

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ
им. акад. В.И. СМЕРНОВА

С.М. Ермаков

**СТАТИСТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Учебное пособие

Часть II
ИНТЕГРАЛЫ. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Санкт-Петербург
2004

УДК 519.21
ББК 517.8
Е 72

Рецензенты:

проф. В.Б. Невзоров (С.-Петербургский гос. ун-т),
проф. Ю.А. Сушков (С.-Петербургский гос. ун-т).

Печатается согласно решению кафедры статистического моделирования
математико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного
университета

Учебное пособие предназначено для студентов специальности 01.02.00 "Прикладная математика и информатика", а также специальностей 35.14.00 "Прикладная информатика в гуманитарной сфере", 35.15.00 "Математическое обеспечение и администрирование информационных систем".

*Издание осуществлено при финансовой поддержке гранта Президента РФ "Ведущие
Научные Школы" НШ 2268.2003.1.*

Содержание

Глава 3. Вычисление интегралов	
3.1 Метод Монте-Карло	4
3.1.1 Метод выделения главной части	5
3.1.2 Замена меры (метод существенной выборки)	6
3.1.3 Интегрирование по части переменных	9
3.1.4 Метод расслоенной выборки	10
3.1.5 Случайные интерполяционно-квадратурные формулы	12
3.2 Метод Квази Монте-Карло	17
3.2.1 Некоторые сведения из теории кубатурных формул	17
3.2.2 "Discrepancy" и его связь с нормой остатка	19
Глава 4. Вычисление суммы ряда Неймана	
4.1 Несмещенные оценки	25
4.2 Вторые моменты, понижение дисперсии	31
4.3 Методы уменьшения дисперсии	33
4.3.1 Метод существенной выборки	33
4.3.2 Понижение порядка интегрирования (векторные оценки)	35
4.3.3 Ветвящиеся траектории	38
4.4 Замечания о трудоемкости. Квазислучайные числа	38
4.4.1 Сравнительная трудоемкость при решении систем линейных алгебраических уравнений	39
4.4.2 Метод Квази Монте-Карло	40
Литература	42
Приложение 1. Таблица простых чисел	43
Приложение 2. Таблица числителей $r_j^{(l)}$	44
Приложение 2. Таблица числителей $r_j^{(l)}$ (продолжение)	45
Приложение 3. Доказательство леммы 3.1	46

Глава 3. Вычисление интегралов

3.1 Метод Монте-Карло

Существенным отличием проблем, возникающих в связи с использованием метода Монте-Карло, от близких по характеру проблем, изучаемых классической вычислительной математикой, является необходимость моделирования вероятностных распределений (мер). Как мы видели в предыдущей главе, меры, определенные на траекториях случайных процессов, могут быть достаточно сложными. В общем случае речь может идти лишь о приближенном (как правило, в слабом смысле) их моделировании. Множество объектов, на которых мера определена, может иметь весьма сложную природу. Мы далее ограничимся примерами задач, в которых проблема моделирования меры достаточно просто решается средствами главы 2.

Таким образом, речь будет идти о вычислении интегралов $J[f] = \int f(x)\mu(dx)$, где μ - вероятностная мера на некотором множестве \mathfrak{X} элементов X . Предполагается, что \mathfrak{X} снабжена некоторой σ -алгеброй и f μ -измеримая на \mathfrak{X} функция.

Тогда, если мы умеем достаточно точно вычислять независимые реализации x_1, x_2, \dots случайной величины X , распределенной в соответствии с мерой μ , то с вероятностью 1 имеем

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j) = \int f(x)\mu(dx). \quad (3.1.1)$$

(Усиленный Закон Больших Чисел. Частный случай).

Если f интегрируема с квадратом ($f \in L^2(\mu)$), то, в качестве частного случая центральной предельной теоремы, имеем при тех же предположениях относительно x_j , что и выше

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P\left(\frac{\sqrt{N}}{\sigma_f} \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j) - \int f(x)\mu(dx) \right| < y\right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^y e^{-u^2} du, \quad (3.1.2)$$

где $\sigma_f^2 = \int f^2(x)\mu(dx) - \left(\int f(x)\mu(dx)\right)^2$, или с заданной вероятностью p , равенство

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j) - \int f(x)\mu(dx) \right| \leq \frac{y\sigma_f}{\sqrt{N}}, \quad (3.1.3)$$

где y определяется из условия $\int_0^y e^{-u^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{2}}p$.

Таким образом, если интеграл $J[f]$ оценивается с помощью суммы $S_N[f] = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j)$, то погрешность при заданном p убывает как $O(N^{-1/2})$.

Замечание. Если $f \in L^p(\mu)$ $1 \leq p < 2$, то равенство (3.1.1) очевидным образом имеет место, но погрешность убывает медленнее чем $N^{-1/2}$. В частности имеет место неравенство (Бар, Эссеен [1])

$$E|S_N[f] - J|^p \leq \frac{2}{N^{p-1}} \sum_{k=1}^N E|f(x_k) - J|^p. \quad (3.1.4)$$

Формулы (3.1.1),(3.1.3) служат обоснованием использования суммы $S_N[f]$ в качестве приближенного значения интеграла J . Очень большое число приложений использует подобную вычислительную схему.

Заметим сразу же, что $S_N[f]$ не является единственной несмещенной оценкой интеграла. Более того, она не является даже самой простой (в некотором разумном смысле) оценкой. Поясним это на простейшем примере интеграла $\int_0^1 f(x)dx$, где $f(x)$ интегрируемая функция и $0 \leq f(x) \leq 1$. Поскольку $\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 \int_0^{f(x)} dx dy$, то имеем

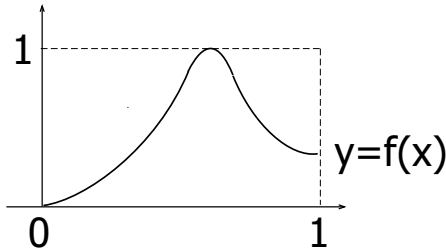


Рис 3.1.

$$E\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)\right) = E\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \zeta_i\right) = \int_0^1 f(x)dx,$$

$$\text{где } \zeta_i = \begin{cases} 1, & \text{если } \alpha_{2i-1} \leq f(\alpha_{2i}) \\ 0, & \text{если } \alpha_{2i-1} > f(\alpha_{2i}), \end{cases}$$

$$i=1, \dots, N$$

и $\alpha_1, \dots, \alpha_{2N}$ – независимые реализации равномерно распределенной на промежутке $[0, 1]$ случайной величины (в нашем случае псевдослучайные числа). При этом

$$D_1 = \mathbf{D}\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\alpha_i)\right) = \frac{1}{N} \left(\int_0^1 f^2(x)dx - \left(\int_0^1 f(x)dx\right)^2 \right),$$

$$D_2 = \frac{1}{N} (p(1-p)), \quad p = \int_0^1 f(x)dx \quad \text{и, очевидно,}$$

$D_2 \geq D_1$ для всех f рассматриваемого нами вида.

Порядок убывания погрешности, определяемый формулой (3.1.3), считается очень медленным (уменьшение погрешности в 10 раз требует увеличения вычислительной работы в 100 раз). Эта трудность могла бы быть непреодолимой при решении многих задач, но наличие множителя σ_f в правой части (3.1.3) подсказывает возможность увеличения эффективности метода за счет построения оценок, имеющих вычисляемый интеграл своим общим математическим ожиданием, но возможно малую дисперсию. Ниже мы рассмотрим некоторые распространенные методы понижения дисперсии оценок.

3.1.1 Метод выделения главной части

Очень простой метод, предполагающий, что заранее (аналитически или численно) определено значение интеграла $J_1 = \int g(x)\mu(dx)$, где g (как и f) интегрируема с

квадратом по отношению к мере μ и y близка к f в метрике $L^2(\mu)$. Тогда оценка

$$\varkappa_1 = J_1 + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f(x_i - g(x_i))], \quad (3.1.5)$$

где x_i независимы и распределены в соответствии с мерой μ , является несмещенной оценкой интеграла $J[f]$. Ее дисперсия есть

$$D\varkappa_1 = \frac{1}{N} \left[\int (f - g)^2 \mu(dx) - (J[f - g])^2 \right]. \quad (3.1.6)$$

В соответствии с предположением о близости f к g эта дисперсия меньше чем дисперсия $S_N[f]$. Этот простой прием иногда может быть очень полезен, но отметим сразу, что необходимость при каждом i вычислять значение $g(x_i)$ увеличивает вычислительную работу.

3.1.2 Замена меры (метод существенной выборки)

Один из наиболее употребительных методов понижения дисперсии. Предварительно следует напомнить определение производной Радона-Никодима.

Если σ -конечная мера μ допускает представление в виде

$$\mu(A) = \int_A f(x) \nu(dx),$$

$A \in Q$ - σ -алгебре подмножеств рассматриваемого множества \mathfrak{X} , а f неотрицательная интегрируемая функция, то $f(x)$ называют производной Радона-Никодима меры μ по мере ν и обозначают

$$f(x) = \frac{d\mu}{d\nu}(x).$$

Согласно теореме Радона-Никодима для заданных σ -конечных мер μ и ν производная $f(x)$ существует в том и только в том случае, если μ абсолютно непрерывна по отношению к ν ($\mu \ll \nu$) т.е. из равенства $\nu(A) = 0$ следует $\mu(A) = 0$.

Пусть, например, вероятностная мера ν в единичном квадрате такова. С вероятностью p_1 мы имеем равномерное распределение в квадрате, с вероятностью p_2 равномерное распределение на его диагонали ($x = y$) и с вероятностью p_3 дискретное распределение в точках (x_i, y_i) $i = 1, 2, 3, 4$ квадрата

номер точки	1	2	3	4
вероятность	0,1	0,1	0,2	0,6

$$p_1 + p_2 + p_3 = 1.$$

Для того, чтобы мера μ была абсолютно непрерывна по отношению к этой мере необходимо, чтобы с вероятностью $q_1 > 0$ она имела плотность $\varphi_1(x, y)$ отличную от нуля в единичном квадрате, с вероятностью $q_2 > 0$ имела плотность $\varphi_2(x)$ отличную от нуля на диагонали и с вероятностью $q_3 > 0$ имела в точках (x_i, y_i) распределение вида

номер точки	1	2	3	4
вероятность	q_{11}	q_{12}	q_{13}	q_{14}

$$q_{1,i} > 0, \quad \sum_{i=1}^4 q_{1,i} = 1.$$

Производная Радона-Никодима $\frac{d\mu}{d\nu}(x, y)$ тогда есть

$$\frac{d\mu}{d\nu}(x, y) = \begin{cases} \varphi_1(x, y) \cdot \frac{p_1}{q_1} & x, y \in D \\ \varphi_2(x, y) \cdot \frac{p_2}{q_2} & x = y \quad x, y \in D \\ \frac{p_3}{q_3} \frac{0,1}{q_{11}}, \quad x=x_1 \frac{p_3}{q_3} \frac{0,1}{q_{12}}, \quad x=x_2 \frac{p_3}{q_3} \frac{0,2}{q_{13}}, \quad x=x_3 \frac{p_3}{q_3} \frac{0,6}{q_{14}}, \quad x=x_4 \\ y=y_1 \quad y=y_2 \quad y=y_3 \quad y=y_4 \end{cases}$$

Таким образом, если ν любая σ -конечная мера, по отношению к которой μ абсолютно непрерывна, то

$$J[f] = \int f(x)\mu(dx) = \int f(x)\frac{d\mu}{d\nu}(x)\nu(dx), \quad (3.1.7)$$

и для интеграла $J[f]$ может быть предложено множество несмещенных оценок

$$\varkappa_\nu[f] = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(Y_j) \frac{d\mu}{d\nu}(Y_j), \quad (3.1.8)$$

где Y_j независимые случайные величины, распределенные в соответствии с мерой ν . $\varkappa_\nu[f]$ имеют общее математическое ожидание, не зависящее от ν , но легко видеть, что их дисперсии от ν зависят. Действительно

$$E\varkappa_\nu^2[f] = \frac{1}{N} \int f^2(x) \left(\frac{d\mu}{d\nu}(x)\right)^2 \nu(dx) = \frac{1}{N} \int f^2(x) \frac{d\mu}{d\nu}(x) \mu(dx). \quad (3.1.9)$$

Естественно, возникает задача-среди всех оценок вида (3.1.7) выбрать оценку с наименьшей дисперсией (выбрать меру ν , доставляющую оценке (3.1.7) минимальную дисперсию).

Для решения этой задачи отметим прежде всего, что имеет место неравенство (Коши-Буняковского)

$$\int \left(f(x) \frac{d\mu}{d\nu}(x)\right)^2 \nu(dx) \geq \left(\int |f(x) \frac{d\mu}{d\nu}(x)| \nu(dx)\right)^2 = \left(\int |f(x)| \mu(dx)\right)^2. \quad (3.1.10)$$

Таким образом, мы получили оценку снизу для $E\varkappa_\nu^2[f]$.

Легко указать (по крайней мере одну) меру ν определенную на множестве $B_f = \{x : f(x) \neq 0; \quad x \in \mathfrak{X}\}$, для которой в (3.1.10) имеет место равенство

Это

$$\nu_0(dx) = \frac{1}{\bar{J}} |f(x)| \mu(dx), \quad x \in B_f, \quad \bar{J} = \int |f(x)| \mu(dx). \quad (3.1.11)$$

Действительно,

1. μ абсолютно непрерывна по отношению к ν_0 . Она отличается от ν_0 множителем $\frac{\bar{J}}{|f(x)|}$, $x \in B_f$.

2. Имеет место равенство:

$$\int \left(f(x) \frac{d\mu}{d\nu}(x)\right)^2 \nu_0(dx) = \int \left(|f(x)| \frac{\bar{J}}{|f(x)|}\right)^2 \cdot \frac{1}{\bar{J}} |f(x)| \mu(dx) = \bar{J}^2.$$

Откуда следует, что при $\nu = \nu_0$ $E\kappa_\nu^2[f]$, а следовательно, и $D\kappa_\nu[f]$ достигает своей нижней границы. Полученный результат составляет содержание следующей теоремы.

Теорема. 3.1(О существенной выборке [2]).

Среди несмещенных оценок $J[f]$ вида

$$\kappa_\nu[f] = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(Y_j) \frac{d\mu}{d\nu}(Y_j),$$

где Y_j независимые случайные величины, распределенные в соответствии с мерой $\nu(dx)$, оценка $\kappa_{\nu_0}[f]$, где

$$\nu_0(dx) = \frac{1}{J} |f(x)| \mu(dx)$$

имеет наименьшую возможную дисперсию, равную

$$D\kappa_{\nu_0}[f] = \bar{J}^2 - J^2. \quad (3.1.12)$$

Следствие. Если $f(x) \geq 0$, $x \in \mathfrak{X}$, то имеем

$$D\kappa_{\nu_0}[f] = 0. \quad (3.1.13)$$

Последнее равенство очевидным образом вытекает из (3.1.12).

Обсуждение практических вопросов, связанных с выбором оптимальной плотности мы проведем на простом случае, когда мера μ задается плотностью $\mu(dx) = \varphi(x)dx$ $x \in D \subset R^s$.

Как в этом, так и в общем случае ясно, что моделирование случайной величины, имеющей распределение ν_0 задача столь же сложная, что и вычисление исходного интеграла.

Теорема 3.1, однако, может быть полезна в том отношении, что она рекомендует выбирать меру, близкую в некотором смысле к оптимальной. Пусть $\nu(dx) = \psi(x)dx$. В этом случае

$$E\kappa_\nu^2 = \int \left(f(x) \frac{\varphi(x)}{\psi(x)} \right)^2 \psi(x) dx, \quad \text{а} \quad \nu_0(dx) \equiv \psi_0(x)(dx) = \frac{1}{J} |f(x)| \varphi(x) dx.$$

Будем рассматривать случай $f(x) \geq 0$ и считать, что мы умеем моделировать плотность $\psi_\varepsilon(x) = \bar{J}_\varepsilon^{-1} (f(x)\varphi(x) + \varepsilon(x))$, где ε малая по норме L_1 функция. Обозначая κ_ε оценку вида (3.1.8), соответствующую этой плотности, имеем

$$\begin{aligned} E\kappa_\varepsilon^2 &= \int \frac{f^2(x)\varphi^2(x)}{\psi_\varepsilon(x)} dx = \bar{J}_\varepsilon \cdot \int \frac{f^2(x)\varphi^2(x)}{f(x)\varphi(x) + \varepsilon(x)} dx = \\ &= (J[f] + \bar{\varepsilon}) \cdot \int f(x)\varphi(x) \left(1 - \frac{\varepsilon(x)}{f(x)\varphi(x)} + \frac{\frac{\varepsilon^2}{f^2\varphi^2}}{1 - \frac{\varepsilon^2}{f^2\varphi^2}} \right), \end{aligned}$$

где $\bar{\varepsilon} = \int \varepsilon(x) dx$. Далее имеем

$$E\mathfrak{K}_\varepsilon^2 = (J[f] + \bar{\varepsilon}) \left(J[f] - \bar{\varepsilon} + \int \frac{\frac{\varepsilon^2(x)}{f^2(x)\varphi^2(x)}}{1 - \frac{\varepsilon^2(x)}{f^2(x)\varphi^2(x)}} \cdot f(x)\varphi(x) dx \right).$$

Если теперь обозначить $\varepsilon_0(x)$ относительную ошибку $\frac{|\varepsilon(x)|}{f(x)\varphi(x)}$, то получим

$$E\mathfrak{K}_\varepsilon^2 = J^2[f] - \bar{\varepsilon}^2 + (J[f] + \bar{\varepsilon}) \cdot \int \frac{\varepsilon_0^2(x)}{1 - \varepsilon_0^2(x)} f(x)\varphi(x) dx. \quad (3.1.14)$$

Таким образом, отклонение на $\varepsilon(x)$ в оптимальной плотности вызывает, грубо говоря, отклонения порядка $\|\varepsilon\|^2$ у дисперсии оценки. Интересно отметить роль относительной погрешности $\varepsilon_0(x)$ в равенстве (3.1.14).

