[\frac{1}{c_0} \frac{p_2(x_0) k^2(x_0, x_{00}, x_{01})}{(p_2(x_0) \bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01}))^2} \right. \\ \times \frac{p_2(x_{00}) k^2(x_{00}, x_{000}, x_{001})}{(p_2(x_{00}) \bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001}))^2} \frac{p_2(x_{01}) k^2(x_{01}, x_{010}, x_{011})}{(p_2(x_{01}) \bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011}))^2} \\ \left. \times \frac{f^2(x_{000}) h(x_{000}) f^2(x_{001}) h(x_{001}) f^2(x_{010}) h(x_{010}) f^2(x_{011}) h(x_{011})}{\Phi^2(x_{000}) h^2(x_{000}) \Phi^2(x_{001}) h^2(x_{001}) \Phi^2(x_{010}) h^2(x_{010}) \Phi^2(x_{011}) h^2(x_{011})} \right] \\ \times |g(x_0)| |\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})| |\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001})| |\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011})| \\ \times \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011}) dx_0 \dots dx_{011} \\ = \frac{c_0^{-1}}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |g(x_0)| |\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})| |\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001})| |\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011})| \\ \times \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011}) dx_0 dx_{00} dx_{01} dx_{000} dx_{001} dx_{010} dx_{011} \\ = \frac{c_0^{-1}}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \int_{\Omega} |g(x_0)| \\ \times \left\{ \int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})| \left[\int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001}) \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001})| dx_{000} dx_{001} \right] \times \right.$$

$$\times \left[\int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011})| dx_{010} dx_{011} \right] dx_{00} dx_{01} \Big\} dx_0.$$

Функциите $\Phi(x)$ и $\hat{\Phi}(x)$ са неотрицателни за всяко $x \in \Omega$ и следователно функцията на плътността (2.28) може да се запише в следната форма:

$$\begin{aligned} \bar{p}_{\gamma}(\cdot | \gamma = \gamma_0) &= \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} c_0 |g(x_0)| \\ &\times p_2(x_0) |\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})| p_2(x_{00}) |\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001})| p_2(x_{01}) |\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011})| \\ &\times \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011}) h(x_{000}) h(x_{001}) h(x_{010}) h(x_{011}) \\ &= \frac{p_2(x_0) p_2(x_{00}) p_2(x_{01}) h(x_{000}) h(x_{001}) h(x_{010}) h(x_{011})}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \\ &\times \frac{|g(x_0)| \hat{\Phi}(x_0) |\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01})| \hat{\Phi}(x_{00}) \hat{\Phi}(x_{01})}{c_0^{-1} \hat{\Phi}(x_0)} \\ &\times \frac{|\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001})| \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001}) |\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011})| \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011})}{\hat{\Phi}(x_{00}) \hat{\Phi}(x_{01})} \\ &= \frac{p_2(x_0) p_2(x_{00}) p_2(x_{01}) h(x_{000}) h(x_{001}) h(x_{010}) h(x_{011})}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \times \frac{|g(x_0) \hat{\Phi}(x_0)|}{c_0^{-1}} \\ &\times \frac{|\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01}) \hat{\Phi}(x_{00}) \hat{\Phi}(x_{01})|}{\int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01}) \hat{\Phi}(x_{00}) \hat{\Phi}(x_{01})| dx_{00} dx_{01}} \\ &\times \frac{|\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001}) \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001})|}{\int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001}) \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001})| dx_{000} dx_{001}} \\ &\times \frac{|\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011})|}{\int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011})| dx_{010} dx_{011}} \\ &= \frac{p_2(x_0) p_2(x_{00}) p_2(x_{01}) h(x_{000}) h(x_{001}) h(x_{010}) h(x_{011})}{Pr\{\gamma = \gamma_0\}} \\ &\times \bar{\pi}_0(x_0) \bar{p}(x_0, x_{00}, x_{01}) \bar{p}(x_{00}, x_{000}, x_{001}) \bar{p}(x_{01}, x_{010}, x_{011}). \end{aligned}$$

Сега може да се приложи Лема 2.4.1 (в случая, когато $m = 2$) за преходните плътности $\bar{p}(x_0, x_{00}, x_{01})$, $\bar{p}(x_{00}, x_{000}, x_{001})$ и $\bar{p}(x_{01}, x_{010}, x_{011})$, а именно:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, y_2) \Phi^2(y_1) \Phi^2(y_2)}{\bar{p}(x, y_1, y_2)} dy_1 dy_2 &= \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, y_2) \Phi^2(y_1) \Phi^2(y_2)}{\bar{p}(x, y_1, y_2)} dy_1 dy_2 \\ &= \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, y_2) \Phi^2(y_1) \Phi^2(y_2)}{|\bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2)|} \left[\int_{\Omega} \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2)| dy_1 dy_2 \right] dy_1 dy_2 = \end{aligned}$$

$$= \int_{\Omega} \int_{\Omega} | \bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2) | dy_1 dy_2 \int_{\Omega} \int_{\Omega} | \bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2) | dy_1 dy_2.$$

Трябва да се вземе предвид, че когато полагаме

$$\tilde{p}(x, y_1, y_2) := \bar{p}(x, y_1, y_2) = \frac{| \bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2) |}{\int_{\Omega} \int_{\Omega} | \bar{k}(x, y_1, y_2) \Phi(y_1) \Phi(y_2) | dy_1 dy_2}$$

съответните функции $\Phi(x)$ и $\hat{\Phi}(x)$ са равни за всяка генерирана точка x в разклонения стохастичен процес, т.е.

$$\Phi(x) = \hat{\Phi}(x),$$

защото съответната преходна плътност минимизира функцията $\Phi(x)$ и нейният минимум е равен на $\hat{\Phi}(x)$ за всяко $x \in \Omega$.

Също така за всяка начална плътност $\pi_0(x_0)$, допустима относно функцията $g(x_0)$ е в сила равенството:

$$(2.29) \quad \min_{\Phi} \left(\int_{\Omega} g^2(x_0) \Phi^2(x_0) p_0^{-1}(x_0) dx_0 \right) = \int_{\Omega} g^2(x_0) \hat{\Phi}^2(x_0) p_0^{-1}(x_0) dx_0.$$

Прилагайки Лема 2.4.2, функционала (2.29) се минимизира при следния избор на началната плътност:

$$\pi_0(x_0) := \bar{\pi}_0(x_0) = \frac{| g(x_0) \hat{\Phi}(x_0) |}{\int_{\Omega} | g(x_0) \hat{\Phi}(x_0) | dx_0},$$

тъй като

$$\Phi(x_0) = \hat{\Phi}(x_0).$$

С това Теорема 2.4.1 е доказана.

Следствие 2.4.1 : Ако вероятността за създаване на ново поколение $p_2(x)$ и вероятността за умирање $h(x)$ са константи, то минимизиращата плътност (2.28) може да се запише в по-опростен вид, а именно:

$$(2.30) \quad \begin{aligned} \bar{p}_{\gamma}(\cdot | \gamma = \gamma_0) &= c_0 | g(x_0) | \\ &\times | \bar{k}(x_0, x_{00}, x_{01}) | | \bar{k}(x_{00}, x_{000}, x_{001}) | | \bar{k}(x_{01}, x_{010}, x_{011}) | \\ &\times \Phi(x_{000}) \Phi(x_{001}) \Phi(x_{010}) \Phi(x_{011}), \end{aligned}$$

Доказателство: Вероятността на това твърдение произтича от следния факт:

$$\begin{aligned}
 Pr\{\gamma = \gamma_0\} &= \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} p_{\gamma_0}(x_0, x_{00}, x_{01}, x_{000}, x_{001}, x_{010}, x_{011}) dx_0 \dots dx_{011} \\
 &= \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \pi_0(x_0) p(x_0, x_{00}, x_{01}) p(x_{00}, x_{000}, x_{001}) p(x_{01}, x_{010}, x_{011}) \\
 &\quad h(x_{000}) h(x_{001}) h(x_{010}) h(x_{011}) dx_0 \dots dx_{011} \\
 &= h^4 \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \pi_0(x_0) p_2(x_0) \tilde{p}(x_0, x_{00}, x_{01}) p_2(x_{00}) \tilde{p}(x_{00}, x_{000}, x_{001}) \\
 &\quad p_2(x_{01}) \tilde{p}(x_{01}, x_{010}, x_{011}) dx_0 \dots dx_{011} \\
 &= h^4 p_2^3 \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \pi_0(x_0) \tilde{p}(x_0, x_{00}, x_{01}) \tilde{p}(x_{00}, x_{000}, x_{001}) \tilde{p}(x_{01}, x_{010}, x_{011}) dx_0 \dots dx_{011}.
 \end{aligned}$$

Последното равенство се получава като се използва (2.22) в случая, когато $m = 2$. Като вземем предвид, че интегрирането по съответните плътности е равно на единица, получаваме:

$$(2.31) \quad Pr\{\gamma = \gamma_0\} = h^4 p_2^3.$$

Остана да заместим (2.31) в равенство (2.28) и получаваме (2.30). С това Следствие 2.4.1 е доказано.

Да разгледаме сл.в.

$$(2.32) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i) = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \frac{K(x_{\gamma_i[q]})}{P(x_{\gamma_i[q]})} \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} \frac{f(x_{\gamma_i[r]})}{h(x_{\gamma_i[r]})}$$

с плътност

$$\begin{aligned}
 p_{\gamma_i}(\cdot | \gamma = \gamma_i) &= \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \pi_0(x_0) \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} P(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma_i[r]}), \\
 &1 \leq q \leq l-1, \quad 1 < r \leq l,
 \end{aligned}$$

която вече бе дефинирана в (2.14) в общия случай при $m \geq 2$.

Нека $\Phi(x)$ е въведената с равенство (2.26) функция, т.е.

$$\Phi(x) = \frac{|f(x)|}{(h(x))^{\frac{1}{2}}},$$

а с $\widehat{\Phi}(x)$ означаваме следната функция:

$$\widehat{\Phi}(x) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i,$$

където

$$(2.33) \quad \bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) = \overline{K}(x) = \frac{k(x, y_1, \dots, y_m)}{(p_m(x))^{\frac{1}{2}}}.$$

Тъй като функцията $\Phi(x)$ е неотрицателна в сила е равенството:

$$|\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| = |\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m)| \prod_{i=1}^m \Phi(y_i).$$

Да означим със \bar{c} следната константа:

$$\bar{c} = \left(\int_{\Omega} |g(x_0)| |\widehat{\Phi}(x_0)| dx_0 \right)^{-1}.$$

В сила е следната теорема:

Теорема 2.4.2 : *Функцията на плътност*

$$(2.34) \quad \bar{p}_{\gamma}(\cdot | \gamma = \gamma_i) = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \bar{c} |g(x_0)| \\ \times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} p_m(x_{\gamma_i[q]}) |\overline{K}(x_{\gamma_i[q]})| \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} \Phi(x_{\gamma_i[q]}) h(x_{\gamma_i[q]}),$$

минимизира втория момент на сл.в. (2.32), т.е.

$$\min_{p_{\gamma}(\cdot | \gamma = \gamma_i)} \left(M(\Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i)) \right)^{\frac{1}{2}} = M(\widehat{\Theta}_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_i)),$$

където сл.в. $\widehat{\Theta}_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_0)$ се записва по следния начин:

$$(2.35) \quad \widehat{\Theta}_{[g]}(\gamma/\Gamma_l | \gamma = \gamma_0) \\ = \frac{g(x_0)}{\bar{c} |g(x_0)|} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \frac{K(x_{\gamma_i[q]})}{p_m(x_{\gamma_i[q]}) \overline{K}(x_{\gamma_i[q]})} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} \frac{f(x_{\gamma_i[q]})}{\Phi(x_{\gamma_i[q]}) h(x_{\gamma_i[q]})},$$

и има за плътност функцията (2.34).

Доказателство: Да въведем следната функция:

$$F(x_{\gamma_i[q]}) = \begin{cases} \hat{\Phi}(x_{\gamma_i[q]}), & \text{за всяко } x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A} \\ \Phi(x_{\gamma_i[q]}), & \text{за всяко } x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}. \end{cases}$$

Да оценим сега вторите моменти на случайните величини (2.32) и (2.35):

$$\begin{aligned} & M(\Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i)) \\ &= \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i) p_{\gamma}(\cdot|\gamma = \gamma_i) \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A} \cup \mathbf{B}} dx_{\gamma_i[q]} \\ &= \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \frac{g^2(x_0)}{\pi_0(x_0)} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \frac{K^2(x_{\gamma_i[q]})}{P(x_{\gamma_i[q]})} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} F^2(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A} \cup \mathbf{B}} dx_{\gamma_i[q]}. \end{aligned}$$

Като вземем предвид равенства (2.22) и (2.33), за втория момент на сл.в. (2.32) получаваме:

$$\begin{aligned} (2.36) \quad & M(\Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i)) \\ &= \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i) p_{\gamma}(\cdot|\gamma = \gamma_i) \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A} \cup \mathbf{B}} dx_{\gamma_i[q]} \\ &= \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \frac{g^2(x_0)}{\pi_0(x_0)} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \frac{\bar{K}^2(x_{\gamma_i[q]})}{\tilde{P}(x_{\gamma_i[q]})} \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} F^2(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A} \cup \mathbf{B}} dx_{\gamma_i[q]}, \end{aligned}$$

където

$$\tilde{P}(x_{\gamma_i[q]}) := \frac{P(x_{\gamma_i[q]})}{p_m(x_{\gamma_i[q]})}.$$

Също така

$$\begin{aligned} (2.37) \quad & M(\hat{\Theta}_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i)) \\ &= \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \hat{\Theta}_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i) \bar{p}_{\gamma}(\cdot|\gamma = \gamma_i) \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A} \cup \mathbf{B}} dx_{\gamma_i[q]} \\ &= \frac{\bar{c}}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} |g(x_0)| \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} |\bar{K}(x_{\gamma_i[q]})| \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} F(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A} \cup \mathbf{B}} dx_{\gamma_i[q]}. \end{aligned}$$

Функциите $\Phi(x)$ и $\hat{\Phi}(x)$ са неотрицателни за всяко $x \in \Omega$ и следователно плътността (2.34) може да се запише в следната форма:

$$\bar{p}_{\gamma}(\cdot|\gamma = \gamma_i) = \frac{1}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \bar{c} |g(x_0)| \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} p_m(x_{\gamma_i[q]} | \bar{K}(x_{\gamma_i[q]})) \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} \Phi(x_{\gamma_i[r]}) h(x_{\gamma_i[r]}), \\
& = \frac{\prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} p_m(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma_i[r]})}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \frac{|g(x_0) | F(x_0)|}{\bar{c}^{-1}} \\
& \times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \frac{|\bar{K}(x_{\gamma_i[q]}) | F(x_{\gamma_i[q]0}) F(x_{\gamma_i[q]1}) \dots F(x_{\gamma_i[q]m-1})|}{F(x_{\gamma_i[q]})} \\
& = \frac{\prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} p_m(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma_i[r]})}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \frac{|g(x_0) F(x_0)|}{\bar{c}^{-1}} \\
& \times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \frac{|\bar{K}(x_{\gamma_i[q]}) F(x_{\gamma_i[q]0}) F(x_{\gamma_i[q]1}) \dots F(x_{\gamma_i[q]m-1})|}{\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{K}(x_{\gamma_i[q]}) F(x_{\gamma_i[q]0}) \dots F(x_{\gamma_i[q]m-1})| dx_{\gamma_i[q]0} \dots dx_{\gamma_i[q]m-1}} \\
& = \frac{\prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} p_m(x_{\gamma_i[q]}) \prod_{x_{\gamma_i[r]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma_i[r]})}{Pr\{\gamma = \gamma_i\}} \bar{\pi}_0(x_0) \times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} \bar{P}(x_{\gamma_i[q]}),
\end{aligned}$$

тъй като функцията $F(x) \geq 0$.

Нека с L означим общия брой на точките в множеството \mathbf{A} . Сравнявайки изразите (2.36) и (2.37), получени за вторите моменти на случайните величини (2.32) и (2.35) следва, че Лема 2.4.1 може да се приложи L -пъти за преходните плътности от вида $\bar{P}(x_{\gamma_i[q]})$.

