

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

СИМОНОВ Николай Александрович

**АЛГОРИТМЫ СТАТИСТИЧЕСКОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕШЕНИЙ  
УРАВНЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО И  
ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА**

01.01.07 – Вычислительная математика

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание учёной степени  
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург  
2010

Работа выполнена в учреждении Российской академии наук, Институте  
вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Андросенко Пётр Александрович  
(Обнинский институт атомной энергетики)

доктор физико-математических наук,  
профессор Григорьев Юрий Николаевич  
(Институт вычислительных технологий  
СО РАН)

доктор физико-математических наук,  
профессор Рябов Виктор Михайлович  
(Санкт-Петербургский государственный  
университет)

Ведущая организация: Новосибирский государственный  
университет

Защита состоится 27 мая 2010 года в \_\_\_\_\_ часов на заседа-  
нии совета Д 212.232.49 по защите докторских и кандидатских диссер-  
таций при Санкт-Петербургском государственном университете по адре-  
су: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, Университетский проспект, 28,  
математико-механический факультет, аудитория 405.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке имени  
М.Горького Санкт-Петербургского государственного университета по  
адресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7/9.

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 2010 года.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

А.А. Архипова

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Постоянный и неослабевающий интерес к применению статистического моделирования (методов Монте-Карло) как в исследовательских целях, так и для решения практических задач обусловлен многими факторами. В первую очередь методы Монте-Карло используются для вычислительных экспериментов по определению свойств таких явлений, для которых вероятностная модель является, с одной стороны, наиболее адекватной и, в то же время, достаточно эффективно реализуемой. Для многих сложных задач построение такой модели и её непосредственная компьютерная реализация является, по сути, единственно возможным подходом, позволяющим применять численные методы для их решения. Среди прочих следует упомянуть задачи статистической физики, динамики разреженных газов, задачи вычислительной генетики, и вообще задачи моделирования и оптимизации сложных систем. При этом сложность решаемой проблемы может возрастать за счёт изменения всего лишь одного параметра. В частности, при решении систем алгебраических уравнений существует такое пороговое значение размерности, после которого применение метода Монте-Карло становится заведомо более эффективным. Похожая ситуация возникает и как следствие усложнения геометрии расчётной области в задачах компьютерной графики, а также в задачах вычисления макроскопических свойств среды и отдельно взятых молекул.

Во многих случаях вероятностные модели для описания какого-либо феномена используются в совокупности с различными другими моделями, отличающимися друг от друга масштабами, степенью детализации и, как следствие, применяемым математическим аппаратом. Согласование этих моделей, а также алгоритмов, создаваемых для решения поставленных в рамках этих моделей задач, является естественным требованием, обеспечивающим их обоснованность и состоятельность. Для природных явлений, которые на макроуровне описываются дифференциальными уравнениями в частных производных эллиптического и параболического типа, условия согласования состоят в том, что макропараметр, удовлетворяющий уравнению, представляется в виде функционала от случайного диффузионного процесса. Построение оценок метода Монте-Карло для такого функционала обычно основано на моделировании траекторий некоторой марковской цепи. Начало разработки и применения алгоритмов статистического моделирования к решению уравнений эллиптического и параболического типа восходит к пятидесятым годам двадцатого века. К этому времени методы Монте-Карло уже являлись основным вычислительным инструментом решения задач, связанных с переносом излучения. Основателями этих методов были J.v.Neumann и S.Ulam, а в СССР развитие и практическое применение алгоритмов статистического моделирования для реше-

ния уравнения переноса связано с именами Г.И.Марчука, В.Г.Золотухина, С.М.Ермакова, Г.А.Михайлова, И.М.Соболя, А.И.Хисамутдинова, Л.В.Майорова, В.В.Учайкина и многих других. Развитие методов Монте-Карло в применении к решению уравнений в частных производных эллиптического и параболического типа восходит к работам W.Wasow, J.Curtiss, M.Muller, G.Brown, A.Haji-Sheikh. Интенсивные исследования в этом направлении были инициированы С.М.Ермаковым, Г.А.Михайловым и продолжают вестись ими и их учениками: К.К.Сабельфельдом, А.С.Расуловым, А.С.Сипиным, О.Курбанмурадовым, А.А.Кронбергом, Б.С.Елеповым, В.Вагнером и другими, а также Г.Н.Мильштейном, D.Talay, S.Maire, A.Lejay, M.Mascagnì, J.Given, I.Dimov и многими другими. Данная диссертация продолжает традиции новосибирской школы методов Монте-Карло. Работа над ней велась в рамках исследований, проводившихся группой Стохастических задач математической физики Института вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук. Начиная с 1985 года, группу возглавляет профессор К.К.Сабельфельд, чьи взгляды и идеи оказали существенное влияние на формирование научных интересов автора и направление его собственных исследований.

Актуальность продолжения исследований в этом направлении и создания новых алгоритмов статистического моделирования для оценивания параметров природных феноменов, описываемых параболическими и эллиптическими уравнениями, объясняется, в частности, необходимостью решать задачи определения макроскопических свойств неупорядоченных сред и тел со сложной геометрией, таких, например, как макромолекулы, погружённые в раствор соли. Несмотря на бурное развитие вычислительной техники, компьютерное моделирование решений таких задач, основанное на подробном описании молекулярной структуры, осуществимо только для простейших случаев. По этой причине используются различные усреднённые модели, приводящие к эллиптическим или параболическим уравнениям. Специфика математической постановки этих задач заключается в том, что на границе требуется выполнение условий не только для собственно решения дифференциального уравнения, но и условий, которым должен удовлетворять поток, то есть, по сути, предельное значение нормальной производной этого решения. Учёт таких краевых условий является трудной алгоритмической проблемой, в силу того, что граничные поверхности имеют очень сложную структуру. Дополнительные трудности возникают как следствие необходимости решать задачу не в ограниченной области, а во всём пространстве.

Использование алгоритмов статистического моделирования позволяет преодолеть многие из имеющихся проблем. Особенностью методов Монте-Карло, применяемых к решению задач, связанных с эллиптическими и па-

параболическими уравнениями, является возможность точного учёта сложных геометрических деталей и поведения решения на бесконечности. К другим привлекательным чертам методов статистического моделирования относятся возможность вычисления отдельных функционалов и точечных значений без необходимости нахождения всего поля решения, а также статистический характер сходимости, который, несмотря на относительно малую скорость уменьшения ошибки при увеличении объёма статистики, позволяет получать достоверные апостериорные оценки погрешности вычисляемого результата. Существенным достоинством методов Монте-Карло является то, что использование весовых оценок при решении задач молекулярной биофизики даёт возможность получать точную зависимость вычисляемых функционалов от параметров. Кроме всего прочего, методы Монте-Карло обладают свойством естественного распараллеливания вычислений, позволяющим наиболее продуктивно использовать постоянно растущие возможности современных компьютеров.

Таким образом, разработка, развитие и использование методов статистического моделирования наряду с детерминированными методами является актуальной задачей и позволяет получать численные результаты, адекватные постоянно усложняющимся моделям, применяемым для описания диффузионных и электростатических свойств тел и сред со сложной геометрической структурой.

#### **Основные цели и задачи работы.**

- Построение и обоснование новых алгоритмов статистического моделирования решений уравнений эллиптического и параболического типа.
- Эффективная компьютерная реализация построенных вычислительных методов.
- Применение разработанного программного обеспечения к решению практических задач электростатики и диффузии в областях со сложными границами.

**Методы исследования.** В работе использовалась теория методов Монте-Карло, методы математического и функционального анализа, теория интегральных и дифференциальных уравнений, теория вероятностей, методы математической статистики и теория проверки статистических гипотез. Программирование осуществлялось на языке Фортран.

#### **Научная новизна.**

Все основные результаты работы являются новыми и заключаются в следующем.

1. Впервые построен класс эффективных алгоритмов статистического моделирования функций, удовлетворяющих уравнению эллиптического типа и граничным условиям, включающими в себя нормальную производную. Разработанные численные методы обладают свойством параллелизма и позволяют достоверно оценивать погрешность построенного решения
2. Разработаны новые алгоритмы статистического моделирования для решений уравнений параболического типа, в том числе и со случайными параметрами
3. На основе эффективной компьютерной реализации разработанных вычислительных методов создан комплекс программ для решения диффузионных и электростатических задач молекулярной биофизики
4. С использованием разработанных алгоритмов и созданного на их основе программного обеспечения получено новое решение важной практической задачи определения электростатических свойств макромолекул в растворе

**Практическая значимость работы.** Результаты работы вносят существенный вклад в вычислительную математику и, в частности, в теорию методов Монте-Карло. Алгоритмы статистического моделирования, разработанные в диссертации и реализованные в виде комплекса программ, позволяют решать широкий класс практически важных задач, в том числе задач, связанных с определением электростатических и диффузионных свойств макромолекул.

**Апробация работы.** Результаты, изложенные в диссертации, регулярно, начиная с 1979 года, докладывались и обсуждались на семинарах отдела Статистического моделирования в физике Вычислительного центра (Института вычислительной математики и математической геофизики) СО РАН под руководством чл.-корр. РАН Г.А.Михайлова.

Результаты диссертации были представлены на семинаре кафедры статистического моделирования математико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного университета под руководством профессора С.М.Ермакова, а также на следующих конференциях.