Включение особенности в плотность. Важной особенностью приемов понижения дисперсии является то, что их формальное применение в задачах, где оценка интеграла может не иметь второго момента, позволяет выбрать такой вариант оценки, где дисперсия конечна. Из теоремы 3.1 следует, что теоретически это можно сделать всегда, когда f абсолютно интегрируема относительно меры μ . Практическую сторону обычно поясняют простейшим примером интеграла $\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}} dx$. Предполагается, что $f(x)$ отделена от нуля и ограничена на $[0, 1]$. Если использовать оценку $\mathfrak{K}_1 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{f(\alpha_j)}{\sqrt{\alpha_j}}$, где α_j равномерно распределены на $[0, 1]$, то как легко видеть, интеграл, через который выражается её второй момент ($\int_0^1 \frac{f^2(x)}{x} dx$) расходится. Однако достаточно использовать плотность $\frac{1}{2\sqrt{x}}$, чтобы получить оценку $\mathfrak{K}_2 = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N f(\beta_j)$, которая несмещена при β_j независимых и распределенных с этой плотностью и имеет конечную дисперсию $D\mathfrak{K}_2 = \frac{1}{N} (2 \int_0^1 \frac{f^2(x)}{\sqrt{x}} dx - (\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}} dx)^2)$. Прием такого рода носит название "Включение особенности в плотность" и широко используется на практике.

3.1.3 Интегрирование по части переменных

Предположим, что интеграл $J[f]$ представим в виде повторного

$$\int_{(\mathfrak{X})} f(x)\mu(dx) = \int_{(\mathcal{Y})} \mu_1(dy) \int_{(\mathcal{Z})} \mu_2(dz) f(y, z), \quad \text{т.е.}$$

$$x = (y, z), \quad y \in \mathcal{Y}, \quad z \in \mathcal{Z}, \quad \mathfrak{X} = \mathcal{Y} \times \mathcal{Z} \quad \text{и} \quad \mu = \mu_1 \otimes \mu_2, \quad (3.1.15)$$

и выполнено аналитическое интегрирование по переменной z , так, что известна функция

$$F(y) = \int_{(\mathcal{Z})} \mu_2(dz) f(y, z). \quad (3.1.16)$$

Сравним дисперсии двух несмещенных оценок интеграла $J[f]$

$$\mathfrak{K}_1 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(X_j Z_j), \quad Y_j \quad \text{распределены в соответствии с мерой} \quad \mu_1,$$

а Z_j в соответствии с μ_2 и

$$\varkappa'_1 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N F(Y_j), \quad Y_j \text{ распределены в соответствии с } \mu_1.$$

Поскольку их математические ожидания равны, достаточно сравнить вторые моменты. Рассмотрим разность

$$\begin{aligned} E\varkappa_1^2 - E(\varkappa'_1)^2 &= \frac{1}{N} \left[\int \mu_1(dy) \int \mu_2(dz) f^2(y, z) - \int \mu_1(dy) F^2(y) \right] = \\ &= \frac{1}{N} \int \mu_1(dy) \left[\int f^2(y, z) \mu_2(dz) - \left(\int f(y, z) \mu_2(dz) \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Но при каждом фиксированном Y выражение в квадратных скобках неотрицательно (Неравенство Коши-Буняковского). Отсюда получаем

$$E\varkappa_1^2 - E(\varkappa'_1)^2 \geq 0, \text{ т.е. } D(\varkappa'_1)^2 \leq D\varkappa_1^2. \quad (3.1.17)$$

Интегрирование по части переменных может только уменьшить дисперсию оценки.

Замечание. На этом примере можно особенно отчетливо видеть, что уменьшение дисперсии не может служить самоцелью. Функция F , как правило, значительно сложнее функции f . Работа по вычислению значений F - трудоемкость вычисления оценки \varkappa'_1 - может значительно превосходить трудоемкость вычисления оценки \varkappa_1 . В конкретных случаях вопрос о выгодности оценки \varkappa'_1 подлежит исследованию. Возможен, правда, случай, когда $D\varkappa_1 = +\infty$, а $D\varkappa'_1 < +\infty$ в этом случае, как правило, преимущество отдается оценке \varkappa'_1 .

3.1.4 Метод расслоенной выборки

Метод основан на том, что $\int_{\mathfrak{X}} f(x) \mu(dx)$ может быть представлен в виде суммы интегралов

$$J[f] = \sum_{k=1}^m \int_{\mathfrak{X}_k} f(x) \mu(dx), \text{ где } \mathfrak{X} = \bigcup_{k=1}^m \mathfrak{X}_k \text{ и } \mathfrak{X}_k \cap \mathfrak{X}_\ell = \emptyset \text{ при } k \neq \ell.$$

Каждый из интегралов вычисляется с помощью оценки вида (3.1.8) с различным, вообще говоря, числом слагаемых при каждом k , т.е.

$$J[f] \sim \sum_{k=1}^m \frac{\mu(\mathfrak{X}_k)}{n_k} \sum_{i_k=1}^{n_k} f(X_{i_k}^{(k)}), \quad (3.1.18)$$

где $X_{i_k}^{(k)}$ имеют распределение $\mu_k(dx) = \begin{cases} \frac{\mu(dx)}{\mu(\mathfrak{X}_k)}, & x \in \mathfrak{X}_k, \\ 0, & x \notin \mathfrak{X}_k. \end{cases}$. Легко проверить, что второй момент этой оценки зависит от характера разбиения множества \mathfrak{X} на подмножества \mathfrak{X}_k и чисел n_k . Возможна постановка задачи об оптимальном разбиении множества \mathfrak{X} и

выборе n_k ($\sum_{k=1}^m n_k = N$). Её решение для $m = 2$ можно найти, например, в [2]. При фиксированном разбиении $\mathfrak{X} = \bigcup_{k=1}^m \mathfrak{X}_k$ наилучший результат может быть получен, когда $\frac{n_k}{N}$ близки к $\int_{\mathfrak{X}_k} f(x)\mu(dx)$. Здесь внимательный читатель может усмотреть аналогию с методом существенной выборки.

Далее мы рассмотрим весьма частный случай, из которого могут быть сделаны любопытные выводы.

Пусть $m = 2$ и множество \mathfrak{X} разделено произвольным образом на два непересекающихся подмножества равной меры $\mu(\mathfrak{X}_1) = \mu(\mathfrak{X}_2) = 1/2$. Для вычисления интеграла используется оценка

$$J[f] \sim \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N \left(f(X_j^{(1)}) + f(X_j^{(2)}) \right) = \varkappa_3[f], \quad (3.1.19)$$

где $X_j^{(1)}$ и $X_j^{(2)}$ независимые при различных j реализации случайных величин, распределенных по законам $\mu_1(dx)$ и $\mu_2(dx)$ соответственно,

$$\mu_1(dx) = \begin{cases} 2\mu(dx) & x \in \mathfrak{X}_1 \\ 0 & x \notin \mathfrak{X}_1 \end{cases}, \quad \mu_2(dx) = \begin{cases} 2\mu(dx) & x \in \mathfrak{X}_2 \\ 0 & x \notin \mathfrak{X}_2 \end{cases}.$$

При одном и том же j $X_j^{(1)}$ и $X_j^{(2)}$, вообще говоря, зависимы. Их совместная плотность по отношению к $\mu^2(dx, dy)$ есть

$$\varphi(x, y) = \begin{cases} 2, & x \in \mathfrak{X}_1, y \in \mathfrak{X}_2 \text{ или } x \in \mathfrak{X}_2, y \in \mathfrak{X}_1 \\ 0, & x \in \mathfrak{X}_1, y \in \mathfrak{X}_1 \text{ или } x \in \mathfrak{X}_2, y \in \mathfrak{X}_2 \end{cases}.$$

В простейшем случае, когда $\mathfrak{X} = [0, 1]$, μ - мера Лебега, $\mathfrak{X}_1 = [0, 1/2]$, $\mathfrak{X}_2 = [1/2, 1]$, $\varphi(x, y)$ выглядит, как это указано на рис. 3.2.

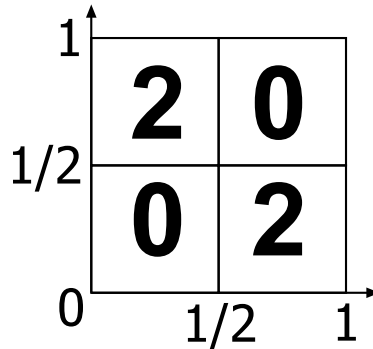


Рис 3.2.

Вычислим $D\varkappa_3[f] = \frac{1}{N} \left\{ \int_{\mathfrak{X}_1} \mu(dX) \int_{\mathfrak{X}_2} \mu(dY) 2 \left[\frac{1}{2} (f(X) + f(Y)) \right]^2 + \int_{\mathfrak{X}_2} \mu(dX) \int_{\mathfrak{X}_1} \mu(dY) 2 \left[\frac{1}{2} (f(X) + f(Y)) \right]^2 - (J[f])^2 \right\} = \frac{1}{N} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\mathfrak{X}} f^2(X) \mu(dx) + 2ab - (a+b)^2 \right\}$, где обозначено $a = \int_{\mathfrak{X}_1} f(x)\mu(dx)$, $b = \int_{\mathfrak{X}_2} f(x)\mu(dx)$.

Поскольку $2ab - (a + b)^2 = \frac{(a+b)^2 + (a-b)^2}{2}$, то имеем

$$D\kappa'_3 = \frac{1}{N} \left\{ \frac{1}{2} \left(\int_{\mathfrak{X}} f^2(x) \mu(dx) - \left(\int_{\mathfrak{X}} f(x) \mu(dx) \right)^2 - (a - b)^2 \right) \right\}. \quad (3.1.20)$$

Теперь заметим, что при вычислении $J[f]$ с помощью оценки (3.1.8) с $2N$ испытаниями (т.е. без расслоения) мы имели бы дисперсию

$$D\kappa_1 = \frac{1}{2N} \left[\int f^2(x) \mu(dx) - \left(\int f(x) \mu(dx) \right)^2 \right].$$

Сравнивая это выражение с (3.1.20), имеем $D\kappa_3 \leq D\kappa_1$. Таким образом расслоение (в этом частном случае, по крайней мере) всегда не увеличивает дисперсию - уменьшает её, если $a \neq b$.

Расслоение уменьшает случайность - мы гарантированы, что половина точек, в которых вычисляется f , будет находиться в κ_1 а половина в κ_2 . При отсутствии расслоения вероятность события $\{X_j^{(1)} \in \mathfrak{X}_1 \text{ и } X_j^{(2)} \in \mathfrak{X}_1\}$ положительна. Очевидно, разбивая \mathfrak{X} на 4, 8 и т.д. частей мы будем улучшать ситуацию и получим почти детерминированную процедуру. Сравнительно легко показать, что аналогичная ситуация имеет место при делении множества \mathfrak{X} на любое число частей равной меры. И мы должны были бы изгнать случайность (метод Монте-Карло!), но, если деление отрезка пополам не требует в сущности дополнительной вычислительной работы, то деление гиперкуба большой размерности на части равного объема совсем не простая проблема. Этой проблемы, очевидно, нет при использовании датчика случайных чисел. Существуют и другие преимущества подхода, основанного на моделировании распределений. Об этом будет сказано в других разделах.

3.1.5 Случайные интерполяционно-квadrатурные формулы

Пусть \mathfrak{X} таково, что на нем могут быть определены линейно-независимые функции $\varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$. Рассмотрим следующую задачу интерполирования функции $f(x)$. Выберем в \mathfrak{X} m различных точек X_1, \dots, X_m (предполагается, что это можно сделать) и определим константы C_1, \dots, C_m из условия

$$\sum_{j=1}^m C_j \varphi_j(X_\ell) = f(X_\ell), \quad (\text{mod } \mu) \quad \ell = 1, 2, \dots, m. \quad (3.1.21)$$

С помощью формул Крамера для интерполяционного многочлена $\mathcal{L}[f, x] = \sum_{j=1}^m c_j \varphi_j(x)$, удовлетворяющего (3.1.21) получаем выражение

$$\mathcal{L}[f, x] = \frac{-1}{\det \|\varphi_i(x_j)\|_{i,j=1}^m} \begin{vmatrix} 0 & \varphi_1(x) & \dots & \varphi_m(x) \\ f(x_1) & \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f(x_m) & \varphi_1(x_m) & \dots & \varphi_m(x_m) \end{vmatrix} \quad (3.1.22)$$

в предположении, что $\det \|\varphi_i(x_j)\|_{i,j=1}^m$ - отличен от нуля. Заметим, что проверка нужных нам свойств $\mathcal{L}[f, x]$ может быть выполнена непосредственно (без Формул Крамера). Действительно, разлагая определитель в числителе (3.1.22) по элементам первой строки,

убеждаемся, что $L[f, x]$ имеет вид $\sum_{j=1}^m C_j \varphi_j(x)$. Подставляя вместо x значение x_k , имеем в качестве первой строки упомянутого определителя $(0, \varphi_1(x_k), \dots, \varphi_m(x_k))$. Вычитаем эту строку из $k + 1$ -ой строки получаем в качестве $k + 1$ -ой строки $(f(x_k), 0, \dots, 0)$. Далее нужно раскрыть определитель по элементам этой строки и в оставшемся определителе поставить 1-ю строку на k -тое место. Получаем $\mathcal{L}[f, x_k] = f(x_k)$, $k = 1, 2, \dots, m$.

Предположим теперь, что $f(x)$ и $\varphi_\ell(x)$, $\ell = 1, 2, \dots, m$ интегрируемы с квадратом относительно меры μ . Тогда, не умаляя общности, можно считать, что φ_ℓ ортонормированы. (Можно проверить даже, что процесс ортонормализации вызовет лишь деление C_j на константу нормировки).

Если f и φ_ℓ обладают некоторыми свойствами гладкости, то принято считать, что при удачном выборе точек x_k многочлен $\mathcal{L}[f, x]$ будет приближать функцию f . Эти же соображения позволяют предполагать, что $\int \varphi_1(x) \mathcal{L}[f, x] \mu(dx)$ будет приближать интеграл $\int \varphi_1(x) f(x) \mu(dx)$. Заметим, что при $\varphi_1(x) \equiv 1$ мы имеем интеграл $J[f]$. Кроме того, роль φ_1 может выполнять любая из φ_ℓ ($\ell = 2, \dots, m$). Используя равенство (3.1.22) и ортонормированность φ_ℓ , имеем

$$\int \varphi_1(x) \mathcal{L}[f, x] \mu(dx) = \frac{1}{\det \|\varphi_i(x_j)\|_{i,j=1}^m} \det \|f(x_k), \varphi_2(x_k), \dots, \varphi_m(x_k)\|_{k=1}^m. \quad (3.1.23)$$

Разложение определителя в числителе (3.1.23) по элементам первого столбца дает

$$\frac{1}{\det \|\varphi_i(x_j)\|_{i,j=1}^m} \det \|f(x_k), \varphi_2(x_k), \dots, \varphi_m(x_k)\|_{k=1}^m = \sum_{k=1}^m \mathcal{A}_k(x_1, \dots, x_m) f(x_k),$$

т.е. интегралу соотносится кубатурная сумма

$$\int f(x) \varphi_1(x) \mu(dx) \sim \sum_{k=1}^m \mathcal{A}_k(x_1, \dots, x_m) f(x_k). \quad (3.1.24)$$

Формулу (3.1.23) принято называть интерполяционно-кубатурной формулой.

Если, как мы говорили, на уровне интуиции сумма $K_m[f, x_1, \dots, x_m] = \sum_{k=1}^m \mathcal{A}_k(x_1, \dots, x_m) f(x_k)$ приближает искомый интеграл, то можно ожидать, что, выбирая точки x_ℓ ($\ell = 1, \dots, m$) случайно и строя по этим точкам (случайную) кубатурную сумму, мы сможем получить инструмент для понижения дисперсии. Перейдем к строгой постановке задачи.