Фактически, в сила са следните преобразования, които ги прилагаме L -пъти:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, \dots, y_m)}{\bar{p}(x, y_1, \dots, y_m)} \prod_{i=1}^m F(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i &= \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, \dots, y_m)}{\bar{p}(x, y_1, \dots, y_m)} \prod_{i=1}^m F(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i \\
&= \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{\bar{k}^2(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m F^2(y_i)}{|\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m F(y_i)|} \\
&\times \left(\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m F(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i \right) \prod_{i=1}^m dy_i \\
&= \left(\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m F(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i \right)^2.
\end{aligned}$$

Трябва да се вземе предвид, че когато полагаме

$$\tilde{p}(x, y_1, \dots, y_m) := \bar{p}(x, y_1, \dots, y_m) = \frac{|\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m F(y_i)|}{\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m F(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i},$$

функциите $\Phi(x)$ и $\hat{\Phi}(x)$ са равни за всяка генерирана точка x в разклонения стохастичен процес, т.е.

$$\Phi(x) = \hat{\Phi}(x) = F(x),$$

защото съответната преходна плътност минимизира функцията $\Phi(x)$ и нейният минимум е равен на $\hat{\Phi}(x)$ за всяко $x \in \Omega$.

Също така за всяка начална плътност $\pi_0(x_0)$, допустима относно функцията $g(x_0)$ е в сила равенството:

$$(2.38) \quad \min_{\Phi} \left(\int_{\Omega} g^2(x_0) \Phi^2(x_0) p_0^{-1}(x_0) dx_0 \right) = \int_{\Omega} g^2(x_0) \hat{\Phi}^2(x_0) p_0^{-1}(x_0) dx_0.$$

Накрая на описаната по-горе процедура прилагаме Лема 2.4.2 за функционала (2.38), който се минимизира при следния избор на началната плътност:

$$\pi_0(x_0) := \bar{\pi}_0(x_0) = \frac{|g(x_0)\hat{\Phi}(x_0)|}{\int_{\Omega} |g(x_0)\hat{\Phi}(x_0)| dx_0}.$$

С това Теорема 2.4.2 е доказана.

Следствие 2.4.2 : *Ако вероятността за създаване на ново поколение $p_m(x)$ и вероятността за умирање $h(x)$ са константи, то минимизиращата плътност (2.34) се записва във вида:*

$$\begin{aligned} \bar{p}_{\gamma}(\cdot | \gamma = \gamma_i) &= \bar{c} |g(x_0)| \\ &\times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} |\bar{K}(x_{\gamma_i[q]})| \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} \Phi(x_{\gamma_i[q]}). \end{aligned}$$

Доказателството е аналогично на Следствие 2.4.1.

Следствие 2.4.3 : *Функцията на плътност (2.34) минимизира дисперсията на сл.в. (2.32).*

Доказателство: Дисперсията на сл.в. (2.32) се изразява с равенството:

$$\sigma^2(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i)) = M(\Theta_{[g]}^2(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i)) - \left(M(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l|\gamma = \gamma_i))\right)^2.$$

Съгласно Теорема 2.4.2 функцията на плътност (2.34) минимизира втория момент на сл.в.(2.32). От друга страна математическото очакване на всяка сл.в. е константа за произволно допустима плътност. Тези два факта доказват Следствие 2.4.3.

Следствие 2.4.4 : *Функцията на плътност*

$$(2.39) \quad p_\gamma := \bar{p}_\gamma = \bar{c} |g(x_0)| \\ \times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} p_m(x_{\gamma_i[q]} | \bar{K}(x_{\gamma_i[q]})) | \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} \Phi(x_{\gamma_i[q]})h(x_{\gamma_i[q]}),$$

минимизира дисперсията на сл.в. (2.12), с която описваме разклонения стохастичен процес до l -то поколение.

Доказателство: Доказателството на това следствие следва от факта, че при всяка реализация на сл.в. (2.12) получаваме сл.в. от вида (2.32), за която съгласно Следствие 2.4.3 функцията на плътност (2.34) минимизира дисперсията и. Двете плътности (2.34) и (2.39) се различават по множителя, който характеризира вероятността да се реализира под-дървото γ_i . Ясно е, че когато γ пробяга всички под-дървета γ_i , ($i = 1, \dots, n$) този член съгласно формулата за пълната вероятност става равен на единица. Това доказва Следствие 2.4.4.

Функцията на плътност (2.39) се нарича *оптимална* за сл.в. (2.12). *Оптимална* плътност е и функцията (2.34) за сл.в. (2.35) асоциирана към под-дървото γ_i . Използването на *оптимални* плътности при решаване на конкретни задачи е практически неосъществимо. Това се дължи на факта, че намиране на *правило за извадка* в алгоритмите Монте Карло с такъв тип плътности е твърде труден, дори невъзможен процес. На практика се прибегва до използването на

почти оптимална плътност, т.е. плътност, която в някакъв смисъл, (например пропорционалност на функции) е „близка“ до оптималната.

Да въведем следните означения:

$$(2.40) \quad \mathcal{K}(x_0)\Phi^{(m)} := \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x_0, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)| \prod_{i=1}^m dy_i = \hat{\Phi}(x_0).$$

$$(2.41) \quad \mathcal{K}(x_0) := \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |\bar{k}(x_0, y_1, y_2, \dots, y_m)| \prod_{i=1}^m dy_i.$$

Ще отбележим, че при фиксирана точка $x_0 \in \Omega$, с равенства (2.40 и (2.41) е дефинирана норма. Възможно е да се покаже, че

$$(2.42) \quad \hat{p}_{\gamma} := \hat{c} |g(x_0)| \times \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{A}} p_m(x_{\gamma_i[q]}) |\bar{K}(x_{\gamma_i[q]})| \prod_{x_{\gamma_i[q]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma_i[q]}),$$

е почти оптимална плътност, където сме положили

$$(\hat{c})^{-1} = \|g\| \mathcal{K}(x_0).$$

Нека предположим, че разклоненият стохастичен процес се състои само от едно поколение $l = 1$. Съгласно взаимно-еднозначното съответствие този процес се асоциира с първата итерация на уравнение (2.2), а именно:

$$u_1(x_0) = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} k(x_0, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m f(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x_0).$$

Броя на под-дърветата на пълното дърво Γ_1 е $n = 2$. Сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_1)$, която характеризира стохастичния процес само с едно поколение има две реализации:

$$(2.43) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_1 | \gamma = \gamma_1) = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \frac{K(x_0)}{P(x_0)} \prod_{i=1}^m \frac{f(y_i)}{h(y_i)} \\ = \frac{g(x_0)}{\pi_0(x_0)} \frac{k(x_0, y_1, \dots, y_m)}{p(x_0, y_1, \dots, y_m)} \prod_{i=1}^m \frac{f(y_i)}{h(y_i)},$$

с плътност

$$p_{\gamma_1}(\cdot | \gamma = \gamma_1) = \pi_0(x_0) P(x_0) \prod_{i=1}^m h(y_i) = \pi_0(x_0) p(x_0, y_1, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m h(y_i),$$

и

$$\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_1|\gamma = \gamma_2) = \frac{g(x_0)f(x_0)}{\pi_0(x_0)h(x_0)},$$

с плътност

$$p_{\gamma_2} = \frac{\pi_0(x_0)h(x_0)}{Pr\{\gamma = \gamma_2\}}.$$

Оптималната плътност за сл.в. (2.43) съгласно Теорема 2.4.2 се записва по следния начин:

$$(2.44) \quad \bar{p}_{\gamma_1}(\cdot|\gamma = \gamma_1) = \frac{p_m(x_0)\prod_{i=1}^m h(y_i)}{Pr\{\gamma = \gamma_1\}}\bar{c} | g(x_0) | | \bar{K}(x_0) | \prod_{i=1}^m \Phi(y_i),$$

където

$$(2.45) \quad (\bar{c})^{-1} = \|g\| \mathcal{K}(x_0)\Phi^{(m)}.$$

Почти оптималната плътност, въведена с равенство (2.42) за сл.в. (2.43), се записва във вида:

$$(2.46) \quad \hat{p}_{\gamma_1}(\cdot|\gamma = \gamma_1) = \frac{p_m(x_0)\prod_{i=1}^m h(y_i)}{Pr\{\gamma = \gamma_1\}}\hat{c} | g(x_0) | | \bar{K}(x_0) |,$$

където

$$(\hat{c})^{-1} = \|g\| \mathcal{K}(x_0).$$

Оптималната плътност за сл.в. (2.43), може да се запише още и по следния начин:

$$\begin{aligned} \bar{p}_{\gamma_1}(\cdot|\gamma = \gamma_1) &= \frac{p_m(x_0)\prod_{i=1}^m h(y_i)}{Pr\{\gamma = \gamma_1\}}\bar{c} | g(x_0) | | \bar{K}(x_0) | \prod_{i=1}^m \Phi(y_i) \\ &= \frac{p_m(x_0)\prod_{i=1}^m h(y_i)}{Pr\{\gamma = \gamma_1\}} \frac{|g(x_0)| \mathcal{K}(x_0)\Phi(x_0)^{(m)}}{(\bar{c})^{-1}} \frac{|\bar{K}(x_0)| \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)}{\mathcal{K}(x_0)\Phi(x_0)^{(m)}}. \end{aligned}$$

Вземайки предвид равенство (2.45) получаваме:

$$\begin{aligned} \bar{p}_{\gamma_1}(\cdot|\gamma = \gamma_1) &= \frac{p_m(x_0)\prod_{i=1}^m h(y_i)}{Pr\{\gamma = \gamma_1\}} \frac{|g(x_0)| | \bar{K}(x_0) | \prod_{i=1}^m \Phi(y_i)}{\|g\| \mathcal{K}(x_0)\Phi(x_0)^{(m)}} \\ &= \frac{p_m(x_0)\prod_{i=1}^m h(y_i)}{Pr\{\gamma = \gamma_1\}} \pi_0(x_0)\bar{p}(x_0, y_1, \dots, y_m). \end{aligned}$$

Аналогично за почти оптималната плътност (2.46) получаваме:

$$\begin{aligned}\widehat{p}_{\gamma_1}(\cdot | \gamma = \gamma_1) &= \frac{p_m(x_0) \prod_{i=1}^m h(y_i) |g(x_0)| \mathcal{K}(x_0) |\overline{K}(x_0)|}{Pr\{\gamma = \gamma_1\} (\widehat{c})^{-1} \mathcal{K}(x_0)} \\ &= \frac{p_m(x_0) \prod_{i=1}^m h(y_i) |g(x_0)| \mathcal{K}(x_0) |\overline{K}(x_0)|}{Pr\{\gamma = \gamma_1\} \|g\| \mathcal{K}(x_0) \mathcal{K}(x_0)} \\ &= \frac{p_m(x_0) \prod_{i=1}^m h(y_i) |g(x_0)| |\overline{K}(x_0)|}{Pr\{\gamma = \gamma_1\} \|g\| \mathcal{K}(x_0)} \\ &= \frac{p_m(x_0) \prod_{i=1}^m h(y_i)}{Pr\{\gamma = \gamma_1\}} \widehat{\pi}_0(x_0) \widehat{p}(x_0, y_1, \dots, y_m).\end{aligned}$$

Сравнявайки двете преходни плътности $\bar{p}(x_0, y_1, \dots, y_m)$ и $\widehat{p}(x_0, y_1, \dots, y_m)$, стигаме до извода, че е в сила следното твърдение:

Теорема 2.4.3 : *Необходимото и достатъчно условие преходната плътност $\widehat{p}(x_0, y_1, \dots, y_m)$ да минимизира функцията*

$$(2.47) \quad \Phi(x_0) = \left(\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \frac{\overline{k}^2(x_0, y_1, y_2, \dots, y_m)}{\tilde{p}(x_0, y_1, y_2, \dots, y_m)} \prod_{i=1}^m \Phi^2(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i \right)^{\frac{1}{2}};$$

е да е изпълнено следното равенство:

$$(2.48) \quad \mathcal{K}(x_0)(\Phi^{(m)})^2 = c_1^2 \mathcal{K}(x_0),$$

където c_1 е константа.

Доказателство: Преходната плътност $\bar{p}(x_0, y_1, \dots, y_m)$ съгласно Лема 2.4.1 минимизира функцията (2.47) и този минимум е

$$\min_{\tilde{p}(\cdot)} \Phi(x_0) = \widehat{\Phi}(x_0) = \mathcal{K}(x_0)(\Phi^{(m)}).$$

Да положим $\tilde{p}(x_0, y_1, \dots, y_m) := \widehat{p}(x_0, y_1, \dots, y_m)$ и да заместим в (2.47):

$$\begin{aligned}\Phi^2(x_0) &= \left(\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \mathcal{K}(x_0) \frac{\overline{k}^2(x_0, y_1, \dots, y_m)}{|\overline{k}(x_0, y_1, \dots, y_m)|} \prod_{i=1}^m \Phi^2(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i \right) \\ &= \mathcal{K}(x_0) \mathcal{K}(x_0)(\Phi^{(m)})^2.\end{aligned}$$

Следователно равенството:

$$\left(\mathcal{K}(x_0)(\Phi^{(m)})\right)^2 = \mathcal{K}(x_0) \mathcal{K}(x_0)(\Phi^{(m)})^2$$

е вярно точно тогава, когато условие (2.48) е изпълнено. Нещо повече, в този случай преходната плътност $\widehat{p}(x_0, y_1, \dots, y_m)$ минимизира $\Phi(x_0)$ за всяко $x_0 \in \Omega$ и е изпълнено равенството:

$$\prod_{i=1}^m \Phi(y_i) = c_1.$$

Стойността на минимума е $\widehat{\Phi}(x_0)$. Това доказва Теорема 2.4.3.

Остана да проверим при какво условие началната плътност $\widehat{\pi}_0(x_0)$ може да минимизира функционала:

$$(2.49) \quad \int_{\Omega} g^2(x_0) \widehat{\Phi}^2(x_0) \pi_0^{-1}(x_0) dx_0.$$

Като вземем предвид, че $\widehat{\pi}_0(x_0) = |g(x_0)| \|g\|^{-1}$, заместваем в (2.49) и получаваме:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} g^2(x_0) \widehat{\Phi}^2(x_0) \widehat{\pi}_0^{-1}(x_0) dx_0 &= c_1^2 \int_{\Omega} |g(x_0)| (\mathcal{K}(x_0))^2 \|g\| dx_0 \\ &= c_1^2 \|g\| \int_{\Omega} |g(x_0)| (\mathcal{K}(x_0))^2 dx_0. \end{aligned}$$

Сравнявайки със случая, когато използваме начална оптимална плътност $\overline{\pi}_0(x_0)$, стигаме до извода, че $\widehat{\pi}_0(x_0)$ може да минимизира функционала (2.49) точно тогава, когато $\mathcal{K}(x_0) = c_2$, където c_2 е константа.

Всички тези аргументи показват, че плътността (2.46) е *почти оптимална*, и че концепцията *почти оптималност*, т.е. концепцията за „близост“ на (2.46) до *оптималната* плътност (2.44), е свързана с пропорционалността на функциите $\mathcal{K}(x_0)(\Phi^{(m)})^2$ и $\mathcal{K}(x_0)$.

2.5 Монте Карло алгоритми с почти оптимални плътности

В този параграф е представен РМК алгоритъм за приближено пресмятане на функционал (2.1) от решението на интегрално уравнение с полиномиална нелинейност (2.2).