VII всесоюзная конференция 'Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике', Новосибирск, 1985; Всесоюзная конференция 'Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики', Новосибирск, 1987; Третья республиканская конференция 'Интегральные уравнения в прикладном моделировании', Одесса, 1989; Актуальные проблемы статистического моделирования и его приложения, Ташкент,

1989; VIII всесоюзная конференция ‘Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике’, Новосибирск, 1991; Международная конференция АМСА-95, Новосибирск, 1995; Математические модели и численные методы механики сплошной среды, Новосибирск, 1996; The 2nd St. Petersburg Workshop on simulation, St. Petersburg, 1996; GAMM Annual Meeting, Regensburg, Germany, 1997; First IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, Brussels, Belgium, 1997; 15th IMACS World Congress, Berlin, Germany, 1997; Munchener Stochastik-Tage, Munich, Germany, 1998; SibIN-PRIM-98, Новосибирск, 1998; The 3rd St. Petersburg Workshop on Simulation, St. Petersburg, 1998; SibINPRIM-2000, Новосибирск, 2000; Algorithms and Complexity for Continuous Problems, Schloss Dagstuhl, Wadern, Germany, 2000; The 4th St. Petersburg Workshop on Simulation, St. Petersburg, 2001; Международная конференция по вычислительной математике ICCM-2002, Новосибирск, 2002; The International Conference on Computational Science ICCS-2003, St. Petersburg, Russia, 2003; 4th International Conference on ‘Large Scale Scientific Computations’, Sozopol, Bulgaria, 2003; IVth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, Berlin, Germany, 2003; AMS 2004 Spring South-eastern Section Meeting, Tallahassee, USA, 2004; NATO Advanced Research Workshop: Advances in Air Pollution Modelling for Environmental Security, Borovetz, Bulgaria, 2004; Международная конференция по вычислительной математике ICCM-2004, Новосибирск, 2004; SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Orlando, USA, 2005; The 5th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, Tallahassee, USA, 2005; The International Conference on Computational Science ICCS-2005, Atlanta, USA, 2005; 5th International Conference on ‘Large Scale Scientific Computations’, Sozopol, Bulgaria, 2005; 17th IMACS World Congress, Paris, France, 2005; 7th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, Ulm, Germany, 2006; 6th Conference on Numerical Mathematics and Applications, Borovetz, Bulgaria, 2006; Workshop on Quantitative Computational Biophysics, Tallahassee, USA, 2007; Всероссийская конференция по вычислительной математике ICCM-2007, Новосибирск, 2007; The 6th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, Reading, UK, 2007; Международная конференция ‘Дифференциальные уравнения. Функциональные пространства. Теория приближений’ посвященная 100-летию со дня рождения С.Л. Соболева, Новосибирск, 2008.

**Публикации.** Результаты диссертации изложены в 41 опубликованной работе, в том числе в двух монографиях и 12 статьях, напечатанных в журналах, рекомендованных ВАК для опубликования основных научных результатов диссертаций на соискание учёной степени доктора наук. Перечень публикаций приведён в конце автореферата. Издания [3, 4, 6, 12] входят в список ВАК, а издания [5, 7 – 10, 11, 13, 14] входят в систему

цитирования Web of Science.

В совместных работах [1, 2] Н.А.Симонову принадлежит детальная разработка алгоритмов случайного блуждания для решения первой, второй и третьей краевых задач для уравнения Лапласа и уравнений Лапе. В работе [4] автору диссертации принадлежит разработка алгоритма для вычисления итераций сингулярного интегрального оператора. В работах [10, 11, 13, 30 – 38] Н.А.Симонову принадлежит разработка и обоснование алгоритма, проведение численных экспериментов и анализ результатов. В работе [14] расчёты проводились с использованием программы, созданной автором, он принимал участие в анализе результатов и формулировке выводов. В работе [19] автору принадлежит алгоритм блуждания в подобластях и его реализация в виде подпрограмм. В работе [27] Н.А.Симонову принадлежит разработка и реализация алгоритма метода Монте-Карло и проведение численных экспериментов.

Все результаты, выносимые на защиту, получены лично автором диссертации.

**Структура и объём работы.** Диссертация состоит из введения, трёх глав, разбитых на параграфы, дополнения и заключения. Результаты исследований изложены на 286 страницах с использованием 26 рисунков и 9 таблиц. Библиографический список состоит из 282 наименований.

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, даётся обзор литературы по изучаемым в диссертации вопросам, краткое содержание диссертации по главам и параграфам, приведен перечень результатов, выносимых на защиту.

В **первой главе** рассматриваются алгоритмы статистического моделирования для решения задач, описываемых дифференциальными уравнениями эллиптического типа.

Параграф 1.1 носит вводный характер. В нём описывается общая схема построения алгоритмов, основанных на интегральной формуле Грина и её связи с вероятностным представлением. Приводится определение стандартной марковской цепи блуждания по сферам и описываются её известные свойства.

В параграфе 1.2 описываются новые эффективные методы моделирования распределения точек выхода винеровского процесса на границу области, основанные на случайном блуждании в подобластях, доказываются свойства построенных с использованием такого алгоритма оценок.

Пусть область, в которой ищется решение, представляется в виде объединения пересекающихся подобластей  $G_j$ , в каждой из которых оценка



решения задачи Дирихле в точке  $x$  имеет вид

$$\xi[u_j](x) = g_j(t_*)Q(x; t_*; t_1, \dots, t_N), \quad (1)$$

где  $t_i \in \overline{G_j}, i \geq 1$  – марковская цепь случайных блужданий,  $t_*$  – точка первого выхода на границу этой подобласти, а  $g_j$  – значение функции  $u_j$  на этой границе. Тогда оценка для решения во всей области представляется в виде

$$\zeta[u](x) = g(t_*^K) \left( \prod_{k=0}^K Q(t_*^{k-1}; t_*^k; t_1^k, \dots, t_{N_k}^k) \right) \quad (2)$$

и обладает всеми свойствами оценок (1). Здесь  $t_*^k$  – последовательность точек выхода из подобластей,  $t_*^{-1} \equiv x$ ,  $g$  – функция, заданная на границе.

**Теорема 1.** *1. Если оценка  $\xi[u_j](x)$ , определяемая равенством (1), является несмещённой оценкой решения задачи Дирихле в каждой из подобластей  $G_j$ , рассматриваемых отдельно, то оценка  $\zeta[u](x)$ , построенная в соответствии с формулой (2), будет несмещённой оценкой решения за-*

*дачи Дирихле во всей области  $G = \bigcup_{j=1}^M G_j$ .*

*2. Если оценка (1), обладает некоторым смещением:*

$$\mathbb{E} \xi[u_j](x) = u_j(x) + \delta_j(x), \quad (3)$$

*где  $|\delta_j(x)| \leq \varepsilon B_j$ , а  $B_j = \sup_{x \in G_j} |u_j(x)|$ , то оценка  $\zeta(x)$  решения задачи Дирихле в области  $G$  также смещённая и*

$$|\mathbb{E} \zeta(x) - u(x)| \leq \frac{\varepsilon}{1 - (\varepsilon + q)} B,$$

*где  $q = \max_{i,k} q_{i,k}$ ,  $B = \sup_{x \in G} |u(x)|$ . Здесь  $q_{j,k} < 1$  – константа из леммы*

*Шварца в применении к паре подобластей  $G_j$  и  $G_k$ .*

*3. Дисперсия оценки  $\zeta(x)$  конечна.*

В параграфе 1.3 описано построение алгоритма блуждания по сферам для решения задачи Неймана и смешанной краевой задачи. Выводится интегральная формула среднего для значения решения на границе области. Эффективные методы статистического моделирования строятся на основе рандомизации этой формулы.

Пусть функция  $u$  является решением линейного уравнения Пуассона-Больцмана (Гельмгольца):

$$\Delta u - \kappa^2 u = 0, \quad \kappa = \text{const} \geq 0 \quad (4)$$

в области  $G \subset \mathbb{R}^3$ . Обозначим

$$\Phi_{\kappa,a}(y) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\sinh(\kappa(a - |y - x|))}{|y - x| \sinh(\kappa a)}$$

функцию Грина задачи Дирихле для уравнения (4) в шаре  $B(x, a)$ . Тогда значение решения в точке  $x \in G$  удовлетворяет при любом  $a \leq d(x)$  формуле среднего ( $d(x)$  – расстояние до границы области  $\Gamma$ )

$$u(x) = \int_{S(x,a)} \frac{1}{4\pi a} \frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)} u \, ds . \quad (5)$$

Рассмотрим смешанную краевую задачу для уравнения (4):

$$\alpha(y) \frac{\partial u}{\partial n}(y) + \beta(y)u(y) = g(y) , \quad y \in \Gamma , \quad (6)$$

где  $\alpha = 1, \beta = 0$  на  $\Gamma_0$  и наоборот  $\alpha = 0, \beta = 1$  на  $\Gamma_1 = \Gamma \setminus \Gamma_0$ . Для построения алгоритма случайного блуждания выведено и используется следующее интегральное соотношение

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_{\Gamma S \setminus \{x\}} 2 \frac{\partial \Phi_{\kappa,a}}{\partial n} u \, ds \\ &+ \int_{\Gamma \cap B(x,a) \setminus \{x\}} [-2\Phi_{\kappa,a}] \frac{\partial u}{\partial n} \, ds , \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\Gamma S$  – граница области  $G \cap B(x, a)$ . Здесь  $x \in \Gamma_0$ . Рандомизация соотношений (5), (7) позволяет построить марковскую цепь случайного блуждания  $\{x_k, k = 0, 1, \dots, N_\varepsilon\}$  и определить оценку решения краевой задачи  $u(x_0)$  в виде функционала от траектории этой цепи. Внутри области используется блуждание по сферам, основанное на рандомизации (5) при  $a = d(x)$ , вплоть до первого попадания точки  $x_k$  в  $\varepsilon$ -окрестность границы. При выходе цепи в окрестность границы с условиями Неймана  $\frac{\partial u}{\partial n}(y) = g(y)$  к оценке решения прибавляется величина, равная второму интегралу в (7) при  $x = x_k^*, x_k^* \in \Gamma_0$  – ближайшая к  $x_k$ . При этом моделирование марковской цепи продолжается, а её следующая точка выбирается на  $\Gamma S$  в соответствии с равномерным распределением по углу видимости из  $x_k^*$ . При  $x_{N_\varepsilon}^* \in \Gamma_1$  используется граничное условие Дирихле и моделирование цепи обрывается.