Пусть набор точек $Q = (x_1, \dots, x_m)$ выбирается случайно с плотностью $g(Q)$ относительно меры $\mu^m(dQ)$. Если $\Delta(Q) = \det \|\varphi_i(x_j)\|_{i,j=1}^m$ отличен от нуля, то строится случайная кубатурная сумма $K_m[f, Q]$. Наша задача состоит в том, чтобы разумным образом выбрать $g(Q)$. Потребуем, чтобы выполнялось равенство

$$EK[f, Q] = \int \mu^n(dQ) K(f, Q) g(Q) = \int \varphi_1(x) f(x) \mu(dx). \quad (3.1.25)$$

Простой пример $m = 2$, μ - мера Лебега на отрезке $[0, 1]$, $\varphi_1 \equiv 1$, $\varphi_2(x) = \sqrt{12}(x - 1/2)$ показывает, что нельзя выбирать x_1 и x_2 независимыми. Действительно в этом случае $K[f, Q] = \frac{f(x_1)(x_2 - 1/2) - f(x_2)(x_1 - 1/2)}{x_2 - x_1}$ и $EK[f, Q] =$

$\int_0^1 dx_1 \int_0^1 dx_2 \frac{f(x_1)(x_2-1/2)-f(x_2)(x_1-1/2)}{x_2-x_1} g(x_1, x_2)$. Интеграл имеет особенность вдоль диагонали квадрата $x_2 = x_1$. Если f произвольная μ интегрируемая с квадратом, то по крайней мере для некоторых f он будет расходиться, когда $g(x_1, x_2) = g_1(x_1)g_2(x_2)$ и конечно, выполнение равенства (3.1.25) в этом случае возможно лишь для некоторых функций.

Условием существования $K[f, Q]$ является отличие от нуля определителя $\Delta(Q)$. Следует ожидать, что $g(Q)$ должна содержать $\Delta(Q)$ в качестве множителя. Далее будет показано, что $g(Q) = Const \cdot \Delta^2(Q)$ обеспечивает выполнение равенства (3.1.25).

Это не единственная плотность, удовлетворяющая этому условию. Подробный анализ проблемы выбора нужной $g(Q)$ можно найти в книге [2]. Мы ограничимся здесь лишь простейшим частным случаем.

Дальнейшее изложение будет использовать Лемму, являющуюся некоторым обобщением известных свойств интегралов от определителей. Доказательство её приводится ниже, в приложении 3 к данному учебному пособию.

Лемма. 3.1 Пусть заданы два набора функций $\varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ и $\psi_1(x), \dots, \psi_m(x)$, принадлежащих $L^2(\mu)$. Справедливо равенство

$$\int \mu^m(dQ) \det \|\varphi_i(x_j)\|_{i,j=1}^m \cdot \det \|\psi_k(x_\ell)\|_{k,\ell=1}^m = m! \det \|(\varphi_i \psi_k)\|_{i,k=1}^m,$$

$$\text{где } (\varphi_i \psi_k) = \int \varphi_i(x) \psi_k(x) \mu(dx).$$

С помощью этой леммы легко доказать следующую теорему

Теорема. 3.2 Пусть $\varphi_\ell(x)$, $\ell = 1, \dots, m$ ортонормированная в $L^2(\mu)$ система функций. Тогда

1. $\frac{1}{m!} \Delta^2(Q)$ является плотностью по отношению к $\mu^n(dQ)$

2. Если Q выбирается случайно в соответствии с этой плотностью, то справедливо равенство

$$EK[f, Q] = \int \varphi_1(x) f(x) \mu(dx), \quad (3.1.26)$$

где $K[f, Q] = \frac{\Delta(f, Q)}{\Delta(Q)}$, $\Delta(f, Q) = \det \|f(x_k, \varphi_2(x_k), \dots, \varphi_m(x_k))\|_{k=1}^m$.

Доказательство Первое утверждение очевидно (матрица $\|(\varphi_i, \varphi_k)\|_{k=1}^m$ является единичной). Далее,

$$EK[f, Q] = \int \mu^n(dQ) \frac{\Delta(f, Q)}{\Delta(Q)} \cdot \frac{1}{m!} \Delta^2(Q) = \int \mu^n(dQ) \Delta(f, Q) \Delta(Q).$$

Последний интеграл вычисляется с помощью Леммы, если положить $\psi_1 = f$, $\psi_\ell = \varphi_\ell$, $\ell = 2, \dots, m$ и считать φ_ℓ ортонормированным. Имеем

$$EK[f, Q] = \begin{vmatrix} (f_1 \varphi_1) & (f_1 \varphi_2) & \dots & (f_1 \varphi_m) \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 1 & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 1 \end{vmatrix} = (f_1 \varphi_1) = \int \varphi_1(x) f(x) \mu(dx),$$

что и завершает доказательство.

Способ вычисления дисперсии $K[f, Q]$ зависит от свойств системы функций $\varphi_1, \dots, \varphi_m$.

Определение. 3.1 Назовем систему функций $\{\varphi_\ell\}_1^m$ регулярной по отношению к мере μ , если она удовлетворяет условию

$$\mu^m\{Q : \Delta(Q) = 0\} = 0. \quad (3.1.27)$$

Пример. Функции $1, \sqrt{12}(x - 1/2)$ ($m = 2$) образуют регулярную систему. $\Delta(Q) = \sqrt{12}(x_2 - x_1)$ обращается в нуль на диагонали единичного квадрата, которая имеет μ^2 меру нуль. μ - мера Лебега. Легко показать, что многочлены от одной и многих переменных регулярны в ограниченной области по отношению к мере Лебега.

Примером нерегулярной системы по отношению к лебеговой мере на $(0,1)$ является система ($m = 2$) функций

$$\varphi_1(x) \equiv 1, \quad \varphi_2(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 1/2] \\ -1, & x \in [1/2, 1]. \end{cases} \quad (3.1.28)$$

В этом случае $\Delta(Q) = (\varphi_2(x_2) - \varphi_2(x_1))$. Легко подсчитать, что $\mu^2\{x_1 x_2 : (\varphi_2(x_2) - \varphi_2(x_1)) = 0\} = 1/2$.

Функции (3.1.28) представляют собой две первые функции системы функций Хаара. Функции Хаара, сплайны и вейвлеты могут служить примером нерегулярных систем.

Теперь мы можем доказать следующую теорему.

Теорема. 3.3 В условиях теоремы 3.2 имеет место неравенство

$$DK[f, Q] \leq \int [f(x) - \sum_{\ell=1}^m (f, \varphi_\ell(x))^2] \mu(dx). \quad (3.1.29)$$

При этом, если система функций регулярна, то в (3.1.29) имеет место знак равенства.

Доказательство Вычислим $EK^2[f, Q] = \int_{\{Q: \Delta(Q) \neq 0\}} \mu^m(dQ) \frac{\Delta^2(f, Q)}{\Delta^2(Q)} \cdot \frac{1}{m!} \Delta^2(Q) = \frac{1}{m!} \int_{\{Q: \Delta(Q) \neq 0\}} \mu^m(dQ) \Delta^2(f, Q)$ Полученная величина меньше, а в случае регулярной системы функций равна величине

$$\delta_m = \frac{1}{m!} \int \mu^m(dQ) \Delta^2(f, Q) = \frac{1}{m!} \int \mu^m(dQ) (\det \|f(x_k), \varphi_2(x_k), \dots, \varphi_m(x_k)\|)^2 =$$

$$= \begin{vmatrix} (f, f) & (f, \varphi_2) & \dots & (f, \varphi_m) \\ (f, \varphi_2) & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (f, \varphi_m) & 0 & \dots & 1 \end{vmatrix}. \text{ Последнее равенство имеет место на основании Леммы}$$

3.1.2, если в её формулировке положить $\{\varphi_\ell\} = (f, \varphi_2, \dots, \varphi_m)$ $\{\psi_k\} = (f, \varphi_2, \dots, \varphi_\ell)$. Далее, разлагая полученный определитель по элементам последней строки (или столбца), получим $\delta_m = \delta_{m-1} - (f, \varphi_m)^2$. Если учесть, что $\delta_1 = (f, f)$, то имеем $\delta_m = (f, f) -$

$\sum_{k=2}^m (f, \varphi_k)^2$. И, поскольку $DK[f, Q] = EK^2(f, Q) - (f, \varphi_1)^2$, то имеем для случая регулярной системы функций

$$DK[f, Q] = (f, f) - \sum_{k=1}^m (f, \varphi_k)^2 = \int (f(x) - \sum_{k=1}^m (f, \varphi_k) \varphi_k(x))^2 \mu(dx).$$

Для нерегулярных функций

$$DK[f, Q] \leq \int (f(x) - \sum_{k=1}^m (f, \varphi_k) \varphi_k(x))^2 \mu(dx),$$

что и доказывает теорему.

Заметим, что в нерегулярном случае мы уже имели пример вычисления дисперсии. Действительно, разбивая множество \mathfrak{X} на два подмножества равной меры и полагая

$$\varphi_1(x) \equiv 1, \quad \varphi_2(x) = \begin{cases} 1, & x \in \mathfrak{X}_1 \\ -1, & x \in \mathfrak{X}_2, \end{cases}$$

мы, как легко проверить, имеем рассмотренный ранее случай расслоенной выборки.

$$\text{Здесь } \frac{1}{2} \Delta^2(Q) = \begin{cases} 2, & \text{если } x_1 \in \mathfrak{X}_1 \text{ а } x_2 \in \mathfrak{X}_2 \text{ или } x_1 \in \mathfrak{X}_2 \text{ а } x_2 \in x_1 \\ 0, & \text{если } x_1 \text{ и } x_2 \text{ оба принадлежат одному из подмножеств,} \end{cases}$$

$K[f, q] = \frac{1}{2}(f(x_1) + f(x_2))$, а дисперсия оказывается равной

$$DK[f, Q] = 1/2[(f, f) - (f, \varphi_1)^2 - (f, \varphi_2)^2]. \quad (3.1.30)$$

Легко видеть, что $(a - b)$, фигурирующее в (3.1.20) не что иное, как (f, φ_2) .

Следующие замечания следует сделать относительно интерполяционно-кубатурных формул и их использования.

А. Использование формул вида $\frac{\Delta(f, Q)}{\Delta(Q)}$ может потребовать значительной вычислительной работы, не связанной с вычислением значений функции f . Моделирование плотности $\frac{1}{m!} \Delta^2(Q)$, как правило, должно выполняться методом отбора. Требуется вычислять определитель. Это при больших m весьма трудоемкая задача. По видимому, область эффективного использования метода относится к небольшим значениям m , когда удастся угадать, что f "похожа" на линейную комбинацию некоторых функций $\varphi_k(x)$. Величина дисперсии зависит от степени "похожести" (близости). В отдельных случаях выигрыш может быть значительным. Интересно отметить, что в регулярном случае мы можем проиграть. Как следует из (3.1.30) в случае расслоения определенного типа мы не проигрываем в любом случае.

Б. Как расслоенная выборка, так и интерполяционно-кубатурные формулы используют зависимые (в данной группе) случайные величины. Более жесткая зависимость может улучшить результат (уменьшить дисперсию). В этой связи полезно изучать суммы $K[f, Q]$, у которых один из узлов (например, x_1) выбирается случайно, а другие являются его детерминированными функциями. Отдельные результаты

относительно таких формул можно найти в [2]. Самым известным примером является следующий (Hammersley, Morton [3])

$$\int_{-1}^{+1} dx_1 \dots \int_{-1}^{+1} dx_s f(x) \sim f(Y) + f(-Y), \quad (3.1.31)$$

где Y равномерно распределен в гиперкубе $\{x_1 \dots x_s : -1 \leq x_i \leq +1, i = 1, \dots, s\}$. Это так называемый "antithetic variate method" (метод противоположной переменной). Относительно дисперсии кубатурной суммы (3.1.31) см. также [3].

3.2 Метод Квази Монте-Карло

Как будет ясно из дальнейшего изложения, так называемый "Квази Монте-Карло" метод является методом вполне детерминированным и связан более с классической теорией кубатурных формул, чем с теорией вероятностей. Нельзя не отметить, однако, что вычислительная схема упомянутого метода имеет формальное сходство со схемами предыдущего параграфа и в ряде случаев обеспечивает более быстрое убывание погрешности. Занимаясь методом Монте-Карло, нельзя не иметь четкого представления о формально близком методе.

Предварительно нам будут необходимы некоторые сведения из классической теории кубатурных формул.

3.2.1 Некоторые сведения из теории кубатурных формул

Пусть D_s – область s -мерного Евклидова пространства ($D_s \subset R^s$) и $f(X)$, $X \in D_s$ – функция, определенная и интегрируемая в этой области. Если X_1, \dots, X_N – точки в D_s и A_1, \dots, A_N – заданные константы, то формулу

$$\int_{D_s} f(X) dX \approx \sum_{j=1}^N A_j f(X_j) \quad (3.2.1)$$

называют кубатурной (квadrатурной при $s = 1$) формулой, а сумму $S_N[f] = \sum_{j=1}^N A_j f(X_j)$ – кубатурной (квadrатурной) суммой.

Величину

$$R_N[f] = \int_{D_s} f(X) dX - S_N[f] \quad (3.2.2)$$

называют остатком кубатурной формулы.

Если для некоторой функции φ , интегрируемой в D_s , имеет место равенство

$$R_N[\varphi] = 0, \quad (3.2.3)$$

то говорят, что формула (3.2.1) точна для этой функции.

В предыдущем параграфе мы рассматривали интерполяционно- кубатурные формулы, точны для m линейно независимых функций при $N = m$

$$R_m[\varphi_j] = 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (3.2.4)$$

При фиксированных X_1, \dots, X_m , удовлетворяющих условию $\det \|\varphi_j(X_j)\|_{i,j=1}^m \neq 0$, числа A_1, \dots, A_m – коэффициенты формулы, определяются условиями (3.2.4) однозначно.

Очевидно, что за счет специального выбора узлов X_1, \dots, X_m можно, вообще говоря, обеспечить выполнение равенств $R_m[\psi_k] = 0$ для некоторых функций ψ_k , $k = 1, 2, \dots, m_1$, отличных от φ_j . Формулы со специальным выбором узлов такого рода называют кубатурными формулами Гауссова типа. При случайном выборе узлов (см. предыдущий параграф) речь идет о наложении на эти узлы детерминированных связей так, что некоторая группа l , ($l < m$) узлов выбирается случайно, а остальные являются функциями этих выбранных узлов (например, формула (3.1.31)).

Проблема специального выбора узлов в особенности, когда φ_j и ψ_k есть полином, является одной из важных задач теории кубатурных формул.

Другой подход к построению кубатурных формул предполагает, что формула должна обслуживать некоторый класс \mathcal{F} функций, т.е. коэффициенты A_j и узлы X_j должны быть выбраны так, чтобы

$$\sup_{f \in \mathcal{F}} |R_m[f]|$$

был минимальным (существование супремума предполагается). Очевидно, что это более общая постановка задачи. Предыдущая может рассматриваться в качестве ее частного случая (\mathcal{F} есть множество линейных комбинаций φ_j и ψ_k).

Наиболее изучен случай, когда \mathcal{F} является линейным нормированным пространством дифференцируемых функций. В этом случае

$$R_m[f] = R_m(f; A_1, \dots, A_m; X_1, \dots, X_m)$$

есть функционал на \mathcal{F} и

$$\sup_{\|f\|_{\mathcal{F}}=1} |R_m[f]| = R_{\mathcal{F}}(A_1, \dots, A_m; X_1, \dots, X_m) \quad (3.2.5)$$

есть его норма. Оптимальной формулой в классе функций \mathcal{F} (если таковая существует) называется формула

$$\int_D f(X) dX \approx \sum A_j^\circ f(X_j^\circ),$$

для которой

$$(A_1^\circ, \dots, A_m^\circ; X_1^\circ, \dots, X_m^\circ) = \operatorname{argmin}_{(A_j, X_j, j=1, \dots, m)} R_{\mathcal{F}}(A_1, \dots, A_m; X_1, \dots, X_m). \quad (3.2.6)$$

При изучении оптимальных формул имеются существенные (иногда непреодолимые на современном уровне знаний) трудности. Первая трудность – это вычисление $\|R_N(A_i, X_i, i = 1, \dots, N)\|_{\mathcal{F}}$ и вторая – определение значений $A_i^\circ, X_i^\circ, i = 1, \dots, N$). Мы

имеем, таким образом, задачу отыскания минимума функций многих переменных, причем вычисление значений этой функции может быть весьма трудоемким. По этой причине значительный интерес представляет изучение различных свойств нормы функционала $R_N[f]$.

Наиболее исследованным является случай, когда \mathcal{F} является множеством функций f , имеющих все частные производные заданного порядка m , т.е.

$$f_{i_1, \dots, i_s}^m(x) = \frac{\partial^m f(x_1, \dots, x_s)}{\partial x_1^{i_1} \dots \partial x_s^{i_s}}, \quad \text{где } i_1 + i_2 + \dots + i_s = m; \quad 0 \leq i_l \leq m; \quad l = 1, \dots, s. \quad (3.2.7)$$

Н.С. Бахваловым [5] получена оценка снизу нормы остатка в этом случае. Точнее, было показано, что если $f \in \mathbb{H}(m, a, \lambda)$ – классу функций, у которых частные производные (3.2.7) до порядка m включительно ограничены константой a , а производные порядка m удовлетворяют условию Гельдера с показателем λ ($0 < \lambda \leq 1$)

$$|f_{i_1, \dots, i_s}^m(X') - f_{i_1, \dots, i_s}^m(X'')| \leq a \sum_{q=1}^s |x_q^1 - x_q''|^\lambda,$$

то при любом способе вычисления интеграла с помощью квадратурной формулы (3.2.1) выполняется неравенство

$$\sup_{f \in \mathbb{H}(m, A, \lambda)} |R_N[f]| \geq AaN^{-\frac{m+\lambda}{s}}.$$

Методы вычисления нормы функционала $R_N[f]$, когда \mathcal{F} есть пространство $L_2^{(m)}$ или W_m^2 разработан С.Л. Соболевым [4]. Им же получен ряд глубоких результатов относительно свойств этой нормы. Тем не менее, эффективных методов решения проблемы (3.2.6) мы сегодня не имеем. Задача может быть решена при $s = 1$ в очень ограниченном числе частных случаев.

