

Михайлов Г. А., Войтишек А. В.

## МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО

(расширенный лекционный курс)

## АННОТАЦИЯ

Книга возникла из основного и нескольких специальных курсов, которые в течение многих лет читаются в Новосибирском государственном университете. Представлены как классические результаты, так и последние теоретические и методические разработки теории численного статистического моделирования. Особое внимание уделено современным приложениям метода Монте-Карло.

Книга содержит подробное изложение методов моделирования случайных величин и процессов, численного интегрирования и решения интегральных уравнений второго рода. Рассмотрены возможности применения методов Монте-Карло при решении задач теории переноса излучения, кинетических уравнений и краевых задач для уравнений в частных производных.

Книга предназначена в качестве учебного пособия для студентов факультетов прикладной математики университетов и технических вузов. Она полезна также широкому кругу специалистов, использующих методы вычислительной математики в различных приложениях.

## ПРЕДИСЛОВИЕ

При написании данной книги авторы учитывали чрезвычайную важность приложений статистического моделирования и возможность идеального распараллеливания методов Монте-Карло путем распределения численных статистических испытаний по отдельным процессорам. Кроме того, учтен успешный опыт преподавания соответствующего предмета на математическом и физическом факультетах Новосибирского государственного университета.

В книге представлены как классические результаты, так и последние теоретические и методические разработки теории численного статистического моделирования. Особое внимание уделено современным приложениям метода Монте-Карло.

Книга написана как учебное пособие для студентов факультетов и отделений прикладной математики университетов и технических вузов. Для ее понимания необходимо знакомство с теорией вероятностей и функциональным анализом в сравнительно небольшом объеме, примерно соответствующем программе по высшей математике для вузов. Авторы старались всячески упростить изложение, не используя в полном объеме аппарат теории меры и случайных процессов и напоминая необходимые сведения из общих университетских курсов. Книга содержит много простых примеров, позволяющих проиллюстрировать особенности представленных вычислительных конструкций. Это делает большинство разделов книги доступными широкому кругу инженеров и научных работников, использующих статистическое моделирование в своей работе.

Предлагаемый курс не мог бы быть написан без активной помощи сотрудников Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН и кафедры вычислительной математики Новосибирского государственного университета. Всем им авторы чрезвычайно признательны. Авторы будут благодарны читателям за критические замечания, относящиеся как к отбору материала, так и к выбранному методу его изложения. Эти замечания можно направлять по электронным адресам [gam@osmf.sccc.ru](mailto:gam@osmf.sccc.ru) и [vav@osmf.sccc.ru](mailto:vav@osmf.sccc.ru).

*Г. А. Михайлов, А. В. Войтишек*

## ВВЕДЕНИЕ

С развитием вычислительной техники возрастает интерес к численным методам решения прикладных задач, в частности, к статистическому моделированию (или методу Монте-Карло) (см. [1–13], а также списки литературы в этих монографиях). Исторически интенсивное развитие теории и приложений метода Монте-Карло было связано с решением актуальных задач теории переноса излучения в пятидесятых годах двадцатого столетия. За последние полвека сфера применимости методов численного статистического моделирования значительно расширилась. Разработана теория вероятностных представлений решений задач математической физики, на основе которой построены соответствующие численные стохастические оценки. Эффективные алгоритмы разработаны также в статистической физике (метод Метрополиса, схема Изинга), в физической и химической кинетике (многочастичные задачи, решение уравнений Больцмана и Смолуховского, моделирование реакций и фазовых переходов), в теории массового обслуживания, в финансовой математике, в теории турбулентности, в математической биологии и др.

Под численным статистическим моделированием обычно понимают реализацию с помощью компьютера вероятностной модели некоторого объекта с целью оценивания изучаемых интегральных характеристик на основе закона больших чисел.

В самом общем виде схема метода Монте-Карло выглядит следующим образом. Пусть нам требуется вычислить некоторую величину  $I$ . Предполагается, что можно построить случайную величину  $\zeta$  с математическим ожиданием  $\mathbf{E}\zeta$ , равным  $I$ , и с конечной дисперсией  $\mathbf{D}\zeta$ , причем выборочные значения  $\zeta_j$  случайной величины  $\zeta$  достаточно просто реализуются на компьютере. Построив большое количество  $n$  выборочных значений  $\zeta_1, \dots, \zeta_n$ , на основе закона больших чисел получаем приближение искомой величины:

$$I = \mathbf{E}\zeta \approx \bar{\zeta}_n = \frac{\zeta_1 + \dots + \zeta_n}{n}. \quad (0.1)$$

Основными примерами величин  $I$ , допускающими такое представление, являются интеграл

$$I = \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

и линейный функционал

$$I_h = (\varphi, h) = \int \varphi(x)h(x) dx$$

от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода

$$\varphi(x) = \int k(x', x)\varphi(x') dx' + f(x).$$

При этом случайная величина  $\zeta$  из (0.1) имеет вид  $\zeta = q(\boldsymbol{\xi})$ , где  $\boldsymbol{\xi}$  – случайный вектор или случайная последовательность (например, обрывающаяся с вероятностью единица цепь Маркова) с заданным распределением.

Ключевым моментом при использовании приближения (0.1) является возможность эффективной реализации выборочных значений случайных величин и векторов на ЭВМ. Описанию соответствующих алгоритмов посвящена глава 1 "Моделирование случайных величин". Четко выделены основные методы и их модификации (в том числе, разработанные не так давно метод Уолкера, двусторонний метод исключения, дискретно-стохастические методы и др.). Во второй главе в краткой форме отражены современные численные модели случайных процессов и полей. В третьей главе особое внимание

уделено методам уменьшения трудоемкости алгоритмов численного стохастического интегрирования и анализу соотношения между детерминированными кубатурными формулами и методами Монте-Карло. Достаточно много принципиальных теоретических и методических улучшений (по сравнению с изданными ранее учебниками и пособиями) представлено в четвертой главе "Вычисление линейных функционалов от решения интегрального уравнения второго рода". Приведен ряд новых кратких обоснований (в частности, условий обрыва с вероятностью единица и конечности числа переходов для цепи Маркова с поглощающими состояниями), показаны возможности применения рекуррентных представлений, векторных и локальных оценок, а также специальных преобразований (расширение множества координат фазового пространства, рандомизация, параметрическое дифференцирование). Традиционно важное место занимают вопросы оптимизации весовых методов Монте-Карло (моделирование по ценности, методы понижения дисперсии и др.). Новый современный теоретический раздел "Функциональные оценки метода Монте-Карло" представляет пятая глава учебника. Следующие две главы посвящены основным приложениям метода Монте-Карло. Название главы 6 – 'Решение задач теории переноса частиц' – и название главы 7 – 'Решение краевых задач для эллиптических уравнений' – являются традиционными, однако многие из результатов, которые представлены в этих главах, являются принципиально новыми по сравнению с опубликованными ранее учебниками и пособиями. В частности, построение и исследование классического метода "блуждания по сферам" осуществляются полностью на основе частичного осреднения известных вероятностных представлений решений краевых задач.

Отметим, что материалы данного учебника прошли широкую апробацию в Новосибирском государственном университете. В частности, для студентов 4-го курса механико-математического факультета НГУ многие годы читается основной полугодовой курс "Методы Монте-Карло", в который входят материалы из подразделов 1.1.1–2, 1.1.4, 1.2.1–3, 1.3.1–2, 1.4.1, 1.4.3, 1.5.1–2, 1.6.1–3, 1.7.1–2, 1.8.1, 1.8.3–4, 1.9.1, 1.9.4, 1.10.1–4; 2.1.1–4, 2.2.1–2, 2.6.1, 3.1.1–3, 3.2.1–2, 3.4.1–2, 3.5.1–4, 3.6.1, 3.6.3, 4.1, 4.2, 4.3.1–6, 4.4, 4.5.1, 4.7.1–2, 4.9.1, 5.2.1, 6.1, 6.2.1–2, 6.3, 6.5, 7.1.1–3, 7.2.1–2, 7.3. На соответствующих семинарах детально прорабатываются алгоритмы метода Монте-Карло для моделирования случайных величин и вычисления интегралов. Разделы, не вошедшие в основной курс служат основой читаемых в НГУ специальных курсов "Дополнительные сведения о моделировании случайных величин и численном стохастическом интегрировании", "Моделирование случайных процессов" и "Функциональные оценки метода Монте-Карло".

При написании данного учебника использованы многочисленные книги и статьи по численному статистическому моделированию, в том числе, монографии и учебники [1–13]. В связи с этим материалы данного учебника нельзя считать новыми, оригинальными. Представлены прежде всего методически выверенные, апробированные в учебном процессе материалы. Поэтому при ссылке на сведения из данного учебника целесообразно добавлять слова *см., например,...*

# ГЛАВА 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН

## 1.1. ГЕНЕРАТОРЫ СТАНДАРТНЫХ СЛУЧАЙНЫХ ЧИСЕЛ

**1.1.1. Основные свойства стандартного случайного числа.** Основным инструментом для моделирования случайных величин на ЭВМ является подходящий генератор стандартных случайных чисел, дающий выборочные значения  $\alpha_i$  случайной величины  $\alpha$ , равномерно распределенной в интервале  $(0, 1)$ .

Перечислим вероятностные характеристики случайной величины  $\alpha$ . Распределение этой величины является абсолютно непрерывным с плотностью (см. определение 1.1)

$$f(u) \equiv 1, \quad 0 < u < 1. \quad (1.1)$$

Функция распределения равна

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \in (-\infty, 0], \\ x & \text{при } x \in (0, 1), \\ 1 & \text{при } x \in [1, +\infty), \end{cases} \quad (1.2)$$

Несложно вычислить математическое ожидание и дисперсию

$$\mathbf{E}\alpha = \int_0^1 u f(u) du = 1/2; \quad \mathbf{D}\alpha = \mathbf{E}\alpha^2 - (\mathbf{E}\alpha)^2 = 1/3 - 1/4 = 1/12. \quad (1.3)$$

**Определение 1.1.** Функция  $f(\mathbf{u}) = f(u_1, \dots, u_l)$  называется **плотностью распределения**  $l$ -мерной случайной величины (случайного вектора)  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_l)$ , если для любого борелевского множества  $D$  из  $R^l$  выполнено

$$\mathbf{P}(\xi \in D) = \int_D f(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \int_D f(u_1, \dots, u_l) du_1 \dots du_l \quad (1.4)$$

Напомним, что борелевские множества из  $R^l$  представляют собой множества, полученные из открытых  $l$ -мерных прямоугольных параллелепипедов ("многомерных интервалов") с помощью счетного числа операций объединения, пересечения и взятия дополнения. Отметим также, что в дальнейшем эквивалентными будут считаться понятия *случайного вектора, имеющего плотность распределения  $f(\mathbf{u})$  в  $R^l$* , и *случайной точки, распределенной согласно плотности  $f(\mathbf{u})$  в  $R^l$* .

Для обоснования алгоритмов метода Монте-Карло важным является следующее свойство равномерно распределенных точек.