**Теорема 2.** *Функция  $\xi[u](x_0)$ , построенная на траектории случайного блуждания по сферам, которое используется как внутри области, так и при моделировании отражения от границы, является оценкой для решения смешанной краевой задачи (4), (6). Дисперсия этой оценки конечна,*

а смещение есть величина того же порядка, что и ширина полосы вблизи границы, то есть совпадает по порядку со смещением оценки решения задачи Дирихле. Трудоемкость построенной оценки (для выпуклой границы) есть  $O(\log(\delta) \delta^{-2})$ . Здесь  $\delta$ , требуемая точность решения, совпадает с шириной приграничной полосы  $\varepsilon$ .

Если  $\kappa > 0$ , то утверждение остаётся верным и для задачи Неймана.

Для невыпуклой границы используется аппроксимация интегрального представления (7), которая позволяет преодолеть алгоритмические трудности, вызванные знакопеременностью ядра интегрального оператора. Вводится касательная плоскость в точке  $x_k^*$  и следующая точка марковской цепи выбирается равномерно на полусфере  $S(x_k^*, a)$ , отсекаемой этой плоскостью. Выбирая  $\varepsilon = O(a/2R)^3$  при малых  $a/R$ , где  $R$  – минимальный радиус кривизны поверхности в данной точке, получаем оценку с трудоемкостью  $O(\log(\delta) \delta^{-5/2})$ .

В параграфе 1.4 соотношение о среднем обобщается для значения решения в точке, находящейся на границе раздела областей с различающимися свойствами. Решения различных эллиптических уравнений согласованы друг с другом через условия непрерывности. Краевые задачи в такой постановке возникают в электростатике, в реакторной физике (диффузионное приближение), в задачах гомогенизации, диффузии в кусочно-однородных средах, и т.п. Строится алгоритм метода Монте-Карло, позволяющий решать поставленную задачу в любой точке пространства и вычислять значения линейных функционалов.

Пусть функция  $u_e$  удовлетворяет линейному уравнению Пуассона-Больцмана (4) во внешности ограниченной области  $G$ , а функция  $u_i$  удовлетворяет внутри  $G$  уравнению Пуассона

$$\epsilon_i \Delta u_i = -4\pi\rho . \quad (8)$$

На границе заданы условия непрерывности решения и потока:

$$u_e = u_i , \quad \epsilon_i \frac{\partial u_i}{\partial n}(y) = \epsilon_e \frac{\partial u_e}{\partial n}(y) . \quad (9)$$

Для построения алгоритма блуждания по сферам в  $G$  и её внешности  $G_1$  используется рандомизация соотношения о среднем (5). Во внешней области при  $\kappa > 0$  весовой множитель в этой интегральной формуле интерпретируется как вероятность выживания. В случае  $\kappa = 0$  используется модификация алгоритма блуждания по сферам с прямым моделированием ухода диффузионной траектории на бесконечность.

Правая часть уравнения Пуассона учитывается с помощью представления  $u_i$  в виде суммы объёмного потенциала  $g(x) = \int_G \frac{1}{\epsilon_i} \frac{1}{|x-y|} \rho(y) dy$ ,

и регулярного слагаемого. Учёт условий на границе раздела приводит к интегральной формуле ( $x \in \Gamma$ ):

$$\begin{aligned}
u(x) &= \frac{\epsilon_e}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int_{S(x,a) \cap G_1} \frac{1}{2\pi a^2} \frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)} u_e ds \\
&+ \frac{\epsilon_i}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int_{S(x,a) \cap G} \frac{1}{2\pi a^2} \frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)} u_i ds \\
&- \frac{(\epsilon_e - \epsilon_i)}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int_{\Gamma \cap B(x,a) \setminus \{x\}} 2 \frac{\partial \Phi_{0,a}}{\partial n} Q_{\kappa,a} u ds \\
&+ \frac{\epsilon_i}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int_{B(x,a) \cap G} [-2\kappa^2 \Phi_{\kappa,a}] u_i dy \\
&+ \frac{1}{\epsilon_e + \epsilon_i} \int_{B(x,a) \cap G} [-2\Phi_{\kappa,a}] \rho dy,
\end{aligned} \tag{10}$$

где  $Q_{\kappa,a}(r) = \frac{\sinh(\kappa(a-r)) + \kappa r \cosh(\kappa(a-r))}{\sinh(\kappa a)} < 1$ ,  $r = |x - y|$ .

Для построения марковской цепи используется приближённая рандомизация этой формулы, основанная на разделении шара  $B(x, a)$  касательной плоскостью в точке  $x = x_k^*$ . С вероятностью  $p_e = \frac{\epsilon_e}{\epsilon_e + \epsilon_i}$  следующая точка марковской цепи  $x_{k+1}$  выбирается равномерно на той полусфере  $S^+(x_k^*, a)$ , в которую направлен вектор нормали, а с дополнительной вероятностью  $p_i$  – в замкнутом полушаре,  $B^-(x_k^*, a)$ . Значение объёмного потенциала с плотностью  $\rho$  оценивается по одной случайной точке, которая выбирается с плотностью, согласованной с  $\Phi$ .

При  $\kappa > 0$  коэффициент, стоящий под интегралом, рассматривается при  $x_{k+1} \in S^+(x_k^*, a)$  как вероятность выживания. Если же направление вектора выбрано так, что  $(x_{k+1} - x_k^*, n(x_k^*)) < 0$ , то с вероятностью  $q(\kappa, a) = \frac{\kappa a}{\sinh(\kappa a)}$  следующая точка цепи выбирается на  $S^-(x_k^*, a)$ , а с дополнительной вероятностью – внутри полушара  $B^-(x_k^*, a)$ .

**Лемма 1.** *Среднее число выходов построенной марковской цепи на границу есть  $\mathbb{E}N^* = \frac{2v}{a}(1 + dv)$ . Здесь  $v$  – ограниченное решение задачи (8),*

(4) с условием на границе  $\epsilon_i \frac{\partial v_i}{\partial n}(y) = \epsilon_e \frac{\partial v_e}{\partial n}(y) + 1$ , а  $dv = O(a)$  при  $a \rightarrow 0$ .

Пусть  $\{x_{k,j}^* \in \Gamma, j = 1, \dots, N_i^*\}$  – последовательность точек выхода построенной марковской цепи из области  $G$  на границу, а  $\{x_{k+1,j} \in G, j = 1, \dots, N_i^* - 1\}$  – последовательность точек возврата цепи в эту область. Тогда

### Теорема 3.

$$\xi[u](x_0) = g(x_0) - g(x_{k,1}^*) + \sum_{j=1}^{N_i^* - 1} [g(x_{k+1,j}) - g(x_{k,j+1}^*)] \quad (11)$$

является оценкой для решения краевой задачи (8), (4), (9). Для  $\varepsilon = (a/2R)^3$  смещение оценки равно  $O(a^2)$  при  $a \rightarrow 0$ . Дисперсия оценки конечна, а трудоёмкость равна  $O(\log(\delta) \delta^{-5/2})$  при заданной точности  $\delta$ .

В параграфе 1.5 описываются алгоритмы случайного блуждания по границе для решения эллиптических уравнений. Вначале даётся описание общего подхода к построению оценок для решений интегральных уравнений теории потенциала для уравнения Лапласа. В силу того, что в случае задач Неймана и Дирихле ряд Неймана для этих уравнений не сходится, используется метод вычисления решения, основанный на аналитическом продолжении резольвенты. Применение такого подхода в приложении к методам Монте-Карло было предложено К.К.Сабельфельдом в его работе 1982 года<sup>1</sup>, которая открыла возможность решения методом Монте-Карло интегральных уравнений с расходящимся рядом Неймана. В частности, в ней впервые сформулирована идея построения алгоритма блуждания по границе для задач теории электростатического и упругого потенциалов, которая далее была развита и обобщена в совместных работах и подытожена в совместных монографиях [1,2].

Аналогичный подход применяется для построения алгоритма статистического моделирования в случае задачи нахождения решения во всём пространстве с условиями непрерывности, заданными на границе раздела областей с разными коэффициентами диэлектрической проницаемости (диффузии).

Далее строятся алгоритмы случайного блуждания по границе для решения краевых задач для линеаризованного уравнения Пуассона-Больцмана. Вначале рассматриваются задачи Дирихле и Неймана, а затем, на основе специально подобранного представления решения строится алгоритм, совмещающий случайные блуждания по границе и по сферам внутри области, который позволяет построить оценку решения задачи с условиями непрерывности.

Для задачи с условиями непрерывности и  $\kappa = 0$  во всём пространстве используется представление решения в виде суммы регулярной части и объёмного потенциала  $g$ . Регулярная часть ищется в виде поверхностного

<sup>1</sup>Сабельфельд, К. К. Векторные алгоритмы метода Монте-Карло для решения эллиптических уравнений второго порядка и уравнений Лапе / К. К. Сабельфельд // Доклады АН СССР.— 1982.— Т. 262, № 5.— С. 1076–1080.