Разглеждаме сл.в. (2.12), която всъщност оценява $J(u_l)$. За да минимизираме на практика дисперсията, използваме въведената в (2.42) почти оптимална плътност. Фактически, в израза за сл.в. (2.12) е необходимо да извършим следните полагания за началната плътност $\pi_0(x_0)$ и за преходната плътност $p(x, y_1, y_2, \dots, y_m)$, а именно:

$$\begin{aligned}\pi_0(x_0) &:= \widehat{\pi}_0(x_0) = \widehat{c} |g(x_0)|; \\ p(x, y_1, \dots, y_m) &= p_m(x) \widetilde{p}(x, y_1, \dots, y_m) := p_m(x) \widehat{p}(x, y_1, \dots, y_m) \\ &= p_m(x) \widehat{c}_x | \bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) |,\end{aligned}$$

където

$$(\widehat{c})^{-1} = \int_{\Omega} |g(x_0)| dx_0$$

и

$$(\widehat{c}_x)^{-1} = \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} | \bar{k}(x, y_1, y_2, \dots, y_m) | \prod_{i=1}^m dy_i.$$

Пресмятането на една стойност на сл.в. $\Theta_{[\theta]}(\gamma/\Gamma_l)$ се извършва в следните няколко стъпки:

Алгоритъм 2.5.1 :

1. Пресмятаме точката $\xi \in \Omega$ която е стойност на сл.в. τ с плътност

$\widehat{\pi}_0(x_0) = \widehat{c} |g(x_0)|$. Полагаме:

$$\Theta_{[\theta]}(\gamma/\Gamma_l) := \widehat{c}^{-1} \frac{g(\xi)}{|g(\xi)|}.$$

2. **Конструираме** независима реализация, α , на равномерно разпределена сл.в. в интервала $(0, 1)$.
3. **Ако** $(\alpha \leq p_m(\xi))$, **то** изпълняваме последователно стъпки 5, 6 и 7.

В противен случай изпълняваме стъпка 4.

4. **Умножаваме** получената до този момент стойност на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ с израза $f(\xi)/h(\xi)$. (Тази стъпка отговаря на случая, когато точката ξ загива.)
5. **Пресмятаме** точките $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$, които са компоненти на m -мерната сл.в. $Y(y_1, y_2, \dots, y_m)$ с функция на плътност

$$\hat{p}(x, y_1, \dots, y_m) = \hat{c}_x \mid \bar{k}(x, y_1, \dots, y_m) \mid .$$

6. **Умножаваме** получената до този момент стойност на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ с израза

$$\frac{k(\xi, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m)}{p_m(\xi) \hat{c}_\xi \mid \bar{k}(\xi, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m) \mid} .$$

7. **Повтаряме** стъпки 2 и 3 за точките от новото поколение $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$.
8. **Спираме** изпълнението на алгоритъма, когато всички точки загинат.

Практически, за да получим осреднената стойност на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ по формула (2.18) е необходимо да изпълним N -пъти Алгоритъм 2.5.1. Тъй като всяка стойност на сл.в. може да се пресмята независимо и едновременно, то представеният Алгоритъм 2.5.1 може да се приложи ефективно върху паралелни машини.

Ще отбележим, че така описаният алгоритъм може да се използва за приближено пресмятане на функционала (2.1), когато $u(x)$ е решение на интегралното уравнение (2.19) с полиномиална нелинейност. В този случай стъпка 5 на алгоритъма е необходимо да се промени така, че параметъра m да бъде стойност на дискретна сл.в. със s състояния.

2.6 Решаване на системи нелинейни алгебрични уравнения от специален тип

Поставяме си задачата за числено пресмятане по метода Монте Карло на скаларното произведение на два вектора, т.е.

$$(2.50) \quad (\underline{g}, \underline{u}) = \sum_{j=1}^d g_j u_j,$$

където $\underline{g} = (g_1, g_2, \dots, g_d)$ е даден вектор, а вектора $\underline{u} = (u_1, u_2, \dots, u_d)$ е решение на следната система от нелинейни алгебрични уравнения (СНАУ) от специален тип:

$$(2.51) \quad u_j = \sum_{\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_d = m} k_{\beta_1 \beta_2 \dots \beta_d}^{(j)} u_1^{\beta_1} u_2^{\beta_2} \dots u_d^{\beta_d} + f_j, \quad j = 1, 2, \dots, d.$$

Ще покажем, че тази задача се явява дискретен случай на поставената задача за решаване в параграф 2.1 и получените оценки в параграфи 2.3 и 2.4 са в сила и за нея, като се отчита дискретността на задачата [37]. Подобна аналогия е установена и между системите от линейни алгебрични уравнения (СЛАУ) и линейните интегрални уравнения (вижте [14, 4, 24]).

Да разгледаме интегралното уравнение с полиномиална нелинейност (2.2), когато $\Omega \equiv [0, d) \subset \mathbb{R}^1$. Нека разделим Ω на подинтервали Ω_α , така че $x \in \Omega_\alpha$ ако $\alpha - 1 \leq x < \alpha$, $\alpha = 1, 2, \dots, d$. Така уравнение (2.2) може да се запише във вида:

$$u(x) = \sum_{\alpha_1=1}^d \int_{\Omega_{\alpha_1}} \dots \sum_{\alpha_m=1}^d \int_{\Omega_{\alpha_m}} k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \prod_{i=1}^m u(y_i) \prod_{i=1}^m dy_i + f(x)$$

Предполагаме, че функциите $u(x)$, $f(x)$ и ядрото $k(x, y_1, y_2, \dots, y_m)$ са константи във всеки интервал Ω_α , $\alpha = 1, 2, \dots, d$.

Въвеждаме следните означения:

$$u_\alpha = u(x), \quad f_\alpha = f(x) \quad \text{за всяко } x \in \Omega_\alpha,$$

$$k_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\alpha)} = k(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \text{ за всяко } x \in \Omega_\alpha \text{ и за всяко } y_i \in \Omega_{\alpha_i},$$

където

$$\alpha, \alpha_i = 1, 2, \dots, d \text{ и } i = 1, 2, \dots, m.$$

Вземайки предвид предположението, че функциите $u(x)$, $f(x)$ и $k(x, y_1, y_2, \dots, y_m)$ са константи във всеки интервал Ω_α получаваме следната СНАУ:

$$(2.52) \quad u_\alpha = \sum_{\alpha_1=1}^d \dots \sum_{\alpha_m=1}^d k_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\alpha)} u_{\alpha_1} u_{\alpha_2} \dots u_{\alpha_m} + f_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, d.$$

Ще отбележим, че в дясната страна на СНАУ (2.52) броя на коефициентите пред неизвестните е d^m . Ако съберем коефициентите пред подобните членове в (2.52) получаваме система (2.51), където броя на коефициентите е $\binom{d+m-1}{d}$. По-нататък в нашите разсъждения, случайната величина, която ще конструираме ще оценява скаларното произведение (2.50), където неизвестният вектор $\underline{u} = (u_1, u_2, \dots, u_d)^T \in \mathbb{R}^{d \times 1}$ се явява решение на система (2.52). Както при интегралното уравнение с полиномиална нелинейност, така и при СНАУ може да се разгледа разклонен стохастичен процес, който в случая е дискретен. За целта предполагаме, че система (2.52) има итерационно решение.

За начална вероятностна плътност разглеждаме вектора $\underline{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_d)^T$, допустим относно дадения вектор $\underline{g} = (g_1, g_2, \dots, g_d)^T$ и за който са изпълнени условията:

$$\sum_{\alpha=1}^d \pi_\alpha = 1, \quad \pi_\alpha \geq 0, \quad \text{за всяко } \alpha = 1, 2, \dots, d.$$

Вероятността за създаване на ново поколение $p_m(x)$ и вероятността за загиване $h(x)$ се разглеждат също като вектори, а именно:

$$p_m(x) \equiv \underline{p}^{(m)} = (p_1^{(m)}, p_2^{(m)}, \dots, p_d^{(m)}), \quad \text{и} \quad h(x) \equiv \underline{h} = (h_1, h_2, \dots, h_d).$$

Разглеждаме дискретния разклонен стохастичен процес: Нека с начална вероятност π_α в интервала Ω_α се поражда точката x_α . В следващия момент с вероятност

h_α , където $0 < h_\alpha \leq 1$, точката или загива, или създава ново поколение от точки $y_{\alpha_1}, y_{\alpha_2}, \dots, y_{\alpha_m}$ с преходна вероятност $p_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\alpha)} = p(x_\alpha, y_{\alpha_1}, y_{\alpha_2}, \dots, y_{\alpha_m}) \geq 0$. В сила са следните равенства:

$$\sum_{\alpha_1=1}^d \dots \sum_{\alpha_m=1}^d p_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\alpha)} = 1 - h_\alpha, \text{ за } \alpha = 1, 2, \dots, d.$$

Така стартирайки процеса от точка $x_\alpha \in \Omega_\alpha$ може да се получи под-дърво γ_α на пълното дърво Γ_l , състоящо се от l -поколения. Предполагаме с вероятност единица, че всички дървета, които се получават при реализацията на стохастичния процес притежават краен брой поколения и средният брой частици, които се раждат на всяко поколение е краен.

Разглеждаме сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma_\alpha/\Gamma_l)$, която има вида:

$$(2.53) \quad \Theta_{[g]}(\gamma_\alpha/\Gamma_l) = \frac{g_\alpha}{\pi_\alpha} \prod_{x_\beta \in \mathbf{A}} \frac{k_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\beta)}}{p_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\beta)}} \prod_{x_\beta \in \mathbf{B}} \frac{f_\beta}{h_\beta},$$

с функция на плътността

$$p_\alpha = \pi_\alpha \prod_{x_\beta \in \mathbf{A}} p_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\beta)} \prod_{x_\beta \in \mathbf{B}} h_\beta,$$

където множествата \mathbf{A} и \mathbf{B} са дефинирани в секция 2.2, а индексите α и β могат да приемат някоя от следните стойности:

$$\alpha, \beta, \alpha_i = 1, 2, \dots, d, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Съгласно Теорема 2.3.1 е в сила следната оценка:

$$\Theta_{[g]}(\gamma_\alpha/\Gamma_l) = (\underline{g}, \underline{u}^{(l)}) = \sum_{j=1}^d g_j u_j^{(l)}.$$

За оценка на скаларното произведение на двата вектора (2.50) се взема осреднената стойност от реализациите на сл.в. (2.53), т.е.

$$(\underline{g}, \underline{u}^{(l)}) \approx \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^N \Theta_{[g]}(\gamma_\alpha/\Gamma_l)_j \right),$$

където $\Theta_{[g]}(\gamma_\alpha/\Gamma_l)_j$ е j -тата реализация на сл.в. (2.53) получена когато случайният процес се стартира от точка $x_\alpha \in \Omega_\alpha$, а с N сме означили броя на реализациите.

По аналогия с функциите $\Phi(x_0)$ и $\hat{\Phi}(x_0)$ въведени в секция (2.4), разглеждаме векторите $\underline{\Phi} = (\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_d)^T$ и $\hat{\underline{\Phi}} = (\hat{\Phi}_1, \hat{\Phi}_2, \dots, \hat{\Phi}_d)^T$, като всяка от техните компоненти се дефинира по следния начин:

$$\Phi_\alpha = \left(\sum_{\alpha_1=1}^d \dots \sum_{\alpha_m=1}^d \frac{(\bar{k}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)})^2 \Phi_{\alpha_1}^2 \dots \Phi_{\alpha_m}^2}{\tilde{p}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)}} \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\hat{\Phi}_\alpha = \sum_{\alpha_1=1}^d \dots \sum_{\alpha_m=1}^d |\bar{k}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)} \Phi_{\alpha_1} \dots \Phi_{\alpha_m}| = \mathcal{K}^{(\alpha)} \Phi^{(m)},$$

където

$$\bar{k}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)} = \frac{k_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)}}{(p_\alpha^{(m)})^{\frac{1}{2}}}; \quad \tilde{p}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)} = \frac{p_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)}}{1 - h_\alpha} \text{ и } \alpha = 1, 2, \dots, d.$$

В сила са следните твърдения:

Лема 2.6.1 : *Преходната вероятност*

$$\tilde{p}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)} := \bar{p}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)} = \frac{|\bar{k}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_m}^{(\alpha)} \Phi_{\alpha_1} \dots \Phi_{\alpha_m}|}{\mathcal{K}^{(\alpha)} \Phi^{(m)}},$$

минимизирва компонентата Φ_α на вектора $\underline{\Phi}$ и този минимум е равен на $\hat{\Phi}_\alpha$, т.е.

$$\min_{p_\alpha} \Phi_\alpha = \hat{\Phi}_\alpha \text{ за всяко } \alpha = 1, 2, \dots, d.$$

Лема 2.6.2 : *Началната вероятност*

$$\pi_\alpha := \bar{\pi}_\alpha = \frac{|g_\alpha \hat{\Phi}_\alpha|}{(g, \hat{\underline{\Phi}})}$$

минимизирва сумата

$$\sum_{\alpha=1}^d \left(\frac{g_\alpha^2 \Phi_\alpha^2}{\pi_\alpha} \right)$$

и този минимум е равен

$$\min_{\pi_\alpha} \sum_{\alpha=1}^d \left(\frac{g_\alpha^2 \Phi_\alpha^2}{p_\alpha^0} \right) = (g, \hat{\underline{\Phi}})^2, \text{ за всяко } \alpha = 1, 2, \dots, d.$$

Доказателствата на тези две лемии са аналогични на Лемии 2.4.1 и 2.4.2.

Да въведем следните величини:

$$\Phi_\alpha = \frac{|f_\alpha|}{(h_\alpha)^{\frac{1}{2}}} \quad \text{и} \quad \bar{c}^{-1} = (\underline{g}, \hat{\Phi}).$$

В сила е следното твърдение, което се доказва аналогично на Теорема 2.4.2.

Теорема 2.6.1 : *Функцията на плътността*

$$\bar{p}_\alpha = \bar{c} |g_\alpha| \prod_{x_\beta \in \mathbf{A}} |p_\alpha^{(m)} \bar{k}_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}^{(\beta)}| \prod_{x_\beta \in \mathbf{B}} \Phi_\beta h_\beta,$$

минимизира втория момент на сл.в. (2.53), т.е.

$$\min_{p_\alpha} (M\Theta_{[g]}^2(\gamma_\alpha/\Gamma_l))^{\frac{1}{2}} = M\hat{\Theta}_{[g]}^2(\gamma_\alpha/\Gamma_l), \quad \text{когато } p_\alpha = \bar{p}_\alpha.$$

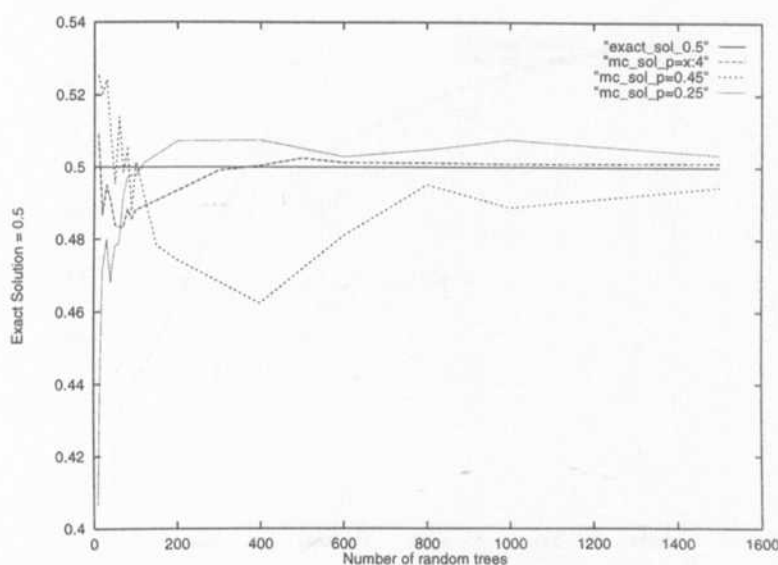
Ако изберем вектора $\underline{g} := \underline{e}^{(j)} = (0, \dots, 0, \underbrace{1}_{d}, 0, \dots, 0)$, подобно на линейния случай [14, 24], то по метода Монте Карло ще бъде оценена j -тата компонента на решението на СНАУ (2.52).

2.7 Числени експерименти и паралелна реализация

Да разгледаме някои числени резултати при прилагането на *почти оптималния* РМК алгоритъм за приближено оценяване на функционала (2.1). Нека функцията $u(x)$ е решение на следното интегрално уравнение с полиномиална нелинейност, когато параметърът $m = 2$:

$$(2.54) \quad u(x) = \int_{\Omega} \int_{\Omega} k(x, y, z) u(y) u(z) dy dz + f(x),$$

където $x \in \mathbb{R}^1$ и $\Omega = [0, 1]$. В нашите тестове



Фигура 2.3: Сравняване на МК решенията с точното решение.

$$k(x, y, z) = \frac{x(a_2y - z)^2}{a_1} \quad f(x) = c - \frac{x}{a_3}, \quad \text{и} \quad g(x) = \delta(x - x_0),$$

където $a_1 > 0$, $a_3 \neq 0$, a_2 и c са константи.