Было также показано [5], что рандомизация (случайный выбор кубатурной формулы из некоторого множества формул) позволяет получить неравенство

$$\sup_{f \in \mathbb{H}(m, A, \lambda)} \mathbb{E} |R_N[f]| \geq AaN^{-\frac{m+\lambda}{s}-1/2}.$$

Существуют примеры, где остаток при рандомизации действительно уменьшается в \sqrt{N} раз (расслоение).

В этой связи представляют значительный интерес результаты относительно асимптотики нормы остатка (3.2.5) при $m \rightarrow \infty$, когда \mathcal{F} является широким классом функций. Результаты такого рода получены в теории чисел в связи с исследованием "отклонения" (discrepancy) и являются основой метода "Квази Монте-Карло".

3.2.2 "Discrepancy" и его связь с нормой остатка

Пусть $s = 1$ и $D = [0, 1]$. Если $f(x)$ имеет первую производную, то

$$f(x) = f(0) + \int_0^x f'(t) dt. \quad (3.2.8)$$

Обозначим $\Theta(X) = \begin{cases} 0 & X > 0 \\ 1/2 & X = 0, \\ 1 & X < 0 \end{cases}$ тогда при $A_j = 1/N, j = 1, \dots, N, R[f] =$

$$\int_0^1 f'(t)(1-t - \frac{1}{N} \sum E(X_i - t)) dt, \text{ где } E(t) = \begin{cases} 0 & t > 0 \\ 1/2 & t = 0 \\ 1 & t < 0, \end{cases} \text{ что нетрудно получить}$$

из (3.2.8). Нетрудно также увидеть, что $R[f] = \int_0^1 f'(t)[-t + \frac{1}{N} \sum \Theta(X_i - t)] dt$. В математической статистике функция $\frac{1}{N} \sum \Theta(X_i - t)$ именуется эмпирической функцией распределения случайной величины, имеющей своими реализациями x_1, x_2, \dots, x_N . Имеем также $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Theta(X_i - t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \chi_{(-\infty, X_i)}(t) = \frac{1}{N}$ (число точек X_1, \dots, X_N , не превосходящих t). Величина же

$$\sup_{t \in (0,1)} N \left| t - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Theta(X_i - t) \right| \quad (3.2.9)$$

носит название отклонения ("discrepancy") и принимается в теории чисел в качестве меры неравномерности распределения множества точек x_1, \dots, x_N . Предполагается $0 \leq x_i \leq 1$. Полезно помнить, что t на промежутке $(0,1)$ есть $P(\alpha \leq t)$ – функция распределения равномерно распределенной случайной величины α . В математической статистике величина (3.2.9), деленная на N фигурирует под названием "Критерия Колмогорова"

Теперь мы можем заметить, что для функции f , имеющей суммируемую производную f' , справедлива точная оценка

$$|R_N[f]| \leq \int_0^1 |f'(t)| dt \cdot \sup_{t \in [0,1]} \left| t - \frac{1}{N} \sum \Theta(X_i - t) \right|. \quad (3.2.10)$$

В многомерном случае имеет место похожий результат, известный под названием "Неравенство Коксмы-Хлавки" [6]. Он не может, однако, непосредственно получен из разложения функции f в ряд Тейлора в окрестности точки $(0,0)$, как это мы могли сделать в одномерном случае. Возникающие здесь вопросы полезно пояснить в двумерном случае. Общий случай довольно громоздок, и мы для наших целей будем использовать известное и уже упоминавшееся неравенство Коксмы-Хлавки.

Итак, пусть $s = 2$, в единичном квадрате имеется множество N точек $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ и задана функция $f(x, y)$, имеющая смешанную производную $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ и первые производные $\frac{\partial f}{\partial x}$ и $\frac{\partial f}{\partial y}$. Относительно последних считаем, что они заданы на сторонах квадрата (например, при $0 \leq x \leq 1, y = 0$ и $0 \leq y \leq 1, x = 0$ соответственно).

В этом случае мы, как и ранее, можем использовать представление

$$f(x, y) = f(0, 0) + \int_0^x f'_x(u, 0) du + \int_0^y f'_y(v, 0) dv + \int_0^x \int_0^y f''_{xy}(u, v) du dv,$$

которое приводит нас к представлению остатка

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 \int_0^1 f(x, y) dx dy - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j, y_j) = \\
& = \int_0^1 f'_x(u, 0) \left[1 - u - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(x_j - u) \right] du + \\
& + \int_0^1 f'_y(0, v) \left[1 - v - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(y_j - v) \right] dv + \\
& + \int_0^1 \int_0^1 f''_{xy}(u, v) \left[(1 - u)(1 - v) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(x_j - u)E(y_j - v) \right] du dv.
\end{aligned} \tag{3.2.11}$$

Пусть теперь \mathcal{F} есть класс функций f с нормой

$$\|f\|_{\mathcal{F}} = \int_0^1 |f'_x(u, 0)| du + \int_0^1 |f'_y(0, v)| dv + \int_0^1 \int_0^1 |f''_{xy}(u, v)| du dv. \tag{3.2.12}$$

В этом классе имеем (точную) оценку остатка $\|R_N[f]\|$

$$\begin{aligned}
\|R_N[f]\| & \leq \|f\|_{\mathcal{F}} \cdot \max \left(\sup_u \left| 1 - u - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(x_j - u) \right|, \right. \\
& \sup_v \left| 1 - v - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(y_j - v) \right|, \\
& \left. \sup_{u,v} \left| (1 - u)(1 - v) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(x_j - u)E(y_j - v) \right| = \right. \\
& = \|f\|_{\mathcal{F}} \cdot \sup_{u,v} \left| (1 - u)(1 - v) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(x_j - u)E(y_j - v) \right|.
\end{aligned} \tag{3.2.13}$$

Последнее равенство следует из того, что первые два супремума под символом \max могут быть получены из третьего, если в последнем положить $v = 0$ и $u = 0$ соответственно.

Неравенство является точным (существует f из \mathcal{F} , для которой в (3.2.13) достигается знак равенства). Такую f легко указать в явной форме.

Таким образом, величина

$$\sup_{u,v} \left| (1 - u)(1 - v) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E(x_j - u)E(y_j - v) \right| \tag{3.2.14}$$

вполне характеризует множество точек (x_j, y_j) , но, как легко проверить, она не совпадает с двумерным отклонением, которое должно иметь вид

$$\begin{aligned}
& \sup_{u,v} N \left| uv - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Theta(x_j - u)\Theta(y_j - v) \right|, \\
& \text{т.е. } \sup_{u,v} N \left| uv - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (1 - E(x_j - u))(1 - E(y_j - v)) \right|
\end{aligned} \tag{3.2.15}$$

(сравните с (3.2.14)).

Вернемся к представлению (3.2.11). После элементарных преобразований имеем

$$\begin{aligned}
R_N[f] &= \int_0^1 f'_x(u, 0) \left[-u + \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) \right] du + \\
&+ \int_0^1 f'_y(0, v) \left[-v + \frac{1}{N} \sum \Theta(y_j - v) \right] dv + \\
&+ \int_0^1 \int_0^1 f''_{xy}(u, v) \left[uv - \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) \Theta(y_j - v) - u + \right. \\
&\left. + \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) - v + \frac{1}{N} \sum \Theta(y_j - v) \right] dudv.
\end{aligned} \tag{3.2.16}$$

и, выполняя интегрирование второй производной, после приведения подобных членов, получим представление ¹

$$\begin{aligned}
R_N[f] &= \int_0^1 f'_x(u, 1) \left[-u + \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) \right] du + \\
&+ \int_0^1 f'_y(1, v) \left[-v + \frac{1}{N} \sum \Theta(y_j - v) \right] dv + \\
&+ \int_0^1 \int_0^1 f''_{xy}(u, v) \left[uv - \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) \Theta(y_j - v) \right] dudv.
\end{aligned}$$

Таким образом, в классе \mathcal{F}' функций f , для которых ограничена сумма

$$\int_0^1 |f'_x(u, 1)| du + \int_0^1 |f'_y(1, v)| dv + \int_0^1 \int_0^1 \left| \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(u, v) \right| dudv = \|f\|_{\mathcal{F}'},$$

имеем

$$\begin{aligned}
\|R_N[f]\| &\leq \|f\|_{\mathcal{F}'} \max \left(\sup_u \left| u - \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) \right|, \right. \\
&\left. \sup_v \left| v - \frac{1}{N} \sum \Theta(y_j - v) \right|, \sup_{u,v} \left| uv - \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) \Theta(y_j - v) \right| \right) = \\
&= \|f\|_{\mathcal{F}'} \cdot \sup_{u,v} \left| uv - \frac{1}{N} \sum \Theta(x_j - u) \Theta(y_j - v) \right|.
\end{aligned} \tag{3.2.17}$$

(Последнее равенство обосновывается аналогично (3.2.13)). Таким образом, отклонение (3.2.15) деленное на N является нормой функционала остатка кубатурной формулы с равными коэффициентами в классе функций, имеющих производные f'_x, f'_y, f''_{xy} (первые две должны существовать на соответствующих сторонах квадрата).

Техника, связанная с разложением в ряд Тейлора, позволяет получать результаты и в многомерном случае. Похожим способом можно получить и упоминавшееся неравенство Коксмы-Хлавки, которое утверждает, что величина $\frac{D_N}{N}$, где

$$D_N = \sup_{x \in D_s} N \left| \prod_{i=1}^s x^{(i)} - \sum_{j=1}^N \prod_{i=1}^s \Theta \left(x_j^{(i)} - x^{(i)} \right) \right|, \quad X = (x^{(1)}, \dots, x^{(s)}) \tag{3.2.18}$$

¹ Легко проверить, что это представление можно получить из разложения в ряд Тейлора в окрестности точки (1,1). См. [7].

является нормой остатка в классе функций ограниченной вариации в смысле Харди-Крауде. В двумерном случае это класс функций, для которого сумма

$$\int_0^1 d|f(x, 1)| + \int_0^1 d|f(1, y)| + \int_0^1 \int_0^1 d^2|f(x, y)|$$

ограничена константой M . (Подробное изложение вопросов, связанных с этим неравенством, можно найти в [6], стр.165).

Укажем в качестве примера две широко известные в настоящее время конструкции последовательностей векторов $X_1, X_2, \dots, X_N, \dots$, для которых $R_N[f] \sim O\left(\frac{\ln^s N}{N}\right)$:

А. Последовательности Холтона. Пусть r, n и m – натуральные числа, и n имеет следующее представление в r -ичной системе счисления

$$n = a_m a_{m-1} \dots a_2 a_1, \quad 0 \leq a_i \leq r - 1.$$

Последовательность чисел $p_r(n), n = 1, 2, \dots$ определяется следующим образом

$$p_r(n) = \sum_{i=1}^m a_r \cdot r^{-i}.$$

Последовательностью Холтона называется последовательность векторов в единичном гиперкубе D_s

$$X(n) = (p_{r_1}(n), p_{r_2}(n), \dots, p_{r_s}(n)),$$

где r_1, r_2, \dots, r_s попарно взаимно простые числа.

Б. ЛП $_r$ – последовательности Соболя. Это последовательность векторов в D_s

$$Q_n = (q_{n-1}, \dots, q_{n,s}).$$

Алгоритм вычисления q_{ij} следующий. Если в двоичной системе счисления

$$n = l_m l_{m-1} \dots l_2 l_1, \quad l_i = \{0, 1\},$$

то для всех $j = 1, 2, \dots, s$

$$q_{n,j} = e_1 v_j^{(1)} * e_2 v_j^{(2)} * \dots * e_m v_j^{(m)}.$$

Здесь звездочкой (*) обозначена операция поразрядного сложения по модулю 2 в двоичной системе счисления. $v_j^{(i)}$ – заданные числа. Эти числа в виде таблиц приведены в ряде руководств. (См. также приложение 2).

Таким образом, последовательности Холтона [6] и Соболя [7,8] определяют последовательность кубатурных формул с равными коэффициентами. Эти формулы обеспечивают в весьма широком классе функций (ограниченной вариации) убывание остатка порядка $O\left(\frac{\ln^s N}{N}\right)$. Сравнительно простой алгоритм построения этих формул позволяет говорить об их использовании в схеме метода Монте-Карло – $p_r(n)$ и $q_{n,j}$ – играют роль псевдослучайных чисел. Имеются примеры удачного применения метода Квази Монте-Карло. Вместе с тем, нужно иметь в виду:

1. Как мы видим, точки Соболя настроены на определенную размерность вычисляемого интеграла. Координаты этих точек не могут браться в произвольном порядке.

2. Если рассматривать $p_2(n)$ и $q_{n,j}$ как реализации некоторых случайных величин, то оказывается, что эти величины, вообще говоря, коррелированы. Использование их при имитационном моделировании реальных явлений может приводить (особенно на уровне вторых моментов) к грубым ошибкам. Конечно, числа, порождаемые мультипликационным датчиком, также коррелированы, но с ростом мультипликатора корреляция убывает.

3. Эмпирическая оценка погрешности с помощью дисперсии, строго говоря, не может быть осуществлена в схеме Квази Монте-Карло.

В целом, на стыке Монте Карло и Квази Монте-Карло необходимы интенсивные дополнительные исследования.

Глава 4. Вычисление суммы ряда Неймана

4.1 Несмещенные оценки

Далее мы будем рассматривать уравнения 2-го рода вида

$$\varphi(x) = \int k(x, y)\varphi(y)\mu(dy) + f(x) \pmod{\mu}, \quad (4.1.1)$$

где $k(x, y)$ и $f(x)$ – заданные на носителях \mathfrak{X} и $\mathfrak{X} \times \mathfrak{X}$ мер $\mu(dx)$ и $\mu(dx) \otimes \mu(dy)$ соответственно функции. Они предполагаются также – μ и $\mu \otimes \mu$ соответственно измеримыми. Для простоты μ предполагается вероятностной мерой. Все результаты этой главы могут быть перенесены на случай σ -конечных мер. Обозначение $(\text{mod } \mu)$ в (4.1.1) и далее обозначает, что равенство имеет место для $x \in \mathfrak{X}$.

В главе 2 мы обсуждали один из простейших вероятностных алгоритмов решения системы линейных алгебраических уравнений. Полезно помнить, что уравнение (4.1.1) есть система линейных алгебраических уравнений, если μ есть дискретная мера, сосредоточенная в конечном множестве точек x_1, \dots, x_n с весами p_1, \dots, p_n соответственно.

В этом случае имеем

$$\varphi(x) = \sum_{j=1}^n p_j k(x, x_j)\varphi(x_j) + f(x) \pmod{\mu}. \quad (4.1.2)$$

Здесь обозначение $(\text{mod } \mu)$ подразумевает, что соотношение (4.1.2) выполняется в точках x_1, \dots, x_n , т.е. может быть записано в виде

$$\varphi(x_i) = \sum_{j=1}^n p_j k(x_i, x_j)\varphi(x_j) + f(x_i) \quad i = 1, \dots, n \quad (4.1.3)$$

или в виде

$$z_i = \sum_{j=1}^n a_{i,j}z_j + b_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad \text{сравните с (2.2.25)}$$

$$(\varphi(x_i) = z_i, \quad p_j k(x_i, x_j) = a_{i,j}, \quad f(x_i) = b_i).$$

Обсуждаемые ниже результаты будут справедливы таким образом для уравнений Фредгольма, для систем линейных алгебраических уравнений и для более общих типов уравнений, порождаемых конкретными классами мер. (см. начало главы 3).

Во всех случаях мы будем предполагать, что для некоторого класса \mathcal{H} функций h сходится ряд

$$\sum_{l=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_l) |h(x_0)K(x_0, x_1) \dots K(x_{l-1}, x_l)f(x_l)|, \quad (4.1.4)$$

где положено $K_{-1,0} \equiv 1$.

Легко видеть, что сумма (4.1.4) есть скалярное произведение $(|h|, \bar{\varphi})$, где $\bar{\varphi}$ является итерационным решением уравнения

$$\bar{\varphi} = \bar{K}\bar{\varphi} + |f|, \quad \bar{K}\varphi[x] = \int |k(x, y)|\varphi(y)\mu(dy). \quad (4.1.5)$$

В этом случае также, очевидно, имеет место сходимость итерационного процесса

$$\varphi_{n+1}(x) = \int k(x, y)\varphi_n(x)\mu(dx) + f(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.6)$$

$$\varphi_0(x) = f(x),$$

в слабом смысле (сходятся функционалы (φ_n, h) для $h \in \mathcal{H}$).