потенциала простого слоя с неизвестной плотностью  $\mu$ . Учёт граничных условий и свойств нормальной производной потенциала даёт интегральное уравнение, которому должна удовлетворять плотность:

$$\mu = -\lambda_0 \mathcal{K}\mu + f. \quad (12)$$

Здесь  $\epsilon_e > \epsilon_i$ ,  $\lambda_0 = \frac{\epsilon_e - \epsilon_i}{\epsilon_e + \epsilon_i} > 0$ . Ядро интегрального оператора  $\mathcal{K}$  имеет вид  $\frac{1}{2\pi} \frac{\cos \varphi_{yy'}}, где  $\varphi_{yy'}$  есть угол между внешней нормалью в точке  $y$  и вектором  $y - y'$ . Свободный член уравнения равен  $f = \lambda_0 \frac{\partial g}{\partial n(y)}$  и вычисляется аналитически. При  $\epsilon_e \gg \epsilon_i$  ряд Неймана для (12) сходится медленно, а в невыпуклом случае сходимость при замене ядра оператора на его модуль не сохраняется. Применяется аналитическое преобразование ряда с помощью замены спектрального параметра и используется конечное число членов. В результате,  $O(q^{n+1})$ -смещённая оценка для регулярной части решения есть$

$$\xi = \sum_{i=0}^n l_i^{(n)} (-\lambda_0)^i Q_i h_x(y_i). \quad (13)$$

Здесь  $h_x(y) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{|x - y|}$ ,  $q = \frac{1}{1 + 2|\lambda_0|} < \frac{1}{3}$ , коэффициенты  $l_i^{(n)}$  определяются способом аналитического продолжения,  $Q_0 = \frac{f(y_0)}{p_0(y_0)}$ . Для построения оценки используется марковская цепь изотропного случайного блуждания по границе  $\{y_0, y_1, \dots, y_n\}$ . В невыпуклом случае используется либо равновероятный выбор одного из пересечений, либо моделирование ветвящейся марковской цепи. В последнем случае  $Q_{i+1} = Q_i \text{sign}(\cos \phi_{y_{i+1}y_i})$ .

Для применения алгоритма случайного блуждания по границе к решению задачи с условиями непрерывности в случае  $\kappa > 0$ , используется другое разложение решения на регулярную и сингулярную составляющие:  $u = u^r + u^s$ . Регулярная часть удовлетворяет уравнению Лапласа внутри  $G$ , а в  $G_1$  — уравнению  $\epsilon_e \Delta u^r - \epsilon_e \kappa^2 (u^r + u^s) = 0$ . Функция  $u^s$  является решением задачи с условиями непрерывности при  $\kappa = 0$ . Для его оценки используется либо алгоритм блуждания по границе, либо блуждание по сферам. Оценка для  $u^r$  строится с использованием блуждания по сферам.

**Вторая глава** посвящена разработке и обоснованию алгоритмов статистического моделирования для решения задач, описываемых уравнениями параболического типа.

В параграфе 2.1 рассматривается уравнение общего вида

$$w_t = \nu \Delta w - (u \cdot \nabla) w + cw + f, \quad (x, t) \in H \equiv \mathbb{R}^m \times (0, T], \quad (14)$$

где  $u(x, t) = (u_1, u_2, \dots, u_m)$  – ограниченное поле:  $|u| \leq C_u$ ,  $\nu > 0$  – некоторый постоянный коэффициент, а  $c(x, t), f(x, t)$  – ограниченные функции. Для решения уравнения (14) выписывается интегральное представление в виде суммы тепловых потенциалов, ядрами которых является фундаментальное решение уравнения теплопроводности  $Z = Z(x - x', t - t')$ . Показано, что если поставлена задача Коши  $w(x, 0) = w_0(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^m$ , то функция  $w$  и её производные по пространственным переменным удовлетворяют системе интегральных уравнений Вольтерра:

$$W = \mathcal{K}W + F, \quad (15)$$

где  $W = (W_0, W_1, \dots, W_m)^T$ ,  $\mathcal{K}$  – матрично-интегральный оператор с матрицей ядер  $K = \{k_{ij}\}_{i,j=0}^m$ . Здесь

$$\begin{aligned} k_{00}(x, t; x't') &= Z c(x', t'), & k_{0j}(x, t; x't') &= -Z u_j(x', t'), \\ k_{i0}(x, t; x't') &= \frac{\partial Z}{\partial x_i} c(x', t'), & k_{ij}(x, t; x't') &= -\frac{\partial Z}{\partial x_i} u_j(x', t'), \\ & & i, j &= 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (16)$$

а  $F_0$  и  $F_i$  – тепловые потенциалы, определяемые свободным членом уравнения и начальными данными.

**Теорема 4.** Пусть функции  $u_j(x, t), c(x, t), f(x, t)$

- a) непрерывны в  $H$ ;
  - b) ограничены;
  - c) непрерывны по Гёльдеру относительно  $x$  равномерно по  $t$ ,
- а функция  $w_0(x)$  непрерывна и ограничена в  $\mathbb{R}^m$ .

Тогда

- 1) ряд Неймана для уравнения (15) сходится к вектор-функции  $W$  с компонентами в  $L_\infty(H)$ ;
- 2)  $w(x, t) = W_0(x, t)$  является решением задачи Коши для уравнения (14);
- 3)  $W_i(x, t) = \partial w / \partial x_i$ , т.е.  $i$ -я компонента суммы ряда Неймана совпадает с соответствующей производной нулевой компоненты.

Рандомизация системы интегральных уравнений (15) позволяет построить различные оценки метода Монте-Карло как для самого решения задачи Коши, так и для его производных. Разработаны скалярные и векторные оценки, прямая и сопряжённая, локально-векторная оценка. Показана несмещённость и конечность дисперсии построенных оценок. Впервые выписано в явном виде выражение для второго момента локально-векторной оценки общего вида.

Скалярная сопряжённая оценка  $(\xi_0^*, \xi_1^*, \dots, \xi_m^*)^T$  для вектора  $W(x_0, t_0)$

строится на основе рекуррентных соотношений

$$\xi_0^*(x_n, t_n) = \sum_{j=0}^m a_0 c_j \xi_j^*(x'_{n+1}, t'_{n+1}) + F_0(x_n, t_n), \quad (17)$$

$$\xi_i^*(x_n, t_n) = \sum_{j=0}^m a_i c_j \xi_j^*(x''_{n+1}, t''_{n+1}) + F_i(x_n, t_n), \quad (18)$$

Здесь  $x'_{n+1} = x_n + 2(\nu(t_n - t'_{n+1})\gamma'_{\frac{m}{2}})^{1/2}\omega'$ ,  $t'_{n+1} = \alpha' t_n$ ,  $\alpha'$  – выборочное значение равномерно распределённой на отрезке  $[0, 1]$  случайной величины,  $\gamma'_{\frac{m}{2}}$  –  $\gamma$ -распределённая с параметром  $m/2$  случайная величина, а  $\omega'$  – единичный вектор с изотропным случайным направлением.  $a_0 = \frac{t_n}{q_0}$  с вероятностью  $q_0$  и  $a_0 = 0$  с вероятностью  $1 - q_0$ .

$x''_{n+1} = x_n + 2(\nu(t_n - t''_{n+1})\gamma''_{\frac{m+1}{2}})^{1/2}\omega''$ ,  $t''_{n+1} = (1 - (\alpha'')^2)t_n$ , при этом  $\alpha''$ ,  $\gamma''_{\frac{m+1}{2}}$ ,  $\omega''$  и  $\alpha'$ ,  $\gamma'_{\frac{m}{2}}$ ,  $\omega'$  попарно независимы, а весовой множитель  $a_i = \frac{2}{q_1} \frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})} \frac{t_n^{\frac{1}{2}}}{\nu^{\frac{1}{2}}} \omega_i''$  с вероятностью  $q_1$  и  $a_i = 0$  с вероятностью  $1 - q_1$ . Таким образом, оценка, несмотря на линейность интегрального уравнения, строится на траекториях ветвящейся марковской цепи, каждая точка которой  $(x_n, t_n)$  с вероятностями  $q_0$  и  $q_1$  порождает в следующем поколении независимые точки  $(x'_{n+1}, t'_{n+1})$  и  $(x''_{n+1}, t''_{n+1})$ .

**Теорема 5.** *Рекуррентные соотношения (17), (18) определяют несмещённую оценку с конечной дисперсией для решения задачи Коши для уравнения (14) и для его первых производных по пространственным переменным в точке  $(x_0, t_0)$ .*

При  $c = 0$  строится векторная оценка  $\vec{\xi}^*$  для градиента решения  $\vec{W}(x, t)$ . При этом её можно вычислять, не оценивая собственно решение задачи. Несмещённая сопряжённая оценка определяется соотношением

$$\vec{\xi}^*(x_0, t_0) = \sum_{n=0}^N Q_n^* \vec{F}(x_n, t_n), \quad (19)$$

где  $Q_{n+1}^* = A_n^* Q_n^*$ , – матричные веса,  $Q_0^* = E$  – единичная матрица,  $A_n^* = \{a_i c_j\}_{i,j=1}^m$ .

$$\begin{aligned} \xi_0^*(x, t) &= \sum_{n=0}^N -a_0 \vec{u}(x_0, t_0) \cdot Q_n^* \vec{F}(x_n, t_n) + F_0(x, t) \\ &= \sum_{n=0}^N \vec{F}(x_n, t_n) \cdot \vec{Q}_n^* + F_0(x, t), \end{aligned} \quad (20)$$



где  $\vec{Q}_0^* = -a_0 \vec{u}(x_0, t_0)$ ,  $\vec{Q}_{n+1}^* = A_n^{*T} \vec{Q}_n^*$  – векторные веса.  $K' = \{k_{ij}\}_{i,j=1}^m$ ,  $\vec{F} = (F_1, \dots, F_m)^T$ .

Несмещённая локально-векторная оценка для  $\vec{W}(x, t)$  определяется соотношениями

$$\vec{\zeta}(x, t) = \zeta(x, t; x_0, t_0) \vec{Q}_0 + \vec{F}(x, t) = \sum_{n=0}^N K'(x, t; x_n, t_n) \vec{Q}_n + \vec{F}(x, t).$$

Здесь весовые матрицы  $Q_n$  и векторные веса  $\vec{Q}_n$  определяются соотношениями

$$Q_0 = E, \quad Q_{n+1} = A_n^T Q_n, \\ \vec{Q}_{n+1} = A_n \vec{Q}_n, \quad \vec{Q}_0 = \frac{\vec{F}(x'_0, t'_0)}{p_{0,2}(x'_0, t'_0)},$$

для согласованной плотности  $p_{0,2}$ ,

$$(A_n)_{ij} = \frac{2}{q_2} \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)} \frac{(t-t'_n)^{\frac{1}{2}}}{\nu^{\frac{1}{2}}} \omega_j u_i(x'_n, t'_n)$$

с вероятностью  $q_2$  и  $(A_n)_{ij} = 0$  с вероятностью  $1 - q_2$ .