Фактически, ние пресмятаме стойността на $u(x_0)$ във фиксирана точка x_0 , защото сме избрали $g(x)$ да е функцията на Дирак. Уравнението (2.54) има единствено решение $u(x) = c$, когато е изпълнено следното условие:

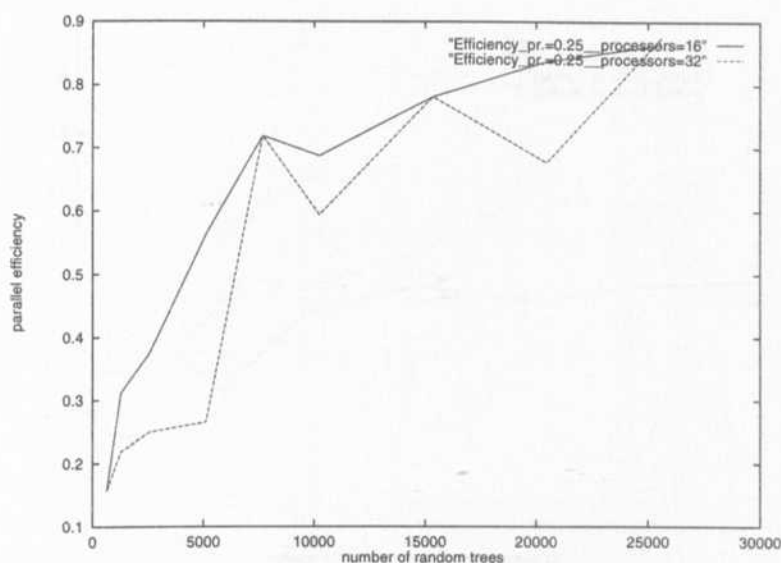
$$c = \pm \left(\frac{6a_1}{a_3(2a_2^2 - 3a_2 + 2)} \right)^{1/2}.$$

Тестовите са направени върху суперкомпютър IBM SP1, състоящ се от 32 процесора. Алгоритъмът е реализиран на програмен език C^{++} в паралелната програмна среда ATHAPASCAN, разработена от изследователска група по паралелно програмиране в Гренобъл, Франция. Преходната функция $\hat{p}(x, y, z)$ се записва с израза:

$$\hat{p}(y, z) = \frac{6}{2a_2^2 - 3a_2 + 2} (a_2y - z)^2.$$

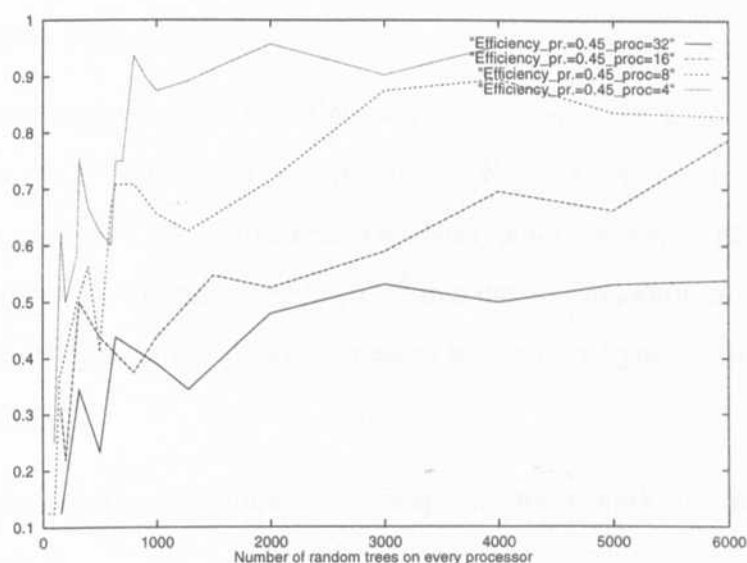
Резултатите, които сме получили за приближеното решение са направени при следните стойности на параметрите:

$$a_1 = 11, \quad a_2 = 4, \quad a_3 = 12, \quad c = 0.5.$$

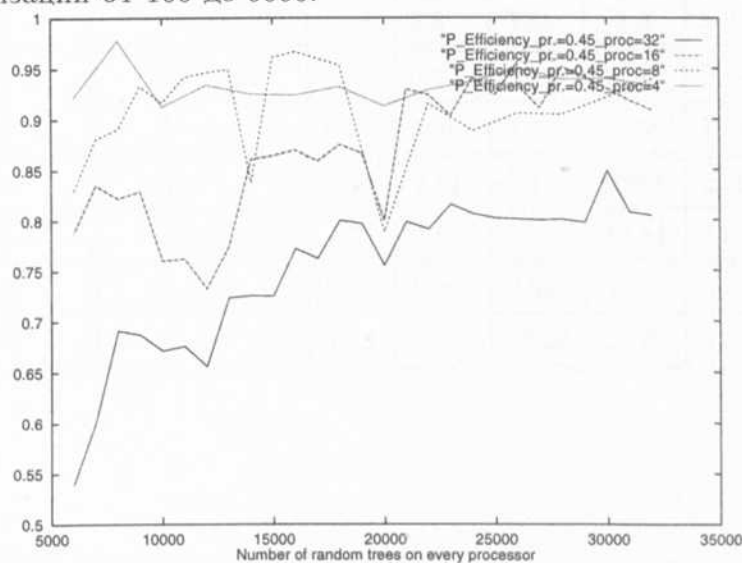


Фигура 2.4: Паралелна ефективност при $p_2(x) = 0.25$; Брой процесори: 16 и 32; Брой реализации от 100 до 30000.

Точното решение при така зададените стойности е $u(x_0) = c = 0.5$. На Фигура 2.3 е показана зависимостта на приближеното решение от броя на реализациите на сл.в., т.е. броя на реализираните случайни дървета в разклонения стохастичен процес. Разгледани са три случая на вероятността за получаване на ново поколение от две частици, а именно $p_2 = 0.25$, $p_2 = 0.45$, $p_2 = x/4$. При малък брой реализации на сл.в. се наблюдава осцилация на приближеното решение, т.е. направената извадка не е представителна. При нарастване броя на случайните дървета се вижда, че решението се сходя към точното решение. Най-доброто решение е получено в случая, когато $p(x) = x/4$, което фактически отговаря на използването на *почти оптималната* плътност. Вижда се, че паралелната ефективност, показана на Фигури 2.4, 2.5 и 2.6 осцилира около 0.2 – 0.3, когато малък брой (200 – 300) случайни дървета са реализирани. При нарастване броя на дърветата ефективността се подобрява. На Фигури 2.5 и 2.6 се вижда как паралелната ефективност зависи от броя на процесорите. В числените тестове представени на тях, броя на дърветата е разпределен върху броя изпол-



Фигура 2.5: Паралелна ефективност при $p_2(x) = 0.45$; Брой процесори: 4, 8, 16 и 32; Брой реализации от 100 до 6000.



Фигура 2.6: Паралелна ефективност при $p_2(x) = 0.45$; Брой процесори: 4, 8, 16 и 32; Брой реализации от 6000 до 35000.

звани процесори. Това означава, че система от 4 процесора реализира същия брой дървета, колкото и система от 16 процесора. Паралелната ефективност при по-малък брой процесори е по-добра, но трябва също така да се следи и за

ускорението, което се получава.

Представените резултати в Таблица 2.1 показват, че с увеличаване брой на реализациите се увеличава и ускорението. Като в случая на 32 процесора ускорението достига до 27.2. Паралелната ефективност е почти винаги над 0.50. Това ни дава право да твърдим, че при решаване на подобни задачи, с голяма изчислителна трудоемкост е необходимо да се използват суперкомпютри от типа на MIMD-машините.

Таблица 2.1: Паралелна ефективност и ускорение на *почти оптималния* Монте Карло алгоритъм

p -процесора	N -сл. дървета	1000	2000	6000	18000	30000
4	Пар. Еф.	0.88	0.95	0.92	0.95	0.95
4	Ускор.	3.52	3.8	3.68	3.8	3.8
8	Пар. Еф.	0.65	0.7	0.83	0.92	0.93
8	Ускор.	5.2	5.6	6.64	7.36	7.44
16	Пар. Еф.	0.46	0.52	0.77	0.865	0.92
16	Ускор.	7.36	8.32	12.32	13.84	14.72
32	Пар. Еф.	0.4	0.48	0.54	0.79	0.85
32	Ускор.	12.8	15.36	17.28	25.28	27.2

2.8 Изводи

Получените теоретични резултати за минимизацията на дисперсията могат успешно да се прилагат при решаване на задачи от посочения тип. Предложенят *почти оптимален* МК алгоритъм има по-висока изчислителна точност от известните до сега МК алгоритми за този клас задачи. Числените резултати потвърждават високата паралелна ефективност на МК алгоритмите.

Глава 3

Приложение на Монте Карло алгоритмите за симулиране на квантов транспорт на електрони в полупроводници

3.1 Постановка на задача

Поставяме си задачата за числено пресмятане по метода МК на квантовото уравнение, описващо ултракъсовременна релаксация на фотогенерирани носители взаимодействащи с LO фонони. Интегралното уравнение се получава след апроксимация на квантово-електронния динамичен модел, предложен от Шилп, Кун и Малер [63]. Съответната система от три кинетични уравнения се редуцира до едно нелинейно уравнение [54] от вида:

$$(3.1) \quad u(\underline{x}, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} \left\{ s'(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') \left[u(\underline{x} + \underline{y}, t'') \right. \right. \\ \left. \left. \times (1 - u(\underline{x}, t''))(n + 1) - u(\underline{x}, t'')(1 - u(\underline{x} + \underline{y}, t''))n \right] - s'(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'') \times \right.$$

$$\times \left[u(\underline{x}, t'')(1 - u(\underline{x} + \underline{y}, t''))(n + 1) - u(\underline{x} + \underline{y}, t'')(1 - u(\underline{x}, t''))n \right] \} dy dt'' dt' + \phi(\underline{x}).$$

Тук $u(\underline{x}, t)$ е функция на разпределение на електроните с вълнов вектор $\underline{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$ в еволюционно време t , а функцията ϕ е началното условие. Ядрото има вида:

$$(3.2) \quad s'(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') = \frac{2V}{(2\pi)^3 \hbar^2} \|f_{\underline{y}}\|^2 e^{-(\Gamma_{\underline{x}+\underline{y}} + \Gamma_{\underline{x}})(t' - t'')} \\ \times \cos\left(\frac{\varepsilon_{\underline{x}+\underline{y}} - \varepsilon_{\underline{x}} - \hbar\omega}{\hbar}(t' - t'')\right),$$

където $\hbar\omega$ е енергията на фонона, взаимодействието $f_{\underline{y}}$ е от типа на Фрьолих

$$f_{\underline{y}} = -i \left[\frac{2\pi q^2 \hbar\omega}{V y^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \right]^{\frac{1}{2}},$$

където i е имагинерната единица ($i^2 = -1$). Обема на кристала сме означили с V , а енергията на електрона с

$$\varepsilon_{\underline{x}} = \frac{\hbar^2 \underline{x}^2}{2m}.$$

Функцията $\Gamma_{\underline{x}}$ се записва по следния начин:

$$(3.3) \quad \Gamma_{\underline{x}} = \int_{\Omega} \frac{V}{2^3 \pi^2 \hbar} \sum_{\pm} \|f_{\underline{y}}\|^2 \delta(\varepsilon_{\underline{x}+\underline{y}} - \varepsilon_{\underline{x}} \pm \hbar\omega)(n + 1/2 \pm 1/2) dy,$$

където

$$n = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

е функция на Бозе, а с T сме означили температурата на кристалната решетка, съответстваща при равновестно разпределение на фононната баня, а L е максималната стойност, която може да взема вектора $\underline{x} \in \Omega$.

Да въведем следните означения:

$$S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') = s'(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'')(n + 1) + s'(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'')n;$$

$$S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'') = s'(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'')n + s'(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'')(n + 1).$$

Вземайки предвид равенство (3.2) за ядрото $S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'')$ получаваме:

$$(3.4) \quad S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') = \frac{2V}{(2\pi)^3 \hbar^2} \|f_{\underline{y}}\|^2 e^{-(\Gamma_{\underline{x}+\underline{y}} + \Gamma_{\underline{x}})(t' - t'')} \\ \times \left\{ \cos \left(\frac{\varepsilon_{\underline{x}+\underline{y}} - \varepsilon_{\underline{x}} - \hbar\omega}{\hbar} (t' - t'') \right) (n + 1) + \cos \left(\frac{\varepsilon_{\underline{x}} - \varepsilon_{\underline{x}+\underline{y}} - \hbar\omega}{\hbar} (t' - t'') \right) n \right\}.$$

В резултат на въведените означения интегралното уравнение (3.1) се записва по следния начин:

$$(3.5) \quad u(\underline{x}, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} \{ S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') [u(\underline{x} + \underline{y}, t'') (1 - f(\underline{x}, t''))] \\ - S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'') [u(\underline{x}, t'') (1 - u(\underline{x} + \underline{y}, t''))] \} d\underline{y} dt'' dt' + \phi(\underline{x}).$$

Интегралното уравнение (3.5) може да се презапише в следната полиномиална форма:

$$(3.6) \quad u(\underline{x}, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} \{ [S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') - \lambda(\underline{x}, t', t'') \delta(\underline{y})] u(\underline{x} + \underline{y}, t'') \\ + [S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'') - S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'')] u(\underline{x} + \underline{y}, t'') u(\underline{x}, t'') \} d\underline{y} dt'' dt' + \phi(\underline{x}),$$

където

$$\lambda(\underline{x}, t', t'') = \int_{\Omega} S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'') d\underline{y}.$$

От равенство (3.6) се вижда, че линейната и квадратичната част са разделени и тази форма на уравнението е удобна за прилагане на разклонен Монте Карло (РМК) алгоритъм, като се използва връзката между интегралното уравнение с полиномиална нелинейност и подходящ разклонен стохастичен процес.

От друга страна при предположение, че функцията $u(\underline{x}, t)$ е много по-малка от единица в цялата си дефиниционна област (от физична гледна точка, това е често срещан случай), изразът $1 - u(\underline{x}, t)$ в уравнение (3.5) може да се замени с единица. Получава се следното линейно интегрално уравнение:

$$(3.7) \quad u(\underline{x}, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} [S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') - \lambda(\underline{x}, t', t'') \delta(\underline{y})] \\ \times u(\underline{x} + \underline{y}, t'') d\underline{y} dt'' dt' + \phi(\underline{x}).$$

Тази форма на (3.7) е удобна за числено решаване на уравнението, като се използва итерационен Монте Карло (ИМК) алгоритъм. Ефекта на линеализацията може да се изследва, като се сравнят числените резултати от решенията на уравнения (3.6) и (3.7), получени съответно с РМК и ИМК алгоритми.

3.2 Монте Карло метод

Нека е поставена задачата за числено пресмятане на функционала:

$$J(u) = (g(\underline{x}, t), u(\underline{x}, t)) = \int_0^{\bar{t}} \int_{\Omega} g(\underline{x}, t) f(\underline{x}, t) dt d\underline{x}$$

по метода МК, където $u(\underline{x}, t)$: е решение или на уравнение (3.7) или на уравнение (3.6). Ясно е, че ако изберем $g(\underline{x}, t) = \delta(\underline{x} - \underline{x}_0, t - t_0)$, то намираме приближено стойността на съответното решение в точка (\underline{x}_0, t_0) .