Иными словами имеет место представление

$$(h, \varphi) = \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_{\tau}) h(x_0) k(x_0, x_1) \dots k(x_{\tau-1}, x_{\tau}) f(x_{\tau}), \quad (4.1.7)$$

$k(x_{-1}, x_0) \equiv 1$, где φ является (итерационным) решением уравнения (4.1.1).

Как и в рассмотренном нами в §2.2 случае систем линейных алгебраических уравнений, уравнению (4.1.1) сопоставляется цепь Маркова с множеством состояний \mathfrak{X} и дискретным временем $t=0,1,2,\dots$. Цепь задается плотностью начального распределения $p^0(x)$ по отношению к мере μ и плотностью перехода из состояния x в состояние y $p(x \rightarrow y)$ (также по отношению к мере μ). Относительно плотности $p(x \rightarrow y)$ предполагается, что она субстохастична

$$\int p(x \rightarrow y)\mu(dy) = 1 - g(x), \quad 0 \leq g(x) < 1, \quad (4.1.8)$$

и цепь Маркова, ею определяемая, такова, что почти все её траектории конечны.

Моделирование этой цепи в соответствии с §2.1 осуществляется с помощью следующего алгоритма:

1. Моделируется плотность $p^0(x)$. Вычисляется x_0 ,
2. При $k > 0$. Вычисляется $g(x_{k-1})$. Проверяется неравенство $\alpha < g(x_{k-1})$. При его вычислении полагаем $k = \tau$ и заканчиваем вычисления. Переход к 4.
3. Если $\alpha > g(x_{k-1})$, то моделируется плотность $p(x_{k-1} \rightarrow x)$. Вычисляется x_k , k заменяется на $k + 1$. Переход к 2.
4. Переход к моделированию следующей траектории (переход к 1), если необходимое число N траекторий еще не промоделировано.

Здесь α обозначает независимую реализацию равномерно распределенной случайной величины (очередное псевдослучайное число), τ -момент обрыва траектории. Результатом является множество N независимых траекторий $\omega_{\tau} = x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_{\tau}$ марковской цепи.

Очевидно, плотность по отношению к $\mu^{\tau+1}$ распределения такой траектории есть

$$p^0(x_0)p(x_0 \rightarrow x_1)\dots p(x_{\tau-1} \rightarrow x_\tau)g(x_\tau), \quad (4.1.9)$$

$\mu^{\tau+1} = \bigotimes_{j=0}^{\tau} \mu$. Совокупность этих плотностей определяет вероятностную меру $P(d\omega_\tau)$ на множестве траекторий. Поскольку мы предположили, что почти все траектории ω конечны, то должно выполняться равенство

$$\sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0)\dots \int \mu(dx_\tau) p^0(x_0)p(x_0 \rightarrow x_1)\dots p(x_{\tau-1,\tau})g(x_\tau) = 1. \quad (4.1.10)$$

Данное равенство также легко может быть получено, если оператор \mathcal{P} , определяемый равенством $\mathcal{P}\chi[x] = \int p(x \rightarrow y)\chi(y)\mu(dy) \pmod{\mu}$, является оператором сжатия.

Действительно, уравнение $\chi = \mathcal{P}\chi + g$ имеет в этом случае, очевидно, своим единственным решением $\chi = 1 \pmod{\mu}$. Это же решение имеет представление

$$\chi(x) = \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_1)p(x_0 \rightarrow x_1)\dots p(x_{\tau-1,\tau})g(\tau), \quad \pmod{\mu}, p(x_{-1}, x_0) = 1.$$

И, в этом случае очевидное равенство $(\chi, p^0) = (1 \cdot p^0) = 1$ равносильно (4.10). Если же $\tilde{\mathfrak{J}}(\omega_\tau)$ – функция траектории, интегрируемая по отношению к мере $P(d\omega_\tau)$, то имеем

$$E\tilde{\mathfrak{J}}(\omega_\tau) = \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0)\dots \int \mu(dx_\tau)\tilde{\mathfrak{J}}(\omega_\tau)p^0(x_0)p(x_0 \rightarrow x_1)\dots p(x_{\tau-1}, x_\tau)g(x_\tau). \quad (4.1.11)$$

Далее сравнение (4.1.7) и (4.1.10) позволяет доказать следующую теорему.

Теорема. 4.1

Для того, чтобы оценка

$$\tilde{\mathfrak{J}}_a(\omega_\tau) = \frac{h(x_0)k(x_0, x_1) \cdots k(x_{\tau-1}, x_\tau)f(x_\tau)}{p^0(x_0)p(x_0 \rightarrow x_1) \cdots p(x_{\tau-1} \rightarrow x_\tau)g(x_\tau)} \quad (4.1.12)$$

была несмещенной оценкой функционала (φ, h) необходимо и достаточно сходимости ряда (4.1.4) и выполнения условий согласования:

$$\begin{aligned} & а) p^0(x) > 0 \text{ для тех } x \pmod{\mu}, \text{ для которых } h(x) \neq 0 \pmod{\mu}, \\ & б) p(x \rightarrow y) > 0 \text{ для тех } (x, y) \pmod{\mu^2}, \text{ для которых } k(x, y) \neq 0 \pmod{\mu^2}, \\ & в) g(x) > 0 \text{ для тех } x \pmod{\mu}, \text{ для которых } f(x) \neq 0 \pmod{\mu} \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

при выполнении (4.1.10).

Доказательство. Очевидно, если воспользоваться равенством (4.1.10) и учесть, что (4.1.4) является необходимым и достаточным условием интегрируемости оценки (4.1.12) на множестве траекторий.

Таким образом, стохастический (один из возможных) алгоритм решения уравнения (4.1.1) состоит в моделировании N независимых траекторий цепи Маркова, удовлетворяющей довольно общим условиям согласования, и вычислении на этих траекториях функции (4.1.12). Среднее арифметическое полученных результатов служит оценкой функционала (φ, h) .

Алгоритм обладает естественным параллелизмом (каждая траектория может вычисляться отдельным процессором) и простой программной реализации.

Вопрос, возникающий в связи с изучением стохастических алгоритмов уравнений (4.1) состоит в следующем – будет ли (4.13) единственной функцией траекторий цепи Маркова, являющейся несмещенной оценкой функционала (φ, h) .

Ответ сугубо отрицателен. Существует бесконечно много такого рода функций. (Подробно об этом см. в [2], гл. 6).

Мы остановимся лишь на простейших (в вычислительном отношении) оценках. Очевидно, простота вычислений является немаловажным преимуществом. Оценка (4.13) достаточно проста. Почти столь же простой является оценка $\mathfrak{J}(\omega_\tau)$, имеющая вид

$$\mathfrak{J}_c(\omega_\tau) = \sum_{l=0}^{\tau} \frac{h_0 K_{01} \cdots K_{l-1,l} f_l}{p_0^0 p_{01} \cdots p_{l-1,l}}, \quad (4.1.14)$$

где обозначено $h_0 = h(x_0)$, $K_{i,j} = K(x_i, x_j)$, $f(x_l) = f_l$, $p_0^0 \neq p^0(x_0)$, $p_{i,j} = p(x_i \rightarrow x_j)$. В соответствии с традицией, возникшей в задачах переноса излучения через вещество оценку (4.1.12) часто называют "оценкой по поглощению" (absorbtion), а оценку (4.1.14) "оценкой по столкновениям" (collision). Важным преимуществом оценки (4.1.14) является то, что условия согласования для нее менее ограничительны.

Имеет место

Теорема. 4.2 Оценка (4.1.14) является несмещенной оценкой функционала (h, φ) для всех h, K, f , удовлетворяющих условию (4.1.4) и p^0, p , удовлетворяющих (4.1.10) и следующим условиям согласования:

$$\begin{aligned} \text{а) } p^0(x) > 0 \text{ для тех } x \pmod{\mu}, \text{ для которых } h(x) \neq 0 \pmod{\mu}, \\ \text{б) } p(x \rightarrow y) > 0 \text{ для тех } (x, y) \pmod{\mu^2}, \text{ для которых } k(x, y) \neq 0 \pmod{\mu^2}. \end{aligned} \quad (4.1.15)$$

Доказательство. В соответствии с определением математического ожидания, имеем

$$\begin{aligned} E\mathfrak{J}_c(\omega_\tau) &= \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \cdots \int \mu(dx_\tau) \sum_{l=0}^{\tau} \frac{h_0 K_{01} \cdots K_{l-1,l} f_l}{p_0^0 p_{01} \cdots p_{l-1,l}} \cdot p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1,\tau} g_\tau = \\ &= \sum_{\tau=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\tau} \int \mu(dx_0) \cdots \int \mu(dx_l) h_0 K_{01} \cdots K_{l-1,l} f_l \int \mu(dx_{l+1}) \cdots \int \mu(dx_\tau) p_{l,l+1} \cdots p_{\tau-1,\tau} g_\tau, \end{aligned}$$

где как и ранее полагается $k_{-1,0} \equiv 1$.

При выполнении условий (4.1.4) (и (4.1.10)) мы можем изменять порядок суммирования, а также суммирования и интегрирования в двойной сумме.

Имеем

$$E\mathfrak{J}_c(\omega_\tau) = \sum_{l=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \cdots \int \mu(dx_l) h_0 K_{01} \cdots K_{l-1,l} f_l \sum_{\tau=l}^{\infty} \int \mu(dx_{l+1}) \cdots \int \mu(dx_\tau) p_{l,l+1} \cdots p_{\tau-1,\tau} g_\tau.$$

Но вторая сумма (по τ от l до ∞) изменением нумерации переменных может быть приведена к сумме (4.1.10), которая равна единице. Отсюда и следует утверждение теоремы.

Множество несмещенных оценок функционала (φ, h) может быть тривиальным образом расширено.

Во-первых, при выполнении условий согласования (4.1.13) любая линейная комбинация $\alpha\mathfrak{J}_c(\omega_\tau) + \beta\mathfrak{J}_a(\omega_\tau)$ при $\alpha + \beta = 1$ будет такой оценкой.

Во-вторых, что менее тривиально, мы имеем равенство $(\varphi, h) = (\varphi^*, f)$ где φ^* есть решение уравнения

$$\varphi^*(x) = \int k(y, x) \varphi^*(y) \mu(dy) + h(x) \pmod{\mu}. \quad (4.1.16)$$

Действительно, при любых g_1 и g_2 , для которых определено и конечно скалярное произведение (g_1, Kg_2) имеем

$(g_1, Kg_2) = (g_2, K^*g_1)$, где K^* – оператор с ядром $k(y, x)$.

Отсюда

$$\begin{array}{l|l} \varphi = K\varphi + f & h \\ \varphi^* = K^*\varphi^* + h & f \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{скалярно умножая равенство на } h \text{ и } f \\ \text{соответственно и вычитая одно из другого имеем} \end{array}$$

$$(\varphi, h) = (\varphi^*, f).$$

Таким образом, нужный нам функционал (φ, h) может быть вычислен с помощью двойственных оценок

$$\mathfrak{J}_a^*(\omega_\tau) = \frac{f_0 k_{1,0} \cdots k_{\tau,\tau-1} h_\tau}{p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1,\tau} g_\tau} \quad (4.1.17)$$

и

$$\mathfrak{J}_c^*(\omega_\tau) = \sum_{l=0}^{\tau} \frac{f_0 k_{1,0} \cdots k_{l,l-1} h_l}{p_0^0 p_{01} \cdots p_{l-1,l}}. \quad (4.1.18)$$

Однако, условия согласования, которым должны удовлетворять p^0 и p (и, следовательно, множества траекторий ω_τ) отличаются очевидным образом от условий, сформулированных в теоремах 4.1 и 4.2. Так, для \mathfrak{J}_a^* они должны быть сформулированы следующим образом:

$$\begin{array}{l} 1^* \quad p^0(x) > 0 \text{ для тех } x, \text{ для которых } f(x) \neq 0 \pmod{\mu}, \\ 2^* \quad p(x, y) > 0 \text{ для тех } x \text{ и } y, \text{ для которых } k(y, x) \neq 0 \pmod{\mu^2}, \\ 3^* \quad g(x) > 0 \text{ для тех } x, \text{ для которых } h(x) > 0 \pmod{\mu}. \end{array} \quad (4.1.19)$$

Для оценки (4.1.18) должны выполняться первые два условия.

Далее следуют замечания относительно использования оценок при вычислениях.

1. Очевидно, что при оценивании многих функционалов (φ, h) оценки со звездочкой (4.1.17) и (4.1.18) предпочтительнее оценок (4.1.12) и (4.1.15). Первые дают возможность

при моделировании одной траектории вычислить оценки многих функционалов. Вторые для этого не приспособлены. Их использование при оценке многих функционалов требует, по крайней мере, дополнительных рассуждений.

2. Также легко заметить, что вычисления существенно упрощаются, если для оценок (4.1.12) и (4.1.14) $p(x, y)$ совпадает с $|k(x, y)|$ или отличается от него на множитель простой структуры. Для оценок (4.1.17) и (4.1.18) $p(x, y)$ следует выбирать близким к $|k(y, x)|$. То же относительно h и $p^0 f$ и g в первом случае и f и $p^0 h$ и g во втором.

Пример 1. Приводимый далее, показывает, в частности, важность учета условий согласования при выборе оценки.

Рассмотрим интегральное уравнение

$$\varphi(X) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}(\det C)^{1/2}} \int_{\mathfrak{D}} \exp(-1/2(Y-X)C^{-1}(Y-X)^T) \varphi(Y) dY + \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^s x_i^2}, \quad (4.1.20)$$

$X = (x_1, \dots, x_s)$, $Y = (y_1, \dots, y_s)$, $\mathfrak{D} \subset R^3$ – ограниченная область, $C = \|c_{ij}\|_{i,j=1}^s$ – положительно определенная матрица. В данном случае интегрирование ведется по (σ -конечной) мере Лебега. Как мы отмечали ранее, предположение о том, что μ -вероятностная мера имеет технический характер. Достаточно предположения о её σ -конечности).

При s достаточно большом (напр., $s \geq 20$) задача вычисления (φ, h) для φ , удовлетворяющему (4.1.20) является достаточно сложной, а при $s \sim 100$ практически неразрешимой с помощью детерминированных методов.

Применение метода Монте-Карло в описанной нами ранее форме приводит к простому алгоритму. В качестве $p(x \rightarrow y)$ целесообразно выбрать многомерную нормальную плотность со средним X и матрицей ковариаций C .

Применение оценки (4.1.12) при этом требует вычисления

$$g(x) = 1 - \frac{1}{(2\pi)^{3/2}(\det C)^{-1/2}} \int_{\mathfrak{D}} \exp(-1/2(Y-X)C^{-1}(Y-X)^T) dY,$$

что в особенности для сложной области \mathfrak{D} , может быть далеко не простой задачей.

Что касается оценки (4.1.14), то при её использовании достаточно просто проверять после очередного перехода факт выхода X_k за границу \mathfrak{D} .

Пример 2. Пусть, как и ранее, \mathfrak{D} – область в R^3 с границей Γ . Γ предполагаем достаточно гладкой и рассматриваем задачу о вычислении значений функции $u(x)$, $x \in \mathfrak{D}$, гармонической в \mathfrak{D} , т.е. удовлетворяющей уравнению

$$\Delta u = 0, \quad u|_{\Gamma} = \varphi(X)_{X \in \Gamma}.$$

Известная теорема о среднем утверждает, что для всякого шара K_R радиуса R с центром в точке X , принадлежащего \mathfrak{D} , выполняется равенство

$$u(x) = \frac{1}{|K_R|} \int_{|X-Y|=R} U(Y) dY = \frac{1}{|K_R|} \int \delta(|X-Y|=R) \varphi(Y) dY,$$

где $|K_R|$ – площадь поверхности шара K_R , а $\delta(|X-Y|=R)$ – равномерная мера на поверхности K_R .

Поскольку u известно на границе, мы можем формально записать уравнение 2-го рода

$$u(x) = \frac{1}{|K_R|} \int_{\mathfrak{D}} \delta(|X - Y| = R) \varphi(Y) dY + \varphi(X) \delta(X \in \Gamma), \quad (4.1.21)$$

где $\delta(X \in \Gamma)$ – единичный заряд в точке X поверхности Γ .

Согласно общей схеме случайный процесс для вычисления $u(x_0)$, $x_0 \in \mathfrak{D}$, приводящий к простейшей оценке ($k(x, y) = p(x \rightarrow y)$), должен описываться следующим образом. Траектория (частицы) начинается в точке x_0 . Затем эта частица переходит в точку равномерно распределенную на поверхности шара K_{R_0} с центром в точке x_0 . R_0 может быть выбрано произвольным, но таким, чтобы $K_{R_0} \subset \mathfrak{D}$. Процесс повторяется и, если частица находилась в точке x_i , то её следующее местонахождение x_{i+1} есть точка равномерно распределенная на поверхности шара $K_{R_{i+1}}$ с центром в точке x_i , причем $K_{R_i} \subset \mathfrak{D}$.

