МАТЕМАТИКА ИЛИМДЕРИ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
MATHEMATICAL SCIENCES

DOI:10.26104/NNTIK.2023.90.24.001

Аблабеков Б.С., Рахманкулов Б.З., Райымберди кызы М.

ДИФФУЗИЯНЫН ТЕНДЕМЕСИ ҮЧҮН БИРИНЧИ БАШТАПКЫ-ЧЕКТИК МАСЕЛЕНИ МОНТЕ-КАРЛО ЫКМАСЫ МЕНЕН ЧЫГАРУУ

Аблабеков Б.С., Рахманкулов Б.З., Райымберди кызы М.

РЕШЕНИЕ ПЕРВОЙ НАЧАЛЬНО-КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

B. Ablabekov, B. Rakhmankulov, Raiymberdi kyzy M.

SOLUTION OF ONE INITIAL-BOUNDARY DIFFUSION PROBLEM BY THE METHOD MONTE CARLO

УДК: 519.676

Физиканын жалпы закондорунун негизинде алынган диффузиянын дифференциалдык теңдемеси диффузия процесси жүрүп жаткан телонун каалаган чекитинде концентрациясынын убакыт боюнча жана мейкиндиктеги өзгөрүшүнүн ортосундагы байланышты орното тургандыгы белгилүү. Иште диффузиялык теңдемеси үчүн баштапкы-чектик маселе каралат. Бул маселени чечүү үчүн диффузиялык теңдеме үчүн фундаменталдык чыгарылышы жана Грин функциясы колдонулат жана анын жардамы менен бул маселенин чыгарылышы алынат. Чыгарылыш Монте-Карло ыкмасы менен тургузулат. Мындан тышкары, Монте-Карло ыкмасын колдонуу менен, чыгарылыштын жана анын туундуларынын асимптотикалык аралашпаган баалоорун алууга болот, ошондой эле кокустук параметрлери менен чечимдин ыктымалдык моменттерин баалоого болот. Диффузия теңдемелери үчүн биринчи баштапкы-чек ара маселесин чечүү үчүн көз каранды тесттер ыкмасын колдонуу менен Монте-Карло методу үчүн эффективдүү алгоритм сунушталган.

Негизги сөздөр: *диффузия маселеси, баштапкы чектик маселе, статистикалык ыкмалар, диффузиянын теңдемеси, Монте-Карло ыкмасы, жакындаштырылган чыгарылыштар.*

Известно, что дифференциальное уравнение диффузии, выведенное на основе общих законов физики, устанавливает связь между временным и пространственным изменением концентрации в любой точке тела, в которой происходит диффузионный процесс. В работе рассматривается начально-краевая задача для уравнения диффузии. Для решения этой задачи используется фундаментальное решение, и функция Грина для уравнения диффузии и с ее помощью представлена решения этой задачи. С помощью метода Монте-Карло построена решение. Кроме того, с помощью метода Монте-Карло можно получить асимптотически несмешанные оценки решения и ее производных, а также оценить вероятностные моменты решения со случайными параметрами. Предлагается эффективный алгоритм метода Монте-Карло для решения первой начально-краевой задачи для уравнений диффузии с использованием техники зависимых испытаний.

Ключевые слова: *диффузионная задача, начально-краевая задача, статистические методы, уравнение диффузии, метод Монте-Карло, приближённые решения.*

It is known that the differential equation of diffusion, derived on the basis of the general laws of physics, establishes a connection between the temporal and spatial changes in concentration at any point in the body where the diffusion process occurs. The paper considers an initial-boundary value problem for the diffusion equation. To solve this problem, the fundamental solution and the Green's function for the diffusion equation are used, and with its help, solutions to this problem are presented. A solution is constructed using the Monte Carlo method. In addition, using the Monte Carlo method, one can obtain asymptotically mocked estimates of the solution and its derivatives, as well as estimate the probabilistic moments of the solution with random parameters. An efficient algorithm for the Monte Carlo method is proposed for solving the first initial-boundary value problem for diffusion equations using the technique of dependent tests.

Key words: *diffusion problem, initial boundary value problem, statistical methods, diffusion equation, Monte Carlo method, approximate solutions.*

Введение. В области $\Omega_T = \{(x,t): 0 < x < b,\, 0 < t \le T\}$ рассмотрим первую начально-краевую задачу для одномерного уравнения диффузии

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = A\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - B\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}, \quad (x,t)\in\Omega_T, \tag{0.1}$$

$$C(x,0) = c_0(x), \quad 0 \le x \le b, \tag{0.2}$$

$$C(0,t) = \mu_1(t), \quad C(b,t) = \mu_2(t), \quad 0 \le t \le T, \tag{0.3}$$

где $A, B > 0 -$ const.