Преди да решим поставената задача, да разгледаме следния итерационен процес:

$$(3.8) \quad u_l(\underline{x}, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} [S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') - \lambda(\underline{x}, t', t'') \delta(\underline{y})] \\ \times u_{l-1}(\underline{x} + \underline{y}, t'') dy dt'' dt' + \phi(\underline{x}), \quad u_0(\underline{x}, t) = \phi(\underline{x}),$$

за интегралното уравнение (3.7). Да покажем, че той е сходящ. Итерационният процес (3.8) може да се презапише във вида:

$$u_l(\underline{x}, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} [S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'') u_{l-1}(\underline{x} + \underline{y}, t'')] dy dt'' dt' \\ - \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} [S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'') u_{l-1}(\underline{x}, t'')] dy dt'' dt' + \phi(\underline{x}), \quad u_0(\underline{x}, t) = \phi(\underline{x}).$$

Да предположим, че са изпълнени неравенствата:

$$\max_{\underline{x}, t', t''} \int_{\Omega} |S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t', t'')| dy \leq \mathcal{M}, \quad \max_{\underline{x}, t', t''} \int_{\Omega} |S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t', t'')| dy \leq \mathcal{M} \quad \text{и} \quad \max_{\underline{x}} |\phi(\underline{x})| \leq \hat{\phi}.$$

Съществуването на константата \mathcal{M} следва непосредствено от конкретната форма на ядрата (3.4).

Фактически, равенство (3.8) дефинира следния ред на Нойман:

$$(3.9) \quad u_l = \phi + \mathbb{K}(\phi) + \dots + \mathbb{K}^{l-1}(\phi) + \mathbb{K}^l(\phi) + \dots, \quad l > 1,$$

където с \mathbb{K}^l е означена l -тата итерация на оператора \mathbb{K} . В сила е следното твърдение:

Лема 3.2.1 : Редът на Нойман (3.9) се мажорира от сходящия ред:

$$(3.10) \quad \hat{\phi} \cosh(t\sqrt{2\mathcal{M}}) = \hat{\phi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(t\sqrt{2\mathcal{M}})^{2j}}{(2j)!}$$

и следователно е равномерно сходящ за всяко $\underline{x}, \underline{y} \in \Omega$ и $0 < t'' < t'$, $0 < t' < t$ към решението на уравнението (3.7).

Доказателство: Достатъчно е да докажем, че всеки член в реда на Нойман (3.9) се мажорира от съответния член в сходящия ред (3.10), т.е.

$$(3.11) \quad |(\mathbb{K}^j \phi)(\underline{x}, t)| \leq \hat{\phi} \frac{(t\sqrt{2\mathcal{M}})^{2j}}{(2j)!}.$$

Доказателството извършваме по индукция. Проверяваме за $j = 1$. В случая $j = 0$ неравенство (3.11) очевидно е изпълнено.

$$\begin{aligned} |(\mathbb{K}^1 \phi)(\underline{x}, t)| &= \left| \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} \{S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t' - t'') - \lambda(\underline{x}, t' - t'')\delta(\underline{y})\} u_0(\underline{x} + \underline{y}, t'') d\underline{y} dt'' dt' \right| \\ &\leq \left| \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t' - t'') \phi(\underline{x} + \underline{y}, t'') d\underline{y} dt'' dt' \right| \\ &\quad + \left| \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t' - t'') \phi(\underline{x}, t'') d\underline{y} dt'' dt' \right| \\ &\leq \hat{\phi} \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} |S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t' - t'')| d\underline{y} dt'' dt' + \hat{\phi} \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} |S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t' - t'')| d\underline{y} dt'' dt' \\ &\leq \hat{\phi} \int_0^t \int_0^{t'} d(\mathcal{M} + \mathcal{M}) dt'' dt' = \hat{\phi} \frac{(2\mathcal{M})(t)^2}{2} = \hat{\phi} \frac{(t\sqrt{2\mathcal{M}})^2}{2!}. \end{aligned}$$

Допускаме, че неравенство (3.11) е вярно за $j = l$, т.е.

$$|(\mathbb{K}^l \phi)(\underline{x}, t)| \leq \hat{\phi} \frac{(t\sqrt{2\mathcal{M}})^{2l}}{(2l)!}.$$

Да докажем, че е вярно за $j = l + 1$. Наистина,

$$\begin{aligned}
& |(\mathbb{K}^{l+1}\phi)(\underline{x}, t)| \\
&= \left| \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} \{S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t' - t'') - \lambda(\underline{x}, t' - t'')\delta(\underline{y})\} (\mathbb{K}^l\phi)(\underline{x} + \underline{y}, t'') d\underline{y} dt'' dt' \right| \\
&\leq \left| \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t' - t'') (\mathbb{K}^l\phi)(\underline{x} + \underline{x}, t'') d\underline{y} dt'' dt' \right| \\
&\quad + \left| \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t' - t'') (\mathbb{K}^l\phi)(\underline{x}, t'') d\underline{y} dt'' dt' \right| \\
&\leq \hat{\phi} \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} |S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t' - t'')| \frac{(2M)^l (t'')^{2l}}{(2l)!} d\underline{y} dt'' dt' \\
&\quad + \hat{\phi} \int_0^t \int_0^{t'} \int_{\Omega} |S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t' - t'')| \frac{(2M)^l (t'')^{2l}}{(2l)!} d\underline{y} dt'' dt' \\
&\leq \hat{\phi} \int_0^t \int_0^{t'} (\mathcal{M} + \mathcal{M}) \frac{(2M)^l (t'')^{2l}}{(2l)!} dt'' dt' \\
&= \hat{\phi} \frac{(2M)^{l+1} (t)^{2l+2}}{(2l)!(2l+1)(2l+2)} = \hat{\phi} \frac{(t\sqrt{2M})^{2l+2}}{(2l+2)!}.
\end{aligned}$$

Следователно е вярно неравенството:

$$|(\mathbb{K}^{l+1}\phi)(\underline{x}, t)| \leq \hat{\phi} \frac{(t\sqrt{2M})^{2l+2}}{(2l+2)!}.$$

С това Лема 3.2.1 е доказана.

Да разгледаме метод МК за намиране решението на функционала

$$(3.12) \quad J(u) = (g(x), u(x)) = \int_{\Omega} g(x)u(x)dx,$$

където $g(x)$ е зададена функция, а $u(x)$ е решение на интегралното уравнение

$$(3.13) \quad u(x) = \int_{\Omega} k(x, x')u(x')dx' + \phi(x)$$

Случайната величина, която има математическо очакване равно на функционала

(3.12) се записва по следния начин (вижте [4, 14]):

$$(3.14) \quad \Theta[g] = \frac{g(\xi_0)}{\pi_0(\xi_0)} \sum_{j=0}^{\infty} W_j \phi(\xi_j),$$

където

$$W_0 = 1, \quad W_j = W_{j-1} \frac{k(\xi_{j-1}, \xi_j)}{p(\xi_{j-1}, \xi_j)}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

а ξ_0, ξ_1, \dots е верига на Марков с начална плътност $\pi_0(x)$ и преходна плътност $p(x, x')$, които са допустими относно функциите $g(x)$ и $k(x, x')$.

Практически е необходимо да се използва сл.в. Θ_{l_ϵ} , която се явява изместена оценка за функционала (3.12) и се записва във вида:

$$(3.15) \quad \Theta_{l_\epsilon} = \frac{g(\xi_0)}{\pi_0(\xi_0)} \sum_{j=0}^{l_\epsilon} W_j \phi(\xi_j) \quad \text{където} \quad W_{l_\epsilon} \leq \epsilon.$$

Използвайки сл.в. (3.15), функционала (3.12) може да се пресметне приближено по формулата:

$$(3.16) \quad J(u) \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\Theta_{l_\epsilon})_j,$$

където N е броя на реализациите на сл.в.

Ясно е, че ако изберем $g(x) = \delta(x - x_0)$, то фактически се оценява стойността на решението $u(x)$ в точка x_0 .

Интегралното уравнение (3.7), описващо симулирането на линеен квантов транспорт на електрони в полупроводници има вида на уравнение (3.13) и следователно сл.в. (3.15) може да се използва за оценяване на решението му. Нека отбележим, че ядрото на уравнение (3.7) се състои от две компоненти $S(\underline{x} + \underline{y}, \underline{x}, t' - t'')$ и $S(\underline{x}, \underline{x} + \underline{y}, t' - t'')$, така че при реализацията на сл.в. (3.15) трябва да се следи, коя компонента на ядрото се появява при пресмятане на теглата W .

Да разгледаме метод МК за намиране решението на функционала (3.12), където $u(x)$ е решение на интегралното уравнение с полиномиална нелинейност:

$$(3.17) \quad u(x) = \int_{\Omega} \mathcal{K}_1(x, x') u(x') dx' + \int_{\Omega} \mathcal{K}_2(x, x'') f(x'') dx'' \\ + \int_{\Omega} \int_{\Omega} \mathcal{K}_3(x, x', x'') f(x') f(x'') dx' dx'' + \phi(x).$$

Предполагаме, че съществува итерационно решение, получаващо се при следния итерационния процес:

$$(3.18) \quad u_l(x) = \int_{\Omega} \mathcal{K}_1(x, x') u_{l-1}(x') dx' + \int_{\Omega} \mathcal{K}_2(x, x'') u_{l-1}(x'') dx'' \\ + \int_{\Omega} \int_{\Omega} \mathcal{K}_3(x, x', x'') u_{l-1}(x') u_{l-1}(x'') dx' dx'' + \phi(x), \quad u_0(x) = \phi(x).$$

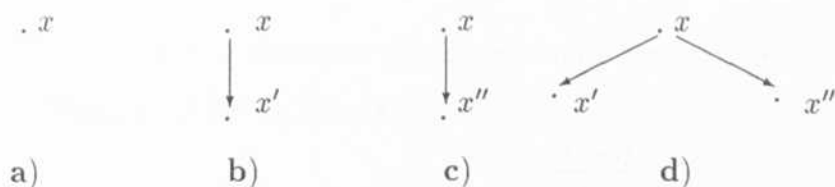
При конструирането на случайната величина, използваме връзката между разклонен стохастичен процес с l -поколения и итерационния процес (3.18) с l -итерации [38]. Връзката е подобна на разгледаната вече в Глава 2.

Стохастичният процес се описва както следва: Предполагаме, че произволна частица, разпределена с начална плътност $\pi_0(x) \geq 0$ и $\int_{\Omega} \pi_0(x) dx = 1$ се ражда в областта $\Omega \in \mathbb{R}^d$ в случайна точка x . В следващия момент тази точка или загива с вероятност $h(x)$, където $0 \leq h(x) < 1$, или поражда нови частици както следва: с вероятност $p_1(x)$ и преходна плътност $p_1(x, x') \geq 0$ генерира нова частица от тип x' ; или, с вероятност $p_2(x)$ и преходна плътност $p_2(x, x'') \geq 0$ генерира нова частица от тип x'' ; или, с вероятност $p_3(x)$ и преходна плътност $p_3(x, x', x'') \geq 0$ генерира две нови частици от тип x' и тип x'' . Вероятностите и преходните плътности удовлетворяват условията:

$$\sum_{j=1}^3 p_j(x) = 1 - h(x), \quad \int_{\Omega} p_1(x, x') dx' = 1, \\ \int_{\Omega} p_1(x, x'') dx'' = 1, \quad \int_{\Omega} \int_{\Omega} p_3(x, x', x'') dx' dx'' = 1.$$

Поведението на генерираните частици е като на началната и т.н. Следата на такъв процес са случайни дървета. Показаните на Фигура 3.1 са различни типове случайни дървета, които могат да се появят до първо поколение.

Нека както в Глава 2 означим с **A** множеството от точки (частици), които генерират нови точки, а с **B** множеството от точки, които загиват и нека отново използваме мулти-индекси при означенията на точките. Случайната величина



Фигура 3.1:

$\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$, асоциирана към разглеждания разклонен стохастичен процес за получаване на кое да е под-дърво γ от *пълното* дърво Γ_l , се конструира по следния начин:

$$(3.19) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l) = \frac{g(x) \phi(x)}{\pi_0(x) h(x)},$$

ако дървото γ се състои само от началната точка. Ако процеса съдържа и други точки, тогава сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ се конструира едновременно с конструирането на дървото γ .

Когато дадена частица, съответстваща на случайната точка $x_{\gamma[q]}$ създава ново поколение от една частица, съответстваща на точките:

$$x'_{\gamma[q]0} \quad \text{или} \quad x''_{\gamma[q]0},$$

тогава изразът в дясната част на равенство (3.19) се умножава с

$$\frac{\mathcal{K}_1(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0})}{p_1(x_{\gamma[q]})p_1(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0})} \quad \text{или} \quad \frac{\mathcal{K}_2(x_{\gamma[q]}, x''_{\gamma[q]0})}{p_2(x_{\gamma[q]})p_2(x_{\gamma[q]}, x''_{\gamma[q]0})}.$$

Когато дадена частица, съответстваща на случайната точка $x_{\gamma[q]}$ създава ново поколение от две частици, съответстващи на точките:

$$x'_{\gamma[q]0} \quad \text{и} \quad x''_{\gamma[q]1},$$

тогава изразът в дясната част на равенство (3.19) се умножава с

$$\frac{\mathcal{K}_3(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0}, x''_{\gamma[q]1})}{p_3(x_{\gamma[q]})p_3(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0}, x''_{\gamma[q]1})}.$$

Ако частицата, съответстваща на точка $x_{\gamma[r]}$ умира, изразът в дясната част на равенство (3.19) се умножава с

$$\frac{\phi(x_{\gamma[r]})}{h(x_{\gamma[r]})}.$$

Така описаната процедура спира, когато всички частици загинат. Случайната величина $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ се записва във вида:

$$(3.20) \quad \Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l) = \frac{g(x)}{\pi_0(x)} \\ \times \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} \frac{\mathcal{K}_1(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0})}{p_1(x_{\gamma[q]})p_1(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0})} \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} \frac{\mathcal{K}_2(x_{\gamma[q]}, x''_{\gamma[q]0})}{p_2(x_{\gamma[q]})p_2(x_{\gamma[q]}, x''_{\gamma[q]0})} \\ \times \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} \frac{\mathcal{K}_3(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0}, x''_{\gamma[q]1})}{p_3(x_{\gamma[q]})p_3(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0}, x''_{\gamma[q]1})} \prod_{x_{\gamma[r]} \in \mathbf{B}} \frac{\phi(x_{\gamma[r]})}{h(x_{\gamma[r]})}$$

с функция на плътността:

$$p_\gamma = \pi_0(x) \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} p_1(x_{\gamma[q]})p_1(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0}) \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} p_2(x_{\gamma[q]})p_2(x_{\gamma[q]}, x''_{\gamma[q]0}) \\ \times \prod_{x_{\gamma[q]} \in \mathbf{A}} p_3(x_{\gamma[q]})p_3(x_{\gamma[q]}, x'_{\gamma[q]0}, x''_{\gamma[q]1}) \prod_{x_{\gamma[r]} \in \mathbf{B}} h(x_{\gamma[r]}), \\ 1 \leq q \leq l-1, \quad 1 < r \leq l.$$

Фактически, интегралното уравнение (3.6), описващо симулирането на нелинеен квантов транспорт на електрони в полупроводници е уравнение с полиномиална нелинейност от вида (3.17) и следователно случайна величина от вида (3.20) може да се използва за оценяване на решението му.

В сила е следното твърдение:

Лема 3.2.2 : *Математическото очакване на сл.в. $\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)$ е равно на функционала $J(u_l) = (g(x), u_l)$, т.е.*

$$M(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l)) = J(u_l) = (g(x), u_l),$$

където с u_l е означено приближението към решението на уравнението с полиномиална нелинейност (3.17), получаващо се от итерационния процес (3.18) до l -тата итерация.

Доказателството е аналогично на Теорема 2.3.1. Ясно е, че ако изберем $g(x) = \delta(x - x_0)$, то фактически сл.в. (3.20) оценява стойността на решението $u_l(x)$ в точка x_0 .

Приближеното намиране на $u_l(x)$ по метода Монте Карло се свежда до осредняването на N на брой реализации на сл.в. (3.20), а именно:

$$J(u_l) \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l))_j.$$

Вероятната грешка е

$$r_N \approx 0.6745\sigma(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l))N^{-1/2},$$

където $\sigma(\Theta_{[g]}(\gamma/\Gamma_l))$ е стандартното отклонение на сл.в. (3.20).

3.3 Монте Карло алгоритми

Преди да представим съответните МК алгоритми, описващи линеен и нелинеен квантов транспорт на електрони, да приведем в по-опростена форма интегралните уравнения (3.6) и (3.7). Предполагаме, че областта на интегриране Ω е кълбо с радиус R . Заменяме вектора $\underline{x} + \underline{y}$ с вектора r' , като използваме сферична координатна система. Нека ъгъл θ да е между векторите \underline{x} и r' , т.е. посоката на вектора \underline{x} да съвпада с направлението определено от третата координата на вектора r' .