Если частица выйдет на границу области, то процесс должен оборваться. (Обратите внимание на условия согласования для оценки (4.12), которую здесь следует использовать. Граница должна служить поглощающим состоянием). Однако вероятность выйти точно в граничную точку-точку касания со сферой равна нулю. Процесс оказывается не реализуемым с вычислительной точки зрения. Следует построить ε -окрестность границы, распространить граничные условия на эту окрестность и обрывать процесс при попадании частицы в нее. Можно считать, что внутри ε -окрестности $u(x)$ постоянна вдоль отрезка внутренней нормали, ей принадлежащей.

Можно показать (например, [9]), что дополнительная погрешность вызванная такой процедурой имеет порядок ε , т.е. оценка (4.1.12) в этом случае будет ε -смещенной оценкой $u(x_0)$.

Мы привели лишь формальное описание процесса "блуждания по сферам", как пример процесса к которому могут привести условия согласования. Подробное исследование этого и родственных процессов содержится в доступной литературе (например, [9,10]).

4.2 Вторые моменты, понижение дисперсии

Выражения для вторых моментов оценок, полезные для многих целей могут быть получены путем прямых выкладок.

Для оценки (4.1.12) имеем

$$\begin{aligned} E\mathfrak{I}_a^2(\omega_\tau) &= \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \cdots \int \mu(dx_\tau) \frac{h_0^2 k_{01}^2 \cdots k_{\tau-1,\tau}^2 f_\tau^2}{(p_0^0)^2 p_{01}^2 \cdots p_{\tau-1,\tau}^2 g_\tau^2} p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1,\tau} = \\ &= \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \cdots \int \mu(dx_\tau) \frac{h_0^2}{p_0^0} \cdot \frac{k_{01}^2}{p_{01}} \cdots \frac{k_{\tau-1,\tau}^2}{p_{\tau-1,\tau}} \cdot \frac{f_\tau^2}{g_\tau}. \end{aligned}$$

Конечность этой суммы есть условие конечности второго момента. Если он конечен, то

$$D\mathfrak{I}_a^2(\omega_\tau) = \left(\frac{h^2}{p^0}, \psi_a \right) - (\varphi, h)^2, \quad (4.2.1)$$

где $\psi_a(x)$ есть итерационное решение уравнения

$$\psi_a(x) = \int \frac{k^2(x, y)}{p(x \rightarrow y)} \psi_a(y) \mu(dy) + \frac{f^2(x)}{g(x)} \pmod{\mu}. \quad (4.2.2)$$

Аналогично,

$$D\mathfrak{J}^*(\omega_\tau) = \left(\frac{f^2}{p^0}, \psi_a^* \right) - \left(\varphi^*, f \right)^2, \quad (4.2.3)$$

где ψ_a^* есть решение уравнения

$$\psi_a^*(x) = \int \frac{k^2(y, x)}{p(x \rightarrow y)} \psi_a^*(y) \mu(dy) + \frac{h^2(x)}{g(x)}. \quad (4.2.4)$$

Иногда бывают полезны выражения, использующие двойственные к уравнениям (4.2.2) и (4.2.4) уравнения.

Сложнее вычисляются вторые моменты оценок по столкновениям. Мы проведем вычисления для оценки $\mathfrak{J}_c^*(\omega_\tau)$. Обозначим $Q_e = \frac{f_0 k_{1,0} \dots k_{l,l-1}}{p_0^0 p_{0,1} \dots p_{l-1,l}}$.

Имеем $\mathfrak{J}_c^*(\omega_\tau) = \sum_{l=0}^{\tau} Q_l h_l$ и

$$E(\mathfrak{J}_c^*)^2 = \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_\tau) \left(\sum_{l=0}^{\tau} Q_l h_l \right)^2 = \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_\tau) \sum_{l=0}^{\tau} \sum_{j=0}^{\tau} Q_l h_l Q_j h_j.$$

В предположении конечности второго момента и абсолютной сходимости рядов (4.1.4) и (4.1.10) имеем

$$\begin{aligned} E(\mathfrak{J}_c^*)^2 &= \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_\tau) \sum_{l=0}^{\tau} \left(Q_l h_l \right)^2 p_0^0 p_{0,1} \dots p_{\tau-1,\tau} g_\tau + \\ &+ 2 \sum_{\tau=1}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_\tau) \sum_{l=1}^{\tau} \sum_{j=0}^{l-1} Q_l Q_j \cdot h_l h_j p_0^0 p_{0,1} \dots p_{\tau-1,\tau} g_\tau. \end{aligned}$$

С первой суммой по τ мы можем обойтись в точности так же, как и при доказательстве теоремы 4.2. Имеем

$$S_1 = \sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_\tau) \sum_{l=0}^{\tau} \left(Q_l h_l \right)^2 p_0^0 p_{0,1} \dots p_{\tau-1,\tau} g_\tau = \left(\psi^*, h^2 \right),$$

где ψ^* есть итерационное решение уравнения

$$\psi^*(x) = \int \frac{k^2(y, x)}{p(x \rightarrow y)} \psi^*(y) \mu(dy) + \frac{f^2(x)}{p^0(x)}. \quad (4.2.5)$$

Для второй суммы имеем

$$S_2 = 2 \sum_{\tau=1}^{\infty} \int \mu(dx_0) \dots \int \mu(dx_\tau) \sum_{l=1}^{\tau} \sum_{j=0}^{l-1} Q_l Q_j h_l h_j p_0^0 \dots p_{j-1,j} p_{j,j+1} \dots p_{l-1,l} \dots P_{\tau-1,\tau} g_\tau =$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} \int \cdots \int \mu(dx_j) \frac{f_0^2 k_{10}^2 \cdots k_{j,j-1}^2 h_j}{p_0 p_{01} \cdots p_{j-1,j}} \cdot \sum_{l=j+1}^{\infty} k_{j+1,j} \cdots k_{l,l-1} h_l \sum_{\tau=l}^{\infty} \int dx_{l+1} \cdots \int dx_{\tau} p_{l,l+1} \cdots p_{\tau-1,\tau} g_{\tau},$$

(полагаем $p_{-1,0} \equiv 1$). Мы видим, что полученное выражение представляет собой произведение трех сомножителей. Последний после изменения нумерации переменных интегрирования на основании (4.1.10) оказывается равным единице. Второй, после аналогичного изменения нумерации оказывается равным $\varphi^*(x_j) - h(x_j)$. Имеем $S_2 = 2(\psi^* h, \varphi - h)$. И, следовательно,

$$(E\mathfrak{J}_c^*)^2 = 2(\psi^*, h(\varphi^* - h)) + (\psi^*, h^2) = (\psi^*, h(2\varphi^* - h)).$$

Таким образом, справедлива

Теорема. 4.3 (Золотухин В.Г., Ермаков С.М.) В предположениях теоремы 4.2 справедливо равенство

$$D\mathfrak{J}_c^* = (\psi^*, h(2\varphi^* - h)) - (h, \varphi)^2, \quad (4.2.6)$$

где ψ^* есть итерационное решение уравнения (4.2.5).

В литературе [2,11] описаны многие другие несмещенные оценки и вычисляется их дисперсия. Техника доказательства соответствующих утверждений в общих чертах та же, что и при доказательстве приведенных выше теорем.

4.3 Методы уменьшения дисперсии

Как уже отмечалось (гл.2 §2.2) развитые в предыдущих параграфах этой главы методы оценивания функционалов от решения уравнений второго рода используют их представления в виде интегралов по вероятностной мере, индуцированной некоторой цепью Маркова (интегралов по траекториям). Следовательно, должны быть применены общие методы уменьшения дисперсии, что не исключает развитие специальных методов, использующих конкретные особенности задачи.

Остановимся сначала на приемах, основанных на общих методах, описанных в гл. 3.

4.3.1 Метод существенной выборки

Рассмотрим оценку $\mathfrak{J}_a(\omega_{\tau})$. Как мы видели, с помощью этой оценки для каждой цепи Маркова, удовлетворяющей условиям согласования, имеем

$$(h, \varphi) = E\mathfrak{J}_a(\omega_{\tau}) = \int \mathfrak{J}_a(\omega_{\tau}) P(d\omega_{\tau}), \quad (4.3.1)$$

где P -мера на траекториях марковской цепи, такая что плотность распределения траектории $x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow \cdots \rightarrow x_{\tau}$ по отношению к мере $\mu^{\tau+1}$ есть $p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1,\tau} g_{\tau}$. Если мы хотим ввести другую меру $Q(d\omega_{\tau})$, такую, что существует производная Радона-Никоидима $\frac{dP}{dQ}$ то P должна быть абсолютно непрерывна по отношению к Q . Q должна иметь ту же структуру, что и P . Мы предполагаем её такой, что траектория ω_{τ} имеет плотность $q_{\tau}(x_0, \dots, x_{\tau})$ по отношению к $\mu^{\tau+1}$ и тогда q_{τ} должна быть больше нуля для тех ω_{τ} , для которых $p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1,\tau} g_{\tau} > 0$.

В соответствии с теоремой 3, имеем для оптимальной плотности

$$q_{\tau, \text{опт}}(\omega_\tau) = \mathbb{C} |\mathfrak{J}_a(\omega_\tau)| p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1, \tau} g_\tau, \text{ или}$$

$$q_{\tau, \text{опт}}(\omega_\tau) = \mathbb{C} |h_0 k_{01} \cdots k_{\tau-1, \tau} f_\tau|, \quad (4.3.2)$$

где \mathbb{C} - константа нормировки,

$$\mathbb{C}^{-1} = \sum_{\tau=0}^{\infty} \int d\mu^{\tau+1} |h_0 k_{01} \cdots k_{\tau-1} f_\tau| = (|h|, \bar{\varphi}), \quad \text{а}$$

$\bar{\varphi}$ удовлетворяет уравнению

$$\bar{\varphi}(x) = \int \mu(dy) |k(x, y)| \bar{\varphi}(y) + |f(x)|. \quad (4.3.3)$$

Далее мы должны заметить, что не обязательно существует цепь Маркова, индуцирующая меру Q . Для существования такой цепи нужно выполнение равенств

$$q_{\tau, \text{опт}}(\omega_\tau) = q_0^0 q_{01} \cdots q_{\tau-1, \tau} r_\tau,$$

где q^0 является плотностью по отношению к мере μ , а $q = q(x \rightarrow y)$ - неотрицательная (mod μ) функция, удовлетворяющая условию

$$\int q(x \rightarrow y) \mu(dy) = 1 - r(x), \quad 0 \leq r(x) \leq 1 \quad (\text{mod } \mu). \quad (4.3.4)$$

Анализируя (4.2.8), мы видим что $|h|$ не обязательно должна быть плотностью, а для $|k(x, y)|$ не обязательно выполняется равенство $\int |k(x, y)| \mu(dy) = 1 - |f(x)|$ и, конечно же, не обязательно $0 \leq |f(x)| \leq 1$ (mod μ). Тем не менее, в рассматриваемом случае всегда можно указать цепь Маркова, индуцирующую оптимальную в смысле теоремы 3 меру. Для этой цели нужно использовать уравнение (4.3.3) и представить $q_{\tau, \text{опт}}$ в виде

$$q_{\tau, \text{опт}}(\omega_\tau) = \frac{||h_0|, \bar{\varphi}_0|}{(|h|, \bar{\varphi})} \cdot \frac{|k_{0,1}| \bar{\varphi}_1}{\bar{\varphi}_0} \cdots \frac{|k_{\tau-1, \tau}| \bar{\varphi}_\tau}{\bar{\varphi}_{\tau-1}} \cdot \frac{|f_\tau|}{\bar{\varphi}_\tau}. \quad (4.3.5)$$

Легко видеть из (4.2.3), что

- а) $\bar{\varphi}_0 > 0$, если $|k_{0,1}| > 0$, $\bar{\varphi}_\tau > 0$, если $|f_\tau| > 0$ (операция деления законна),
- б) $\frac{|h_0| \bar{\varphi}_0}{(|h|, \bar{\varphi})}$ является плотностью,
- в) $\int \frac{|k(x, y)| \bar{\varphi}(y)}{\bar{\varphi}(x)} \mu(dx) = 1 - \frac{|f(x)|}{\bar{\varphi}(x)}$, $0 \leq \frac{|f(x)|}{\bar{\varphi}(x)} \leq 1$.

(все равенства и неравенства следует понимать (mod μ)).

Из этих рассуждений следует теорема.

Теорема. 4.4 Существует цепь Маркова $(q^0(x), q(x \rightarrow y))$, такая, что при $p^0 = q^0$, $p(x \rightarrow y) = q(x \rightarrow y)$ достигается минимум дисперсии оценки $\mathfrak{J}_c(\omega_\tau)$. При этом

$$q^0(x) = \frac{|h(x)| \bar{\varphi}(x)}{(|h|, \bar{\varphi})}, \quad q(x \rightarrow y) = \frac{|k(x, y)| \bar{\varphi}(y)}{\bar{\varphi}(x)}, \quad (4.3.6)$$

а $\bar{\varphi}$ есть решение уравнения (4.3.3). Значение дисперсии, соответствующее оптимальной цепи Маркова, есть

$$D_{\text{опт}} \mathfrak{J}_a(\omega_\tau) = (|h|, \bar{\varphi})^2 - (h, \varphi)^2. \quad (4.3.7)$$

Доказательство. Нами проведено ранее. Исключение представляет равенство (4.3.7), которое может быть получено из (4.2.1) путем элементарных выкладок.

Следствие. Если $h \geq 0$, $f \geq 0$, $k \geq 0 \pmod{\mu}$ и $\pmod{\mu^2}$ соответственно, то

$$D_{\text{опт}} \mathfrak{J}_a(\omega_\tau) = 0. \quad (4.3.8)$$

Мы видим, что как и в случае теоремы 3.1 оптимальный результат достигается, если известно решение $\bar{\varphi}$ уравнения (4.3.3). Практическое значение имеет использование априорных сведений о $\bar{\varphi}$.

Исследование дисперсии оценки $\mathfrak{J}_a(\omega_\tau)$ проводится вполне аналогично предыдущему. В этом случае оказывается, что оптимальная цепь Маркова определяется следующим образом

$$q^{0*}(x) = \frac{|f(x)|\bar{\varphi}^*(x)}{(|f|, \bar{\varphi}^*)}, \quad q^*(x \rightarrow y) = \frac{|k(y, x)|\bar{\varphi}^*(y)}{\bar{\varphi}^*(x)}, \quad (4.3.9)$$

а $\bar{\varphi}^*$ есть решение уравнения

$$\bar{\varphi}^*(x) = \int |k(y, x)|\bar{\varphi}^*(y)\mu(dx) + |h(x)|. \quad (4.3.10)$$

В последнем случае для уменьшения дисперсии используется информация о $\bar{\varphi}^*$ (двойственность), что бывает полезно, в особенности, если $\bar{\varphi}^*$ может иметь некоторый физический смысл.

Не представляет труда формально указать оптимальную меру Q в случае оценок по столкновениям $\mathfrak{J}_c(\omega_\tau)$ и $\mathfrak{J}_c^*(\omega_\tau)$, однако цепи Маркова, соответствующей этой мере, не существует.

Если с самого начала ограничиться мерами, индуцируемыми цепями Маркова, то задача об определении оптимальной марковской цепи может быть решена, но её решение не вытекает непосредственно из теоремы 3.1. Требуется развитие специального аппарата (см. Г.А. Михайлов [12]). Известно, что для различных оценок полезно выбирать переходную плотность цепи Маркова так, чтобы $|k(x, y)|$ (соответственно $|k(y, x)|$) входил в качестве сомножителя.

4.3.2 Понижение порядка интегрирования (векторные оценки)

Если ряд Неймана, с помощью которого представлен функционал (h, φ)

$$(h, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \int \mu(dx_0) \cdots \int \mu(dx_l) h_0 k_{01} \cdots k_{l-1,l} f_l \quad (4.3.11)$$

может быть преобразован путем выполнения интегрирования аналитического или численного по части переменных, то таким образом часто удается построить оценки с меньшей дисперсией. Аналогичный прием был рассмотрен в главе 3 применительно к общему случаю интеграла по вероятностной мере. Частные особенности суммы (4.2.7) позволяют указать специальные вычислительные методы.

Отметим прежде всего, что прием понижения порядка интегрирования может применяться к отдельным членам суммы (часто удается вычислить аналитически первые

или несколько первых слагаемых ряда). Поскольку переменные x_i обычно векторы $x_i = (x_i^i, \dots, x_i^s)$, то также часто можно интегрировать все слагаемые по части компонент вектора x_i . Этот случай представляет особый интерес и мы остановимся на нем подробно.