Матрица вторых моментов локально-векторной оценки полностью определяется массивом матриц

$$\Theta^{ip} = \{\mathbb{E} \zeta_{ij} \zeta_{pq}\}_{i,q=1}^m, \quad i, p = 1, \dots, m.$$

Каждая из этих матриц есть сумма сходящегося ряда Неймана для соответствующего интегрального уравнения:

$$\Theta^{ip} = \int_X \frac{(K')^T \Theta^{ip} K'}{p_2} + \vec{L}_i^T \vec{k}_p + \vec{k}_i^T \vec{L}_p + \vec{k}_i^T \vec{k}_p, \quad i, p = 1, \dots, m.$$

Здесь  $\vec{L}_i = ((W^* K')_{i1}, \dots, (W^* K')_{im})$ .

Далее рассматривается первая начально-краевая задача для уравнения (14):  $w(y, t) = g(y, t)$ ,  $y \in \Gamma, t \in (0, T]$ . Решение этой задачи представляется в виде суммы тепловых потенциалов, в которую добавляется по-

верхностный потенциал  $\int_0^t dt' \int_{\Gamma} ds(y') 2 \frac{\partial Z}{\partial n(y')} \mu(y', t')$  с неизвестной плот-

ностью. Получена система интегральных уравнений Вольтерра со слабо полярными ядрами, которой удовлетворяет вектор-функция с компонентами  $w$  и  $\mu$ . Показана сходимость ряда Неймана для этой системы. Её рандомизация определяет ветвящуюся марковскую цепь  $X_{\Gamma} = \{(x_n, t_n), n =$

$0, 1, \dots\}$  с фазовым пространством, включающим в себя как внутреннюю часть области решения, так и её боковую цилиндрическую поверхность. Оценка решения начально-краевой задачи  $\xi^*[w](x, t)$  строится на траекториях цепи  $X_\Gamma$  в соответствии с рекуррентными соотношениями

$$\begin{aligned} & \xi^*[w](x_n, t_n) \\ &= a_0 \chi_G(x'_{n+1}) (\operatorname{div} u(x'_{n+1}, t'_{n+1}) + c(x'_{n+1}, t'_{n+1})) \xi^*[w](x'_{n+1}, t'_{n+1}) \\ & - \chi_G(x''_{n+1}) (u(x''_{n+1}, t''_{n+1}) \cdot a) \xi^*[w](x''_{n+1}, t''_{n+1}) \\ & + \sum_{j=1}^{2k} \chi_\Gamma^j b_j \xi^*[\mu](y_{n+1}^j, t_{n+1}^j) + F(x_n, t_n). \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} & \xi^*[\mu](y_n, t_n) \\ &= a_0 \chi_G(x'_{n+1}) (\operatorname{div} u(x'_{n+1}, t'_{n+1}) + c(x'_{n+1}, t'_{n+1})) \xi^*[w](x'_{n+1}, t'_{n+1}) \\ & - \chi_G(x''_{n+1}) (u(x''_{n+1}, t''_{n+1}) \cdot a) \xi^*[w](x''_{n+1}, t''_{n+1}) \\ & + \sum_{j=1}^{2k-1} \chi_\Gamma^j b_j \xi^*[\mu](y_{n+1}^j, t_{n+1}^j) + F(y_n, t_n) - g(y_n, t_n), \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь  $\chi_G$  и  $\chi_\Gamma$  – индикаторные функции области  $G$  и поверхности  $\Gamma$  соответственно.

**Теорема 6.** *Рекуррентные соотношения (21), (22) определяют несмещённую оценку с конечной дисперсией для решения  $w(x, t)$  первой начально-краевой задачи для уравнения (14).*

В параграфе 2.2 рассматривается уравнение диффузии с конвекцией, выписывается интегральное уравнение Вольтерра, которому удовлетворяет его решение. Строится марковская цепь, согласованная с интегральным уравнением, и определяются оценки как решения задачи Коши, так и начально-краевой задачи. Доказывается их несмещённость и конечность дисперсии.

Для уравнения конвекции-диффузии во внешности ограниченной односвязной области  $G_0$  с односвязной границей  $\Gamma$

$$\begin{aligned} & w_t = \nu \Delta w - (u \cdot \nabla) w, \\ & (x, t) \in \mathcal{X} = G \times [0, T], \quad G = \mathbb{R}^m \setminus \overline{G_0}, \quad m \geq 2 \end{aligned} \quad (23)$$

рассматривается первая краевая задача. Её решение представляется в виде суммы объёмных и поверхностного тепловых потенциалов, что позволяет

получить систему интегральных уравнений Вольтерра, которой удовлетворяют решение и плотность поверхностного потенциала:

$$w = Kw + \bar{K}\mu + F_0 \quad (24)$$

$$\mu = BKw + B\bar{K}\mu + BF_0 - g. \quad (25)$$

Здесь ядро интегрального оператора  $K$  определено соотношением

$$k(x, t; x', t') = \frac{2}{\pi^{m/2}} \cdot \frac{1}{(4\nu(t-t'))^{m/2+1}} \times \exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{4\nu(t-t')}\right) \cdot [u(x', t') \cdot (x-x')], \quad (26)$$

$F_0 = \int_G dx' Z(x-x', t)w_0(x')$ . Оператор  $\bar{K}$  с ядром

$$\bar{k}(x, t; y', t') = \frac{|x-y'| \cdot \cos \varphi_{y'x}}{(4\pi)^{m/2}(\nu(t-t'))^{m/2+1}} \exp\left(-\frac{|x-y'|^2}{4\nu(t-t')}\right) \quad (27)$$

переводит функции из  $L_\infty(\mathcal{Y})$  ( $\mathcal{Y} = \Gamma \times [0, T)$ ) в функции, бесконечно дифференцируемые в любой точке, отдалённой от границы. Здесь  $\varphi_{y'x} = \angle(n(y'), x-y')$ , а вектор нормали  $n(y')$  считаем для определённости направленным внутрь  $G_0$  (то есть  $n(y')$  – внешняя по отношению к  $G$  нормаль). Предполагаем также, что поверхность  $\Gamma$  – ляпуновская из класса  $L_1(B, \lambda)$ .  $BK$  – интегральный оператор с ядром  $k(y, t; x', t')$ , определённым в (26), действующий из  $L_\infty(\mathcal{X})$  в  $C(\mathcal{Y})$ ,  $B\bar{K}$  – интегральный оператор с ядром  $\bar{k}(y, t; y', t')$ , действующий из  $L_\infty(\mathcal{Y})$  в  $C(\mathcal{Y})$ ,  $BF_0$  – граничное значение функции  $F_0$ , а  $g$  – краевое условие.

Определяется ветвящаяся марковская цепь, на траекториях которой строится оценка решения:

$$\begin{aligned} & \xi[w](X_0) \\ &= \chi_1 \cdot 2 \left(\frac{t_0}{\nu}\right)^{1/2} \frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})} [-u(X_1) \cdot e_{\phi,1}] \frac{1}{q} \cdot \xi[w](X_1) \\ &+ \sum_{j=1}^{2k} \chi_1^j \cdot \frac{1}{\nu} \text{sign}(\cos \varphi_{y_1^j x_0}) \frac{1}{q^j} \xi[\mu](Y_1^j) + F_0(X_0). \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} & \xi[\mu](Y_1) \\ &= \chi_2 \cdot 2 \left(\frac{t_1}{\nu}\right)^{1/2} \frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})} [-u(X_2) \cdot e_{\phi,2}] \frac{1}{q} \cdot \xi[w](X_2) \\ &+ \sum_{j=1}^{2k-1} \chi_2^j \cdot \frac{1}{\nu} \text{sign}(\cos \varphi_{y_2^j y_1}) \frac{1}{q^j} \cdot \xi[\mu](Y_2^j) + F_0(Y_1) - g(Y_1). \end{aligned} \quad (29)$$

Здесь  $\chi, \chi^j$  – индикаторные функции области  $G$  и поверхности  $\Gamma$ .

**Лемма 2.** *Обозначим  $n^{(G)}(x, t)$  и  $n^{(\Gamma)}(x, t)$  – среднее число точек ветвящейся марковской цепи, начинающейся в точке  $(x, t) \in X$ , в  $G$  и на  $\Gamma$  соответственно. В условиях поставленной начально-краевой задачи  $n^{(G)}(x, t)$  и  $n^{(\Gamma)}(x, t)$  ограничены.*

**Теорема 7.** *Случайная величина  $\xi[w](X)$ , построенная на основе рекуррентных соотношений (28), (29), является несмещённой оценкой с конечной дисперсией для решения  $w(x, t)$  первой начально-краевой задачи.*

В параграфе 2.3 линейризованное уравнение Навье-Стокса рассматривается как система уравнений параболического типа. Использование тепловых потенциалов позволяет выписать систему линейных интегральных уравнений для вектора завихренности. Показано, что при решении задачи Коши ряд Неймана для этой системы сходится. Это даёт возможность построить векторные оценки метода Монте-Карло для завихренности, удовлетворяющей линейризованному уравнению Навье-Стокса.

В параграфе 2.4 рассматривается первая краевая задача для параболического уравнения, в которой граничная функция зависит от решения внутри области. На основе применения тепловых потенциалов выписываются интегральные уравнения для решения и для плотности поверхностного теплового потенциала. Доказана сходимость ряда Неймана, построена оценка решения задачи, показаны её несмещённость и конечность дисперсии.