**Утверждение 1.1.** Если  $l$ -мерная точка  $\alpha$  равномерно распределена в области  $G_1 \subset R^l$  конечного объема  $\bar{G}_1 = \int_{G_1} d\mathbf{u}$ , то она также равномерно распределена в произвольной подобласти  $G \subseteq G_1$  объема  $\bar{G}$  при условии попадания в эту подобласть; при этом  $\mathbf{P}(\alpha \in G) = \bar{G}/\bar{G}_1$ .

**Доказательство.** Плотность распределения точки  $\alpha$  имеет вид  $f_1(\mathbf{u}) \equiv 1/\bar{G}_1$  при  $\mathbf{u} \in G_1$ . Возьмем произвольное борелевское подмножество  $D \subseteq G$  и вычислим условную вероятность

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\alpha \in D | \alpha \in G) &= \mathbf{P}\{(\alpha \in D) \cap (\alpha \in G)\} / \mathbf{P}(\alpha \in G) = \\ &= \int_D \frac{1}{\bar{G}_1} d\mathbf{u} / \int_G \frac{1}{\bar{G}_1} d\mathbf{u} = \bar{D}/\bar{G} = \int_D \frac{1}{\bar{G}} d\mathbf{u}. \end{aligned}$$

Из определения 1.1, в силу произвольности множества  $D$ , получаем, что точка  $\alpha$ , попадая в область  $G$ , распределена в ней равномерно с плотностью  $f(\mathbf{u}) = 1/\bar{G}$ . Из соотношения (1.4) при  $D = G$  получаем, что  $\mathbf{P}(\alpha \in G) = \bar{G}/\bar{G}_1$ .  $\square$

В качестве следствия сформулируем

**Утверждение 1.2.** Пусть имеется интервал  $(a, b) \subseteq (0, 1)$ . Тогда случайная величина  $\alpha$  равномерно распределена в  $(a, b)$  при условии попадания в этот интервал и  $\mathbf{P}(\alpha \in (a, b)) = b - a$ .

Важным для построения и тестирования генераторов стандартных случайных чисел является следующее рассуждение. Поскольку  $\alpha \in (0, 1)$ , двоичное представление каждого выборочного значения этой случайной величины имеет вид

$$\alpha = 0, \alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k)} \dots = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k}, \quad (1.5)$$

причем каждый разряд  $\alpha^{(k)}$  мантиссы числа (1.5) равен нулю или единице.

**Утверждение 1.3.** Для того, чтобы случайная величина  $\alpha$  была равномерно распределенной в интервале  $(0, 1)$ , необходимо и достаточно, чтобы двоичные цифры  $\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k)}, \dots$  из соотношения (1.5) представляли собой последовательность независимых бернуллиевских случайных величин с вероятностью успеха  $1/2$ :  $\mathbf{P}(\alpha^{(k)} = 1) = \mathbf{P}(\alpha^{(k)} = 0) = 1/2$ .

**Доказательство.** Необходимость. Поскольку случайная величина (1.5) равномерно распределена в  $(0, 1)$ , то  $\alpha^{(k)} = 0$  при

$$0, \alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k-1)} 0 \leq \alpha < 0, \alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k-1)} 1, \quad (1.6)$$

причем  $\alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k-1)}$  в (1.6) могут принимать значения 0 и 1. Длина интервала (1.6) равна  $2^{-k}$ , и интервалы (1.6) для разных наборов  $\alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k-1)}$  не пересекаются, поэтому, используя утверждение 1.2, получаем

$$\mathbf{P}(\alpha^{(k)} = 0) = \sum_{\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k-1)}=0}^1 2^{-k} = 2^{k-1} 2^{-k} = 1/2. \quad (1.7)$$

Тогда  $\mathbf{P}(\alpha^{(k)} = 1) = 1 - \mathbf{P}(\alpha^{(k)} = 0) = 1/2$ .

Докажем теперь независимость  $\alpha^{(s)}$  и  $\alpha^{(k)}$ , где  $1 \leq s < k$ . Для этого рассмотрим вероятность  $\mathbf{P}\{(\alpha^{(k)} = i) \cap (\alpha^{(s)} = j)\}$ . Это число, очевидно, можно рассматривать как условную вероятность того, что выполнено (1.6), при условии, что  $\alpha^{(s)}$  фиксировано. Тогда по аналогии с (1.7) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{(\alpha^{(k)} = i) \cap (\alpha^{(s)} = j)\} &= \sum_{\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(s-1)}, \alpha^{(s+1)}, \dots, \alpha^{(k-1)}=0}^1 2^{-k} = \\ &= 2^{k-2} 2^{-k} = 1/4 = \mathbf{P}(\alpha^{(k)} = i) \times \mathbf{P}(\alpha^{(s)} = j). \end{aligned}$$

Аналогично

$$\mathbf{P}\{(\alpha^{(k_1)} = i_1) \cap \dots \cap (\alpha^{(k_q)} = i_q)\} = 2^{-q} = \mathbf{P}(\alpha^{(k_1)} = i_1) \times \dots \times \mathbf{P}(\alpha^{(k_q)} = i_q),$$

а это и означает независимость случайных цифр числа (1.5).

*Достаточность.* Очевидно, что дробь из правой части соотношения (1.5) принадлежит интервалу  $(0, 1)$ , поэтому

$$\mathbf{P} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k} < x \right) = 0 \quad \text{при } x \leq 0 \quad \text{и} \quad \mathbf{P} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k} < x \right) = 1 \quad \text{при } x \geq 1.$$

Возьмем произвольное  $x = 0, a_1 a_2 \dots a_k \dots$  из интервала  $(0, 1)$  и покажем, что  $\mathbf{P}(\sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k} < x) = x$ .

Если  $\sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k} < x$ , то либо  $\alpha^{(1)} < a_1$ , либо  $\alpha^{(1)} = a_1$  и  $\alpha^{(2)} < a_2$ , либо  $\alpha^{(1)} = a_1$ ,  $\alpha^{(2)} = a_2$  и  $\alpha^{(3)} < a_3$  и т.д. Таким образом,

$$\begin{aligned} \mathbf{P} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k} < x \right) &= \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{P}\{(\alpha^{(1)} = a_1) \cap \dots \cap (\alpha^{(k-1)} = a_{k-1}) \cap (\alpha^{(k)} < a_k)\} = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{P}(\alpha^{(1)} = a_1) \times \dots \times \mathbf{P}(\alpha^{(k-1)} = a_{k-1}) \times \mathbf{P}(\alpha^{(k)} < a_k); \end{aligned}$$

здесь использована независимость случайных цифр  $\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k)}$ . Легко видеть, что  $\mathbf{P}(\alpha^{(k)} < a_k) = a_k/2$ . Поэтому

$$\mathbf{P} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k} < x \right) = \sum_{k=1}^{\infty} 2^{-(k-1)} a_k 2^{-1} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k 2^{-k} = x.$$

Таким образом, функция распределения случайной дроби из правой части соотношения (1.5) совпадает с функцией (1.2).  $\square$

**1.1.2. Два типа генераторов стандартных случайных чисел.** С одной стороны, доказанное утверждение 1.3 может повергнуть исследователя в некоторое уныние, так как оно говорит о том, что "настоящее" стандартное случайное число (1.5) имеет *бесконечную* мантиссу, воспроизвести которую на ЭВМ невозможно. С другой стороны, можно отметить, что в вычислительной математике машинные ошибки, связанные с конечностью мантиссы, часто не учитываются (в качестве примера можно указать использование форматов вещественных чисел на ЭВМ). Для используемых на практике генераторов случайных чисел эффекты, связанные с конечностью мантиссы, как правило, незначительны.

Утверждение 1.3 обосновывает принцип работы так называемых *физических датчиков случайных чисел*. Это технические устройства (чаще всего "шумящие" радиоэлектронные приборы), которые вырабатывают случайную последовательность двоичных цифр (условно: лампочка горит или не горит с вероятностью  $1/2$ ; если вероятность не равна  $1/2$ , можно брать пары событий "да – нет" и "нет – да", а события "да – да", "нет – нет" отбрасывать). К преимуществам такого способа получения случайных чисел относят быстроту реализации и неограниченность запаса случайных чисел. Недостатком датчиков случайных чисел является то, что периодически требуется статистическая проверка вырабатываемых случайных чисел (поскольку даже сверхнадежное техническое устройство дает сбой). Кроме того, нет возможности воспроизвести расчеты. Следует тем не менее заметить, что существует немало вычислителей, которые предпочитают именно датчики случайных чисел, и работы по конструированию таких устройств продолжают.

Большинство расчетов по методу Монте-Карло произведено и производится с помощью генераторов псевдослучайных чисел, представляющих из себя некоторые вычислительные программы. Аргументами в пользу применения псевдослучайных чисел

являются возможность воспроизводить расчеты, быстрота получения чисел, отсутствие внешних устройств и необходимости многократной проверки качества получаемых чисел, малая загруженность памяти ЭВМ. Большинство известных алгоритмов реализации псевдослучайных чисел имеют вид

$$\alpha_{n+1} = \psi(\alpha_n), \quad (1.8)$$

где начальное число  $\alpha_0$  задано. Областью значений функции  $\psi$  должен являться интервал  $(0, 1)$ .

Одно из соображений о том, каким образом следует выбирать функцию  $\psi$  из (1.8), состоит в следующем. Пары точек

$$(\alpha_1, \alpha_2 = \psi(\alpha_1)), (\alpha_3, \alpha_4 = \psi(\alpha_3)), (\alpha_5, \alpha_6 = \psi(\alpha_5)), \dots \quad (1.9)$$

с одной стороны, должны располагаться на кривой  $y = \psi(x)$ , а с другой – эти же точки должны (по свойствам "настоящих" стандартных случайных чисел) быть равномерно распределены в квадрате  $Q_2 = \{(x, y) : 0 < x < 1, 0 < y < 1\}$ . Поэтому график функции  $\psi(x)$  должен достаточно плотно заполнять квадрат  $Q_2$ . Примером такой функции  $\psi(x)$  может служить

$$\psi(x) = \{Mx\} \quad (1.10)$$

для большого множителя  $M$ ; здесь  $\{A\}$  обозначает дробную часть числа  $A$ . Алгоритм (1.8) с функцией (1.10) называется *мультипликативным методом вычетов* и является одним из наиболее часто употребляемых алгоритмов при моделировании псевдослучайных чисел.