Уравнение диффузии относится к уравнению параболического типа.

Существуют задачи вычислительного характера, которые в своей постановке не связаны с теорией вероятности, но к которым хорошо применим метод Монте-Карло. Наиболее типичный пример – это задачи для уравнений параболического типа (основной пример - уравнение диффузии). Решения этих уравнений тесно связаны с характеристиками некоторых случайных процессов диффузионного типа. Поэтому решение подобных уравнений удобно сводится к моделированию таких процессов. Способ такого сведения показан в [l]. Основы метода Монте-Карло изложены в работах [1-5].

Сделав замену неизвестной функции подстановкой $C(x,t) = e^{\frac{B}{2A}x - \frac{B^2}{2A}t} u(x,t)$ относительно функции $u(x,t)$ получим следующую начально-краевую задачу: найти функцию $u(x,t)$ удовлетворяющее уравнению

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = A\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad (x,t) \in \Omega_T, \tag{0.4}$$

удовлетворяющее начальному условию

$$u(x,0) = u_0(x) = c_0(x)e^{-\frac{B}{2A}x}, \quad 0 \le x \le b, \tag{0.5}$$

и граничным условиям

$$u(0,t) = \nu_1(t) = \mu_1(t)e^{\frac{B^2}{2A^2}t}, \quad u(b,t) = \nu_2(t) = \mu_2(t)e^{-\frac{B}{2A}b + \frac{B^2}{2A^2}t}, \quad 0 \le t \le T. \tag{0.6}$$

В дальнейшем мы будем изучать задачу (0.4) -(0.6).

1. Основные понятия и определения.

Будем рассматривать стохастические процессы, придавая случайным величинам определенный физический смысл. Обратимся к решению первой краевой задачи для уравнения диффузии. Введем к рассмотрению одномерное пространство R^1, которое изобразим в виде оси Ox

Представим одномерную случайную величину X на пространстве R^1 следующим образом. Для задания случайной величины X введем *функцию плотности распределения вероятностей* $\rho(x)$ обладающей следующими свойствами:

1) $\rho(x)$-определена при $-\infty < x < +\infty$,
2) $\rho(x) \ge 0$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)dx = 1. \tag{0.7}$$

Определение 1.1. Говорят, что случайная величина X определена, если задана плотность вероятностей $\rho(x)$.

Функция $\rho(x)$ имеет следующий смысл. Величина $P_{[a,b]} = \int_a^b \rho(x)dx$ означает вероятность того, что случайная величина x попадает на отрезок $[a,b]$, то есть примет значение в пределах $a \le x \le b$.

В реальности прибор с течением времени t меняет свои свойства, то есть с течением времени меняется плотность вероятностей, т.е. $\rho = \rho(x,t)$.

Введем еще два параметра y и τ, которые описывают предысторию процесса, то есть будем считать, что

$$\rho = \rho(y,\tau;x,t), \ -\infty < \tau < t < \infty, \ -\infty < y < \infty, \quad -\infty < x < \infty, \tag{0.8}$$

где y означает значение случайной величины $X(s)$, которое она приняла в предыдущий момент времени s; x означает значение случайной величины $X(t)$, которое она примет в последующий момент времени t.

Определение 1.2. Функция (0.8) называется *переходной функцией плотности вероятностей* или *условной плотностью вероятностей* стохастического процесса $X(t)$.

Определение 1.3. Стохастический процесс называется *марковским,* если для любых s, η, t $(s < \eta < t)$ выполнено *тождество Маркова- Колмогорова-Чепмена*:

$$\rho(y,s;x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\rho(y,s;z,\eta)\rho(z,\eta;x,t)\,dz. \tag{0.9}$$

В этом случае мы имеем *стохастический процесс* $X(t)$, то есть в каждый момент времени t мы имеем случайную величину $X(t)$ со своей плотностью.

2. Постановка задачи и вспомогательные результаты. Рассмотрим задачу: найти

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}=A\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2},\quad (x,t)\in\Omega_T, \tag{1.1}$$

удовлетворяющее начальному условию

$$u(x,0)=u_0(x),\quad 0\le x\le b, \tag{1.2}$$

и граничным условиям

$$u(0,t)=\nu_1(t),\quad u(b,t)=\nu_2(t),\quad 0\le t\le T. \tag{1.3}$$

Установим достаточные условия существования и единственности решения задач (11 -(1.3) и построим алгоритм для его численной реализации. Для решения задачи (1.1) - (1.3) справедлива.

