泊松方程的蒙特卡洛算法

计算数学所　刘乐

序　言

首先, 感谢的是数学院研究生会组织的这次数学科普活动, 为我们不同研究方向的同学提供了一个交流的平台.

在这篇文章中, 我分享的内容是求解泊松方程的蒙特卡洛算法. 目前, 求解偏微分方程的主流方法包括有限差分法、有限元方法及有限体积法等. 这些均是确定性算法, 相对于它们, 蒙特卡洛算法是一种随机算法. 它基于的是概率论中的大数定律, 将方程的解在某点处的值转化为某一个随机变量的期望, 然后用独立采样的平均值去逼近这个期望, 以达到近似方程解的效果.

蒙特卡洛算法求解泊松方程的好处主要体现在两个方面. 一是, 它相较于其他算法, 十分便于并行化, 从而有利于计算速度的提高; 二是, 它的结论特别直观, 可以独立求出微分方程的解在任意一点处的函数值. 这两点好处将在文中呈现.

已有的结论是关于调和方程的情形, 我们对一般情形的泊松方程的蒙特卡洛算法进行了探究, 给出了相应的结论, 并通过数值算例来展示算法的计算效果.

下面分享给大家.

第 1 部分　问题描述

泊松方程 $-\Delta u = f$ 是椭圆型方程的代表, 特别地, 当 $f \equiv 0$ 时, 称为调和方程.

在静电学中很容易遇到泊松方程, 如:$-\Delta\Phi = \frac{\rho}{\epsilon_0}$, 这里 Φ 表示电势,ρ 是电荷体密度,ϵ_0 是真空电容率. 如果空间中某区域静带电粒子为 0, 则 $\rho = 0$, 此时就变为了调和方程 $-\Delta\Phi = 0$.

本文考虑二维泊松方程的 Dirichlet 边值问题:

$$\begin{cases} -\Delta u(x,y) = f(x,y), (x,y) \in \Omega, \\ u(x,y) = \varphi(x,y), (x,y) \in \partial\Omega, \end{cases} \tag{1}$$

这里 Ω 是求解区域,$\partial\Omega$ 是 Ω 的边界.

第 2 部分 数值方法

简单起见, 考虑正方形区域 $\Omega = [a,b] \times [a,b]$.

2.1 先睹为快

我们以调和方程为例, 先看看结论. 比如, 我们要求取图 1 中红色标记点 (x,y)(或 (i,j)) 处方程 (1) 的解 $u(x,y)$(或 $u_{i,j}$) 的近似值.

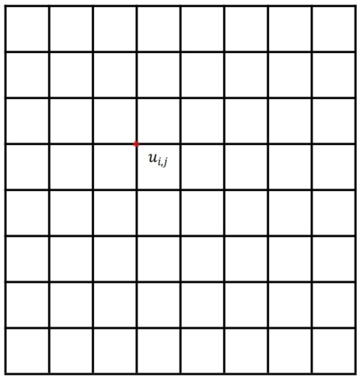

图 1: 随机游走 1

这可以通过等概率的随机游走来完成. 具体地, 从网格点 (x,y) 处出发, 沿着网格线朝着四个方向均以 $\frac{1}{4}$ 的概率随机游走, 当走到区域的边界 $(x^{(1)}, y^{(1)})$ 时, 则停止, 并记下此时边界处的函数值 $\varphi(x^{(1)}, y^{(1)})$, 这是第一次实验; 就像这样, 反复独立地做 N(充分大) 次实验, 可以得到序列 $\{\varphi(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{N}$, 那么

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \varphi(x^{(k)}, y^{(k)}) \overset{p,\varepsilon}{\approx} u(x,y),$$

这里 $\overset{p,\varepsilon}{\approx}$ 表示以概率 p 落在区间 $[u(x,y)-\varepsilon, u(x,y)+\varepsilon]$ 内. 可以证明 (见后文), 对于任意的 $\varepsilon > 0$, 当 N 充分大且网格剖分足够细时,p 都能趋于 1.