**1.1.3. Свойства преобразования  $\beta = \{M\alpha\}$ .** Отметим два полезных свойства функции (1.10).

**Утверждение 1.4.** *Случайная величина  $\beta = \{M\alpha\}$  равномерно распределена в интервале  $(0, 1)$  для любого целого положительного числа  $M$ .*

**Доказательство.** Исследуем функцию распределения  $F(x) = \mathbf{P}(\beta < x)$ . По определению дробной части числа и с учетом того, что  $\alpha \in (0, 1)$ , имеем  $\beta \in (0, 1)$ , и поэтому  $F(x) = 0$  при  $x \leq 0$  и  $F(x) = 1$  при  $x \geq 1$ . Если  $x \in (0, 1)$ , то, используя утверждение 1.2, получаем

$$F(x) = \sum_{k=0}^{M-1} \mathbf{P}(k \leq M\alpha < k+x) = \sum_{k=0}^{M-1} \mathbf{P}\left(\frac{k}{M} \leq \alpha < \frac{k+x}{M}\right) = \sum_{k=0}^{M-1} \frac{x}{M} = x.$$

Из формулы (1.2) следует, что случайная величина  $\beta$  равномерно распределена в интервале  $(0, 1)$ .  $\square$

Одним из существенных сомнений, связанных с использованием мультипликативного метода вычетов (1.8), (1.10), является то обстоятельство, что члены последовательности  $\{\alpha_n\}$  зависимы между собой. Поэтому весьма важным является следующее

**Утверждение 1.5.** *Коэффициент корреляции*

$$r(\alpha, \beta^{(s)}) = \mathbf{E}\left(\left(\frac{\alpha - \mathbf{E}\alpha}{\sqrt{\mathbf{D}\alpha}}\right)\left(\frac{\beta^{(s)} - \mathbf{E}\beta^{(s)}}{\sqrt{\mathbf{D}\beta^{(s)}}}\right)\right)$$

*случайных величин  $\alpha$  и*

$$\beta^{(s)} = \{M\beta^{(s-1)}\}, \quad \beta^{(0)} = \alpha; \quad s = 1, 2, \dots$$



равен  $1/M^s$  для любого целого положительного  $M$ .

**Доказательство.** Утверждение доказывается индукцией по  $s$ . Основание индукции дает соотношение  $r(\alpha, \beta) = 1/M$ , которое обосновывается следующим образом. Из утверждения 1.4 следует, что случайная величина  $\beta$  является также стандартной и коэффициент корреляции равен

$$\begin{aligned} r(\alpha, \beta) &= \mathbf{E} \left( \left( \frac{\alpha - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \left( \frac{\beta - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \right) = \mathbf{E} \left( \left( \frac{M\alpha - M/2}{M\sqrt{1/12}} \right) \left( \frac{\beta - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \right) = \\ &= \mathbf{E} \left( \left( \frac{[M\alpha] + \{M\alpha\} - (M/2 - 1/2) - 1/2}{M\sqrt{1/12}} \right) \left( \frac{\beta - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \right) = \\ &= \mathbf{E} \left( \left( \frac{\gamma - (M/2 - 1/2)}{M\sqrt{1/12}} \right) \left( \frac{\beta - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \right) + \mathbf{E} \left( \left( \frac{\beta - 1/2}{M\sqrt{1/12}} \right) \left( \frac{\beta - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \right), \end{aligned}$$

где  $\gamma = [M\alpha]$ . Случайная величина  $\gamma$ , принимающая значения  $0, 1, \dots, M-1$  с равными вероятностями  $1/M$ , и непрерывная случайная величина  $\beta$  независимы. Действительно,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{(\gamma = k) \cap (\beta \in (c, d))\} &= \mathbf{P}(k + c < M\alpha < k + d) = \mathbf{P} \left( \frac{k + c}{M} < \alpha < \frac{k + d}{M} \right) = \\ &= \frac{k + d}{M} - \frac{k + c}{M} = \frac{c - d}{M} = \mathbf{P}(\gamma = k) \times \mathbf{P}(\beta \in (c, d)); \end{aligned}$$

здесь  $k = 0, 1, \dots, M-1$  и  $0 < c < d < 1$ . Таким образом,

$$r(\alpha, \beta) = \frac{\sqrt{\mathbf{D}\gamma}}{M\sqrt{1/12}} r(\gamma, \beta) + \frac{1}{M} r(\beta, \beta) = \frac{1}{M}.$$

Индуктивный переход обосновывается аналогично.  $\square$

Из утверждения 1.5 следует, что при  $M \gg 1$  коэффициент корреляции между зависимыми величинами  $\alpha_{n+s}$  и  $\alpha_n$  невелик и равен  $1/M^s$ .

Учитывая то обстоятельство, что метод Монте-Карло весьма эффективен при оценке многократных интегралов, важную роль играет *свойство  $k$ -равномерности*, смысл которого состоит в том, что векторы

$$\boldsymbol{\alpha}_1^{(k)} = (\alpha_1, \dots, \alpha_k), \quad \boldsymbol{\alpha}_2^{(k)} = (\alpha_{k+1}, \dots, \alpha_{2k}), \quad \dots, \quad \boldsymbol{\alpha}_n^{(k)} = (\alpha_{k(n-1)+1}, \dots, \alpha_{nk}) \quad (1.11)$$

должны с ростом  $n$  с вероятностью единица равномерно заполнять единичный  $k$ -мерный куб  $Q_k$ . Это означает, что частота попадания в любую прямоугольную подобласть куба стремится к объему этой области при  $n \rightarrow \infty$ .

Определенным недостатком мультипликативного метода вычетов (1.8), (1.10) является то обстоятельство, что  $k$ -мерные распределения векторов вида  $(\alpha_j, \alpha_{j+1}, \dots, \alpha_{j+k})$  сосредоточены на семействах плоскостей, т.е. на многообразиях меньших размерностей. Например, нетрудно показать, что точки вида (1.9) расположены на  $M$  параллельных прямых. Действительно, если  $sM^{-1} \leq \alpha_j < (s+1)M^{-1}$ , то  $\alpha_{j+1} = \{M\alpha_j\} = M\alpha_j - s$ . Можно показать, что при большом  $M$  и другие упомянутые многообразия достаточно плотно заполняют  $k$ -мерные кубы. Поэтому указанным недостатком метода вычетов можно пренебречь.

Для последовательностей  $\{\alpha_n\}$ , обладающих свойством  $k$ -равномерности, выполняются соотношения вида

$$\bar{\xi}_n^{(k)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n g(\alpha_j^{(k)}) \rightarrow J^{(k)}, \text{ где } J^{(k)} = \int_{Q_k} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_0^1 \dots \int_0^1 g(x_1, \dots, x_k) dx_1 \dots dx_k \quad (1.12)$$

для любой интегрируемой по Риману функции  $g(\mathbf{x})$ , что и определяет важность свойства  $k$ -равномерности с точки зрения приближенного вычисления многократных интегралов. Отметим также, что многие авторы в качестве определения  $k$ -равномерности используют соотношение (1.12). В частности, на основе такого подхода строится критерий Вейля (см. далее утверждение 1.7).

Последовательность (1.8), (1.10) обладает асимптотическим (при  $M \rightarrow \infty$ ) свойством (1.12). Это вытекает из следующего утверждения. Пусть

$$J_M^{(k)} = \int_0^1 \varphi_M(x) dx, \text{ где } \varphi_M(x) = g(x, \{Mx\}, \{M^2x\}, \dots, \{M^{k-1}x\}).$$

При условии, что  $\alpha_0$  равномерно распределено в  $(0, 1)$ , и при специальном выборе  $M$  (см. далее формулу (1.13)) выполнено  $J_M^{(k)} = \mathbf{E}\xi_n^{(k)}$ .

**Утверждение 1.6** [1]. *Если для некоторого  $M_0$  при всех  $M > M_0$  все функции  $\varphi_M(x)$  интегрируемы по Риману в  $(0, 1)$ , то  $\lim_{M \rightarrow \infty} J_M^{(k)} = J^{(k)}$ . Если при этом подынтегральная функция  $g(\mathbf{x})$  обладает в  $Q_k$  условию Липшица*

$$|g(\mathbf{x}') - g(\mathbf{x}'')| \leq L_\Phi \sum_{i=1}^k |x'_i - x''_i|^\gamma, \quad 0 < \gamma < 1,$$

то для  $M > M_0$  выполнено  $|J^{(k)} - J_M^{(k)}| \leq ((k-1)L_\Phi)/M^\gamma$ .

В рамках алгоритма метода Монте-Карло вместо последовательностей вида (1.8), (1.10) для вычисления интегралов вида  $J^{(k)}$  можно использовать специальные равномерные последовательности узлов кубатурных формул с равными весами. Это может дать существенное улучшение расчетов, если вычисляется интеграл не слишком высокой кратности ( $k \leq 12$ ) от достаточно "хорошей" (гладкой) функции. Такие последовательности кубатурных узлов называются *квазислучайными числами*. Из них наиболее изучены и проверены последовательности Холтона и Соболя [2].

**1.1.4. Свойства мультипликативного метода вычетов.** Отметим, что утверждения 1.4 и 1.5 сформулированы для "настоящего" стандартного случайного числа  $\alpha$ . Можно сформулировать аналоги этих утверждений в случае применения метода (1.8), (1.10) для чисел  $\alpha_n$  с ограниченной мантиссой длины  $m$ . При этом для достаточно большого  $m$  при удачном подборе множителя  $M$  статистические свойства членов последовательности (1.8), (1.10) и "настоящего" стандартного числа  $\alpha$  близки (это показывают соответствующие статистические тесты – см. далее подразд. 1.1.5).

Предположим, что начальный элемент последовательности (1.8), (1.10) равен  $\alpha_0 = 2^{-m}$ , а множитель имеет вид  $M = 5^{2p+1}$ , где  $p$  – целое положительное число. Такой выбор объясняется, в частности, тем, что многие специалисты использовали и проверяли последовательности с множителями  $M$  именно такого вида. Справедливо представление

$$\alpha_n = k_n 2^{-m}; \quad k_0 = 1, \quad k_n \equiv k_{n-1} 5^{2p+1} \pmod{2^m}. \quad (1.13)$$

Существенный недостаток мультипликативного метода вычетов (1.13) связан с тем, что количество чисел, имеющих мантиссу длины  $m$  и принадлежащих интервалу  $(0, 1)$ ,

является конечным, и поэтому последовательность (1.13) является *периодической*, т.е. рано или поздно какое-нибудь значение  $\alpha_L$  совпадет со значением  $\alpha_0$ , и тогда, в силу (1.8), имеем

$$\alpha_{L+i} = \alpha_i \quad \text{при } i = 1, 2, \dots \quad (1.14)$$

Наименьшее число  $L$ , удовлетворяющее (1.14), называется *длиной периода*. Обычно для расчетов не рекомендуют использовать больше чем  $L/2$  чисел последовательности (1.8), (1.10).

Стандартными методами теории чисел можно доказать, что для мультипликативного метода вычетов (1.13) период равен  $L = 2^{m-2}$ . Величина  $M = 5^{2p+1}$  в двоичном представлении оканчивается на 01, поэтому все  $\alpha_n$  являются  $m$ -разрядными двоичными дробями, последние два разряда которых равны 01. Вследствие равенства  $L = 2^{m-2}$  остальные  $m - 2$  разряда "пробегают" все возможные комбинации. Поэтому в качестве  $\alpha_0$  можно выбрать любую  $m$ -разрядную двоичную дробь указанного типа.