Теорема 1. Пусть функции $u_0(x)\in C^2[0,b],\quad \varphi_1(t),\varphi_2(t)\in C^1[0,T]$ и выполнены условия согласования $u_0(0)=\varphi_1(0),\quad u_0(b)=\varphi_2(0)$. Тогда решение задачи (1.1) - (1.3) существует, единственно и выражается формулой

$$\begin{gathered}u(x,t)=\int_0^b\left\{\theta(x-\xi,t)-\theta(x+\xi,t)\right\}u_0(\xi)d\xi+\\ -2\int_0^t\frac{\partial\theta(x,t-\tau)}{\partial x}\varphi_1(\tau)d\tau+2\int_0^t\frac{\partial\theta(b-x,t-\tau)}{\partial x}\varphi_2(\tau)d\tau,\end{gathered} \tag{1.4}$$

где

$$\theta(x,t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}K(x+2n,t),\ K(x,t)=\frac{1}{2\sqrt{A\pi t}}\exp\left\{-\frac{x^2}{4At}\right\}.$$

Доказательство. Сначала проводим простейшие преобразования вида

$$u(x,t)=v(x,t)+w(x,t), \tag{1.5}$$

приводящее неоднородные граничные условия к однородным граничным условиям. Пусть выполнены условия согласования начального и граничных условий: $u_0(0)=\varphi_1(0),\quad u_0(b)=\varphi_2(0)$. В качестве функции $w(x,t)$ в преобразовании (1.5) можно взять

$$w(x,t)=u_0(x)+\varphi_1(t)-\varphi_1(0)+\frac{x}{b}\left[\varphi_2(t)-\varphi_1(t)+\varphi_1(0)-\varphi_2(0)\right]. \tag{1.6}$$

Тогда функция $v(x,t)$ будет удовлетворять задаче:

$$\frac{\partial v}{\partial t}-A\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}=f(x,t),\quad (x,t)\in\Omega_T, \tag{1.7}$$

$$v(x,0)=0, \quad 0\le x\le b, \tag{1.8}$$

$$v\big(0,t\big)=0,\ v\big(b,t\big)=0,\ 0\le t\le T, \tag{1.9}$$

где

$$f(x,t)=Au_0''(x)-\varphi_1'(t)-\frac{x}{b}\Big[\varphi_2'(t)-\varphi_1'(t)\Big].$$

Как известно [5], что решение задачи (1.7) -(1.9) выражается формулой

$$v(x,t)=\int_0^t\int_0^b\theta(x-\xi,t-\tau)\left(Au_0''(\xi)-\varphi_1'(\tau)-\frac{x}{b}\Big[\varphi_2'(\tau)-\varphi_1'(\tau)\Big]\right)d\xi d\tau$$

или после интегрирования по частям и учета (1.5), (1.6), получим

$$\begin{gathered}u(x,t)=\int_0^b\big\{\theta(x-\xi,t)-\theta(x+\xi,t)\big\}u_0(\xi)d\xi+\\ -2\int_0^t\frac{\partial\theta(x,t-\tau)}{\partial x}\varphi_1(\tau)d\tau+2\int_0^t\frac{\partial\theta(b-x,t-\tau)}{\partial x}\varphi_2(\tau)d\tau.\end{gathered} \tag{1.10}$$

Оценивая непосредственно оценивая (1.10), имеем

$$\begin{gathered}\big|u(x,t)\big|\le A\int_0^b\Big\{\big|\theta(x-\xi,t)\big|+\big|\theta(x+\xi,t\big|)\Big\}\big|u_0(\xi)\big|d\xi+\\ +2\int_0^t\left|\frac{\partial\theta(x,t-\tau)}{\partial x}\right|\big|\varphi_1(\tau)\big|d\tau+2\int_0^t\left|\frac{\partial\theta(b-x,t-\tau)}{\partial x}\right|\big|\varphi_2(\tau)\big|d\tau\le\\ \le 2\left\{\sup_{0\le t\le T}\left|\frac{\partial\theta(x,t)}{\partial x}\right|\right\}\int_0^T\Big\{\big|\varphi_1(\tau)\big|+\big|\varphi_2(\tau)\big|\Big\}d\tau+Ab\big\|u_0\big\|_{C[0,b]}.\end{gathered} \tag{1.11}$$

Отсюда следует непрерывная зависимость решения задачи (1.1) - (1.3) от исходных данных $u_0(x), \varphi_1(t), \varphi_2(t)$.