2.2 五点差分格式回顾

将 $[a,b]$ 剖分成 n 份, 设步长为 $h=\frac{b-a}{n}$, 设格点横纵坐标 $x_i=y_i=a+ih, 0\le i\le n$.

当 $1\le i,j\le n-1$ 时, 由

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i,y_i)\approx\frac{1}{h^2}[u(x_{i-1},y_j)-2u(x_i,y_j)+u(x_{i+1},y_j)],$$
$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i,y_i)\approx\frac{1}{h^2}[u(x_i,y_{j-1})-2u(x_i,y_j)+u(x_i,y_{j+1})],$$

将它们代入微分方程 (1), 并用 $u_{i,j}$ 代替 $u(x_i,y_j)$ 可得五点差分格式:

$$u_{i,j}=\frac{1}{4}[u_{i,j-1}+u_{i-1,j}+u_{i+1,j}+u_{i,j+1}]+\frac{1}{4}h^2 f(x_i,y_j), \qquad (2)$$
$$u_{0,j}=\varphi(a,y_j), u_{n,j}=\varphi(b,y_j), \qquad (3)$$
$$u_{i,0}=\varphi(x_i,a), u_{i,n}=\varphi(x_i,b), \qquad (4)$$

这里 $1\le i,j\le n-1$.

2.3 辛钦大数定律回顾

引理 2.1 设 $\{X_k\}_{k=1}^{\infty}$ 为独立同分布随机变量序列, 若 $E[X_1]=\mu$ 存在, 则 $\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}X_k$ 依概率收敛于 μ, 即对任意的 $\varepsilon>0$ 都有

$$\lim_{N\to\infty}P\left\{\left|\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}X_k-\mu\right|<\varepsilon\right\}=1.$$

2.4 主要思想

对于 $u_{i,j}, 1\le i,j\le n-1$, 如果我们能找到一个随机变量 $X_{i,j}$, 使得 $u_{i,j}=E[X_{i,j}]$, 那么由辛钦大数定律, 取 $X_k=X_{i,j}, \forall k$, 则 $\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}X_n$ 依概率收敛于 $u_{i,j}$, 那么我们对随机变量 $X_{i,j}$ 独立采样 N(充分大) 次, 再求平均值, 即可作为 $u_{i,j}$ 的近似值.

所以关键在于寻找满足要求 $E[X_{i,j}]=u_{i,j}$ 的随机变量 $X_{i,j}$.

2.5 先猜后证

2.5.1 调和方程的情形

猜想

考虑最简单的调和方程, 只有一个未知格点值的情况, 如图 2:

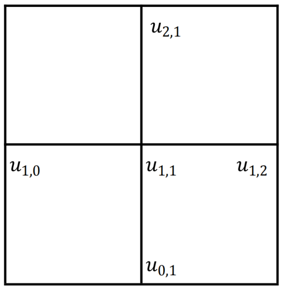

图 2: 随机游走 2

由方程 (2) 可知 $u_{1,1} = \frac{1}{4}[u_{1,0} + u_{0,1} + u_{2,1} + u_{1,2}]$, 显然, 它是离散型随机变量

$$X_{1,1} \sim \begin{pmatrix} u_{2,1} & u_{1,0} & u_{0,1} & u_{1,2} \\ 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

的期望. 而随机变量 $X_{1,1}$ 可以看成从网格坐标 $(1,1)$ 出发, 沿着网格线朝着四个方向均以 $\frac{1}{4}$ 的概率随机游走, 每步走一格, 走到边界点则停止, 停止时, 该边界点处的函数值.

下面内容将基于这种思想进行推广, 并给出证明.

推广与证明

定义 1 设一族随机变量 $\{X_{i,j}, 1 \le i,j \le n-1\}$, 其中 $X_{i,j}$ 表示从网格坐标 (i,j) 处沿着网格线朝着四个方向均以 $\frac{1}{4}$ 的概率随机游走, 每步走一格, 走到边界点则停止, 停止时, 该边界点处的函数值.