Вопрос о пригодности псевдослучайных чисел (1.13) исследуется с помощью специальных статистических тестов (см. далее подразд. 1.1.5) и решения достаточно сложных тестовых задач. Для некоторых параметров  $(m, p)$  получаются удовлетворительные последовательности, для других – плохие. В новосибирской школе методов Монте-Карло для алгоритмов с числом испытаний  $n$  порядка  $10^9$  и меньше долгие годы вполне удовлетворительным считается генератор (1.13) с параметрами  $m = 40$  и  $p = 8$ , прошедший всестороннее многолетнее тестирование. В последнее время в связи с ростом мощностей современных вычислительных систем возникла потребность в генераторах с увеличенным периодом. В частности, для параллельных вычислений используется генератор (1.13) с параметрами  $m = 128$  и  $p = 50059$  из [3] (см. далее подразд. 1.1.6). Определенные трудности конкретной реализации формул (1.13) на компьютере связаны с тем, что нужно производить действия с числами, имеющими мантиссу длины  $m$ , превосходящую стандартный формат ЭВМ.

В заключение этого подраздела сформулируем два важных замечания.

**Замечание 1.1.** Как правило, генераторы псевдослучайных чисел, представленные в современных версиях языков программирования (FORTRAN, PASCAL, СИ++ и др.) достаточно хорошо протестированы и дают статистически удовлетворительные результаты вычислений по методу Монте-Карло (во всяком случае, для задач, в которых используется умеренно большое количество выборочных значений случайных величин). Поэтому несмотря на сформулированные выше замечания о возможных недостатках датчиков (конечность используемой мантиссы, периодичность и т. п.), в дальнейшем будем полагать, что используемый в расчетах генератор стандартных случайных чисел дает "настоящие" (теоретические) выборочные значения  $\alpha$ .

Заметим, однако, что для проведения прецизионных расчетов целесообразно использовать датчик, результаты проверки которого известны. Особую роль играют контрольные расчеты для задач (близких к реальным) с известным решением.

**Замечание 1.2.** Мультипликативный метод вычетов (1.13), даже реализованный оптимально для используемого языка программирования, является относительно трудоемким (по сравнению, например, с простым умножением чисел). Поэтому при оптимизации алгоритмов метода Монте-Карло целесообразно по-возможности уменьшать число обращений к подпрограмме типа *RANDOM*.

**1.1.5. Тестирование и модификация генераторов случайных и псевдослучайных чисел.** Как указано выше, окончательный вывод о качестве того или иного генератора случайных или псевдослучайных чисел следует из результатов тестирования этого генератора. Сразу следует заметить, что никакая, даже самая широкая, система

тестов не является достаточной для того, чтобы объявить тот или иной генератор подходящим. Процесс проверки данного генератора, вообще говоря, бесконечен. Более того, каждую задачу с известным решением, при численном решении которой используется генератор случайных (псевдослучайных) чисел, можно рассматривать как очередной тест для этого датчика. Мы упомянем наиболее распространенные тесты для проверки генераторов.

Как указано в подразд. 1.1.3, одним из важнейших характеристик последовательностей  $\{\alpha_n\}$  является свойство  $k$ -равномерности. Проверку этого свойства можно осуществлять, например, с помощью критерия хи-квадрат. Область  $Q_k$  разбивается на  $r = s^k$  одинаковых достаточно малых кубов (при этом вводится равномерная сетка шага  $1/s$  по каждой координате), подсчитываются частоты  $\{\nu_i\}$  попадания векторов (1.11) в эти малые кубы и величина

$$\tilde{\chi}_{r-1}^2(n) = \sum_{i=1}^r \frac{(\nu_i - np_i)^2}{np_i}, \quad (1.15)$$

где  $\{p_i = 1/r\}$  – "теоретические" вероятности попадания равномерно распределенных векторов (1.11) в соответствующие кубы разбиения. Согласно теореме Пирсона, справедливо соотношение

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(\tilde{\chi}_{r-1}^2(n) < x) = \int_0^x f_{\chi_{r-1}^2}(u) du, \quad \text{где} \quad f_{\chi_{r-1}^2}(u) = \frac{u^{(r-1)/2-1} e^{-u/2}}{2^{(r-1)/2} \Gamma((r-1)/2)}$$

является плотностью хи-квадрат распределения с  $(r-1)$  степенями свободы, а  $\Gamma(v) = \int_0^{+\infty} w^{v-1} e^{-w} dw$  – гамма-функция. Задается доверительная вероятность (или коэффициент доверия)  $\varepsilon$  (чаще всего берут  $\varepsilon = 0.95; 0.99; 0.999$ ) и из уравнения

$$\int_{\chi^2(r-1, 1-\varepsilon)}^{\infty} f_{\chi_{r-1}^2}(u) du = 1 - \varepsilon$$

находят (чаще всего с помощью соответствующих таблиц) величину  $\chi^2(r-1, 1-\varepsilon)$ , которую называют *доверительной границей с уровнем значимости  $(1-\varepsilon)$* . Доверительная граница сравнивается со значением  $\tilde{\chi}_{r-1}^2(n)$  из (1.15), и если  $\tilde{\chi}_{r-1}^2(n) < \chi^2(r-1, 1-\varepsilon)$ , то исследуемая выборка  $\{\xi_j\}$  считается удовлетворительной, а если  $\tilde{\chi}_{r-1}^2(n) \geq \chi^2(r-1, 1-\varepsilon)$  – неудовлетворительной. Для критерия  $\chi^2$  рекомендуется выбирать  $n$  и  $r$  таким образом, чтобы выполнялось неравенство  $n/r \geq 10$ .

Для проверки свойства  $k$ -равномерности применяется также ряд других тестов. Прежде всего упомянем *тест "k-нормальности"*, основанный на переходе от векторов (1.11) к соответствующим  $k$ -мерным векторам независимых стандартных нормальных случайных величин.

Весьма широкое применение имеют *спектральные тесты*, основанные на критерии Вейля.

**Утверждение 1.7.** *Для того, чтобы последовательность  $\{\alpha_n^{(k)}\}$  из (1.11) была распределена равномерно в  $k$ -мерном единичном кубе, необходимо и достаточно выполнение равенства*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \exp(2\pi i(s_1 \alpha_{k(n-1)+1} + \dots + s_k \alpha_{nk})) = 0. \quad (1.16)$$

для всех целых  $s_1, \dots, s_k$ , не равных одновременно нулю.

Здесь под  $k$ -равномерностью понимается выполнение соотношения (1.12). Упомянем, в частности, *волновой тест*, для которого с использованием тригонометрических ортогональных базисов осуществляется переход от соотношения (1.16) к следующей конструкции для метода вычетов (1.8), (1.10) с множителем  $M$  для чисел  $\alpha_n$  с ограниченной мантиссой длины  $m$ .

Рассматриваются всевозможные наборы целых чисел  $(s_1, s_2, \dots, s_k)$  таких, что сумма  $s_1 + s_2M + s_3M^2 + \dots + s_kM^{k-1}$  равна нулю (по модулю  $2^m$ ). Вводится *волновое число*  $W = \min_{s_1, \dots, s_k} \sum_{i=1}^k s_i^2$ . Считается, что последовательность обладает свойством  $k$ -равномерности, если число  $W$  достаточно велико (более точная информация дана в [4]). Из определения волнового числа следует, что если при некотором  $k$  волновое число мало, то оно не возрастает и для  $k + 1$ . Вместе с тем, большое значение  $W$  при некотором  $k$  не гарантирует удовлетворительной величины  $W$  для  $k + 1$ , поэтому следует находить значения волновых чисел для некоторого представительного набора размерностей. Препятствием для распространения волнового теста является то, что теорией не найдена функция распределения для  $W$ .

Учитывая утверждение 1.3, при проверке генераторов можно исследовать случайность цифр стандартных чисел  $\alpha$ . Здесь проверяют частоту появления различных цифр в числах, реализуемых генератором (тест "проверка частот"); частоту различных двузначных чисел среди пар цифр, реализуемых подряд генератором (тест "проверка пар"); частоту различных интервалов между двумя последовательными нулями (тест "проверка интервалов"); частоту различных четырехзначных чисел среди четверок цифр, реализуемых подряд (тест "проверка комбинаций"); частоту появления  $q$  одинаковых цифр подряд ("тест серий" длины  $q$ ) и др. В упомянутых тестах также активно используется критерий хи-квадрат.

Для проверки качества стандартных случайных и псевдослучайных чисел используют также критерий  $\omega^2$  Н.В.Смирнова, корреляционные критерии и др.

Известны эффективные модификации мультипликативного метода вычетов, связанные с использованием операции конгруэнтного (т.е. по модулю 1) суммирования последовательностей вида (1.13), а также с применением физического датчика для получения начального числа  $\alpha_0$  (целесообразность такого выбора начального члена последовательности (1.8) следует из утверждения 1.6).

**1.1.6. Использование датчиков псевдослучайных чисел в параллельных вычислениях.** Сформулируем ряд замечаний относительно возможностей распараллеливания алгоритмов метода Монте-Карло. Ясно, что использование  $K$  независимых процессоров путем распределения между ними независимых испытаний уменьшает трудоемкость статистического моделирования в  $K$  раз, поскольку затраты на заключительное суммирование в формуле (0.1) и осреднение результатов практически несущественны. Конечно, при этом следует допускать возможность реализации различных объемов выборок  $\{n_k\}$  на различных процессах с использованием статистически оптимального способа осреднения по формулам вида

$$\bar{\zeta}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k \bar{\zeta}_{n_k}, \quad n = \sum_{k=1}^K n_k,$$

где  $\bar{\zeta}_{n_k}$  – среднее значение, полученное на  $k$ -ом процессоре. Как указано выше, если  $K$  (и, соответственно,  $n$ ) велико, то необходимый объем выборки стандартных случайных чисел тоже велик, поэтому целесообразно использование длиннопериодных псевдослучайных последовательностей, для которых существует простой способ их разбиения на  $K$  частей необходимой длины. Метод вычетов (1.13) дает элементарный способ такого

разбиения. Пусть  $\mu \gg 1$  – количество стандартных случайных чисел, требующихся для вычислений на одном процессоре. Для  $k$ -го процессора начальное число в методе вычетов с множителем  $M$  выберем по формуле

$$\alpha_0^{(k,\mu)} = u_{k,\mu}/2^m; \quad u_{k,\mu} = u_{k-1,\mu}M^\mu \pmod{2^m}. \quad (1.17)$$

Такой способ распределения случайных чисел по процессорам называют *bf-генератором* (сокращение от "big-frog-генератор"). В отделе статистического моделирования в физике Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН реализован bf-генератор с  $\mu = 10^{26}$  (в качестве исходного используется датчик (1.13) с параметрами  $m = 128$  и  $p = 50059$ ). Соответствующих количеств псевдослучайных чисел для каждого процессора с избытком хватает для вычислительных потребностей. Генератор позволяет, вообще говоря, распределять исходную последовательность примерно на  $10^{12}$  процессоров. Подробное описание генератора, программы вычисления начальных значений (1.17), множителей  $M_\mu = M^\mu \pmod{2^m}$ , а также результаты тестирования датчика приведены в [3].