3. Функция Грина и вероятностное представление решений начально-краевой задачи для уравнения диффузии.

Пусть $G(x,y;t-\tau)$-функция Грина задачи (1.1) - (1.3), т.е. функция, удовлетворяющая уравнению:

$$G_t-AG_{xx}=\delta(x-y)\delta t-\tau),$$

и однородным граничным условиям,

$$G\big(0,y;t-\tau\big)=0,\ G\big(b,y;t-\tau\big)=0,$$

и $G(x,y;t-\tau)$ при $t-\tau<0$ равны нулю.

Если известно функция Грина $G(x,y;t-\tau)$, то, не применяя метод Фурье можно строить решение краевой задачи (1.1)- (1.3). Известно [7], что функция Грина $G(x,y;t-\tau)$ для задачи (1.1) - (1.3) имеет вид

$$G(x,y;t-\tau)=\sum_{n=1}^{\infty}\exp\left(-\frac{An^2\pi^2}{b^2}t\right)\sin\frac{n\pi}{b}x\sin\frac{n\pi}{b}y. \quad (1.12)$$

Используя метод отражения, функцию Грина $G(x,y;t-\tau)$ можно переписать в другом виде [7, с. 59]:

$$G(x,y;t-\tau)=\frac{1}{2\sqrt{\pi(t-\tau)}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left\{\exp\left[-\frac{(x-y+2n\pi)^2}{4(t-\tau)}\right]-\exp\left[-\frac{(x+y+2n\pi)^2}{4(t-\tau)}\right]\right\}= \quad (1.13)$$

$$=\frac{1}{2\sqrt{A\pi(t-\tau)}}\exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4(t-\tau)}\right)+\frac{1}{2\sqrt{A\pi(t-\tau)}}\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\exp\left[-\frac{(x-\xi+2n\pi)^2}{4(t-\tau)}\right]-\exp\left[-\frac{(x+\xi+2n\pi)^2}{4(t-\tau)}\right]\right\}=$$

$$=K(x-y,t-\tau)+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{K(x-y+2n\pi,t-\tau)+K(x+y+2n\pi,t-\tau)\right\},$$

где

$$K(x,t)=\frac{1}{2\sqrt{A\pi t}}exp\left(-\frac{x^2}{4At}\right).$$

Покажем, что из интегральных представлений решений начально-краевой задачи, которое строится с помощью функции Грина для уравнения диффузии, получить вероятностное представление решение краевой задачи (1.1) - (1.3).

Следствие 1. Начально-краевая задача допускает следующее вероятностное представление

$$u(x,t)=\int_0^b G(x,y,t)\,u_0(\xi)d\xi+A\int_0^t\frac{\partial G(x,y,t-\tau)}{\partial y}|y=0\varphi_1(\tau)d\tau-A\int_0^t\frac{\partial G(x,y,t-\tau)}{\partial y}|y=b\varphi_2(\tau)d\tau. \quad (1.14).$$

Следовательно, можно модифицировать наш метод так, чтобы вероятности перехода в соседние точки равнялись коэффициенту в соответствующем члене [6].

Доказательство этого следствия следует из формулы (1.13).

4. Применение метода Монте-Карло.

Рассмотрим теперь реализации метода Монте-Карло (метода статистического испытания) для первой начально-краевой задачи уравнения диффузии (1.1) - (1.3). Для применения метода Монте-Карло нужно свести задачу к расчету математических ожиданий. Основной частью решения уравнений диффузии методом Монте-Карло является случайное заблуждение,

Для этого применим известную разностную схему Кранка-Николсона.

Алгоритм решения. 1. Для построения разностной схемы введем равномерную сетку на отрезке $[0,b]$:

$\overline{\omega}_h=\{x_j\mid x_j=jh,\ j=0,1,2,...,N\},\ h=1/N,$ равномерную сетку на отрезке $[0,T]$:

$\overline{\omega}_\tau=\{t^n\mid t^n=n\tau,\ n=0,1,2,...,M\},\ \tau=n/M,$ и сетку на Ω_T:

$\overline{\omega}_{h\tau}=\overline{\omega}_h\times\overline{\omega}_\tau=\{(x_j,t^n)\mid x_j\in\overline{\omega}_h,\ t^n\in\overline{\omega}_\tau\}.$

2. Пусть v_j^n − значение сеточной функции v_h в узле (x_j,t^n), определенной на сетке $\overline{\omega}_{h\tau}$.