定理 2.1 $E[X_{i,j}] = u_{i,j}, \forall 1 \le i,j \le n-1.$

证明 设 $\varphi_{s,t}$ 表示边界网格点 (s,t) 处的函数值, 又随机变量 V 表示第一步随机游走的方向, 它的取值为 $0,1,2,3$, 分别代表上、下、

左、右. 则由条件概率公式, 有

$$
\begin{aligned}
&P(X_{i,j}=\varphi_{s,t})\\
&=P(V=0)P(X_{i,j}=\varphi_{s,t}|V=0)+P(V=1)P(X_{i,j}=\varphi_{s,t}|V=1)\\
&+P(V=2)P(X_{i,j}=\varphi_{s,t}|V=2)+P(V=3)P(X_{i,j}=\varphi_{s,t}|V=3)\\
&=\frac{1}{4}[P(X_{i+1,j}=\varphi_{s,t})+P(X_{i-1,j}=\varphi_{s,t})\\
&+P(X_{i,j-1}=\varphi_{s,t})+P(X_{i,j+1}=\varphi_{s,t})],
\end{aligned}
$$

两边同时乘以 $\varphi_{s,t}$, 有:

$$
\begin{aligned}
\varphi_{s,t}P(X_{i,j}=\varphi_{s,t})=\frac{1}{4}\varphi_{s,t}[&P(X_{i,j-1}=\varphi_{s,t})+P(X_{i,j+1}=\varphi_{s,t})\\
&+P(X_{i-1,j}=\varphi_{s,t})+P(X_{i,j}=\varphi_{s,t})],
\end{aligned}
$$

两边关于 (s,t) 求和即得:

$$E[X_{i,j}]=\frac{1}{4}(E[X_{i,j-1}]+E[X_{i,j+1}]+E[X_{i-1,j}]+E[X_{i+1,j}]).$$

此即为五点差分格式所满足的方程, 由五点差分格式线性方程组解的存在唯一性可得: $E[X_{i,j}]=u_{i,j},\forall 1\le i,j\le n-1$.

2.5.2 一般泊松方程的情形

猜想

为了构造相关随机变量, 我们先考虑 $n=3$ 的情形, 如图 3 所示:

直接求解方程 (2) 系数矩阵的逆矩阵, 可得关系

$$
\begin{bmatrix}u_{1,1}\\u_{1,2}\\u_{2,2}\\u_{2,1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7/24&1/12&1/24&1/12\\1/12&7/24&1/12&1/24\\1/24&1/12&7/24&1/12\\1/12&1/24&1/12&7/24\end{bmatrix}\left(\begin{bmatrix}\varphi_{1,0}+\varphi_{0,1}\\\varphi_{0,2}+\varphi_{1,3}\\\varphi_{3,2}+\varphi_{2,3}\\\varphi_{3,1}+\varphi_{2,0}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}h^2f_{1,1}\\h^2f_{1,2}\\h^2f_{2,2}\\h^2f_{2,1}\end{bmatrix}\right),
$$

此系数矩阵乘以 2, 即为概率矩阵. 再结合五点差分格式

$$u_{i,j}=\frac{1}{4}[u_{i,j-1}+u_{i-1,j}+u_{i+1,j}+u_{i,j+1}]+\frac{1}{4}h^2f(x_i,y_j)$$

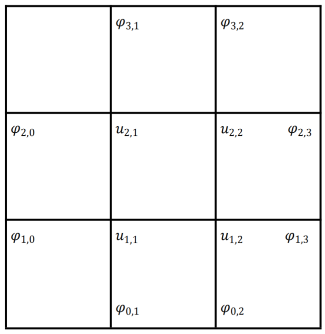

图 3: n=3 的情况

知一点电势受它周围四点影响, 同时受本点电荷密度的影响, 那么由递推关系, 亦受周围四点电荷密度的影响, 扩散出去, 进而受所有点的电荷密度的影响, 那么影响程度是怎么样的呢？由上面 $n=3$ 的式子情况, 比如 $u_{1,1}$ 受内部电荷影响的量为

$$\frac{1}{4}\left(\frac{7}{6}h^2 f_{1,1}+\frac{1}{3}h^2 f_{1,2}+\frac{1}{6}h^2 f_{2,2}+\frac{1}{3}h^2 f_{2,1}\right),$$