При така въведената сферична координатна система получаваме, че $d\underline{y} = r'^2 dr' \sin \theta d\theta d\varphi$, $\theta \in [0, \pi)$, $\varphi \in [0, 2\pi)$.

В израза за ядрото S (вижте равенство (3.4)) само нормата $\|f_{\underline{y}}\|^2$ зависи от r и r' и по-точно е пропорционална на израза:

$$\frac{1}{r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \theta}.$$

Като вземем предвид, че

$$(3.21) \quad \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi \quad \text{и} \quad \int_0^\pi \frac{r'^2 \sin \theta}{r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \theta} d\theta = \frac{r'}{r} \ln \left(\frac{r+r'}{|r-r'|} \right),$$

за интегралните уравнения (3.7) и (3.6), съответно при линейния и нелинейния случаи получаваме:

$$(3.22) \quad u(r, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_0^R c_1 \frac{r'}{r} \ln \left(\frac{r+r'}{|r-r'|} \right) \\ \times [S_1(r', r, t', t'')u(r', t'') - S_2(r, r', t', t'')u(r, t'')] dr' dt'' dt' + \phi(r)$$

и

$$(3.23) \quad u(r, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_0^R c_1 \frac{r'}{r} \ln \left(\frac{r+r'}{|r-r'|} \right) \\ \times \{ [S_1(r', r, t', t'')u(r', t'') - S_2(r, r', t', t'')u(r, t'')] \\ + [S_2(r, r', t', t'') - S_1(r', r, t', t'')]u(r', t'')u(r, t'') \} dr' dt'' dt' + \phi(r),$$

където

$$(3.24) \quad S_1(r', r, t', t'') = S_2(r', r, t', t'') = e^{-(\Gamma_{r'} + \Gamma_r)(t' - t'')} \\ \times \left\{ \cos \left(\frac{\varepsilon_{r'} - \varepsilon_r - \hbar\omega}{\hbar} (t' - t'') \right) (n+1) + \cos \left(\frac{\varepsilon_r - \varepsilon_{r'} - \hbar\omega}{\hbar} (t' - t'') \right) n \right\},$$

а константата c_1 се записва във вида:

$$c_1 = \frac{q^2 \omega}{2\pi \hbar} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right).$$

Да въведем следните означения:

$$U(r, t) = ru(r, t) \quad \text{и} \quad \Phi(r, t) = r\phi(r, t).$$

Уравнения (3.22) и (3.23) могат да се презапишат във вида:

$$(3.25) \quad U(r, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_0^R K_1(r, r', t', t'')U(r', t'') dr' dt'' dt' \\ + \int_0^t \int_0^{t'} \int_0^R K_2(r, r', t', t'')U(r, t'') dr' dt'' dt' + \Phi(r)$$

и

$$(3.26) \quad U(r, t) = \int_0^t \int_0^{t'} \int_0^R K_1(r, r', t', t'') U(r', t'') dr' dt'' dt' \\ + \int_0^t \int_0^{t'} \int_0^R K_2(r, r', t', t'') U(r, t'') dr' dt'' dt' \\ + \int_0^t \int_0^{t'} \int_0^R K_3(r, r', t', t'') U(r, t'') U(r', t'') dr' dt'' dt' + \Phi(r),$$

където

$$K_1(r, r', t', t'') = c_1 \ln \left(\frac{r + r'}{|r - r'|} \right) S_1(r', r, t', t''), \\ K_2(r, r', t', t'') = (-c_1) \frac{r'}{r} \ln \left(\frac{r + r'}{|r - r'|} \right) S_2(r, r', t', t''), \\ K_3(r, r', t', t'') = \frac{c_1}{r} \ln \left(\frac{r + r'}{|r - r'|} \right) (S_2(r, r', t', t'') - S_1(r', r, t', t'')).$$

Областта Ω сега е интервала $(0, R)$. Фактически, уравнения (3.25) и (3.26) се решават при изпълнение на представените ИМК и РМК алгоритми.

За да завършим със смяна на променливите необходимо е да посочим вида на Γ_x . Записваме в сферични координати равенство (3.3), а именно:

$$\Gamma_r = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R \left(\frac{r'^2 \sin \theta}{r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \theta} \right) \frac{e^2 \omega}{4\pi} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \\ \times [\delta(\varepsilon_{r'} - \varepsilon_r + \hbar\omega)(n+1) + \delta(\varepsilon_{r'} - \varepsilon_r - \hbar\omega)n] dr' d\theta d\varphi.$$

Като вземем предвид интегриранията по φ и θ и равенство (3.21), получаваме:

$$(3.27) \quad \Gamma_r = \int_0^R c_2 \left[\frac{r'}{r} \ln \left(\frac{r + r'}{|r - r'|} \right) \right] \\ \times [\delta(r'^2 - r^2 + \omega_1)(n+1) + \delta(r'^2 - r^2 - \omega_1)n] dr',$$

където с ω_1 и c_2 сме означили изразите:

$$\omega_1 = \frac{2m\omega}{\hbar} \quad \text{и} \quad c_2 = \frac{q^2 \hbar^2 \omega}{4m} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right).$$

Използвайки свойството на функцията на Дирак (вижте [1]), а именно:

$$\int \delta(x - x_0) F(x) dx = F(x_0),$$

получаваме следния опростен запис на равенство (3.27):

$$\Gamma_r = \frac{c_2(n+1)}{r} \ln \left(\frac{\sqrt{\omega_1}}{|r - \sqrt{r^2 - \omega_1}|} \right) + \frac{c_2 n}{r} \ln \left(\frac{\sqrt{\omega_1}}{-r + \sqrt{r^2 + \omega_1}} \right).$$

Да представим итерационния Монте Карло алгоритъм за приближено пресмятане на решението на уравнение (3.7) в точка $x = (r, t)$.

Алгоритъм 3.3.1 :

1. **Въвеждаме** начални стойности на величините: ε - критерий за прекъсване на веригата на Марков; $\Theta_l = \phi(r)$, $W := 1$;
2. **Намираме** стойността $x' = (r', t')$ на сл.в. τ с функция на плътността $P(x, x') = p(t', t'')p(r, r')$, където $p(t', t'') = p(t')p(t''/t')$. Стойността t' се избира с плътност $p(t') = \frac{2t'}{t^2}$ в интервала $(0, t)$, докато t'' и r' са стойности на равномерно разпределени случайни величини съответно в интервалите $(0, t')$ и $(0, R)$;
3. **Пресмятаме** ядрата K_1 и K_2 ;
4. **Избираме** независима реализация, α , на равномерно разпределена случайна величина в интервала $(0, 1)$;

5. **Ако** е вярно

$$\left(\frac{|K_1|}{(|K_1| + |K_2|)} \leq \alpha \right)$$

то изпълни:

$$W := W \frac{\text{sign}(K_1)(|K_1| + |K_2|)}{P(x, x')} \quad \text{и} \quad \Theta_l := \Theta_l + W \cdot \phi(x)$$

Отиваме на стъпка 7;

6. **Ако** е вярно

$$\left(\frac{|K_1|}{(|K_1| + |K_2|)} \geq \alpha \right)$$

то изпълни:

$$W := W \frac{-\text{sign}(K_2)(|K_1| + |K_2|)}{P(x, x')} \quad \text{и} \quad \Theta_l := \Theta_l + W \cdot \phi(x);$$

7. **Повтаряме** стъпки от 2 до 5 или 6 докато $|W| \leq \varepsilon$ и спираме изпълнението на алгоритъма.

Алгоритъмът 3.3.1 пресмята една стойност на сл.в. (3.15). За да намерим приближено решението на уравнение (3.25) в точка $x = (r, t)$ е необходимо да изпълним алгоритъма N -пъти и да осредним получените стойности на случайната величина. Изборът кое от двете ядра се появява при реализацията на веригата на Марков се извършва в стъпки 5 и 6.

Вторият алгоритъм, който се нарича разклонен Монте Карло (РМК) пресмята една стойност на сл.в. (3.20). За да оценим решението на уравнение (3.26) в точка $x = (r, t)$ е необходимо също да изпълним алгоритъма N -пъти и след това да осредним получените стойности на случайната величина.

Алгоритъм 3.3.2 :

1. **Присвояваме** стойност 1 на сл.в.

$$\Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) := 1$$

и записваме точка $x = (r, t)$, от която стартира разклонения стохастичен процес в масива \mathbf{A} , съдържащ тези точки, които генерират ново поколение от точки;

2. **Намираме** стойността $x' = (r', t')$ на сл.в. τ с функция на плътността $P(x, x') = p(t', t'')p(r, r')$, където $p(t', t'') = p(t')p(t''/t')$. Стойността t' се избира с плътност $p(t') = \frac{2t'}{t^2}$ в интервала $(0, t)$, докато t'' и r' са стойности на равномерно разпределени случайни величини съответно в интервалите $(0, t')$ и $(0, R)$.
3. **Избираме** независима реализация, α , на равномерно разпределена случайна величина в интервала $(0, 1)$.

4. Ако $(\alpha < h(x))$, то изпълни:

$$\Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) := \Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) \frac{\phi(x)}{h(x)}.$$

Изваждаме точка $x = (r, t)$ от масива \mathbf{A} . Това е случаят, при който $x = (r, t)$ умира в разклонения стохастичен процес.

В противен случай изпълни:

4.1. Ако е вярно $(\alpha < h(x) + p_1(x))$, то изпълни:

$$\Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) := \Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) \frac{K_1(r, r', t', t'')}{p_1(x)p(t', t'')p(r, r')}.$$

Записваме точка $x' = (r', t'')$ в масива \mathbf{A} и отиваме на стъпка 5.

4.2. Ако е вярно $(\alpha < h(x) + p_1(x) + p_2(x))$, то изпълни:

$$\Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) := \Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) \frac{K_2(r, r', t', t'')}{p_2(x)p(t', t'')p(r, r')}.$$

Записваме точка $x'' = (r, t'')$ в масива \mathbf{A} и отиваме на стъпка 5.

4.3. Ако е вярно $(\alpha < h(x) + p_1(x) + p_2(x) + p_3(x) = 1)$, то изпълни:

$$\Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) := \Theta_{[\delta]}(\gamma/\Gamma_l) \frac{K_3(r, r', t', t'')}{p_3(x)p(t', t'')p(r, r')}.$$

Записваме точките $x' = (r', t'')$ и $x'' = (r, t'')$ в масива \mathbf{A} .

5. Повтаряме стъпки 2, 3 и 4 за всяка точка от масива \mathbf{A} .

6. Спираме алгоритъма, когато всички точки от масива \mathbf{A} са извадени.

Вероятностите за преход е необходимо да се избират така, че разклонения стохастичен процес да е сходящ. Един добър избор е тези вероятности да бъдат пропорционални на ядрата.

3.4 Числени резултати

Алгоритмите 3.3.1 и 3.3.2 са реализирани на програмен език C^{++} и са тествани върху компютър SUN Sparkstation и Cray Origin 2000.

Представените числени резултати са за случая, когато температурата на кристалната решетка е $0^\circ C$. При тази температура, класическото поведение на електроните се определя от закона за запазване на енергията. Кристалната решетка е с енергия нула. Електроните могат само да и отдават енергия, губейки на свой ред енергия равна на енергията на фонона $\hbar\omega$. Електрони с енергия над енергията на началното разпределение не могат да се появят в процеса на класическата еволюция.

За начално условие сме използвали функцията

$$\phi(r) = e^{-(b_1 r^2 - b_2)^2},$$

където константите $b_1 = 40.64$ и $b_2 = 6.832$ са взети както в [63]. Физическите параметри сме ги задали както следва:

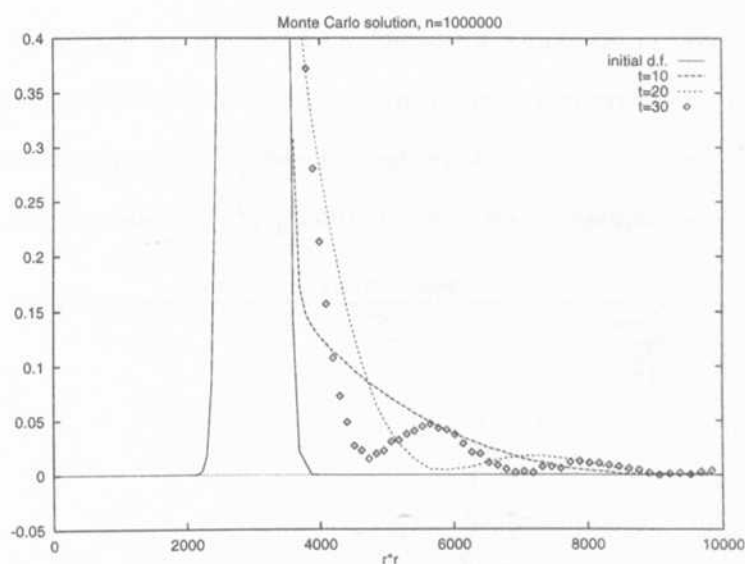
$$\omega = 5.5460 \times 10^{13}, \quad \hbar = 1.05 \times 10^{(-34)}, \quad m = 57.33 \times 10^{(-33)},$$

$$q = 1.6 \times 10^{(-19)}, \quad \varepsilon_\infty = 12.9 \quad \text{и} \quad \varepsilon_s = 10.92.$$

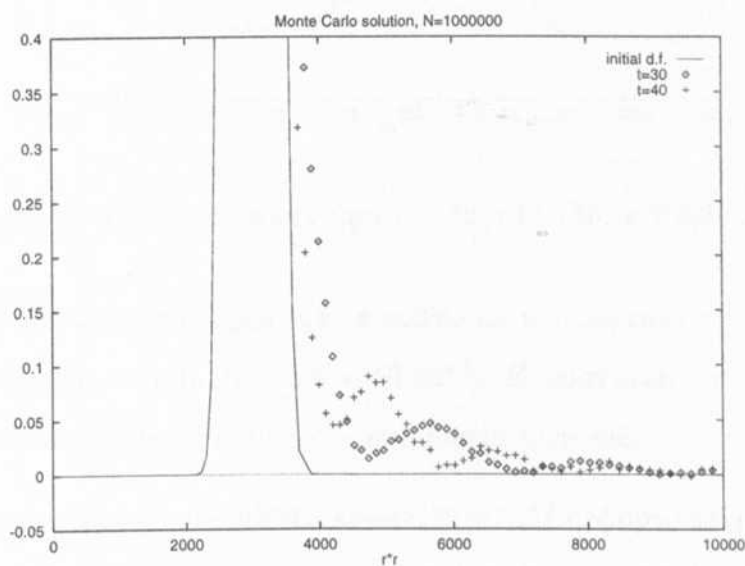
Резултатите показват, че функцията описваща еволюцията на разпределението на електрона е с по-малка амплитуда от тази на началното разпределение. Тази амплитуда намалява при по-големи еволюционни времена.

Резултатите при първите четири фигури са получени при изпълнение на Алгоритъм 3.3.1.

На Фигури 3.2 и 3.3 е показано разпределението на функцията $U(r^2)$ за еволюционни времена 10, 20, 30 и 40 фемтосекунди. Интервалът, в който са пресметнати стойностите на решението U е $(0, R)$, където $R = 100 \times 10^7 m^{-1}$. Използвани



Фигура 3.2: Монте Карло решения при $t = 10, 20, 30$, с ИМК алгоритъм.