Отметим, что в случае, когда  $\mu$  невелико и равно количеству псевдослучайных чисел, требующихся для построения одной траектории, использование чисел (1.17) в качестве начальных для каждой траектории определяет *lf-генератор* (сокращение от "little-frog-генератор"). В отличие от обычного способа распределения случайных чисел "по-ряд" (т. е. в порядке обращения к генератору (1.13)) lf-генератор обеспечивает малое изменение результатов моделирования при малом изменении параметров задачи. В связи с этим lf-генератор более корректно проверяется решением типовых задач по сравнению с обычным генератором (1.13). Кроме того, lf-генератор больше соответствует наиболее важным тестам на  $k$ -мерную равномерность для задач оценки многократных интегралов (см. подразд. 1.1.3, 1.1.5).

## 1.2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСКРЕТНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ (СТАНДАРТНЫЙ АЛГОРИТМ)

**1.2.1. Стандартный алгоритм.** Наличие надежного генератора стандартных случайных чисел  $\alpha$  (см. замечание 1.1) позволяет получать выборочные значения случайных величин (одномерных и многомерных) с произвольными законами распределения. Порядок описания соответствующих алгоритмов в этой главе аналогичен порядку изучения случайных величин в курсах теории вероятностей: "от простого к сложному" [5, 6]. Сначала будут изучены алгоритмы моделирования для дискретных случайных величин, затем для одномерных абсолютно непрерывных величин и далее – для многомерных случайных величин (или случайных векторов). Для каждого типа случайных величин будет представлен соответствующий стандартный алгоритм. Учитывая то обстоятельство, что при реализации метода Монте-Карло (0.1) требуется получать большое количество  $n \gg 1$  выборочных значений, особое внимание будет уделяться трудоемкости представляемых алгоритмов. Для ряда важнейших (с прикладной точки зрения) распределений стандартные алгоритмы либо не реализуемы, либо не эффективны. В этих случаях предпринимаются (часто довольно успешные) попытки построить специальные алгоритмы моделирования, учитывающие свойства заданного распределения [2, 7–9].

Рассмотрим вопрос о моделировании дискретной случайной величины  $\xi$  с конечным

числом значений  $x_1, \dots, x_N$  и распределением вероятностей

$$\mathbf{P}(\xi = x_i) = p_i; \quad p_i > 0, \quad \sum_{i=1}^N p_i = 1. \quad (1.18)$$

В силу соотношений (1.18) реализация того или иного значения  $x_m$  случайной величины  $\xi$  означает розыгрыш события с вероятностью  $p_m$ . Кроме того, из соотношений (1.18) следует, что интервал  $(0, 1)$  можно разбить на полуинтервалы  $\Delta_m$  длины  $p_m$ :

$$\Delta_m = [R_{m-1}, R_m); \quad R_m = \sum_{i=1}^m p_i; \quad m = 1, 2, \dots, N;$$

для  $m = 1$  полагаем  $R_{m-1} = R_0 = 0$ . Используя соответствующий генератор, реализуем выборочное значение  $\alpha$  стандартного случайного числа. В силу утверждения 1.2 имеем  $\mathbf{P}(\alpha \in \Delta_m) = p_m$ . Таким образом, если  $\alpha \in \Delta_m$ , то для данного испытания полагаем  $\xi = x_m$ .

Технически определение того номера  $m$  полуинтервала  $\Delta_m$ , в который попало выборочное значение  $\alpha$ , осуществляется последовательным вычитанием из  $\alpha$  сумм  $R_m$  для  $m = 1, 2, \dots$  до тех пор, пока разность  $\alpha - R_m$  не станет отрицательной. Описанную операцию можно осуществлять без непосредственного вычисления сумм  $R_m$ , используя операцию переприсваивания.

**Алгоритм 1.1.** Реализуем значение  $Q := \alpha$  (т. е.  $Q := \text{RANDOM}$ ) и полагаем  $m := 1$ . Производим переприсваивание

$$Q := Q - p_m \quad (1.19)$$

(т. е. заносим новое значение  $(\alpha - p_1)$  в ячейку  $Q$ ). Если новое  $Q$  не положительно, то в качестве  $m$  выбираем текущее его значение и полагаем  $\xi = x_m$ , в противном случае производим переприсваивания  $m := m + 1$  и (1.19) и вновь производим проверку  $Q$  на положительность и т. д.

Важным примером дискретных случайных величин являются целочисленные случайные величины  $\eta$ , для которых

$$x_i = i, \quad \mathbf{P}(\eta = i) = p_i \quad (1.20)$$

для  $i = 1, 2, \dots, N$ . Алгоритм 1.1 в этом случае имеет следующий вид.

**Алгоритм 1.2.** Реализуем значение  $Q := \alpha$  и полагаем  $m := 1$ . Производим переприсваивание (1.19). Если новое значение  $Q$  не положительно, то полагаем  $\eta = m$ , в противном случае производим переприсваивания  $m := m + 1$  и (1.19) и вновь производим проверку  $Q$  на положительность и т. д.

**1.2.2. Трудоемкость стандартного алгоритма.** В разделе 0.5 указано, что формуле (0.5) для трудоемкости метода Монте-Карло (0.1) величина  $t$  является средним временем вычисления одного выборочного значения  $\xi_j$ . Слово *среднее* здесь принципиально, так как затраты на моделирование конкретного выборочного значения  $\xi_j$  являются, вообще говоря, случайными. Это проявляется уже на простейшем примере случайной величины  $\xi$  с дискретным распределением.

Легко видеть, что в случае, когда  $\xi = x_m$ , приходится осуществлять  $m$  проверок  $Q$  на положительность. В общие затраты  $\delta$  алгоритма 1.1 входят затраты на моделирование одной стандартной случайной величины (их обозначим  $a$ ) и реализацию сравнений  $Q$

с нулем (затраты на каждое сравнение обозначим  $b$ ). Тогда средняя трудоемкость  $t$  алгоритма равна

$$t = \mathbf{E}\delta = a + \left( \sum_{i=1}^N ip_i \right) \times b. \quad (1.21)$$

Заметим, что для целочисленной случайной величины  $\eta$  с распределением (1.20) величина  $t$  из (1.21) представима в виде

$$t_1 = a + b \mathbf{E}\eta. \quad (1.22)$$

При реализации алгоритмов 1.1 и 1.2 целесообразно (если это возможно) располагать вероятности  $p_i$  в порядке их убывания.

**Утверждение 1.8.** *Оптимальным распределением вероятностей, при котором средние затраты  $t$  из (1.21) минимальны, является*

$$p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_N. \quad (1.23)$$

**Доказательство.** Рассуждаем от противного. Пусть для некоторого распределения вероятностей  $\{p'_1, \dots, p'_N\}$  соотношение (1.23) не выполнено, а величина  $t' = a + \left( \sum_{i=1}^N ip'_i \right) \times b$  минимальна. Тогда найдутся такие номера  $s$  и  $k$ , для которых одновременно выполнено

$$s < k \quad \text{и} \quad p'_s < p'_k. \quad (1.24)$$

Рассмотрим новое распределение вероятностей  $\{p''_1, \dots, p''_N\}$ , которое получено из распределения  $\{p'_1, \dots, p'_N\}$  перестановкой вероятностей  $p'_s$  и  $p'_k$ , т. е.  $p''_j = p'_j$  при  $j \neq s, j \neq k$  и  $p''_s = p'_k, p''_k = p'_s$ . Рассмотрим разность

$$t' - t'' = (sp'_s + kp'_k - sp''_s - kp''_k)b = (sp'_s + kp'_k - sp'_k - kp'_s)b = (k - s)(p'_k - p'_s)b.$$

Из (1.24) следует, что  $t' - t'' > 0$  и  $t'' < t'$ . Получили противоречие с тем, что величина  $t'$  минимальна.  $\square$

**1.2.3. Случай малого и бесконечного числа значений. Примеры.** Отметим, что в алгоритме 1.1 возможна следующая модификация. Если  $\alpha - R_{N-1} > 0$ , то последнее вычитание можно не производить, так как в этом случае  $\alpha \in \Delta_N$ . Соответствующие аналоги формул (1.21) и (1.22) имеют вид

$$t = a + \left( \sum_{i=1}^{N-1} ip_i + (N-1)p_N \right) \times b; \quad t_1 = a - bp_N + b \mathbf{E}\eta.$$

Однако выигрыш от этой модификации сказывается только для малых  $N$ , так как при ее применении требуется проводить сравнение текущего  $m$  с  $(N-1)$ .

Рассмотрим, в частности, случай  $N = 2$ . Здесь алгоритм 1.1 приобретает следующий простой вид.

**Алгоритм 1.3.** *Реализуем значение  $\alpha$ . Если  $\alpha < p_1$ , то  $\xi = x_1$ , иначе  $\xi = x_2$ .*

Если  $x_1 = 1$  и  $x_2 = 0$ , то  $\xi$  — бернуллиевская случайная величина с вероятностью успеха  $p_1$ . В свою очередь, можно вспомнить о том, что бернуллиевская случайная величина вводится для формализации изучения случайных событий. Если придать величинам  $x_1$  и  $x_2$  "словесные" значения  $x_1 = \{\text{событие } A \text{ произошло}\}$  и  $x_2 = \{\text{событие } A \text{ не произошло}\}$ , то алгоритм 1.3 описывает моделирование случайного события  $A$ .



В случае  $N = \infty$  для задания распределения (1.18) вместо конкретных значений  $\{x_i\}$  и вероятностей  $\{p_i\}$  задаются формулы их вычисления

$$x_i = \varphi(i); \quad p_i = \psi(i). \quad (1.25)$$

Для вычисления вероятностей часто более удобными (экономичными) являются рекуррентные формулы вида

$$p_{i+1} = z(p_i), \quad \text{а конкретнее, } p_{i+1} = p_i r(i+1). \quad (1.26)$$

При реализации алгоритма 1.1 в случае бесконечного числа значений перед вычитанием соответствующей вероятности требуется вычислить ее по одной из формул (1.25) или (1.26).

**Алгоритм 1.4.** Реализуем значение стандартной случайной величины  $Q := \alpha$  и полагаем  $t := 1$  и  $P := p_1$  (или  $P := \psi(1)$ ). Производим переприсваивание

$$Q := Q - P. \quad (1.27)$$

Если новое  $Q$  не положительно, то в качестве значения  $\xi$  выбираем  $\xi = \varphi(t)$  для текущего  $t$ ; в противном случае полагаем  $t := t + 1$ , производим пересчет вероятности  $P := \psi(t)$  (или  $P := z(P)$ , или  $P := Pr(t)$ ) и переприсваивание (1.27) и вновь производим проверку  $Q$  на положительность и т.д.