Рассмотрим первую краевую задачу для уравнения теплопроводности. Для оценки решения применяется алгоритм случайного блуждания по границе. В невыпуклом случае оценка строится на траекториях ветвящейся марковской цепи, переходная плотность которой есть

$$p(y_i, t_i \rightarrow y_{i+1}, t_{i+1}) = \left[ \frac{2 |\cos \varphi_{y_i y_{i+1}}|}{\sigma_m |y_i - y_{i+1}|^{m-1}} \right] \quad (30)$$

$$\times \left[ \frac{4\nu |y_i - y_{i+1}|^m}{\Gamma(\frac{m}{2})(4\nu(t_i - t_{i+1}))^{m/2+1}} \cdot \exp\left(-\frac{|y_i - y_{i+1}|^2}{4\nu(t_i - t_{i+1})}\right) \right].$$

Доказана следующая лемма, позволяющая обосновать реализуемость оценок метода Монте-Карло при решении уравнений параболического типа в невыпуклых областях.

**Лемма 3.** *Среднее число точек нестационарного ветвящегося случайного блуждания по границе равно*

$$n = \int_0^t dt_0 \int_{\Gamma} d\sigma(y_0) m(y_0, t_0) p_0(y_0, t_0) ,$$

где  $m$  – решение интегрального уравнения

$$m(y, t) = \int_0^t dt' \int_{\Gamma} d\sigma(y') p(y, t \rightarrow y', t') m(y', t') + 1 , \quad (31)$$

$p_0$  – плотность распределения начальной точки цепи.

В параграфе 2.5 рассматривается двумерное уравнение Прандтля для завихренности, построено интегральное уравнение, которому удовлетворяет эта функция. Для решения этого уравнения определяется итерационный алгоритм и доказывается его сходимость. На основе рандомизации итерационного процесса построена ветвящаяся марковская цепь и конструктивно определена монте-карловская оценка решения.

Параграф 2.6 посвящён рассмотрению задачи Коши для параболического уравнения со случайными параметрами: коэффициенте при линейном члене, правой части и начальными данными. Вначале рассматривается задача со случайными данными. Выписываются интегральные уравнения для решения и для его вторых моментов. Показана сходимость ряда Неймана, определены оценки статистического моделирования и доказаны их свойства. Далее получено интегральное уравнение, которому удовлетворяет решение уравнения со случайным коэффициентом. Определены условия, которым должны удовлетворять случайные параметры для обеспечения сходимости ряда Неймана в различных вероятностных смыслах. Построена оценка решения и доказаны её вероятностные свойства.

Рассмотрим уравнение

$$w_t = \nu \Delta w + cw + f, \quad (32)$$

где коэффициент  $c(x, t; \omega)$ ,  $f(x, t; \omega)$  и начальные данные  $w_0(x; \omega)$  являются случайными полями над некоторым подходящим вероятностным пространством  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ ,  $(x, t) \in D_T = \mathbb{R}^m \times (0, T)$ . Решение представляется в виде суммы тепловых потенциалов  $w = K_{Z_0} c w + F_0$ , где  $Z_0$  – фундаментальное решение уравнения теплопроводности,  $F_0 = \int_{\mathbb{R}^m} dx' Z_0(x - x', t) w_0(x'; \omega)$ . Это представление рассматривается как интегральное уравнение, а его решение

ищется в виде суммы ряда

$$w = \sum_{n=0}^{\infty} K_{Z_0 c}^n F_0, \quad (33)$$

где предел рассматривается либо почти наверное (п.н.), либо в среднеквадратичном (с.к.) смысле.

Марковская цепь  $X = \{(x_n, t_n), n = 0, 1, \dots\}$  с фазовым пространством  $D_T$  определяется начальной точкой и переходной плотностью  $p(x_n, t_n \rightarrow x_{n+1}, t_{n+1}) = \frac{q}{t_n} Z_0(x_n - x_{n+1}, t_n - t_{n+1})$ .

$C_n = \mathbb{E}(c_n | X)$  ( $C_0 \equiv 1$ ) – моментные функции случайного поля  $c(x, t; \omega)$ ,  $\bar{C}_n = \mathbb{E}(|c_n| | X)$  и  $\hat{C}_n = \sup_X |C_n|$ , где  $c_n(X; \omega)$  есть произведение  $\prod_{j=1}^n c(x_j, t_j; \omega)$  значений случайного коэффициента рассматриваемого параболического уравнения в точках последовательности  $X$ .

Оценка решения определяется рекуррентными соотношениями

$$\begin{aligned} \xi^*[w](x_n, t_n; \omega) &= s_n \frac{t_n}{q} c(x_{n+1}, t_{n+1}; \omega) \xi^*[w](x_{n+1}, t_{n+1}; \omega) \\ &+ \xi[F_0](x_n, t_n; \omega), \end{aligned} \quad (34)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{n+1}^*[c] &= Q_n^*[c] \frac{k(x_n, t_n; x_{n+1}, t_{n+1})}{p(x_n, t_n \rightarrow x_{n+1}, t_{n+1})} \\ &= Q_n^*[c] \frac{t_n}{q} c(x_{n+1}, t_{n+1}; \omega), \quad Q_0^*[c] = 1, \end{aligned}$$

$q$  – вероятность выживания на переходе  $(x_n, t_n) \rightarrow (x_{n+1}, t_{n+1})$ , а  $\{s_n, n = 0, 1, \dots\}$  – последовательность случайных величин, равных единице с вероятностью  $q$  и нулю с дополнительной вероятностью  $1 - q$ ,  $N$  – случайное число членов в выборочной траектории марковской цепи  $X$ .

**Теорема 8.** 1) *если для почти всех фиксированных  $\omega \in \Omega$  функции  $s$ ,  $f$  и  $w_0$  ограничены почти всюду в  $D_T$ , то п.н. существует условное математическое ожидание  $\mathbb{E}(\xi^*[w] | \omega)$ , равное сумме ряда Неймана из (33);*

2) *условное математическое ожидание  $\mathbb{E}(\xi^*[w] | \omega)$  является п.н. решением случайной задачи Коши и условная дисперсия этой оценки конечна;*

- 3) для произвольного конечного  $t > 0$ ,  $\xi^*[w](x, t; \omega)$  является несмещённой оценкой для математического ожидания случайного решения  $\bar{w}(x, t) \equiv \mathbb{E}w(x, t; \cdot)$  ;
- 4) если кроме того  $f$  и  $w_0$  имеют ограниченные вторые моменты, а моментные функции случайного коэффициента с удовлетворяют условиям  $\bar{C}_n \leq n!!q^{n/2}t^{-n}a(n)$  для некоторого сходящегося ряда  $\sum a(n)$ , то дисперсия оценки  $\xi^*[w](x, t; \omega)$  конечна.

В параграфе 2.7 описывается алгоритм решения уравнения Шрёдингера, основанный на преобразовании Хопфа-Коула, переходе к нелинейному уравнению и статистическом моделировании системы взаимодействующих частиц. Построенный метод Монте-Карло позволяет вычислять собственную функцию и собственное значение дифференциального оператора.

**Глава 3** посвящена применению построенных методов статистического моделирования к решению модельных и прикладных задач.

В первом параграфе приведены результаты вычислений, полученные на основе использования разработанных в диссертации алгоритмов метода Монте-Карло для определения диффузионно обусловленной константы реакции. Макромолекула рассматривается как компактное множество  $G \subset \mathbb{R}^3$ , ограниченное односвязной кусочно-ляпуновской поверхностью  $\partial G$ . Константа реакции макромолекулы  $G$  с броуновскими частицами определяется как интегральный поток этих частиц на поверхности молекулы. Задача вычисления диффузионно обусловленной константы реакции  $K$  сводится в стационарном случае к решению внешней краевой задачи для уравнения Лапласа:

$$\begin{aligned} \Delta u(x) &= 0, \quad x \in G_1 = \mathbb{R}^3 \setminus \bar{G}, \\ \kappa_s(y)u(y) - D \frac{\partial u}{\partial n}(y) &= \kappa_s(y), \quad y \in \partial G, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x) &= 0. \end{aligned} \quad (35)$$

Здесь  $u = 1 - \rho$ .  $\rho(x)$  – концентрация частиц,  $D$  – коэффициент диффузии. Вычисления основаны на формуле  $K = 4\pi RD \bar{u}(R)$ , где  $\bar{u}(r) = \int d\Omega \frac{1}{4\pi} u(r, \Omega)$ , а  $R$  таково, что  $G \subset B(x, R)$  для некоторого  $x$ . Рандомизация этой формулы приводит к следующей монте-карловской оценке:

$$K = 4\pi RD \mathbb{E} \xi(x_0). \quad (36)$$

Здесь случайная точка  $x_0$  равномерно распределена на  $S(x, R)$ , а  $\xi$  – независимая от неё оценка решения задачи (35). Эта оценка строится на траекториях случайного блуждания по сферам с прямым моделированием

ухода на бесконечность (метод А.С.Сипина). При первом попадании в  $\varepsilon$ -окрестность границы используется рандомизация конечно-разностного приближения к граничному условию третьего рода. Для частного случая смешанной краевой задачи (модель Solc-Stockmayer) или задачи Неймана используется алгоритм, основанный на рандомизация формулы среднего, построенный в первой главе. Результаты тестовых расчётов показывают эффективность предложенных алгоритмов в сравнении с использовавшимися ранее оценками, основанными на прямом моделировании броуновского движения.

Во втором параграфе приведены результаты численных экспериментов по решению задач с граничными условиями, включающими в себя нормальную производную решения. Прояснены свойства построенных методов. На примере смешанной задачи для куба, в котором на одной из граней выполняется условие Неймана, а на всех остальных решение равно нулю, показана эффективность построенного в первой главе алгоритма (см. Рис.1).