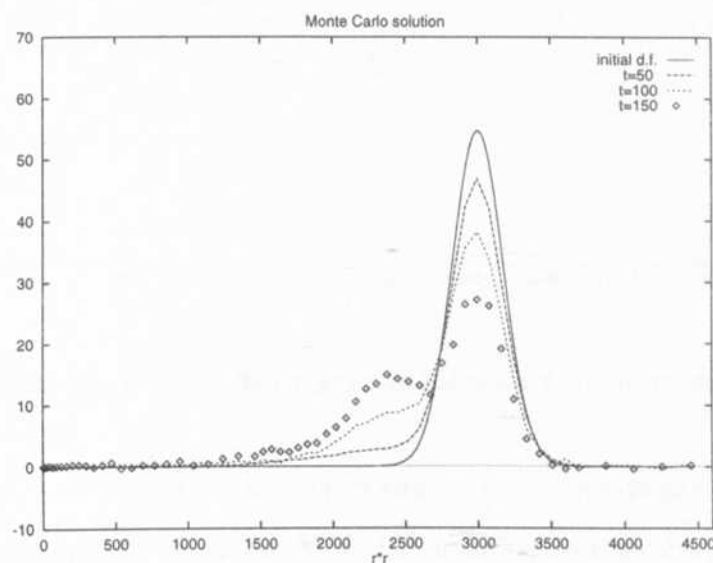


Фигура 3.3: Монте Карло решения при $t = 30, 40$, с ИМК алгоритъм.

са $N = 10^6$ реализации на сл.в. (3.15) в 50 фиксирани точки в посочения интервал около началното условие, където се появяват електрони в неклассическия случай. Квантовото решение показва появата на електрони в класически недостъпната област от енергии. Причината за това е, че за такива малки еволюционни времена закона за запазване на енергията не е в сила. Този ефект, заедно с появата на

осцилации с увеличаване на времето са типични характеристики на квантовия транспорт. Резултатите са еквивалентни на представените в [63] по метода Рунге-Кута, като изчислителното време на нашия алгоритъм е два пъти по-добро.

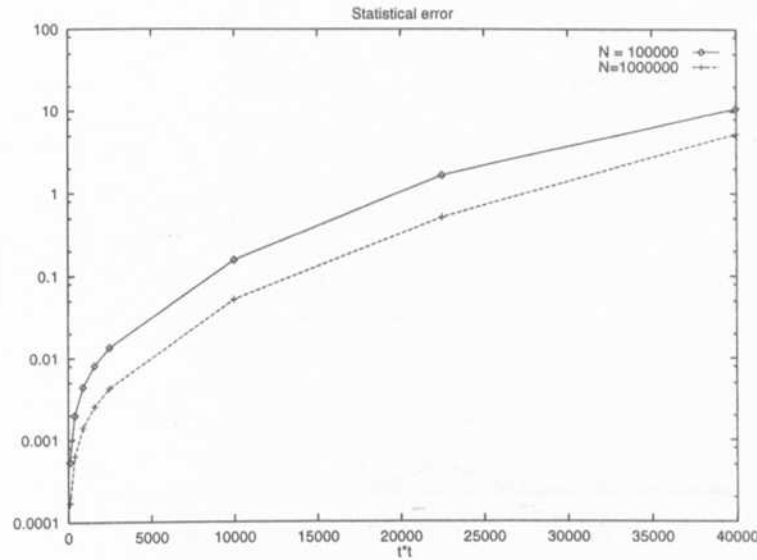
На Фигура 3.4 е показано $U(r^2)$ разпределението за еволюционни времена 50,



Фигура 3.4: Монте Карло решения при $t = 50, 100, 150$, с ИМК алгоритъм.

100 и 150 фемтосекунди. Интервалът, в който са пресметнати стойностите на решението U е $(0, R)$, където $R = 66 \times 10^7 m^{-1}$. Използвани са реализации на сл.в. (3.15) в 88 фиксирани точки около началното условие.

С нарастване на еволюционното време, $t = 150 fs$, формата на първия пик във функцията на разпределение се приближава до класическия случай, а числените резултати показват, че при това нарастване на времето трудоемкостта на алгоритъма се увеличава драстично. Докато за $t = 50 fs$ необходимият брой за добра статистика е $N = 10^5$ реализации на сл.в. (3.15), при $t = 100 fs$, реализациите на сл.в. са $N = 10^6$, а при $t = 150 fs$, реализациите са $N = 10^7$ (вижте Фигура 3.4). Ще отбележим, че за време $t = 200 fs$, реализации от порядъка на $N = 10^8$ са вече недостатъчни. Това се дължи на нарастването на дисперсията на сл.в. с нарастване на еволюционното време. Този извод следва непосредствено

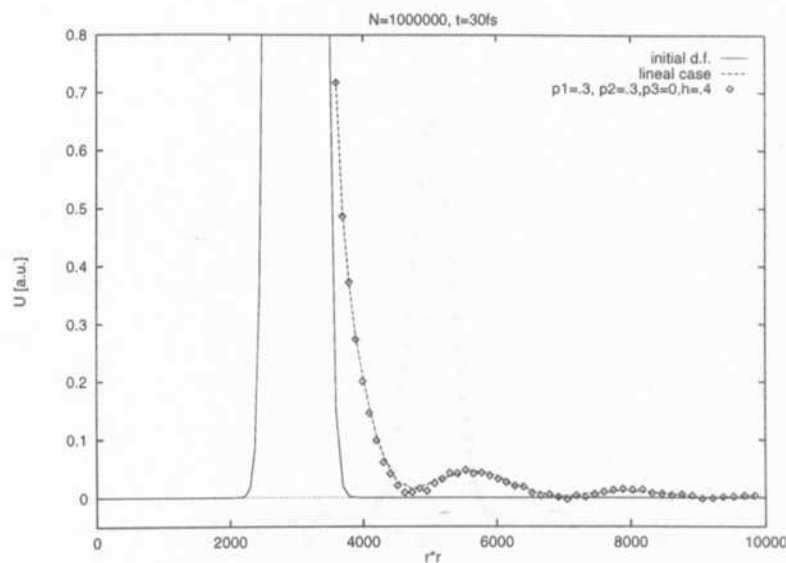


Фигура 3.5: Поведение на статистическата грешка с нарастване на времето.

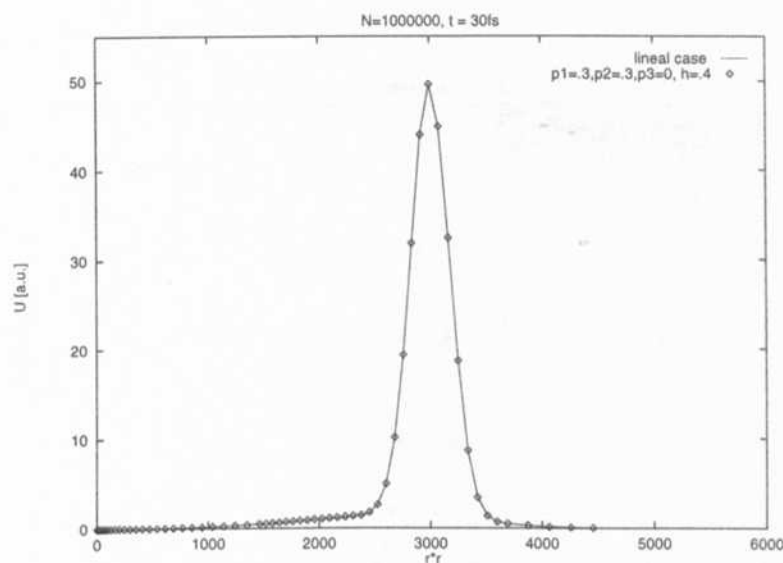
от Фигура 3.5, където в логаритмична скала са показани резултати за статистическата грешка, при $N = 10^5$ и $N = 10^6$ реализации на сл.в. Фактически, това е осреднената стойност на статистическата грешка, която се получава в съответните точки, в които намираме решението на задачата.

На останалите фигури са сравнени резултати за решението, получени с използване на ИМК Алгоритъм (3.3.1) и РМК Алгоритъм (3.3.2).

Като необходима първа стъпка при тестовете за сравняване на двата алгоритъма сме поставили вероятността p_3 да е равна на нула. Това е вероятността, при която се генерират нови две точки в разклонения стохастичен процес и е свързана с нелинейния член на уравнението с полиномиална нелинейност. Резултатите в този случай са показани на Фигури 3.6 и 3.7 и извода е, че използването на Алгоритъм 3.3.2 за намиране на решението е напълно коректно. Вероятностите за преход при първото и второто ядро са $p_1 = 0.3$ и $p_2 = 0.3$, а вероятността за загиване на частица е $h = 0.4$. На Фигура 3.6 е разглеждан интервал от енергии около началното условие, където решението изцяло е с квантово поведение. На Фигура 3.7 представеното квантово решение съответства на



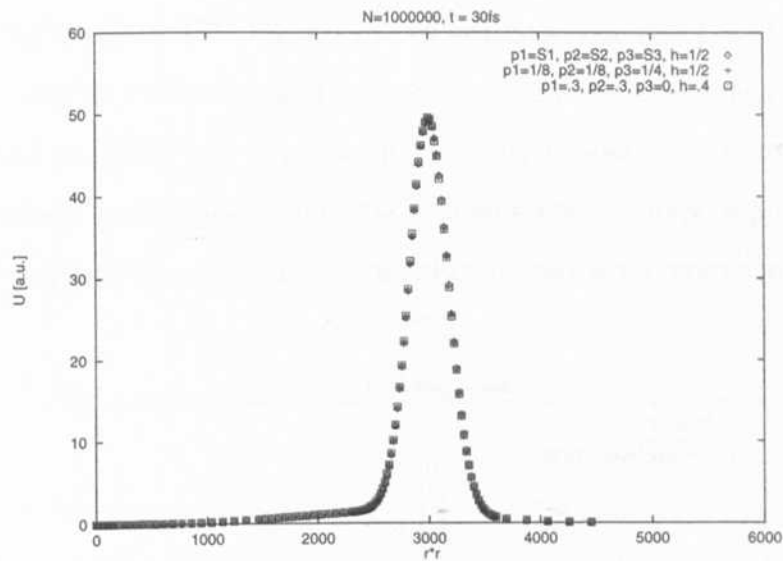
Фигура 3.6: Сравняване на МК решения, при ИМК и РМК алгоритми.



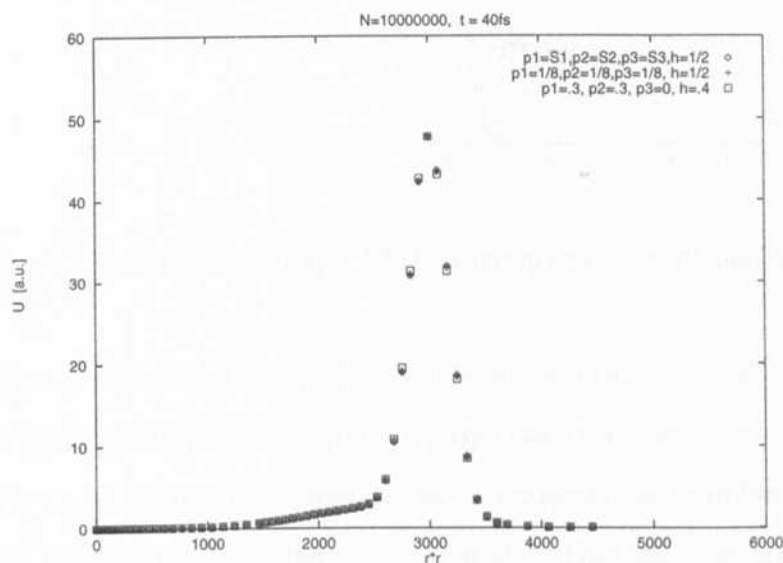
Фигура 3.7: Сравняване на МК решения, при ИМК и РМК алгоритми.

класически достъпната област от енергии. Еволюционното време е $t = 30fs$, а броя на реализациите на случайните величини (3.15) и (3.20) са $N = 10^6$.

На Фигури 3.8 и 3.9 са представени резултати за решението при тестване на РМК алгоритъм с различни вероятности. Използваните еволюционни времена са съответно $t = 30fs$ и $t = 40fs$. На тези фигури със знака (\diamond) е означено



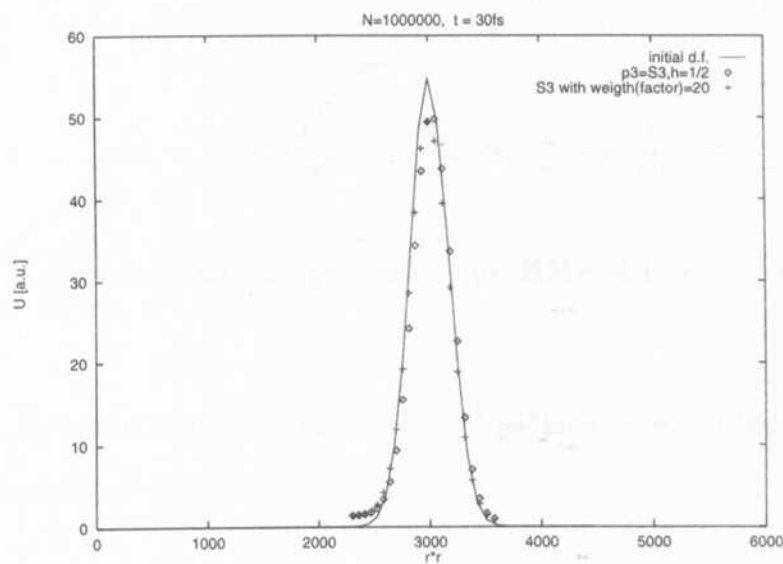
Фигура 3.8: МК решения, с РМК алгоритъм при различни вероятности за преход.



Фигура 3.9: МК решения, с РМК алгоритъм при различни вероятности за преход.

решението, получено с вероятности пропорционални на ядрата, със знака (+) - решението е получено при стойности $p_1 = 1/8$, $p_2 = 1/8$, $p_3 = 1/4$. Числените тестове са сравнени със случая, когато вероятността $p_3 = 0$. Броя на реализаци-

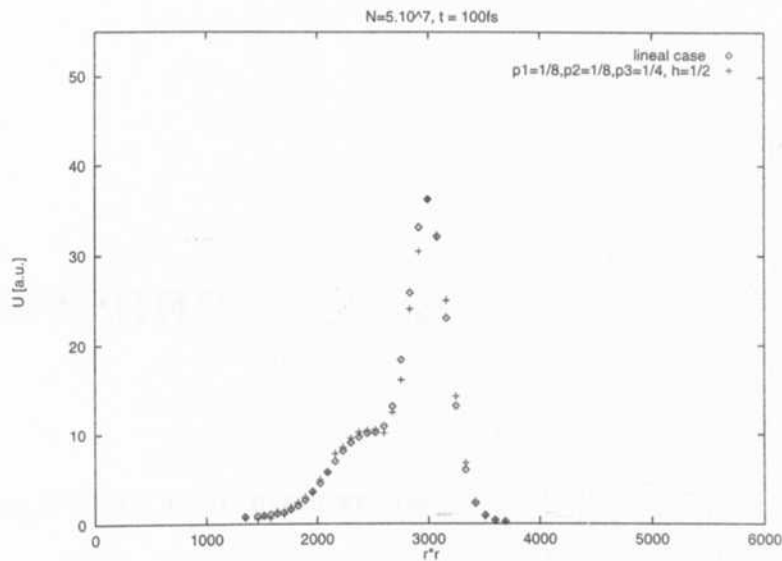
ите на сл.в. (3.20) е $N = 10^6$. Разликите са незначителни за $t = 30fs$ и $t = 40fs$. Това може да се обясни по следния начин: За малки времена факторът $t' - t''$ в аргументите на първите две ядра ги прави почти равни. Третото ядро, което зависи от разликата на първите две има незначителен принос в уравнението. За да се демонстрира това, може да се увеличи приноса на третото ядро с даден фактор.



Фигура 3.10: МК решения, с РМК алгоритъм и теглови фактор.

На Фигура 3.10 със знака (+) е означено решението, получено с фактор 20, с който е умножено третото ядро и резултатът е сравнен с решението от Фигура 3.8, като са използвани вероятности пропорционални на ядрата. Числените тестове са сравнени с началното условие. Въпреки че, използването на допълнително тегло при третото ядро е нереалистичен случай от гледна точка на физиката, този тест показва ефекта от нелинейността и демонстрира тенденцията на решението. Разликата в решенията от ефекта на нелинейност ясно се очертава при използване на по-големи стойности за еволюционното време.

На Фигура 3.11 са показани резултати при използване на двата алгоритъма сравняващи линейното с нелинейното за време $t = 100fs$. Реализациите на



Фигура 3.11: Сравняване на МК решения, при ИМК и РМК алгоритми за $t = 100fs$.