Средние затраты алгоритма 1.4 равны

$$t = a + \left( \sum_{i=1}^{\infty} i p_i \right) (b + c), \quad (1.28)$$

где  $c$  – средние затраты на пересчет вероятности. В случае, когда пересчет вероятностей происходит по рекуррентным формулам (1.26) и вероятность  $p_1$  задана, число  $t$  из (1.28) уменьшается на величину  $c$ . Для целочисленных случайных величин  $\eta$  с распределением (1.20) при  $i = 1, 2, \dots$  формула (1.28) имеет вид

$$t_1 = a + (b + c)\mathbf{E}\eta. \quad (1.29)$$

Существует ряд способов понизить трудоемкость (1.28), к числу которых относятся, в частности, расположение (если это возможно) вероятностей  $p_i$  в порядке убывания (см. утверждение 1.8). В случае, когда пересчет вероятностей по одной из формул (1.25) или (1.26) является трудоемким (т.е. величина  $c$  велика), можно выбрать число  $N_0$  так, чтобы сумма вероятностей  $R_{N_0} = p_1 + p_2 + \dots + p_{N_0}$  была близка к единице и имелась возможность сохранить в оперативной памяти ЭВМ массив значений  $p_0, p_1, \dots, p_{N_0}$ . Тогда при  $\alpha < R_{N_0}$  реализуется алгоритм 1.1 (без пересчета вероятностей), а формулы (1.25) или (1.26) будут использоваться только при  $\alpha \geq R_{N_0}$ , т.е. достаточно редко. Существенно снижают затраты (1.21), (1.28) алгоритмов 1.1 и 1.4 для  $N \gg 1$  или  $N = \infty$  рассмотренные далее в разделе 1.3 *метод Уолкера* и *квантильный метод* (алгоритмы 1.6 и 1.7). В этих алгоритмах существенно используется специальный алгоритм моделирования *равномерного дискретного распределения* (алгоритм 1.5).

В качестве примеров случайных величин с большим или бесконечным числом значений рассмотрим широко применимые в теории вероятностей специальные целочисленные случайные величины  $\eta$  с распределением (1.20) (для них соотношение (1.25) имеет вид  $x_i = \varphi(i) = i$ ). Эти случайные величины связаны с упомянутыми выше испытаниями Бернулли, т.е. с реализацией значений случайной величины  $\gamma$  с распределением вероятностей

$$\mathbf{P}(\gamma = 1) = p, \quad \mathbf{P}(\gamma = 0) = 1 - p; \quad 0 < p < 1.$$

Событие  $\{\gamma = 1\}$  называют *успехом* (тогда величина  $p$  – *вероятность успеха*), а событие  $\{\gamma = 0\}$  – *неуспехом*.

**Пример 1.1.** *Геометрическое распределение с параметром  $p$ , здесь*

$$p_i = p(1 - p)^{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (1.30)$$

Соответствующая случайная величина  $\eta$  определяет количество испытаний Бернулли  $\gamma$  до получения первого успеха. Отметим, что во многих изданиях в качестве случайной величины, имеющей геометрическое распределение, берется  $\eta' = \eta - 1$ . Эта величина равна числу испытаний Бернулли, *предшествующих* первому успеху. Для нужд численного моделирования удобнее использовать версию (1.30) геометрического распределения. При реализации алгоритма 1.4 для пересчета вероятностей целесообразно использовать мультипликативную рекуррентную формулу (1.26) при  $r(i+1) = p_{i+1}/p_i \equiv 1 - p$ . Разлагая функцию  $1/(1 - z)^2$  в ряд Тейлора в точке  $z_0 = 0$  и полагая  $z = q = 1 - p$ , получаем

$$\frac{1}{(1 - q)^2} = \sum_{i=1}^{\infty} i q^{i-1} \quad \text{и тогда} \quad \mathbf{E}\xi = \sum_{i=1}^{\infty} i p q^{i-1} = \frac{p}{(1 - q)^2} = \frac{1}{p}. \quad (1.31)$$

Согласно формуле (1.29), трудоемкость стандартного алгоритма 1.4 равна  $t_1 = a + (b + c)/p$ .

**Пример 1.2.** *Биномиальное распределение с параметрами  $p$  и  $N$ , здесь*

$$p_i = C_N^i p^i (1 - p)^{N-i}; \quad i = 0, 1, \dots, N; \quad C_N^i = \frac{N!}{i!(N - i)!}. \quad (1.32)$$

Соответствующая случайная величина

$$\eta_{p,N} = \gamma_1 + \dots + \gamma_N \quad (1.33)$$

определяет количество успехов в  $N$  испытаниях Бернулли. При реализации алгоритма 1.4 следует сначала полагать  $m := 0$  (вместо  $m := 1$ ; при этом среднее число вычитаний (1.27) увеличится на единицу) и для пересчета вероятностей использовать формулу (1.26) при  $r(i+1) = (p(N - i))/(q(i + 1))$ . Из формулы (1.33) следует, что  $\mathbf{E}\eta_{p,N} = Np$  и тогда, согласно формуле (1.22),  $t_1 = a + (b + c)(Np + 1)$ .

**Пример 1.3.** *Распределение Пуассона с параметром  $\lambda > 0$ , здесь*

$$p_i = \frac{\lambda^i}{i!} e^{-\lambda}; \quad i = 0, 1, \dots \quad (1.34)$$

Согласно теореме Пуассона, это распределение является предельной формой биномиального распределения при

$$N \rightarrow \infty, \quad p(N) \rightarrow 0, \quad N p(N) \rightarrow \lambda. \quad (1.35)$$

При реализации алгоритма 1.4 следует сначала полагать  $m := 0$  и для пересчета вероятностей использовать формулу (1.26) при  $r(i+1) = \lambda/(i + 1)$ . Используя известное разложение функции  $e^\lambda$  в ряд Тейлора в точке  $\lambda_0 = 0$ , имеем

$$\mathbf{E}\eta = \sum_{i=0}^{\infty} i \frac{\lambda^i}{i!} e^{-\lambda} = \lambda e^{-\lambda} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^j}{j!} = \lambda;$$

здесь  $j = i - 1$ . Следовательно,  $t_1 = a + (b + c)(\lambda + 1)$ .

В заключение отметим, что далее в подразд. 1.3.7–1.3.9 приведен ряд специальных методов моделирования случайных величин из примеров 1.1–1.3 и проведен анализ этих методов сравнительно со стандартными алгоритмами 1.2 и 1.4.

### 1.3. СПЕЦИАЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИСКРЕТНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

**1.3.1. Моделирование равномерного дискретного распределения.** Реализация случайной величины  $\xi$  с конечным числом значений заметно упрощается, когда все значения  $x_1, \dots, x_N$  равновероятны, т. е. в (1.18) все  $p_i$  равны  $1/N$  (такое распределение вероятностей называется *дискретным равномерным*).

**Алгоритм 1.5.** *Реализуем выборочное значение  $\alpha$  стандартного случайного числа и полагаем*

$$m = [\alpha N] + 1 = [\alpha N + 1] \quad (1.36)$$

(здесь  $[A]$  обозначает целую часть числа  $A$ ) и  $\xi = x_m$ .

Для обоснования правильности выбора номера  $m$  по формуле (1.36) нужно показать, что для любого  $k = 1, 2, \dots, N$  выполнено  $\mathbf{P}(m = k) = 1/N$ . Используя определение целой части числа и утверждение 1.2, имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(m = k) &= \mathbf{P}([\alpha N + 1] = k) = \mathbf{P}(k - 1 \leq \alpha N < k) = \\ &= \mathbf{P}\left(\frac{k - 1}{N} \leq \alpha < \frac{k}{N}\right) = \frac{k}{N} - \frac{k - 1}{N} = \frac{1}{N}, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

**Замечание 1.3.** Для достаточно больших  $N$  преимущество использования алгоритма 1.5 вместо алгоритма 1.1 очевидно. Однако неверно говорить что алгоритм 1.5 *всегда* экономичнее алгоритма 1.1. Так, для  $N = 2$  и  $p_1 = p_2 = 1/2$  более экономичным (по сравнению с алгоритмом 1.5), как правило, является алгоритм 1.3 (частный случай алгоритма 1.1). Здесь все зависит от того, насколько быстро работают операции взятия целой части числа, вычитания, сравнения и т. п., а это, в свою очередь, определяется выбором компьютера и языка программирования. Поэтому в каждом конкретном случае может существовать свое число  $N_0$ , для которого при  $N \leq N_0$  более экономичным является алгоритм 1.1, а при  $N > N_0$  – алгоритм 1.5. Значение  $N_0$  определяется экспериментально с помощью реализации выборки  $\xi_1, \dots, \xi_n$  и фиксации затрат  $s = nt$  для каждого из алгоритмов 1.1 и 1.5.

**1.3.2. Приведение вероятностей к общему знаменателю.** Алгоритм 1.5 позволяет предложить целый ряд модификаций алгоритмов 1.1 и 1.4. Мы рассмотрим три таких модификации: для относительно небольшого  $N$  (приведение вероятностей к общему знаменателю), для умеренно большого  $N$  (метод Уолкера [10] – см. подразд. 1.3.3) и для большого  $N$  (квантильный метод [8] – см. подразд. 1.3.4). Кроме того, в подразд. 1.3.5 для случая большого  $N$  будут рассмотрены специальные алгоритмы моделирования дискретного распределения, не связанные с применением формулы (1.36) – бинарный поиск и метод "мажорантной частоты"[11].

Рассмотрим случай относительно небольшого  $N$  такого, что вероятности  $p_i$  из соотношения (1.18) представляют собой обыкновенные дроби, которые можно привести к общему знаменателю  $M$ , т. е.  $p_i = m_i/M$ , причем  $m_1 + \dots + m_N = M$  и  $M \leq M_0$ . Здесь через  $M_0$  обозначен размер максимального массива для заданного компьютера и выбранного языка программирования.

Рассмотрим случайную величину  $\xi'$ , эквивалентную случайной величине  $\xi$  с распределением (1.18) и такую, что  $\xi' = x'_j = x_i$  при  $j = \sum_{s=1}^{i-1} m_s + 1, \dots, \sum_{s=1}^i m_s$ , причем  $\mathbf{P}(\xi' = x'_j) = 1/M$  (т. е. первые  $m_1$  значений  $x'_j$  случайной величины  $\xi'$  равны  $x_1$ , следующие  $m_2$  значений равны  $x_2$  и т. д., причем все значения  $\{x'_j\}$  равновероятны). Выборочные значения случайной величины  $\xi'$  реализуются согласно алгоритму 1.5:  $\xi' = x'_{m'}$  при  $m' = [M\alpha] + 1$ . Рассмотренная модификация означает замену алгоритма 1.1 для моделирования случайной величины  $\xi$  на алгоритм 1.5 для величины  $\xi'$ .