由前面的系数的大小, 我们就猜想应该和随机游走经过的次数有关. 随机游走时, 经过内网格点 (k,l) 一次加一次 $\frac{1}{4}h^2 f_{k,l}$. 这里系数不是整数, 它体现的是次数的期望, 我们下面需要对这个猜想进行证明.

推广与证明

定义 2 设随机变量 $O_{i,j}^{k,l}$ 表示从任意网格坐标 (i,j) 出发沿着网格线朝着四个方向均以 $\frac{1}{4}$ 的概率随机游走, 每步走一格, 到边界则停止, 到停止时, 经过内网格坐标 (k,l) 的次数. 这里, 当 (i,j) 为边界网格坐标时, $O_{i,j}^{k,l}\equiv 0$.

定义 3 设电势积累随机变量为

$$C_{i,j}=\sum_{k,l}\left(\frac{1}{4}h^2 f_{k,l}\right)O_{i,j}^{k,l}.$$

定理 2.2 对于任意的内网格坐标 (i,j), 下式成立:
$E[C_{i,j}]=\frac{1}{4}(E[C_{i,j-1}]+E[C_{i-1,j}]+E[C_{i+1,j}]+E[C_{i,j+1}])+\frac{1}{4}h^2f_{i,j}$.
证明 记

$$\delta_{(i,j),(k,l)}=\begin{cases}1, & (i,j)=(k,l)\\ 0, & (i,j)\neq(k,l)\end{cases},$$

由
$E[O_{i,j}^{k,l}]=\delta_{(i,j),(k,l)}+\frac{1}{4}(E[O_{i,j-1}^{k,l}]+E[O_{i-1,j}^{k,l}]+E[O_{i+1,j}^{k,l}]+E[O_{i,j+1}^{k,l}])$
两边同乘以 $\frac{1}{4}h^2f_{k,l}$, 可得

$$\begin{aligned}\frac{1}{4}h^2f_{k,l}E[O_{i,j}^{k,l}]=\frac{1}{4}h^2\delta_{(i,j),(k,l)}f_{k,l}+\frac{1}{4}\times\frac{1}{4}h^2f_{k,l}(E[O_{i,j-1}^{k,l}]+E[O_{i-1,j}^{k,l}]\\+E[O_{i+1,j}^{k,l}]+E[O_{i,j+1}^{k,l}]),\end{aligned}$$

关于 (k,l) 求和, 并由期望的线性性质即得
$E[C_{i,j}]=\frac{1}{4}(E[C_{i,j-1}]+E[C_{i-1,j}]+E[C_{i+1,j}]+E[C_{i,j+1}])+\frac{1}{4}h^2f_{i,j}$.
定义 4 对于任意网格坐标 (i,j), 记随机变量 $Y_{i,j}=X_{i,j}+C_{i,j}$, 即其表示从任意网格坐标 (i,j) 出发沿着网格线朝着四个方向均以 $\frac{1}{4}$ 的概率随机游走, 每步走一格, 到边界则停止, 到停止时, 经过内网格坐标的电势的积累与到达的边界网格坐标处的电势之和.