съответните случайни величини са $N = 5.10^7$. Разликите, по-малки от 10%, се появяват в склоновете на главния пик.

3.5 Изводи

Представените Монте Карло алгоритми успешно се прилагат за решаване на уравнения, описващи симулирането на линеен и нелинеен квантов транспорт на електрони в полупроводници. За малки еволюционни времена ефекта от нелинейност е незначителен, което се дължи на структурата на ядрото. При увеличаване на еволюционното време се наблюдава и съответния принос на нелинейната част към решението, но трудоемкостта на двата алгоритъма се увеличава значително. Появява се необходимостта от разработване на нови ефективни Монте Карло алгоритми за решаване на поставената задача. Като се вземе предвид високата паралелна ефективност на МК алгоритмите, използването на паралелни машини е за предпочитане.

Заклучение

Съществени резултати в дисертацията са:

1. Предложен е и теоретично е изследван итерационен Монте Карло алгоритъм за решаване на елиптични гранични задачи, възникващи при пренос на замърсители. Направено е сравнение между изчислителната сложност на предложения алгоритъм, използващ процес *блуждаене по кълба* и изчислителната сложност на алгоритмите, използващи процес *блуждаене по малки сфери* и са намерени условия за балансиране на систематичната и статистическа грешки.
2. Доказана е оптимална по порядък оценка за ефективността на метода на *селекцията* (метод на Нойман). Намерена е връзка между параметрите на елиптичното частно диференциално уравнение и радиуса на максималното кълбо, което може да се впише в областта и е доказано, че тази връзка може да се използва за намаляване на изчислителната сложност на алгоритъма.
3. Предложен е и теоретично е изследван разклонен Монте Карло алгоритъм за решаване на интегрални уравнения с полиномиална нелинейност. Намерени са плътности за случайната величина, за които дисперсията и е минимална и е предложен ефективен Монте Карло алгоритъм с използване на *почти оптимална* плътност. Показано е, че при дискретизацията интегрални уравнения с полиномиална нелинейност се свеждат до системи

нелинейни уравнения, които също могат да се решат с помощта на Монте Карло метод.

4. За първи път са реализирани итерационен и разклонен Монте Карло алгоритми за симулиране, съответно на линеен и нелинеен квантов транспорт на електрони в полупроводници. Представените числени резултати показват стабилност на решението при малки еволюционни времена.
5. Разработени са последователни и паралелни програми, реализиращи изследваните алгоритми. Показана е висока изчислителна ефективност на суперкомпютъра IBM SP1 с 32 процесора при паралелна реализация на алгоритмите в програмната среда ATHAPASCAN.

Получените теоретични резултати и алгоритъма за решаване на гранични задачи за елиптични частни диференциални уравнения могат да се използват при моделиране пренос на замърсители. Резултатите и алгоритмите за решаване на интегрални уравнения с полиномиална нелинейност намират приложение при решаване на квантово-кинетични уравнения, описващи пространствено хомогенен квантов транспорт в полупроводници.

Библиография

- [1] Владимиров В.С., *Уравнения математической физики*, Наука, Москва, 1988.
- [2] Елепов Б.С., Кронберг А.А., Михайлов Г.А., Сабельфельд К.К., *Решение краевых задач методом Монте Карло*, Новосибирск, Наука, 1980.
- [3] Елепов Б.С., Михайлов Г.А., *К теории оценок метода Монте Карло, связанных с „блужданием по сферам“*, Сибирский матем. журнал, Том 36, № 3, 1995, стр. 543–550.
- [4] Ермаков С.М., Михайлов Г.А., *Статистическое моделирование*, Наука, Москва, 1982.
- [5] Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С., *Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики*, Наука, Москва, 1984.
- [6] Климов Г.П., *Теория вероятностей и математическая статистика*, Наука, Москва, 1983.
- [7] Марчук Г.И., *Методы расчета ядерных реакторов*, Госатомиздат, Москва, 1961.
- [8] Марчук Г.И., *Метод Монте Карло в проблеме переноса излучений*, Сб. под ред. Марчука, Атомиздат, Москва, 1967.

- [9] Михайлов В.П., *Уравнения с частными производными*, Наука, Москва, 1983.
- [10] Михайлов Г.А., *Оптимизация весовых методов Монте Карло*, Наука, Москва, 1987.
- [11] Обретенов А., *Вероятности и статистически методи*, Наука и изкуство, София, 1978.
- [12] Сипин А.С., *Решение первой краевой задачи для уравнения эллиптического типа методом Монте Карло*, Методым Монте Карло в вычислительной математике и математической физике, Новосибирск, 1979, стр. 113–119.
- [13] Стойнов Й., Миразчийски И., Игнатов Ц., Танушев М., *Ръководство за упражнения по теория на вероятностите*, Наука и изкуство, София, 1976.
- [14] Соболев И.М., *Численные методы Монте Карло*, Наука, Москва, 1973.
- [15] Тиханов А.Н., Самарски А.А., *Уравнения математической физики*, Наука, Москва, 1977.
- [16] Askew C.R., Carpenter D.B., Chalker I.T., Hey A.J.R., Moore M., Nicole D.A. and Pritchard D.J., *Monte Carlo simulation on transputer arrays*, Parallel Computing, Vol.6, 1988, pp. 247–258.
- [17] Bitzadze A.V., *Equations of the Mathematical Physics*, Nauka, Moscow, 1982.
- [18] Camescasse F. et al, *Physical Review Lett.*, Vol. 77, pp. 27, 1996.
- [19] Curtiss J.H., *Monte Carlo methods for the iteration of linear operators*, J. Math. Phys., Vol. 32, No 4, 1954, pp. 209–232.
- [20] Dimov I.T., *Minimization of the probable error for Monte Carlo methods*, Application of Mathematics in Technology. Differential equations and applications., Varna 1986, Sofia 1987, pp. 161–164.

- [21] Dimov I.T., *Efficiency estimator for the Monte Carlo algorithms*, in: Bl. Sendov, R. Lazarov and I. Dimov, Eds., Proc. of the Intern. Conf. on Num. Meth. and Appl., Sofia, 1988, Publ. House of the Bulg. Acad. Sci., Sofia, 1989, pp. 111–115.
- [22] Dimov I., Tonev O., *Monte Carlo numerical methods with overconvergent probable error*, Proc. Intern. Conf. on Numerical Methods and Appl., Publ. House of the Bulg. Acad. Sci., Sofia, 1989, pp. 116–120.
- [23] Dimov I., Tonev O., *Performance Analysis of Monte Carlo Algorithms for Some Models of Computer Architectures*, in: Bl. Sendov, I. Dimov, Eds., International Youth Workshop on Monte Carlo Methods and Parallel Algorithms - Primorsko, World Scientific, Singapore, 1990, pp. 91–95.
- [24] Dimov I.T., *Minimization of the probable error for some Monte Carlo methods*, Proc. of the Summer School on Mathematical Modelling and Scientific Computations, Publ. House of the Bulg. Acad. Sci., 1991, pp. 159–170, CINTI, Reg. No II 1147, pp. 12
- [25] Dimov I., Tonev O., *Monte Carlo algorithms: performance analysis for some computer architectures*, J. of Comp. and Appl. Math., Vol. 48, 1993, pp. 253–277.
- [26] Dimov I., Gurov T., *Parallel Monte Carlo Algorithms for Calculation Integrals*, Proc. WP&DP, Edt. K.Boyanov, Sofia, 1993, pp. 426–434.
- [27] Dimov I., Karaivanova A., Kuchen H., Stoltze H., *Monte Carlo algorithms for elliptic differential equations. Data parallel functional approach*, Journal of Parallel Algorithms and Applications, Vol. 9, 1996, pp. 39–65.
- [28] Dimov I., Jaekel U., Vereecken H., *A Numerical Approach for Determination of Sources in Transport Equations*, Computers Math. Applic., Vol. 32, No 5, 1996, pp. 31–42.

- [29] Dimov I., Jaekel U., Vereecken H., Wendt D., *A Numerical Approach for Determination of Sources in Reactive Transport Equations*, in: Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 1996, (H. Niederreiter, P.Hellekalek, G. Larcher, P. Zinterhof eds), Lecture Notes in Statistics 127, Springer-Verlag New York, 1998, pp. 189–204.
- [30] Dimov I., Karaivanova A., Yordanova P., *Monte Carlo Algorithms for calculating eigenvalues*, in: Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 1996, (H. Niederreiter, P.Hellekalek, G. Larcher, P. Zinterhof eds), Lecture Notes in Statistics 127, Springer-Verlag New York, 1998, pp. 205–220.
- [31] Dimov I.T., Gurov T.V., *Estimates of the computational complexity of iterative Monte Carlo algorithm based on Green's function approach*, Mathematics and Computers in Simulation, Vol. 47, No 2-5, 1998, pp. 183–199.
- [32] Dimov I.T., Gurov T.V., *Monte Carlo algorithm for solving integral equations with polynomial non-linearity. Parallel implementation*, Lecture Notes, N.M. Yanev ed., SCT Publishing, pp. 106–120, (to appear in 1999).
- [33] Dupach V., *Stochastike pocetni metody*, Cas.pro pest. mat., 81, No 1, 1956, pp. 55–68.
- [34] Ermakov S.M., *The Monte Carlo method for iterating nonlinear operators*, Dok. Akad. Nauk SSSR, Vol.204, No 2, 1972, pp. 271–274.
- [35] Ermakov S.M., *On summation of series connected with integral equation*, Vestnik Leningrad Univ. Math., Vol. 16, 1984, pp. 57–63.
- [36] Gurov T., *Minimization of the Probable Error of the Monte Carlo method for Solving of Nonlinear Integral Equation*, J. Mathematica Balkanica, vol. 6, 1992, pp. 237–249.

- [37] Gurov T., *Monte Carlo Methods for Nonlinear Equations*, Advances in Num. Methods and Appl., I.T.Dimov, Bl. Sendov, P.S. Vassilevski eds., World Scientific, 1994, pp. 127–135.
- [38] Gurov T., Nedjalkov M., Dimov I., *Monte Carlo Branch Method for Simulation of Nonlinear Electron Quantum Kinetics in one-band Semiconductor*, Recent Advances in Numerical Methods and Applications, O. Iliev, M. Kaschiev, Bl. Sendov, P.S. Vassilevski eds., World Scientific, Singapore, pp. 248–256, (to appear in 1999).
- [39] Halton J.H., *Sequential Monte Carlo Techniques for the Solution of Linear Systems*, TR 92-033, University of North Carolina at Chapel Hill, Department of Computer Science, pp. 46, 1992.
- [40] Hammersley J.M., Handscomb D.C., *Monte Carlo methods*, John Wiley & Sons inc., New York, London, Sydney, Methuen, 1964.
- [41] Heinrich S., Mathe P., *The Monte Carlo complexity of Fredholm integral equations*, Mathematics of Comp., Vol.60, No 201, 1993, pp. 257–278.
- [42] Jacoboni C., Poli P., Rota L., *Solid State Electronics*, V31, p523, 1988
- [43] Kahn H., *Random sampling (Monte Carlo) techniques in neutron attenuation problems*, Nucleonics 6, No 5, 1950, pp. 27–33 ; No 6, 1950, pp. 60–65.
- [44] Mascagni M., *SPRNG: A Scalable Library for Pseudorandom Number Generation*, Recent Advances in Numerical Methods and Applications, O. Iliev, M. Kaschiev, Bl. Sendov, P.S. Vassilevski eds., World Scientific, Singapore, pp. 275–286, (to appear in 1999).
- [45] Mikhailov G.A., Cheshkova A.F., *Monte Carlo solution of the Dirichlet problem for elliptic with variable parameters*, Russian Acad. Sci. Dokl. Math., Vol., 49, No 3, 1994, pp. 587–591.

- [46] Mikhailov G.A., *New Monte Carlo Methods with Estimating Derivatives*, VSP Ufrecht, The Netherlands, 1995.
- [47] Metropolis N., Ulam S.M., *The Monte Carlo methods*, J. Amer. Statist. Assoc., 44, No 247, 1949, pp. 335–341.
- [48] Miranda C., *Equazioni alle derivate parziali di tipo ellittico*, Springer-Verlag, Berlin, 1955.
- [49] Muller M., *Some Continuous Monte Carlo Methods for the Dirichlet Problem*, Ann. Math. Stat., Vol. 27, No 3, 1956, pp. 569–589.
- [50] Nedjalkov M., Vitanov P., *Solid State Electronics*, Vol. 32, pp. 10, 1989.
- [51] Nedjalkov M., Vitanov P., *COMPEL*, Vol. 10, No 4, 1991.
- [52] Nedjalkov N., Dimov I., Rossi F., Jacoboni C., *Convergency of the Monte Carlo Algorithm for the Solution of the Wigner Quantum-Transport Equation*, J. of Mathl and Computer Modelling, Vol. 23, No 8/9, 1996, pp. 159–166.
- [53] Nedjalkov N., Dimov I., Bondone P., Brunetti R., Jacoboni C., *Using the Wigner Function for Quantum Transport in Device Simulation*, J. of Mathl and Computer Modelling, Vol. 25, No 12, 1997, pp. 33–53.
- [54] Nedjalkov M., Gurov T., Dimov I., *Statistical modelling of pulse excited electron quantum kinetics in one-band semiconductor*, Mathematics and Computers in Simulation, Vol. 47, No 2-5, 1998, pp. 391–402.
- [55] Niederreiter H., *On the existence of uniformly distributed sequences in compact spaces*, Compositio Math., 25, 1972, pp. 93–99.
- [56] Niederreiter H., Kuipers L., *Uniform Distribution of Sequences*, Interscience Tracts, John Wiley and Sons, New York, 1974.

- [57] Plateau B., *APACHE: Algorithmique Parallele et pArtagede CHargE*, Raport APACHE, Institut IMAG, Grenoble, #1, pp. 28, 1994.
- [58] Plotnikov M. Yu., *Iterative solution of Dirichlet nonlinear problem by application of the Helmholtz equation*, Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, Vol. 10, No 6, 1995, pp. 535–548.
- [59] Rascoli M., Bondone P., Brunetti R., Jacoboni C., *Wigner paths for electrons interacting with phonons*, Physical Review B, Vol. 58, No 7, 1998, pp. 3503–3506.
- [60] Rota L., Jacoboni C., Poli P., *Solid State Electronics*, Vol. 31, pp. 523, 1989
- [61] Rubinstein R.Y., *Simulation and the Monte Carlo Method*, John Wiley & Sons Inc., 1981.
- [62] Sabelfeld K.K., *Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems*, Springer Verlag, Berlin - Heidelberg - New York - London, 1991.
- [63] Schilp J., Kuhn T., Mahler G., *Electron-phonon quantum kinetics in pulse excited semiconductors: Memory and renormalization effects.*, Physical Review B, Vol. 50, No 8, 1994, pp. 5435–5447.
- [64] Schmid W., *The exact quality parameter of nets derived from Sobol' and Niederreiter sequences*, Recent Advances in Numerical Methods and Applications, O. Iliev, M. Kaschiev, Bl. Sendov, P.S. Vassilevski eds., World Scientific, Singapore, pp. 287–295, (to appear in 1999).
- [65] Srinivasan A., Ceperley D., Mascagni M., *Testing Parallel Random Number Generators*, in: Proceedings of the Third International Conference on Monte Carlo and Quasi Monte Carlo Methods in Scientific Computing, J. Spanier et al. eds., Springer-Verlag, Berlin, 1999.

- [66] Thompson E.A., *Sampling and ascertainment in genetic epidemiology; a tutorial review*, Technical report No. 243, Dep. of Stat., University of Washington, pp. 54, 1993.
- [67] Thompson E.A., *Monte Carlo in Genetic Analysis*, Technical report No. 294, Dep. of Stat., University of Washington, pp. 61, 1995.
- [68] Traub J.F., Wozniakowski H., *The Monte Carlo with a Pseudo-random Generator*, Mathematics of Computation, Vol. 58, 1992, pp. 303–339.
- [69] <http://random.mat.sbg.ac.at/athers/rando.html>
- [70] <http://www.ncsa.uiuc.edu/Apps/SPRNG>