**1.3.3. Перераспределение вероятностей (метод Уолкера).** Рассмотрим теперь случай умеренно большого  $N$ , для которого  $N \approx M_0/2$ . Здесь вместо алгоритма 1.1 можно предложить простую конструкцию, включающую использование формулы (1.36) и одного сравнения. Идею этой конструкции проще всего объяснить графически. Изобразим распределение (1.18) в виде диаграммы, состоящей из столбцов единичной ширины и высоты  $p_i$  (см. рис. 1.1). Проведем на высоте  $h = 1/N$  линию, параллельную основанию диаграммы. Часть столбцов диаграммы имеют высоту, большую  $h$ , а часть – меньшую  $h$ . Несложно сформулировать алгоритм перераспределения частей столбцов диаграммы таким образом, чтобы все столбцы имели высоту  $h$  и в каждом из них были не более чем две доли исходных столбцов. Процедура перераспределения состоит в последовательном выборе максимального (например,  $l$ -го) и минимального ( $m$ -го) столбцов (при этом выполнены строгие неравенства  $p_l > 1/N$  и  $p_m < 1/N$ ) и в дополнении  $m$ -го столбца частью  $l$ -го до высоты  $h$  (это возможно, т. к. на любом шаге процесса  $p_{min} + p_{max} \geq 1/N$ , ведь иначе  $\sum_{i=1}^N p_i < 1$ ). После каждого шага заводится двумерная ячейка  $E_m$ , в которой хранится число  $F_m = Np_m$  (здесь  $p_m$  – минимальная – на данном шаге – высота столбца) и номер столбца  $l$ , из которого взято дополнение  $m$ -го столбца. В дальнейшем  $m$ -я ячейка не меняется (соответствующий столбец имеет высоту  $1/N$ , и он не может быть ни максимальным, ни минимальным, т. к. не выполнены неравенства  $p_m > 1/N$  и  $p_m < 1/N$ ). Если же исходный ( $m$ -й) столбец имел высоту  $h = 1/N$ , то он заменяется на двумерную ячейку  $E_m$ , в которой вторая координата пуста. Процесс перераспределения заканчивается (через  $N$  шагов), когда на всех позициях возникают двумерные ячейки  $E_j$  (т. е. фактически возникает массив длины  $2N$ , что объясняет соотношение  $N \approx M_0/2$  для максимально возможных  $N$ ). После проведенной подготовительной работы возникает

**Алгоритм 1.6.** Согласно формуле  $m = [\alpha_1 N + 1]$  (см. соотношение (1.36)) выбираем номер ячейки  $E_m = (F_m; l)$ . Реализуем также второе выборочное значение  $\alpha_2$  стандартной случайной величины. Если  $\alpha_2 < F_m$ , то  $\xi = x_m$ , иначе  $\xi = x_l$ .

Рис. 1.1. Схема перераспределения вероятностей при применении метода Уолкера

Обоснование алгоритма 1.6 приведено далее в подразд. 1.8.2. Заметим, что алгоритм 1.6 допускает следующую модификацию: вместо  $\alpha_2$  можно взять величину

$$\alpha_3 = \frac{\alpha_1 - (m-1)/N}{1/N} = N\alpha_1 - m + 1. \quad (1.37)$$

Обоснование такой замены следует из того, что случайная величина  $\alpha_3$  равномерно распределена на интервале  $(0, 1)$  для любого  $\alpha_1 \in ((m-1)/N, m/N)$ , что, в свою очередь, следует из утверждения 1.2 (см. также обоснование модифицированного метода суперпозиции из подразд. 1.6.3). Целесообразность применения формулы (1.37) связана с тем, что реализация нового выборочного значения  $\alpha_2$  с помощью обращения к генератору типа *RANDOM* является относительно трудоемкой операцией (см. замечание 1.2).

**1.3.4. Квантильный метод.** Рассмотрим случай большого  $N$  (т. е.  $N > M_0$  и даже  $N = \infty$ ). Трудоемкости  $t$  из соотношений (1.21) и (1.28) в этом случае можно существенно уменьшить, если применить так называемый *квантильный метод* моделирования дискретных случайных величин, который состоит в следующем.

Зададим целое число  $K$  и разобьем интервал  $(0, 1)$  на  $K$  равных частей  $[(j-1)/K, j/K)$ ,  $j = 1, \dots, K$ . Далее построим массив целых чисел  $\{X_j\}_{j=1}^K$  такой, что

$$X_j = \min\{k : R_k = p_1 + p_2 + \dots + p_k \geq (j-1)/K\},$$

который называется *массивом нижних квантилей* (см. рис. 1.2). Этот массив задает номер  $k$  элемента массива  $\{R_i; i = 1, 2, \dots, N\}$ , с которого следует начинать поиск "вверх" (т. е. как и в алгоритмах вида 1.1 и 1.4, вычитать величины  $R_q$ ,  $q = k, k+1, \dots$  из  $\alpha$  до получения первого отрицательного значения) при  $(j-1)/K \leq \alpha < j/K$ . Окончательно моделирование дискретной случайной величины выглядит следующим образом.

**Алгоритм 1.7.** 1. Реализуем выборочное значение  $\alpha$  равномерно распределенной в интервале  $(0, 1)$  случайной величины.

2. Вычисляем номер  $j$  полуинтервала  $[(j-1)/K, j/K)$ , в который попадает  $\alpha$  по формуле типа (1.36):  $j = [K\alpha + 1]$ .

3. Реализуем последовательный поиск "снизу вверх" начиная с  $R_{X_j}$ .

Сформулированный алгоритм не приводит, как в алгоритмах из подразд. 1.3.2 и 1.3.3, к полной замене алгоритмов 1.1 и 1.4 на алгоритм 1.5, а лишь убыстряет процесс вычитания сумм  $R_m$  в стандартных алгоритмах 1.1 и 1.4 за счет применения формулы (1.36) и использования дополнительной оперативной памяти ЭВМ для хранения массивов номеров  $\{X_j\}$  и сумм  $\{R_{X_j}\}$ . Тестовые вычисления показали, что при  $N \leq 3M_0$  следует выбирать число  $K$  квантилей  $[(j-1)/K, j/K)$  так, чтобы выполнялось соотношение  $N/K \approx 3$  (при этом трудоемкость алгоритма 1.7 практически не меняется с ростом  $N$ ). Особо подчеркнем, что квантильный метод работает и в случае бесконечного числа значений случайной величины  $\xi$  (т. е. для  $N = \infty$ ); здесь можно брать  $K \approx M_0$ .

Рис. 1.2. Схема формирования сумм  $R_{x_j}$  при применении квантильного метода

**1.3.5. Бинарный поиск. Метод "мажорантной частоты".** Следующая модификация стандартного алгоритма 1.1 приводит к уменьшению вычислительных затрат.

**Алгоритм 1.8 (бинарный поиск).** 1. Реализуем выборочное значение  $\alpha$  равномерно распределенной в интервале  $(0, 1)$  случайной величины и полагаем  $s_1 := 1$ ,  $s_2 := N + 1$ .

2. Вычисляем целую часть  $k := [(s_1 + s_2)/2]$ .

3. Если  $R_k = p_1 + \dots + p_k < \alpha$ , то полагаем  $s_1 := k$ , иначе присваиваем  $s_2 := k$ .

4. Если  $s_2 - s_1 > 1$ , то идем на п. 2, иначе полагаем  $t = s_1$  и  $\xi = x_m$ .

Можно показать, что при  $2^r < N \leq 2^{r+1}$  для получения выборочного значения  $x_m$  требуется  $(r+1)$  сравнений. Таким образом, затраты  $\hat{t}$  алгоритма 1.8 имеют порядок  $\log_2 N$ , и при больших  $N$  выполнено  $\hat{t} \ll t$ , где величина  $t$  определяется соотношением (1.21). Следует, однако, отметить, что использование дополнительной оперативной памяти и формулы (1.36) (см. алгоритм Уолкера из подразд. 1.3.3 и квантильный алгоритм из подразд. 1.3.4) позволяет добиться того, что трудоемкость практически не увеличивается с ростом  $N$ .

Упомянем еще один алгоритм, который применяется в случае, когда  $N > M_0$  и формула пересчета вероятностей (1.25) меняется после получения очередного выборочного

значения. Такие ситуации возникают, в частности, в алгоритмах статистического моделирования процессов газовой динамики [11]. Стандартные алгоритмы 1.1 и 1.4 оказываются неэффективными. Модификации типа алгоритма Уолкера и квантильного метода также не помогают, т.к. их применение целесообразно при реализации большого количества выборочных значений при фиксированном дискретном распределении (1.18). Следующий алгоритм позволяет получить приемлемые результаты для описанных ситуаций.

**Алгоритм 1.9 (метод "мажорантной частоты").** 1. Реализуя выборочное значение  $\alpha$  и используя формулу (1.36) находим равномерно распределенный номер  $m$ .

2. Реализуем еще одно значение  $\alpha'$ . Если  $p_m > \alpha' p_{max}$ , то идем на пункт 1 (здесь  $p_{max} = \max\{p_1, \dots, p_N\}$ ), иначе  $\xi = x_m$ .

Если вычисление величины  $p_{max}$  затруднено, то можно положить  $p_{max} = 1$ . Кроме того, алгоритм применим и в том случае, когда положительные числа  $\{p_1, \dots, p_N\}$  не в точности равны, а только пропорциональны вероятностям (т.е. их сумма может не равняться единице). Алгоритм 1.9 легче всего обосновать с помощью перехода от дискретного к непрерывному распределению с кусочно-постоянной плотностью (см. далее подразд. 1.8.2). При этом получается частный случай мажорантного метода исключения, рассмотренного в разд. 1.7.

**1.3.6. Специальные методы моделирования геометрического распределения.** Для моделирования целочисленных случайных величин из примеров 1.1–1.3 можно предложить специальные методы, связанные с особенностями соответствующих вероятностных распределений. Сразу отметим, что целесообразность применения того или иного специального метода (вместо стандартного) требует отдельного обсуждения и исследования.

Рассмотрим сначала специальный метод моделирования целочисленной случайной величины  $\eta$ , имеющей геометрическое распределение (1.30) (см. пример 1.1).

**Алгоритм 1.10.** Моделирование производится по формуле

$$\eta = \left\lceil \frac{\ln \alpha}{\ln(1-p)} \right\rceil + 1, \quad 0 < p < 1. \quad (1.38)$$

Покажем, что случайная величина (1.38) имеет геометрическое распределение, т.е.  $p_k = \mathbf{P}(\eta = k) = p(1-p)^{k-1}$  при  $k = 1, 2, \dots$ . Имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\eta = k) &= \mathbf{P}\left(k-1 \leq \frac{\ln \alpha}{\ln(1-p)} < k\right) = \mathbf{P}\{k \ln(1-p) < \ln \alpha \leq (k-1) \ln(1-p)\} = \\ &= \mathbf{P}\{\ln(1-p)^k < \ln \alpha \leq \ln(1-p)^{k-1}\} = \mathbf{P}\{(1-p)^k < \alpha \leq (1-p)^{k-1}\} = \\ &= (1-p)^{k-1} - (1-p)^k = (1-p)^{k-1}(1 - (1-p)) = p(1-p)^{k-1}, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

При описании случайных величин  $\eta$  из примеров 1.1–1.3 говорилось о том, что эти величины связаны с комбинациями независимых бернуллиевских случайных величин  $\{\gamma_i\}$  с вероятностью успеха  $p$ . Из этого следует, что моделирование  $\eta$  можно осуществлять с помощью реализации соответствующих комбинаций величин  $\{\gamma_i\}$ ; такие алгоритмы называются *методами браковки*. В частности, для геометрического распределения  $\xi = \min\{i : \gamma_i = 1\}$ , т.е. метод браковки состоит в последовательной проверке неравенства  $\alpha_i < p$  (см. алгоритм 1.3) до тех пор, пока оно не окажется верным. В силу замечания 1.2, методы браковки неэффективны из-за необходимости реализации большого количества стандартных случайных чисел  $\{\alpha_i\}$  (т.е. методы браковки следует "забраковать").