Пусть $x = (y, z)$, и $\mu(dx) = \mu_2(dy)\mu_1(dz)$. Рассмотрим оценку $\mathfrak{J}_a(\omega_\tau)$ для вычисления (φ, h)

$$\mathfrak{J}_a(\omega_\tau) = \frac{h_0 k_{01} \cdots k_{\tau-1, \tau} f_\tau}{p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1, \tau} g_\tau}, \quad k_{i,j} = k(y_i, z_i; y_j, z_j),$$

$$p_{i,j} = p(y_i, z_i \rightarrow y_j, z_j), \quad h_0 = h(y_0, z_0), \quad p_0^0 = p^0(y_0, z_0), \quad f_i = f(y_i, z_i),$$

$$g_\tau = g(y_\tau, z_\tau). \quad \mathfrak{X} = \mathcal{Y} \times \mathcal{Z}, \quad y_i \in \mathcal{Y}, \quad z_i \in \mathcal{Z}, \quad i = 0, \dots, \tau.$$

Предположим, что при любом τ интеграл от $h_0 k_{01} \cdots k_{\tau-1, \tau} f_\tau$ по $\mu(dz_0) \dots \mu(dz_\tau)$ может быть вычислен точно. С учетом структуры оценки это обозначает, что вместо значений ядра $k_{j,j+1}$, $j = 0, \dots, \tau - 1$ следует рассматривать оператор $L_{j,j+1} = \int k(y_j, z_j; y_{j+1}, z_{j+1}) \psi(z_{j+1}) \mu_1(dz_{j+1})$, так что проинтегрированный числитель оценки будет иметь вид: $\int \mu(dz_0) h_0 L_{01} \cdots L_{\tau-1, \tau} f_\tau$.

Если теперь мы выберем цепь Маркова так, что она не зависит от переменных из \mathcal{Z} , т.е. $\bar{p}^0(y, z) = \bar{p}^0(y)$, $p(y, z \rightarrow y', z') = \bar{p}(y \rightarrow y')$, то оценка

$$\bar{\mathfrak{J}}_a(\omega_\tau) = \frac{\int \mu_1(dz_0) (h_0 L_{0,1} \cdots L_{\tau-1, \tau} f_\tau)}{\bar{p}_0^0 \bar{p}_{01} \cdots \bar{p}_{\tau-1, \tau} \bar{g}_\tau}, \quad L_{-1,0} \equiv 1 \quad (4.3.12)$$

будет несмещенной при выполнении следующих условий:

4.3^a $\bar{p}_0^0 \bar{p}_{01} \cdots \bar{p}_{\tau-1, \tau} \bar{g}_\tau > 0$ для тех $(\text{mod } \mu_2^{\tau+1})$ y_0, \dots, y_τ , для которых также $(\text{mod } \mu_2^{\tau+1})$ отлично от нуля выражение $\int \mu_1(dz_0) h_0 L_{0,1} \cdots L_{\tau-1, \tau} f_\tau$,

4.3^b Сходится ряд

$$\sum_{\tau=0}^{\infty} \int \mu_2(dy_0) \cdots \int \mu_2(dy_\tau) \left| \int \mu_1(dz_0) h_0 L_{0,1} \cdots L_{\tau-1, \tau} f_\tau \right|, \quad (4.3.13)$$

т.е. имеет место следующая

Теорема. 4.5 При выполнении условий 4.3^a 4.3^b имеет место равенство

$$E \bar{\mathfrak{J}}_a(\omega_\tau) = (h, \varphi).$$

Доказательство тривиально и мы предоставляем его читателю.

Поскольку, в исходной оценке $\mathfrak{J}_a(\omega_\tau)$ часто удобно выбирать $p(x \rightarrow x')$ близким к $|k(x \rightarrow x')|$, то в рассматриваемом случае часто возможен выбор таких $p^0(x)$ и $p(x \rightarrow x')$, что плотность траекторий $p_0^0 p_{01} \cdots p_{\tau-1, \tau} g_\tau$ также удобно проинтегрировать по переменным z_0, \dots, z_τ . Тогда оценка

$$\bar{\bar{\mathfrak{J}}}_a(\omega_\tau) = \frac{\int \mu_1(dz_0) (h_0 L_{01} \cdots L_{\tau-1, \tau} f_\tau)}{\int \mu_1(dz_0) (p_0^0 \pi_{01} \cdots \pi_{\tau-1, \tau} g_\tau)}, \quad (4.3.14)$$

(где π есть оператор определяемый равенством $\pi_{j,j+1} \psi(z_j) = \int \mu_1(dz_{j+1}) p(y_j, z_j \rightarrow y_{j+1}, z_{j+1}) \psi(z_{j+1})$, ψ – ограниченная $\text{mod } \mu_1$ функция на \mathcal{Z}) также будет несмещенной оценкой (φ, h) при выполнении соответствующих условий согласования 4.3^b, если моделируется цепь Маркова (p_0, p) , но используется лишь траектория y_0, \dots, y_τ .

Следующие замечания являются важными.

Замечание 4.2.1. Условие (4.2.20) слабее условия (4.1.4). Оценки $\bar{\mathfrak{J}}_a$ и $\bar{\bar{\mathfrak{J}}}_a$ могут быть интегрируемыми на траекториях марковской цепи (иметь математическое ожидание), когда \mathfrak{J}_a не интегрируема.

Замечание 4.2.2. Если \mathfrak{J}_a имеет математическое ожидание, то $\bar{\mathfrak{J}}_a$ и $\bar{\bar{\mathfrak{J}}}_a$ могут служить средством уменьшения вычислительной работы. Решение о целесообразности их использования требует в конкретных случаях отдельных исследований. Отметим только, что при неотрицательных f, k, h дисперсия $\bar{\bar{\mathfrak{J}}}_a$ обращается в нуль на той же марковской цепи, что и $D\mathfrak{J}_a$.

"Операторные" аналоги оценок \mathfrak{J}_a^* , \mathfrak{J}_c' и \mathfrak{J}_c^* строятся аналогичным образом. Особенности, связанные с их использованием во многом аналогичны особенностям при использовании $\bar{\mathfrak{J}}_c$ и $\bar{\bar{\mathfrak{J}}}_c$.

Особенности "операторных" оценок полезно проследить на примере систем линейных алгебраических уравнений. Имеем

$$\begin{aligned} X &= AX + F \\ X &= (x_1, \dots, x_n)^T, \quad A = \|a_{i,j}\|_{i,j=1}^n, \quad F = (f_1, \dots, f_n)^T. \end{aligned}$$

Разобьем множество натуральных чисел $1, 2, \dots, n$ на s непустых подмножеств $N_1 = (n_0 + 1, n_1), N_2 = (n_1 + 1, \dots, n_2), \dots, N_s = (N_{s-1} + 1, \dots, n_s)$, $n_0 = 0, n_1 > n_2 > \dots > n_s$. В соответствии с этим разбиением представим векторы X и F в виде $X = (X_1, \dots, X_s)$, $F = (F_1, \dots, F_s)$, где $X_{j+1} = (\mathfrak{X}_{n_j+1}, \dots, \mathfrak{X}_{n_{j+1}})$, $F_{j+1} = (f_{n_j+1}, \dots, f_{n_{j+1}})$, $j = 0, \dots, s-1$, а матрицу A в виде $A = \|A_{k,l}\|_{k,l=1}^s$, где $A_{k,j}$ – прямоугольные подматрицы матрицы $A_{k,l} = \|a_{i,j}\|_{i \in N_k, j \in N_l}$. Аналогично, пусть $H = (H_1, \dots, H_s)$, где $H_{l+1} = (h_{n_j+1}, \dots, h_{n_{j+1}})$. Оценка $\bar{\mathfrak{J}}_a$, соответствующая этому разбиению, есть

$$\bar{\mathfrak{J}}_a(\omega_\tau) = \frac{\sum_{l=1}^s H_l A_{i_0, i_1} \dots A_{i_{\tau-1}, \tau} F_\tau}{\bar{p}_{i_0}^0 \bar{p}_{i_0, i_1} \dots \bar{p}_{i_{\tau-1}, \tau} \bar{g}_\tau}, \quad A_{-1,0} \equiv I \quad (\text{единичной подматрице}).$$

Соответствующий алгоритм может рассматриваться как комбинация метода Монте-Карло и итерационных методов. Он имеет большую трудоемкость (по сравнению с алгоритмом, использующим \mathfrak{J}_a). Учтите далее замечания, сделанные выше. Очевидны также преимущества, которые могут доставить операторные оценки при вычислениях на параллельно-векторных вычислительных структурах.

Другое важное приложение операторных оценок возникает при решении систем интегральных уравнений. Так, в простейшем случае система двух уравнений

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= \int k_{1,1}(x, y) \varphi_1(y) \mu(dy) + \int k_{1,2}(x, y) \varphi_2(y) + f_1(x) \\ &\quad (\text{mod } \mu) \\ \varphi_2(x) &= \int k_{2,1}(x, y) \varphi_1(y) \mu(dy) + \int k_{2,2}(x, y) \varphi_2(y) + f_2(x) \end{aligned}$$

может рассматриваться как одно уравнение

$$\varphi(j, x) = \int k(j, x; l, y) \varphi(l, y) \mu(dl, dy) + f(j, x), \quad \mu(dl, dy) = \mu(dy) \otimes \mu_1(dl),$$

где $\mu_1(dl)$ есть мера с равными весами на множестве (1,2). Индекс l играет роль переменной z в нашем общем рассмотрении в начале n^0 4.3.2.

4.3.3 Ветвящиеся траектории

Одним из универсальных методов уменьшения дисперсии оценок в задаче суммирования ряда Неймана является использование ветвящихся цепей Маркова. Суть метода проще всего пояснить следующим образом. Пусть для вычисления суммы ряда (4.1.7) с помощью одной из рассмотренных оценок выбрана цепь Маркова (p^0, p) , удовлетворяющая соответствующим условиям согласования. В качестве одного испытания будем рассматривать множество M траекторий таких, что начальная часть (от x_0 до x_m включительно) у них совпадает, а $x_i^{(j)}$ ($j = 1, \dots, M$) моделируется независимо при $i \geq m$. Считаем $x_m^{(1)} = x_m^{(2)} = \dots = x_m^{(M)}$. Имеем общую часть $x_0 \rightarrow x_1 \dots \rightarrow x_\tau$ при $\tau \leq m$ и

$$\begin{array}{c} \nearrow x_{m+1}^{(1)} \rightarrow \dots \rightarrow x_{\tau(1)}^1 \\ x_0 \rightarrow \dots \rightarrow x_m \longrightarrow \dots \quad \dots \quad \dots \\ \searrow x_{m+1}^{(M)} \rightarrow \dots \rightarrow x_{\tau(M)}^M \end{array} \quad (4.3.15)$$

если $\tau > m$. Пусть $\sum_{j=1}^M \lambda_j = 1$.

Оценка

$$\mathfrak{J}_a^b = \begin{cases} \sum_{j=1}^M \lambda_j \frac{h_0 k_{01} \dots k_{m_j, m_{j+1}}^{(j)} \dots k_{\tau(j)-1, \tau(j)}^{(j)} f_{\tau(j)}^{(j)}}{p_0^j p_{01} \dots p_{m_j, m_{j+1}}^{(j)} \dots p_{\tau(j)-1, \tau(j)}^{(j)} g_{\tau(j)}^{(j)}}, & \tau(j) \geq m \\ \frac{h_0 k_{01} \dots k_{\tau-1, \tau} f_\tau}{p_0^j p_{01} \dots p_{\tau-1, \tau} g_\tau}, & \tau \leq m, \end{cases} \quad (4.3.16)$$

где $k_{p,q}^{(j)} = k(x_p^{(j)}, x_q^{(j)})$, $p_{p,q}^{(j)} = p(x_p^{(j)} \rightarrow x_q^{(j)})$, $f_q^{(j)} = f(x_q^{(j)})$, $g_q^{(j)} = g(x_q^{(j)})$, очевидным образом является несмещенной. Здесь m_j имеет, вообще говоря, свое значение для каждой траектории и может зависеть от $x_i^{(j)}$. Для данной траектории (4.3.15) точка x_m называется точкой ветвления, а λ_j - статистическим весом j -той ветви. Обычно выбираем $\lambda_j > 0$. Очевидно, что конструкция обобщается на случай, когда любые из j -ых траекторий в свою очередь имеют точку ветвления. Наличие ветвления, значения m, x_m и λ_j влияют на величину дисперсии оценок. (Аналоги \mathfrak{J}_a^* , \mathfrak{J}_c и \mathfrak{J}_c^* для ветвящихся траекторий строятся очевидным образом). Большое количество параметров делает задачу оптимизации очень сложной. Обычно используют ветвление в той области фазового пространства траекторий, которая может значительно повлиять на дисперсию оценки. Эта область определяется экспериментально или на основе "физических" соображений. Здесь большую роль играют соображения двойственности (φ и φ^*), но это специальная тема, развиваемая в связи с задачами переноса излучения через вещество. Отметим в заключение, что использование расслоенной выборки при вычислении ряда Неймана приводит также к конструкциям схожим с ветвящимися цепями Маркова.

4.4 Замечания о трудоемкости. Квазислучайные числа

Прежде всего следует повторить то общее положение, что уменьшение дисперсии не может служить самоцелью. Целью теоретических исследований, связанных с применением метода Монте-Карло является

1. Уверенность (теоретическое обоснование) в том, что математическое ожидание существует

2. Оценка сверху второго момента, если он существует.
3. Выбор меры, подлежащей моделированию и оценки, обеспечивающей наименьшую трудоемкость (наименьшее среднее число операций компьютера). Заметим, что обычно речь идет не об оптимальном, а более или менее близком к оптимальному выборе. Выбор такого рода часто осуществляется путем численных экспериментов и существенно зависит от конкретных особенностей задачи.

В отличие от классических детерминированных методов, теория которых ориентирована на исследование алгоритмов решения некоторого достаточно обширного класса задач, метод Монте-Карло является инструментом решения конкретной задачи. Поясним последнее утверждение конкретным примером. Метод существенной выборки указывает оптимальное распределение узлов интегрирования для конкретных f и μ . При детерминированной постановке задача строится для класса функций f (и может быть решена в очень ограниченном числе случаев). Тем не менее, нужны веские основания, чтобы предпочесть метод Монте-Карло детерминированному алгоритму в тех случаях, когда последний удобен и подробно исследован.

4.4.1 Сравнительная трудоемкость при решении систем линейных алгебраических уравнений

Представляет очевидный интерес сравнение детерминированных алгоритмов и алгоритмов метода Монте-Карло в достаточно простом случае. Пусть в предположениях §4.1. вычисляется решение системы линейных алгебраических уравнений

$$X = AX + F, \quad \lambda_1(|A|) < 1.$$

Будем для определенности использовать оценку \mathfrak{J}_c^* , которая позволяет на одной траектории цепи Маркова оценивать все компоненты решения X и сравнивать её трудоемкость с трудоемкостью метода простых итераций

$$X_m = AX_{m-1} + F, \quad X_0 = F.$$

Пусть M – число итераций, необходимое для получения решения с точностью ε (в некоторой векторной норме),

$$X_M = (J + A + \dots + A^M)F. \quad (4.4.1)$$

Компоненты $x_l^{(m)}$, $l = 1, \dots, n$ вектора X_M могут быть оценены с помощью случайного вектора с компонентами

$$[\mathfrak{J}_c^*]_M(l) = \sum_{j=0}^{\tau_M} \frac{f_{i_0} a_{i_1, i_0} \cdots a_{i_j, i_{j-1}} h_{i_j}}{p_{i_0} p_{i_0 i_1} \cdots p_{i_{j-1} i_j}}, \quad (4.4.2)$$

$$\tau_M = \begin{cases} \tau & \tau < M \\ M & \tau \geq M \end{cases}, \quad a_{0,-1} \equiv 1, \quad h_{i,j} = \begin{cases} 1 & i_j = l \\ 0 & i_j \neq l \end{cases}.$$

Полагая $Q_{ij} = \frac{f_{i_0}^{a_{i_1, i_0} \dots a_{i_j, i_{j-1}}}}{p_{i_0} p_{i_0 i_1} \dots p_{i_{j-1} i_j}}$, $i_j \leq \tau_M$ мы можем указать оценку для каждого $x_l^{(M)}$ на одной моделируемой траектории. А именно

$$\widehat{x}_l^{(M)} = \begin{cases} \sum_{i_j=l} Q_{ij} \\ 0, \text{ если нет } i_j, \text{ равных } l. \end{cases} \quad \text{Очевидно, } E\widehat{x}_l^{(M)} = x_l^{(M)}. \quad (4.4.3)$$

А. Для вычисления X_M нужно M раз умножить матрицу $\|a_{i,j}\|$ на вектор и M раз сложить векторы. Это требует $R = M(n(n+1) + 1) \sim Mn^2$ операций при полностью заполненной матрице A .

Б. Для вычисления $[\mathfrak{J}_c^*](l)$ требуется не более M раз моделировать дискретное распределение (p^0 или строку переходной матрицы $\|p_{i,j}\|$), осуществить не более M умножений и делений, и не более M сложений (добавление Q_{ij} к ранее полученным оценкам $\widehat{x}_l^{(M)}$). Если теперь мы вспомним (§2.1), что моделирование дискретного распределения p_1, \dots, p_n требует не более $\log_2 n$ операций. то получим, что для вычисления оценки $\widehat{x}_l^{(M)}$ нужно не более $M(\log_2 n + 3)$ операций. Однако, мы вынуждены повторить эту операцию N раз и вычислить среднее арифметическое полученных N значений. Имеем окончательную оценку - число операций S_n ,

$$S_n \leq NM(\log_2 n + 3) + n.$$

И, далее,

$$S_n/R_n \sim \frac{N \log_2 n + n/M}{n^2}. \quad (4.4.4)$$

Из общей теории итерационных методов известно, что $M \sim \frac{\ln \varepsilon}{\ln |\lambda_1|}$. С другой стороны при заданном уровне надежности имеем $N \sim \sigma^2/\varepsilon^2$ и асимптотически по ε получаем

$$S_n/R_n \sim \frac{N \log_2 n + n/M}{n^2} \sim \left(\frac{\sigma^2}{\varepsilon^2} \log_2 n + \frac{n \ln |\lambda_1|}{\ln \varepsilon} \right) \frac{1}{n^2} = \frac{\sigma^2}{(n\varepsilon)^2} \log_2 n + \frac{\ln |\lambda_1|}{n \ln \varepsilon}. \quad (4.4.5)$$

Из полученного следует, что при $n\varepsilon > \log_2 n$ при ε фиксированном и возрастающем n метод Монте-Карло может быть более эффективным чем метод простых итераций.