Аппроксимируем частные производные входящие в уравнение (1.1) по схеме Кранка-Николсона

$$u_t(x_j,t^n)=\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}, \quad (1.14)$$

$$u_{xx}(x_j,t^n)=\frac{\lambda}{h^2}\left[u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}\right]+\frac{1-\lambda}{h^2}\left[u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n\right], \quad (1.15)$$

где $\lambda\in[0,1]$. Функцию f непрерывных аргументов x и t заменим сеточной функцией f_j^n : $f(x_j,t^n)=f_j^n$

3. Заменим задачу (1.1) -(1.3) ее разностным аналогом:

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}=A\left(\frac{\lambda}{h^2}\left[u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}\right]+\frac{1-\lambda}{h^2}\left[u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n\right]\right)+f_j^n, \quad (1.16)$$

$$u_j^0=u(x_j,0)=0, \quad j=0,1,2,...,N, \quad (1.17)$$

$$u_0^n=u(0,t^n)=0, \quad n=0,1,2,...,M, \quad (1.18)$$

$$u_N^n=u(b,t^n)=0, \quad n=0,1,2,...,M. \quad (1.19)$$

Разрешив уравнение (1.16) относительно u_j^{n+1}, получим

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{1+2A\lambda\tau/h^2}\left\{\frac{A\lambda\tau}{h^2}\left(u_{j+1}^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}\right)+\frac{A(\lambda-1)\tau}{h^2}\left(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n\right)+\left(1-2A\tau(1-\lambda)/h^2\right)u_j^n+\tau f_j^n\right\}. \quad (1.20)$$

Следует заметит, что в соотношении (1.20) все значения берутся для внутренних узлов сетки. Анализируя (1.20), заметим, что коэффициенты при $u_{j+1}^{n+1},u_{j-1}^{n+1},\ u_j^n,u_{j-1}^{n+1},u_{j+1}^n$ положительны и их сумма равна единице. Другими словами, решение u_j^{n+1} является взвешенным средним в двух соседних временных слоях n и $n+1$.

Представим себе частицу M, которая совершает равномерное случайное блуждание по сетке $\overline{\omega}_{h\tau}$. Точнее, находясь во внутреннем узле $M_{j,n}\left(x_j,t_n\right)$ сетки $\overline{\omega}_{h\tau}$. Эта частица за один переход может переместится одним из двух соседних узлов $M_{j,n+1}\left(x_j,t_n+h\right)$ или $M_{j+1,n+1}\left(x_j+h,t_n\right)$, причем такой переход совершенно случаен и не зависит от положения частицы и ее прошлой истории.

Следовательно, согласно методику работы [7], этот метод можно модифицировать, так чтобы вероятности перехода в соседние точки равнялись коэффициенту в соответствующем члене. Другими словами, если пьяница находится в точке $\left(j,n\right)$, то он переходит в точку

$\left(j+1,n+1\right)$	с вероятностью	$\dfrac{A\lambda\tau}{h^2+2A\lambda\tau}$;
$\left(j-1,n+1\right)$ с	с вероятностью	$\dfrac{A\lambda\tau}{h^2+2A\lambda\tau}$;
$\left(j-1,n\right)$	с вероятностью	$\dfrac{A(\lambda-1)\tau}{h^2}$
$\left(j,n\right)$	с вероятностью	$\left(1-2A\tau(1-\lambda)/h^2\right)$

В остальном блуждающая игра не меняется.

Литература:

1. Бусленко Н.П. Метод статических испытаний (Метод Монте-Карло) и его реализация на ЦВМ / Н.П. Бусленко, Д.И. Голенко, И.М. Соболь, В.Г. Срагович, Ю.А. Шрейдер. - Физматгиз, СМБ, 1962. - 228с.
2. Ермаков С.М. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики / С.М. Ермаков, В.В. Некруткин, А.С. Сипин. -Москва: Наука, 1984.
3. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло в вычислительной математике. / С.М. Ермаков. - Санкт-Петербург: СПбГУ, 2008.
4. Ермаков С.М. Статистическое моделирование / С.М. Ермаков, Г.А. Михайлов. - Москва: Наука, 1982.
5. Сабельфельд К.К. Методы Монте-Карло в краевых задачах / К.К. Сабельфельд. - Новосибирск: Наука, 1989.
6. Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики / А.Д. Полянин. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 576 с.
7. Фарлоу С. Уравнения с частными производными для научных работников и инженеров. / С. Фарлоу. - М.: Мир, 1985. - 384с.
8. Аблабеков Б.С., Касымалиева А.А. Вторая начально-краевая задача для уравнения буссинеска-лява. Наука, новые технологии и инновации Кыргызстана. 2021. №. 3. С. 8-17.