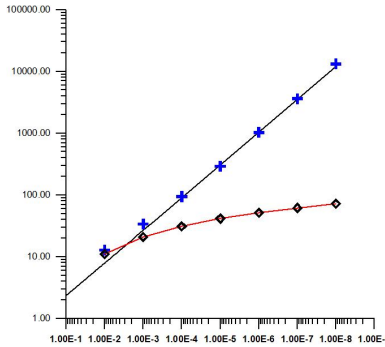


Рис. 1: Зависимость от  $\varepsilon$  (ширины приграничной полосы, в лог-лог масштабе) среднего числа переходов в блуждании по сферам, в котором отражение от границы с условиями Неймана производилось в соответствии с соотношением о сферическом среднем (7) (ромбы). Результаты расчётов аппроксимируются зависимостью  $\mathbb{E}N = -4.419 \ln \varepsilon - 9.505$ , то есть  $\mathbb{E}N$  имеет тот же порядок, что и при решении задачи Дирихле.

Для сравнения приведена зависимость среднего числа переходов при использовании конечноразностного приближения к нормальной производной (кресты). Результаты расчётов аппроксимируются степенной зависимостью  $\mathbb{E}N = 0.691 h^{-1.059}$ . Здесь  $h = \varepsilon^{-1/2}$  – шаг аппроксимации.

На примере задачи с условиями непрерывности для невыпуклой области показана эффективность использования квазислучайных последователь-



ностей при моделировании траекторий блуждания по границе.

В параграфе 3.3 рассмотрено применение разработанных алгоритмов случайного блуждания к решению задач молекулярной биофизики. Показана эффективность методов статистического моделирования в применении к определению зависимости свойств макромолекул от концентрации солей. Приведены результаты вычислений значений потенциала и свободной электростатической энергии для пептидов, помещённых в солевой водный раствор.

Общепринятым подходом, позволяющим вычислять электростатические свойства макромолекул в растворе, является использование физической модели, в которой только структура самой молекулы (область  $G_i \subset \mathbb{R}^3$ ) описывается точно, а окружающая её вода с растворёнными в ней солями рассматривается как сплошная среда. При такой постановке задачи электростатический потенциал  $\Phi_i$  внутри молекулы удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\epsilon_i \Delta \Phi_i(x) + 4\pi \sum_{m=1}^M Q_m \delta(x - x^{(m)}) = 0, \quad x \in G_i, \quad (37)$$

где  $Q_m$  – величины зарядов, расположенных в точках  $x^{(m)}$ ,  $\epsilon_i$  – диэлектрическая постоянная в  $G_i$ . В растворе за пределами молекулы (область  $G_e = \mathbb{R}^3 \setminus G_i$ ) электростатический потенциал  $\Phi_e$  удовлетворяет уравнению Пуассона-Больцмана. При малых значениях потенциала это уравнение линеаризуется:

$$\Delta \Phi_e(x) - \kappa^2 \Phi_e(x) = 0. \quad (38)$$

Значения функций  $\Phi_i$  и  $\Phi_e$  согласованы условиями непрерывности вида (9). Для вычисления значений потенциала и электростатической энергии используются оценки вида (11), описанные в первой главе. При этом  $g = \Phi^c(x)$  – сингулярная составляющая потенциала, представимая в аналитическом виде. Здесь  $\Phi_i(x) = \Phi_{rf}(x) + \Phi^c(x)$ . Для описания геометрии молекулы рассматривается модель, определяемая поверхностью Ван-дер-Ваальса.

Постановка задачи определения электростатических свойств макромолекул такова, что применение методов Монте-Карло для её решения является естественным. Использование построенных в данной работе алгоритмов позволяет, не находя решения во всём пространстве, вычислять значения потенциала в отдельных точках. Не возникает проблем, вызванных неограниченностью расчётной области, в том числе, проблем с компьютерной памятью. Статистический характер погрешности позволяет адекватно оценивать точность полученного решения. Разработанные алгоритмы статистического моделирования позволяют вычислять значения потенциала диэлектрической реакции и энергии одновременно для конечного набора

значений параметра  $\kappa$ , квадрат которого линейно зависит от концентрации соли типа *NaCl*:

$$\xi[\Phi_{rf}](x^{(m)}) = -\Phi^c(x_1^*) + \sum_{j=2}^{N_{ins}} F_j(\kappa) (\Phi^c(x_j^{ins}) - \Phi^c(x_{j,ins}^*)). \quad (39)$$

Здесь весовая функция  $F_j(\kappa) \equiv 1$  при  $\kappa = \kappa_1$ , а при других значениях параметра домножается на каждом шаге во внешней области на отношение  $q(\kappa_i, d_k)/q(\kappa_1, d_k)$ . Оценка для свободной электростатической энергии диэлектрической реакции есть линейная комбинация оценок точечных значений  $\Phi_{rf}$ :

$$\xi[W_{rf}] = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M Q_m \xi[\Phi_{rf}](x^{(m)}). \quad (40)$$

При этом значения потенциала оцениваются непосредственно в местах расположения зарядов, что невозможно при использовании конечноразностных и конечноэлементных методов. Тестовые расчёты для модельной задачи, имеющей аналитическое решение, показали, что данное обстоятельство приводит к относительно большим ошибкам в результатах. Например, для концентрации соли 0.1 моль расчёт по широко используемой программе APBS с шагом сетки 0.1 даёт результат с ошибкой 0.856%, в то время как оценка (39) приводит к результату со смещением 0.028%. При  $\epsilon_i = 1$  энергия диэлектрической реакции  $W_{rf}$  совпадает с электростатической свободной энергией растворения. На Рис. 2 показана зависимость разности между энергией при заданной концентрации соли и её значением при концентрации 0.5 моль для пептидов которые идентифицируются в PDB (белковой базе данных) как (A) 1A4T и (B) 1QFQ. Для сравнения приведены результаты решения, полученные на основе метода граничных элементов с ускорением по мультипольному методу. Существенно, что каждое значение, полученное с использованием детерминированного метода, требует отдельного расчёта, в то время как алгоритм статистического моделирования позволяет получить всю кривую на основе одного вычислительного эксперимента. Результаты вычислений по методу Монте-Карло сильно коррелированы, и дисперсия разности результатов, полученных для  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  стремится к нулю при стремлении к нулю разности  $|\kappa_1 - \kappa_2|$ .

В параграфе 3.4 описан комплекс программ, построенный с использованием разработанных алгоритмов и применяющийся для решения задач молекулярной биофизики. Программа написана на языке Фортран. При её создании использован опыт работы над предыдущими пакетами программ, реализующими алгоритмы блуждания по сферам в сочетании с блужданием в подобластях, описанным в первой главе. Применялись все идеи,

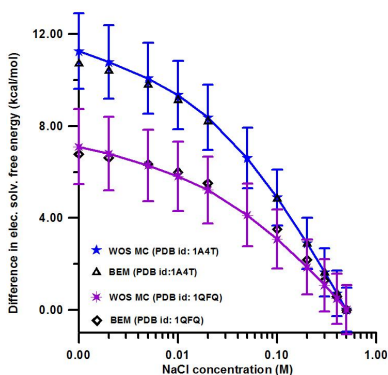


Рис. 2: Разность между электростатической энергией растворения и контрольным значением энергии при концентрации NaCl в 0.5 M для двух пептидов: 1A4T и 1QFQ. Диэлектрические постоянные равны 1 внутри и 78.5 вонне молекулы. В качестве границы используется поверхность Ван-дер-Ваальса. Все детерминированные расчёты проводились с использованием метода граничных элементов с ускорением по мультипольному методу. Результаты обозначены треугольниками (1A4T) и ромбами (1QFQ). Показаны доверительные интервалы ( $\pm 2\sigma$ ) для результатов, полученных методом Монте-Карло.

реализованные ранее при разработке программного обеспечения для более ранних версий операционных систем. Были учтены конкретные особенности геометрических моделей, применяемых в задачах определения электростатических свойств макромолекул в растворе. Внутри молекулы используется блуждание в подобластях, а для нахождения расстояния до границы во внешней для молекулы области – алгоритм, основанный на построении многомерных двоичных деревьев. Созданный на основе разработанных алгоритмов программный комплекс используется в настоящее время для исследовательских расчётов в Институте молекулярной биофизики Флоридского государственного университета.

В параграфе 3.5 описывается применение методов Монте-Карло к вычислению электростатической ёмкости. Исследуются свойства эргодического алгоритма К.К.Сабельфельда, уточнены условия его применимости и скорость сходимости. Показано что при вычислении ёмкости единичного куба данный подход оказывается наиболее эффективным в сравнении как с другими методами статистического моделирования, так и с различными детерминированными вычислительными методами.

Параграф 3.6 посвящён использованию алгоритмов случайного блуждания для вычисления эффективного коэффициента проницаемости пористой среды со случайными параметрами. С помощью численных экспериментов выявлены условия проявления логнормального распределения этого коэффициента. В последующих параграфах даны результаты вычислительных экспериментов по выяснению эффективности алгоритмов, построенных для решения уравнения конвекции-диффузии, системы линейаризованных уравнений Навье-Стокса и параболических уравнения со случайными параметрами.

В **дополнении** (глава 4) описаны результаты исследований, посвящённых разработке алгоритмов и численным экспериментам по решению уравнений, не являющихся ни эллиптическими, ни параболическими. Приведены результаты расчётов по решению методами Монте-Карло уравнений Эйлера (динамики идеального газа) в интегральной форме.

В **заклЮчении** приводятся основные результаты диссертационной работы.

## СПИСОК РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Монографии

1. Курбанмуратов О. А., Сабельфельд К. К., Симонов Н. А. Алгоритмы случайного блуждания по границе. — Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1989.
2. Sabelfeld K. K., Simonov N. A. Random Walks on Boundary for solving PDEs. — Utrecht, The Netherlands: VSP, 1994.