Если матрица A имеет нулевые элементы, но число ненулевых пропорционально qn^2 , $q < 1$, то похожий результат имеет место. Случай других итерационных процессов и матриц специального вида требует отдельного рассмотрения, но в условиях применимости схемы Неймана-Улама обычно может быть получен результат, что находится такое n_0 , что при $n > n_0$ (при фиксированном, а во многих случаях и при зависящей от n , величине ε) метод Монте-Карло может быть более предпочтительным [13,14]. Метод Монте-Карло приспособлен для решения задач большого объема.

4.4.2 Метод Квази Монте-Карло

Как мы уже отмечали в §3.2 методы Квази Монте-Карло состоят в применении кубатурной формулы

$$\int_0^1 dx_1 \dots \int_0^1 dx_s f(x_1, \dots, x_s) \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_1^{(s)}(j), \dots, x_s^{(s)}(j)). \quad (4.4.6)$$

$x_i^{(s)}(j)$ здесь неслучайные (т.е. полученные не с помощью датчика случайных чисел!) числа из промежутка $(0,1)$. Идея Квази Монте-Карло состоит в том, чтобы использовать $x_i(j)$ в схеме метода метода Монте-Карло вместо реализации α_l равномерно распределенной на $(0,1)$ случайной величины. Возвращаясь к материалу главы 1, мы вспоминаем, что α_l можно выбирать в любом порядке. Этого, вообще говоря, нельзя делать с числами $x_i^{(s)}(j)$, хотя во многих схемах квази Монте-Карло (напр., точки Холтона) при переходе от s к $s + 1$ можно сохранять полученные ранее $x_i^{(s)}(j)$, т.е. можно выбирать $x_i^{(s)}(j)$, не зависящими от s , и при увеличении N можно не пересчитывать полученную ранее сумму. Новые узлы добавляются к старым. Эти особенности свойственны более методу Монте-Карло, чем классической теории кубатурных формул. В последней изменение N или s требует выбора новой системы узлов.

Таким образом, если методом Монте-Карло вычисляется интеграл и подынтегральная функция, как функция α_l является функцией ограниченной вариации (в смысле Харди-Краузе), то применение формулы (4.4.6.) может повысить эффективность алгоритма (уменьшить вычислительную работу). При этом о поведении погрешности можно судить по результатам вычислений полученных при возрастании N .

Если вычисления состоят в моделировании траекторий цепи Маркова и вычислении соответствующей оценки, то для одной траектории должна использоваться система узлов, принадлежащая одному значению j , т.е. $x_1(j), x_2(j), \dots, x_s(j)$. Поскольку траектории могут иметь разную длину, важно, чтобы при возрастании s не нужно было бы изменять полученные ранее $x_i(j)$. Имеется много публикаций, где использование последовательностей Холтона и Соболя приводит к лучшим результатам, чем результаты, полученные с помощью стандартного датчика случайных чисел. Однако, имеется ряд мало исследованных вопросов, связанных с использованием метода Квази Монте-Карло.

Так известно, что распределения, получаемые в качестве результатов при моделировании естественных явлений могут быть искажены вследствие корреляций, имеющих место между элементами квазислучайных последовательностей. Эти искажения могут быть особенно заметны, когда применяются методы отбора. По этой причине должна быть проявлена осторожность при решении задач, использующих моделирование распределений и, в особенности, методы отбора для моделирования распределений.

Литература

- [1] В.В. Петров. Предельные теоремы для сумм независимых случайных величин. – М., Наука, 1987.
- [2] С.М. Ермаков. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М., Наука, 1975.
- [3] Hammersley T.M., Handscomb D.C. Monte Carlo methods. – London - N.Y., 1964.
- [4] С.Л.Соболев. Введение в теорию кубатурных формул. – М., Наука, 1974.
- [5] Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. Численные методы. Изд. 8. – М. - С.Петербург, 2000.
- [6] Н. Niederreiter. Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods. – SIAM, Phil., Pensilvania, 1992.
- [7] Соболев И.М. Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. – М., Наука, 1969.
- [8] Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М., Наука, 1973.
- [9] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М., Наука, 2 изд., доп., 1982.
- [10] Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С. Случайные процессы для решения классических уравнений мат. физики. – М., Наука, 1984.
- [11] Хисамутдинов А.И. Единичный класс оценок для вычисления по методу Монте-Карло функционалов от решения интегрального уравнения 2-го рода // ЖВМ и МФ (1970), 10, № 5, 1269-1280.
- [12] Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. – М., Наука, 1987.
- [13] Danilov D.L., Ermakov S.M., Halton J.H. Asymptotic complexity of Monte Carlo methods for solving linear systems // J. Statistical Planning and Inference, 2000, № 85, p.p. 5-18.
- [14] Дополнение к одной работе по методу Монте-Карло // ЖВМ и МФ, 2001, том 41, № 6, с. 991-992.

Приложение 1. Таблица простых чисел

2	3	5	7	11	13	17	19	23	29
31	37	41	43	47	53	59	61	67	71
73	79	83	89	97	101	103	107	109	113
127	131	137	139	149	151	157	163	167	173
179	181	191	193	197	199	211	223	227	229
233	239	241	251	257	263	269	271	277	281
283	293	307	311	313	317	331	337	347	349
353	359	367	373	379	383	389	397	401	409
419	421	431	433	439	443	449	457	461	463
467	479	487	491	499	503	509	521	523	541
547	557	563	569	571	577	587	593	599	601
607	613	617	619	631	641	643	647	653	659
661	673	677	683	691	701	709	719	727	733
739	743	751	757	761	769	773	787	797	809
811	821	823	827	829	839	853	857	859	863
877	881	883	887	907	911	919	929	937	941
947	953	967	971	977	983	991	997	1009	1013
1019	1021	1031	1033	1039	1049	1051	1061	1063	1069
1087	1091	1093	1097	1103	1109	1117	1123	1129	1151
1153	1163	1171	1181	1187	1193	1201	1213	1217	1223
1229	1231	1237	1249	1259	1277	1279	1283	1289	1291
1297	1301	1303	1307	1319	1321	1327	1361	1367	1373
1381	1399	1409	1423	1427	1429	1433	1439	1447	1451
1453	1459	1471	1481	1483	1487	1489	1493	1499	1511
1523	1531	1543	1549	1553	1559	1567	1571	1579	1583
1597	1601	1607	1609	1613	1619	1621	1627	1637	1657
1663	1667	1669	1693	1697	1699	1709	1721	1723	1733
1741	1747	1753	1759	1777	1783	1787	1789	1801	1811
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Приложение 2. Таблица числителей $r_j^{(l)}$

j	l=1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	l=12	...
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	...
2	1	3	5	15	17	51	85	255	257	771	1285	3855	...
3	1	1	7	11	13	61	67	79	465	721	823	4091	...
4	1	3	7	5	7	43	49	147	439	1013	727	987	...
5	1	1	5	3	15	51	125	141	177	759	267	1839	...
6	1	3	1	1	9	59	25	89	321	835	833	4033	...
7	1	1	3	7	31	47	109	173	181	949	471	2515	...
8	1	3	3	9	9	57	43	43	225	113	1601	579	...
9	1	3	7	13	3	35	89	9	235	929	1341	3863	...
10	1	1	5	11	27	53	69	25	103	615	913	977	...
11	1	3	5	1	15	19	113	115	411	157	1725	3463	...
12	1	1	7	3	29	51	47	97	233	39	2021	2909	...
13	1	3	7	7	21	61	55	19	59	761	1905	3379	...
14	1	1	1	9	23	37	97	97	353	169	375	1349	...
15	1	3	3	5	19	33	3	197	329	983	893	3739	...
16	1	1	3	13	11	7	37	101	463	657	1599	347	...
17	1	1	7	13	25	5	83	255	385	647	415	387	...
18	1	3	5	11	7	11	103	29	111	581	605	2381	...
19	1	1	1	3	13	39	27	203	475	505	819	2821	...
20	1	3	1	15	17	63	13	65	451	833	975	1873	...
21	1	1	5	5	1	27	33	195	263	139	915	1959	...
22	1	3	3	3	25	17	115	177	19	147	1715	1929	...
23	1	1	3	15	29	15	41	105	249	203	1223	2389	...
24	1	3	1	7	3	23	79	17	275	81	1367	3251	...
25	1	3	7	9	31	29	17	47	369	337	663	1149	...
26	1	1	5	13	11	3	29	169	393	829	629	243	...
27	1	3	1	9	5	21	119	109	167	989	525	3609	...
28	1	1	3	1	23	13	75	149	333	375	469	1131	...
29	1	3	3	11	27	31	73	15	473	365	981	1701	...
30	1	1	7	7	19	25	105	213	469	131	1667	143	...
31	1	3	5	5	21	9	7	135	101	215	1587	1339	...
32	1	1	1	15	5	49	59	253	21	733	1251	3497	...
33	1	1	1	1	1	33	65	191	451	451	451	2499	...
34	1	3	5	15	17	19	21	155	229	447	481	1571	...
35	1	1	7	11	13	29	3	175	247	177	721	983	...
36	1	3	7	5	7	11	113	63	297	57	483	4021	...
37	1	1	5	3	15	19	61	47	403	471	1209	1625	...
38	1	3	1	1	9	27	89	7	497	979	1457	3217	...
39	1	1	3	7	31	15	45	23	61	197	415	1163	...
40	1	3	3	9	9	25	107	39	361	251	1435	2977	...
41	1	3	7	13	3	3	25	55	215	517	725	3391	...
42	1	1	5	11	27	21	5	71	393	137	861	675	...
43	1	3	5	1	15	51	49	87	125	567	41	3093	...
44	1	1	7	3	29	19	111	103	285	1021	1619	1495	...
45	1	3	7	7	21	29	119	119	501	167	1579	3443	...
46	1	1	1	9	23	5	33	135	277	877	1701	557	...
47	1	3	3	5	19	1	67	153	199	929	869	675	...
48	1	1	3	13	11	39	101	169	301	269	1151	1489	...
49	1	1	7	13	25	37	19	185	19	327	1897	2303	...
50	1	3	5	11	7	43	39	201	83	997	1679	3925	...
51	1	1	1	3	13	7	91	217	351	91	1355	3705	...

Приложение 2. Таблица числителей $r_j^{(l)}$ (продолжение)

j	...	l=13	14	15	16	17	18	19	l=20
1	...	1	1	1	1	1	1	1	1
2	...	4369	13107	21845	65535	65537	196611	327685	983055
3	...	4125	4141	28723	45311	53505	250113	276231	326411
4	...	5889	6915	16647	49925	116487	83243	116529	715667
5	...	6929	16241	16565	17139	82207	50979	252717	851901
6	...	3913	11643	18777	35225	102401	45059	36865	299009
7	...	6211	2147	3169	35873	33841	99889	247315	1032727
8	...	1731	11977	7241	63609	81003	15595	144417	685617
9	...	1347	4417	5087	12631	103445	152645	130127	775365
10	...	6197	14651	2507	27109	5205	91369	302231	172023
11	...	2817	9997	7451	12055	44877	24895	508255	574033
12	...	5459	2615	13329	35887	97323	83101	320901	810643
13	...	8119	13207	8965	9997	75591	226659	187499	628265
14	...	5121	13313	19457	1033	62487	250917	234593	308321
15	...	7669	2671	18391	31161	12111	259781	36159	232401
16	...	2481	5201	3123	32253	78043	63447	508757	974837
17	...	7101	11469	11699	15865	49173	147489	81991	802875
18	...	2677	14855	721	26903	100419	206167	241771	987201
19	...	1405	12165	709	41543	57545	77163	357231	378135
20	...	7423	5837	20481	12291	86017	12303	299025	774207
21	...	725	5387	19285	5165	27985	69809	128325	164575
22	...	2465	12483	13057	28931	54019	21251	62233	248081
23	...	471	12945	32321	29377	127427	103759	472541	1008719
24	...	2887	1279	4865	64771	24321	42247	338691	599831
25	...	1715	187	12285	53631	110851	4357	153347	671033
26	...	5595	8133	4929	10817	8261	189901	255947	734787
27	...	5689	11819	15889	48083	67537	63993	336469	749285
28	...	441	14471	12625	8881	34707	85105	479495	911133
29	...	3169	7615	8405	41135	106823	107847	339031	977907
30	...	4485	2981	12593	60913	1573	26967	507907	344073
31	...	6311	4081	28637	60935	94129	109273	475921	281389
32	...	3557	7223	13425	58577	69521	217151	424277	789985
33	...	483	11843	28285	12029	86021	217093	348165	176165
34	...	3781	10799	15893	959	19793	213491	377941	414943
35	...	3195	9277	15405	19637	87283	186143	343297	1041185
36	...	5213	2031	4677	26607	20931	54345	259163	741087
37	...	5085	15371	19493	56445	26369	27399	521499	132383
38	...	185	6603	1129	36087	66817	98051	451841	175361
39	...	7323	7563	25321	52563	37745	81777	235347	539895
40	...	1713	11617	14979	5455	68289	209987	346179	521289
41	...	4021	4129	4099	12345	102733	21287	128115	20689
42	...	5875	12061	25469	47423	29505	124097	444613	430923
43	...	5363	3471	17589	50131	33137	98739	361365	426737
44	...	4977	15919	6731	43771	23313	151281	270519	11187
45	...	5441	1097	13483	58779	36561	116819	420599	998391
46	...	1779	10369	15325	33331	118321	59665	498897	494137
47	...	6777	14343	18465	63615	43349	30799	322567	939017
48	...	287	8475	6929	46013	52785	75249	14035	507165
49	...	6919	16139	16677	34579	120981	239693	73299	863545
50	...	1517	305	21765	45827	91157	113679	204881	761911
51	...	1875	7621	4381	9079	94533	37261	431301	176455

В таблице приведены числители $r_j^{(l)}$ направляющих чисел при $1 \leq j \leq 51$, $1 \leq l \leq 20$. Направляющие числа $v_j^{(l)}$ вычисляются по формуле $v_j^{(l)} = r_j^{(l)} 2^{-l}$, $(q_j, l_j = l_1 v_j^{(1)} * l_2 v_j^{(2)} * \dots * l_m v_j^{(m)})$.

Приложение 3. Доказательство леммы 3.1

Разложим определитель $\det\|\varphi_i(x_j)\|_1^m$ (j - номер строки) по элементам первого столбца, обозначая Δ_j соответствующий минор:

$$\Delta_j = \begin{vmatrix} \varphi_2(x_1) & \varphi_3(x_1) & \dots & \varphi_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_2(x_{j-1}) & \varphi_3(x_{j-1}) & \dots & \varphi_m(x_{j-1}) \\ \varphi_2(x_{j+1}) & \varphi_3(x_{j+1}) & \dots & \varphi_m(x_{j+1}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_2(x_m) & \varphi_3(x_m) & \dots & \varphi_m(x_m) \end{vmatrix}.$$

Получим

$$\begin{aligned} I &= \int \mu^m(dQ) \sum_{j=1}^m (-1)^{j+1} \Delta_j \varphi_1(x_j) \det\|\psi_k(x_l)\|_1^m = \\ &= \sum_{j=1}^m \int \mu(dx_1) \dots \int \mu(dx_{j-1}) \int \mu(dx_{j+1}) \dots \int \mu(dx_m) \times \\ &\times (-1)^{j+1} \Delta_j \int \mu(dx_j) \varphi(x_j) \det\|\psi_k(x_l)\|_1^m. \end{aligned}$$

Домножим строку определителя $\det\|\psi_k(x_l)\|_1^m$ с номером j на $\varphi_1(x_j)$ и проинтегрируем ее элементы. Перестановка проинтегрированной строки на первое место вызовет появление множителя $(-1)^{j-1}$. Если теперь изменить нумерацию первых $j-1$ переменных интегрирования во всех слагаемых, начиная со второго, обозначая \mathbf{x}_2 вместо \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_3 вместо \mathbf{x}_2 , ..., \mathbf{x}_j вместо \mathbf{x}_{j-1} , то получим

$$I = m \int \mu(dx_2) \dots \int \mu(dx_m) \det\|\varphi_i(x_j)\|_2^m \times \begin{vmatrix} (\varphi_1, \psi_1) & (\varphi_1, \psi_2) & \dots & (\varphi_1, \psi_m) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) & \dots & \psi_m(x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(x_m) & \psi_2(x_m) & \dots & \psi_m(x_m) \end{vmatrix}.$$

Таким образом, мы понизили на единицу порядок одного из определителей и проинтегрировали строку второго. Буквальное повторение этой операции, очевидно, приведет нас к желаемому результату. Лемма доказана.