定理 2.3 对于任意的网格坐标 (i,j), 成立

$$E[Y_{i,j}]=u_{i,j}.$$

证明 当 (i,j) 为边界网格坐标时，由 $E[C_{i,j}]=0,E[X_{i,j}]=\varphi_{i,j}=u_{i,j}$ 知 $E[Y_{i,j}]=u_{i,j}$;
当 (i,j) 是内网格坐标时,

$$E[X_{i,j}]=\frac{1}{4}(E[X_{i,j-1}]+E[X_{i,j+1}]+E[X_{i-1,j}]+E[X_{i+1,j}]),$$

$$E[C_{i,j}]=\frac{1}{4}(E[C_{i,j-1}]+E[C_{i-1,j}]+E[C_{i+1,j}]+E[C_{i,j+1}])+\frac{1}{4}h^2f_{i,j},$$

相加, 即得

$$E[Y_{i,j}]=\frac{1}{4}(E[Y_{i,j-1}]+E[Y_{i-1,j}]+E[Y_{i+1,j}]+E[Y_{i,j+1}])+\frac{1}{4}h^2f_{i,j},$$

知 $E[Y_{i,j}]$ 与泊松方程五点差分格式满足相同的线性方程组，由解的唯一性，可得 $E[Y_{i,j}]=u_{i,j}$.

2.6 算法设计

有了函数值 $u_{i,j}$ 的近似为随机变量 $Y_{i,j}$ 的期望, 则由辛钦大数定律, 对于任意给定的 $\varepsilon > 0$, $\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} y_{i,j}^{(k)} \in [u_{i,j}-\varepsilon, u_{i,j}+\varepsilon]$ 以概率 $p(N,\varepsilon)$ 成立, 且 $\lim_{N\to\infty} p(N,\varepsilon)=1$. 其中 $\left\{y_{i,j}^{(k)}\right\}_{k=1}^{N}$ 为 $Y_{i,j}$ 的 N 次独立采样.

根据我们的理论可以给出以下算法:

算法 泊松方程的蒙特卡洛算法

---

1. **输入**：区域 $[a,b]\times[a,b]$ 边长剖分的个数 n, 要求函数值的网格坐标 (i,j), 采样次数 N.
2. **初始化**：内电势积累 $C=0$, 边界电势积累 $X=0$, 步长 $h=\frac{b-a}{n}$, 记录采样次数的变量 $k=0$, 当前网格坐标 $(ii,jj)=(i,j)$, 当前实际坐标 $(x_{ii},y_{jj})=(a+ih,a+jh)$, 随机变量的值 r, 网格坐标 (i,j) 处函数值的近似 $rs=0$.
3. **过程**：
4. **for** $k=1,2,\ldots,N$ **do**
5. **while** (ii,jj) 是内网格坐标 **do**
6. 得到实际坐标 $(x_{ii},y_{jj})=(a+iih,a+jjh)$.
7. 更新 $C=C+\frac{1}{4}h^2 f(x_{ii},y_{jj})$.
8. 从 $\{0,1,2,3\}$ 中等概率采样, 得到随机变量的值 r.
9. **if**(r=0) ii=ii+1;
10. **elif**(r=1) ii=ii-1;
11. **elif**(r=2) jj=jj-1;
12. **else** jj=jj+1;
13. **end if**
14. **end while**
15. 得到实际坐标 $(x_{ii},y_{jj})=(a+iih,a+jjh)$.
16. 更新 $X=X+\varphi(x_{ii},y_{jj})$.
17. 还原坐标 $(ii,jj)=(i,j)$.
18. **end for**
19. 输出: 网格坐标 (i,j) 处函数值的近似 $rs=\frac{X+C}{N}$.

第 3 部分 收敛性分析与数值算例

3.1 收敛性分析

设 ω 是内网格坐标集合, 对于五点差分格式有结论:

引理 3.1

$$max_{(i,j)\in\omega}|u(x_i,y_j)-u_{i,j}|\le C(\Omega,f,\varphi)h^2,$$

这里 $C(\Omega,f,\varphi)$ 是依赖于 Ω,f,φ 的正常数.