### Публикации в журналах, рекомендованных ВАК

3. Симонов Н. А. Модификация алгоритма блуждания по сферам, удобная в практическом применении // *Журн. вычисл. матем. и матем. физ.* — 1984. — Т. 24, № 6. — С. 936–938.
4. Сабельфельд К. К., Симонов Н. А. Решение пространственных задач теории упругости в детерминированной и стохастической постановках методом Монте-Карло // *Доклады АН СССР*. — 1984. — Т. 275, № 4. — С. 802–805.
5. Simonov N. A. Monte Carlo solution of the nonlinear integral equation system in the boundary layer theory // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 1993. — Vol. 8, no. 3. — Pp. 265–274.

6. *Симонов Н. А.* Стохастические итерационные методы решения уравнений параболического типа // *Сиб. матем. журн.* — 1997. — Т. 38, № 5. — С. 1146–1162.
7. *Simonov N. A.* Monte Carlo methods for convective diffusion equation // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* — 1997. — Vol. 12, no. 1. — Pp. 67–81.
8. *Simonov N. A.* Monte Carlo solution to three-dimensional vorticity equation // *Mathematics and Computers in Simulation.* — 1998. — Vol. 47, no. 2-5. — Pp. 455–459.
9. *Simonov N. A.* Stochastic iterative method for a system of parabolic equations // *Zeit. Angew. Math. Mech.* — 1998. — Vol. 78, Suppl.1. — Pp. S185–S188.
10. *Mascagni M., Simonov N. A.* Monte Carlo methods for calculating some physical properties of large molecules // *SIAM Journal on Scientific Computing.* — 2004. — Vol. 26, no. 1. — Pp. 339–357.
11. *Mascagni M., Simonov N. A.* The random walk on the boundary method for calculating capacitance // *The Journal of Computational Physics.* — 2004. — Vol. 195, no. 2. — Pp. 465–473.
12. *Симонов Н. А.* Методы Монте-Карло для решения эллиптических уравнений с граничными условиями, включающими в себя нормальную производную // *Доклады Академии наук.* — 2006. — Т. 410, № 2. — С. 164–167.
13. *Simonov N. A., Mascagni M., Fenley M. O.* Monte Carlo-based linear Poisson-Boltzmann approach makes accurate salt-dependent solvation free energy predictions possible // *Journal of Chemical Physics.* — 2007. — Vol. 127. — P. 185105 (6 pages).
14. Using Correlated Monte Carlo Sampling for Efficiently Solving the Linearized Poisson-Boltzmann Equation Over a Broad Range of Salt Concentration / *M. O. Fenley, M. Mascagni, J. McClain et al.* // *J. Chem. Theory Comput.* — 2010. — Vol. 6, no. 1. — Pp. 300–314. Publication Date (Web): December 23, 2009. <http://dx.doi.org/10.1021/ct9003806>.

#### **Прочие публикации**

15. *Симонов Н. А.* Алгоритмы случайного блуждания для решения краевых задач с разбиением на подобласти // *Методы и алгоритмы статистического моделирования.* — Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1983. — С. 48–58.

16. *Симонов Н. А.* О рандомизации итерационных процессов решения уравнений первого рода // Теория и приложения статистического моделирования. — Новосибирск: Вычислительный центр СО АН СССР, 1985. — С. 31–37.
17. *Симонов Н. А.* Решение граничного интегрального уравнения для третьей краевой задачи методом Монте-Карло // Методы статистического моделирования. — Новосибирск: Вычислительный центр СО АН СССР, 1986. — С. 53–59.
18. *Симонов Н. А.* Случайные оценки производных от решения задачи Неймана вблизи границы области // Теория и приложения статистического моделирования. — Новосибирск: Вычислительный центр СО АН СССР, 1988. — С. 76–87.
19. Назначение и архитектура пакета прикладных программ НЕКТОН-1 / М. М. Бежанова, И. И. Кабанихина, С. Е. Макаров и др. // VIII Всесоюзное совещание "Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике 19-21 февраля 1991г. Часть 1. — Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1991. — С. 142–145.
20. *Симонов Н. А.* Монтекарловская оценка решения системы интегральных уравнений, порожденной уравнениями Прандтля // Труды ВЦ СО РАН. — Новосибирск: Вычислительный центр СО РАН, 1993. — Вычислительная математика. Выпуск 1. — С. 107–112.
21. *Simonov N. A.* Solution of two-dimensional Prandtl equations by the Monte Carlo method // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. — Novosibirsk: Computing Center SB RAS, 1993. — Numerical Analysis. Issue 4. — Pp. 83–102.
22. *Simonov N. A.* Stochastic algorithm for solving two-dimensional boundary layer equations // *Siberian Journal of Computer Mathematics*. — 1995. — Vol. 2, no. 1. — Pp. 41–56.
23. *Simonov N. A.* Boundary value problem and stochastic algorithm for two-dimensional Navier-Stokes equations // *Monte Carlo Methods and Applications*. — 1995. — Vol. 1, no. 1. — Pp. 59–70.
24. *Симонов Н. А.* Решение методом Монте-Карло первой краевой задачи для параболических уравнений с граничной функцией, зависящей от решения // Труды ВЦ СО РАН. — Новосибирск: Вычислительный центр СО РАН, 1996. — Вычислительная математика. Выпуск 4. — С. 129–145.

25. *Simonov N. A.* Monte Carlo solution of the first boundary value problem for parabolic equation // Mathematical methods in stochastic simulation and experimental design. Proc. of the 2nd St. Petersburg Workshop on simulation, St. Petersburg, June 18-21, 1996 / Ed. by S. M. Ermakov, V. B. Melas. — St. Petersburg: Pub. House of St. Petersburg University, 1996. — Pp. 109–111.
26. *Simonov N. A.* Stochastic computational methods for parabolic equations with random data // IMACS World Congress. Berlin, Germany, August 24-29, 1997. Proceedings. Volume 1. Computational Mathematics. — 1997. — Pp. 449–452.
27. Iterative procedure for multidimensional Euler equations / W. Dreyer, M. Kunik, K. Sabelfeld et al. // *Monte Carlo Methods and Applications.* — 1998. — Vol. 4, no. 3. — Pp. 253–271.
28. *Simonov N. A.* Nonlinear Monte Carlo estimators for parabolic equation // Simulation 2001, Proc. 4th St. Petersburg Workshop on Simulation / Ed. by S. M. Ermakov, Y. N. Kashtanov, V. B. Melas. — St. Petersburg: St. Petersburg State University, 2001. — Pp. 453–456.
29. *Simonov N. A.* Monte Carlo solution of a parabolic equation with a random coefficient // *Сибирский журнал вычислительной математики.* — 2001. — Т. 4, № 4. — С. 389–402.
30. *Mascagni M., Simonov N. A.* Random walk on the boundary methods for computing reaction rate and capacitance // The International Conference on Computational Mathematics. Novosibirsk, Russia, June 24-28, 2002, Proceedings / Ed. by G. A. Mikhailov, V. P. Il'in, Y. M. Laevsky. — Novosibirsk: ICM&MG Publisher, 2002. — Pp. 238–242.
31. *Mascagni M., Simonov N. A.* Monte Carlo method for calculating the electrostatic energy of a molecule // *Lecture Notes in Computer Science.* — 2003. — Vol. 2657. — Pp. 63–74.
32. *Karavanova A., Mascagni M., Simonov N. A.* Solving BVPs using quasi-random walks on the boundary // *Lecture Notes in Computer Science.* — 2004. — Vol. 2907. — Pp. 162–169.
33. *Simonov N. A., Mascagni M.* Random walk algorithms for estimating effective properties of digitized porous media // *Monte Carlo Methods and Applications.* — 2004. — Vol. 10, no. 3-4. — Pp. 599–608.

34. *Karaivanova A., Mascagni M., Simonov N. A.* Parallel quasirandom walks on the boundary // *Monte Carlo Methods and Applications*. — 2004. — Vol. 10, no. 3-4. — Pp. 311–320.
35. *Simonov N. A., Mascagni M.* Random walk algorithms for estimating electrostatic properties of large molecules // The International Conference on Computational Mathematics. Novosibirsk, Russia, June 21-25, 2004, Proceedings / Ed. by G. Mikhailov, V.P. Il'in, Y.M. Laevsky. — Novosibirsk: ICM&MG Publisher, 2004. — Pp. 352–358.
36. *Fleming C., Mascagni M., Simonov N.* An efficient Monte Carlo approach for solving linear problems in biomolecular electrostatics // *Lecture Notes in Computer Science*. — 2005. — Vol. 3516. — Pp. 760–765.
37. *Simonov N., Mascagni M.* The method of random walk on spheres for solving boundary-value problems from molecular electrostatics // 17th IMACS World Congress, Paris, France, July 11-15, 2005. Proceedings. — 2005. — Pp. T1-I-62-0945. — ISBN 2-915913-02-1.
38. *Karaivanova A., Simonov N. A.* Quasi-Monte Carlo methods for investigating electrostatic properties of organic pollutant molecules in solvent // *Lecture Notes in Computer Science*. — 2006. — Vol. 3743. — Pp. 172–180.
39. *Симонов Н. А.* Алгоритмы случайного блуждания по сферам для решения смешанной краевой задачи и задачи Неймана // *Сибирский журнал вычислительной математики*. — 2007. — Т. 10, № 2. — С. 209–220.
40. *Simonov N. A.* Random walks for solving boundary-value problems with flux conditions // *Lecture Notes in Computer Science*. — 2007. — Vol. 4310. — Pp. 181–188.
41. *Simonov N. A.* Walk-on-spheres algorithm for solving boundary-value problems with continuity flux conditions // Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2006 / Ed. by A. Keller, S. Heinrich, H. Niederreiter. — Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. — Pp. 633–644.