由前面知, 对于任意给定的 $\varepsilon>0$,

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}y_{i,j}^{(k)}\in\left[u_{i,j}-\frac{1}{2}\varepsilon,u_{i,j}+\frac{1}{2}\varepsilon\right]$$

以概率 $p(N,\frac{1}{2}\varepsilon)$ 成立, 且 $\lim_{N\to\infty}p(N,\frac{1}{2}\varepsilon)=1$. 其中 $\left\{y_{i,j}^{(k)}\right\}_{k=1}^{N}$ 为 $Y_{i,j}$ 的 N 次独立采样.
由引理 3.1, 当 n 充分大时, 有

$$\left[u_{i,j}-\frac{1}{2}\varepsilon,u_{i,j}+\frac{1}{2}\varepsilon\right]\subset\left[u(x_i,y_j)-\varepsilon,u(x_i,y_j)+\varepsilon\right],$$

所以

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}y_{i,j}^{(k)}\in[u(x_i,y_j)-\varepsilon,u(x_i,y_j)+\varepsilon]$$

以概率 $q(N,\varepsilon)>p(N,\frac{1}{2}\varepsilon)$ 成立, 更有 $\lim_{N\to\infty}q(N,\varepsilon)=1$.

3.2 数值算例

考虑算例:

$$\begin{cases}-\Delta u(x,y)=(\pi^2-1)e^x\sin(\pi y),(x,y)\in(0,1)\times(0,1),\\ u(0,y)=\sin(\pi y),u(1,y)=e\sin(\pi y),y\in[0,1],\\ u(x,0)=0,u(x,1)=0,x\in(0,1),\end{cases}$$

该问题的精确解为 $u(x,y)=e^x\sin(\pi y)$.
我们对每个内网格点 (i,j) 均利用上面蒙特卡洛算法求解, 得到相

应的近似值为 $rs_{i,j}$, 然后看平均误差 $merror$ 的大小, 这里我们采用 1− 范数, 即

$$merror = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left|rs_{i,j} - u(x_i, y_j)\right|.$$

计算结果如下:

merror \ n ; N	10	20	40	80
10	0.253955	0.250992	0.227093	0.227312
100	0.0847661	0.0806093	0.0740826	0.0720648
1000	0.0234798	0.0256761	0.0235552	0.023018

3.3 误差定性分析

通过表格可以看出, 当区域边长剖分个数 n 固定时, $merror$ 随着采样步数 N 的增加, 明显变小; 当采样步数 N 固定时,$merror$ 随着区域边长剖分个数 n 的增加, 变化较小.

这是可以理解的. 事实上, 我们的误差来源于两部分, 一是, 五点差分格式的解 $u_{i,j}$ 与真实解 $u(x_i, y_j)$ 的误差; 二是, 蒙特卡洛算法所得结果 $rs_{i,j}$ 与五点差分格式的解 $u_{i,j}$ 的误差. 由引理 3.1, 前者是二阶的, 即为 $O(1/n^2)$, 在本例中 (区域边长为 1) 我们取的 n 已经足够大了, 可以保证, 前者带来的误差是微乎其微了, 所以主要误差在于蒙特卡洛算法, 因此当步长增大时能够显著减少误差.

第 4 部分　总结与展望

我们知道, 用蒙特卡洛算法求每个点方程解函数值的近似值时, 求法上不依赖于周围其他点的信息, 只需要采样即可, 而采样可以并行来进行, 这比五点差分格式的并行处理简单得多. 另外一点好处是蒙特卡洛算法可以直接求出任意一点处的近似值, 而五点差分格式做不到这一点. 特别是在高维情形, 蒙特卡洛算法几乎成了唯一的选择.

关于蒙特卡洛算法, 本文只是粗糙地利用一下其基本原理, 这个算法本身就是一门专门而系统的学问, 包括方差减小技术、重要性采样、切片抽样等等, 这些需要将来进一步地学习.

第 5 部分 参考文献

[1] 游皎, 李万爱. 高效蒙特卡罗方法在偏微分方程初边值问题中的应用 [J]. 中山大学学报: 自然科学版,(2015)06-0037-05.
[2] 刘春光. 偏微分方程边值问题的蒙特卡罗解法 [D]. 长春：吉林大学,2004.
[3]Michael J.Quinn. 陈文光, 武永卫等译. MPI 与 OpenMP 并行程序设计:C 语言版 [M]. 北京：清华大学出版社,2004.