Сравнивая алгоритмы 1.4 и 1.10 для геометрического распределения, можно, по аналогии с замечанием 1.3, отметить, что несмотря на компактность формулы (1.38) неверно говорить, что алгоритм 1.10 всегда экономичнее алгоритма 1.4. Для вероятности успеха  $p$ , близкой к единице, затраты  $t$  из (1.29) относительно невелики, а в формуле (1.38) для любого  $p$  дважды применяется трудоемкая операция логарифмирования. Поэтому для выбранного компьютера и данного языка программирования можно экспериментально найти число  $p_0$ , для которого при  $p \geq p_0$  более экономичным является алгоритм 1.4, а при  $p < p_0$  – алгоритм 1.10.

**1.3.7. Специальные методы моделирования биномиального распределения.** Рассмотрим теперь специальные методы моделирования случайной величины  $\eta_{p,N}$ , имеющей биномиальное распределение (1.32) с параметрами  $p$  и  $N$  (см. пример 1.2). Метод браковки для величины  $\eta_{p,N}$  определяется формулой (1.33). При  $Np(1-p) > 9$  и  $1/(N+1) < p < N/(N+1)$  можно также применять следующий приближенный алгоритм.

**Алгоритм 1.11.** Моделирование  $\eta_{p,N}$  производится по следующей формуле:

$$\eta_{p,N} = \left[ \sqrt{Np(1-p)} \zeta + Np \right], \quad (1.39)$$

где  $\zeta$  – стандартная нормальная случайная величина.

Алгоритмы моделирования стандартной нормальной случайной величины  $\zeta$  рассмотрены далее в разд. 1.10. Обоснование алгоритма 1.11 следует из соотношения (1.33) и теоремы Муавра–Лапласа, утверждающей, что случайная величина  $\theta_N = (\eta_{p,N} - Np)/\sqrt{Np(1-p)}$  сходится по распределению при  $N \rightarrow \infty$  к стандартной нормальной величине  $\zeta$ . Теорема Берри–Эссена, в свою очередь, дает скорость этой сходимости

$$\sup_{-\infty \leq x \leq +\infty} |F_N(x) - \Phi(x)| \leq \frac{p^2 + (1-p)^2}{\sqrt{Np(1-p)}},$$

где  $F_N(x)$  – функция распределения случайной величины  $\theta_N$ , а  $\Phi(x)$  – функция распределения стандартной нормальной величины  $\zeta$ . Если  $Np^{3/2} > 1.07$ , то ошибка при использовании нормальной функции распределения  $\Phi(x)$  вместо  $F_N(x)$  не превосходит 0.05 при всех  $x$ .

В описании примера 1.3 упомянута теорема Пуассона, в которой утверждается, что при выполнении условий (1.35) биномиальное распределение сходится к распределению Пуассона с параметром  $\lambda$ . Теорема Ю.В.Прохорова дает скорость этой сходимости

$$\sum_{i=0}^N \left| C_N^i p^i (1-p)^{N-i} - \frac{\lambda^i e^{-\lambda}}{i!} \right| \leq \frac{2\lambda}{N} \min(2, \lambda).$$

Из этого следует, что если  $p$  имеет одинаковый с  $1/N$  порядок с ростом  $N$  либо  $p < 0.1$ , то вместо биномиального распределения можно моделировать распределение Пуассона с вероятностями  $p_i = (Np)^i e^{-Np}/i!$ ,  $i = 0, 1, \dots, N$ . В свою очередь, для моделирования распределения Пуассона можно использовать как стандартный алгоритм 1.4 и его модификации (метод Уолкера, квантильный метод и т. п.), так и специальные методы из подразд. 1.3.8.

**1.3.8. Специальные методы моделирования распределения Пуассона.** Для начала отметим, что вероятности  $p_i$  распределения Пуассона (1.34) (см. пример 1.3) растут при  $i = 0, 1, \dots, [\lambda]$  и убывают при  $i = [\lambda] + 1, [\lambda] + 2, \dots$ . Из этого следует, что для относительно небольших  $\lambda$  распределение Пуассона допускает оптимальное

расположение вероятностей по убыванию вида (1.23); при этом, однако, при реализации соответствующего стандартного алгоритма 1.4 следует составить массив начальных значений, так как после перестановки вероятностей соотношение  $x_i = i$  не выполнено для начальных  $i$ .

В свою очередь, в силу теоремы Пуассона, для достаточно больших  $\lambda$  (конкретнее, для  $\lambda > 9$ ) можно применять следующий аналог приближенного алгоритма 1.11.

**Алгоритм 1.12.** *Моделирование  $\eta$  производится по следующей формуле:*

$$\eta = [\sqrt{\lambda}\zeta + \lambda],$$

где  $\zeta$  – стандартная нормальная случайная величина.

Рассмотрим также следующий метод.

**Алгоритм 1.13.** *Случайную величину  $\eta$ , имеющую распределение Пуассона (1.34), можно моделировать по формуле*

$$\eta = \min\left(m : \prod_{k=0}^m \alpha_k < e^{-\lambda}\right). \quad (1.40)$$

Формулу (1.40) можно обосновать, используя следующее свойство пуассоновского потока (см. далее пример 2.2 из подразд. 2.4.2): случайная величина

$$\eta' = \min\left(m : \sum_{k=0}^m (-\ln \alpha_k) > \lambda\right)$$

(это так называемый *пуассоновский момент*) имеет распределение (1.34).

Оригинальный, простой (в смысле программной реализации) алгоритм 1.13 может оказаться неэффективным для случая малых  $\lambda$ , в котором требуется многократное обращение к датчику стандартных случайных чисел (см. замечание 1.2).

## 1.4. СТАНДАРТНЫЙ АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕПРЕРЫВНОЙ СЛУЧАЙНОЙ ВЕЛИЧИНЫ

**1.4.1. Метод обратной функции распределения. Примеры.** Рассмотрим теперь алгоритмы моделирования случайной величины  $\xi$ , областью значений которой является интервал или объединение интервалов. В дальнейшем в подавляющем числе случаев предполагается, что  $\xi \in (a, b)$ , т. е. случайная величина  $\xi$  принимает значения в интервале  $(a, b)$ , где  $-\infty \leq a < b \leq +\infty$ , и ее функция распределения  $F(x) = \mathbf{P}(\xi < x)$  непрерывна и строго возрастает при  $x \in (a, b)$ , при этом

$$F(x) = 0 \text{ при } x \leq a \text{ и } F(x) = 1 \text{ при } x \geq b; \quad (1.41)$$

для случаев  $a = -\infty$  и  $b = +\infty$  соотношения (1.41) приобретают вид

$$F(-\infty) = 0, \quad F(+\infty) = 1 \quad \text{или} \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1.$$

Случаи, когда область значений представляет собой объединение непересекающихся интервалов или дискретных множеств с интервалами (при этом нарушаются условия строгой монотонности или непрерывности функции  $F(x)$ ), будут считаться "экзотическими" (см. далее подразд. 1.4.2).



В случае  $\xi \in (a, b)$ , в отличие от дискретного случая, отдельное значение  $x_0 \in (a, b)$  имеет нулевую вероятность. Здесь функция распределения позволяет вычислять вероятности того, что  $\xi$  принадлежит некоторому интервалу:

$$\mathbf{P}(\xi \in (c, d)) = F(d) - F(c). \quad (1.42)$$

Сформулируем *стандартный алгоритм (метод обратной функции распределения)*.

**Алгоритм 1.14.** Для численной реализации (моделирования) выборочного значения  $\xi \in (a, b)$  используем формулу

$$\xi = F^{-1}(\alpha); \quad (1.43)$$

здесь  $\alpha$  – стандартное случайное число.

Обоснование формулы (1.43) следует из того, что случайные величины  $\xi$  и  $\tilde{\xi} = F^{-1}(\alpha)$  одинаково распределены. Действительно, для  $x \leq a$  имеем  $F_{\tilde{\xi}}(x) = \mathbf{P}(\tilde{\xi} < x) = F(x) = 0$ , для  $x \geq b$  выполнено  $F_{\tilde{\xi}}(x) = F(x) = 1$ , а для  $a < x < b$  справедливо равенство

$$F_{\tilde{\xi}}(x) = \mathbf{P}(F^{-1}(\alpha) < x) = \mathbf{P}(\alpha < F(x)) = F(x).$$

В последней выкладке использовано утверждение 1.2.

Алгоритм 1.14, на первый взгляд, закрывает вопрос о моделировании случайных величин  $\xi \in (a, b)$ . Однако остается одна важная "техническая" проблема, связанная с использованием формул вида (1.43) в реальных вычислительных программах.

**Задача 1.1.** Представить зависимость  $\psi(x) = F^{-1}(x)$  в виде простой композиции элементарных функций так, чтобы вычисление значения  $\psi(x)$  могло быть эффективно реализовано на ЭВМ.

В случае, когда задача 1.1 разрешима, будем называть распределение случайной величины  $\xi$  и соответствующую формулу (1.43) и алгоритм 1.14 *элементарными* (с точки зрения возможности численного моделирования). Сразу заметим, что практически для всех распределений, для которых задача 1.1 неразрешима, удастся построить альтернативные алгоритмы численной реализации (моделирования) выборочных значений (методы исключения, суперпозиции и т. п. – см. далее разд. 1.6–1.10). Однако для случайных величин, имеющих элементарные распределения, алгоритм 1.14 является, как правило, наиболее эффективным (экономичным).

Решение задачи 1.1 будем рассматривать для случая, когда распределение величины  $\xi \in (a, b)$  является *абсолютно непрерывным*, что означает существование неотрицательной функции  $f(u)$  такой, что для любого интервала  $(c, d) \subseteq (a, b)$  выполнено

$$\mathbf{P}(\xi \in (c, d)) = \int_c^d f(u) du; \quad (1.44)$$

это аналог соотношения (1.42) (см. также определение 1.1 и соотношение (1.4)). Функция  $f(u)$  называется *плотностью распределения*. Она определена с точностью до значений на множестве меры нуль. В дальнейшем рассматриваются непрерывные и кусочно-непрерывные "версии" плотности  $f(u)$ . Свойствами плотности являются:

$$f(u) \geq 0 \quad \text{при} \quad u \in (a, b); \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) du = \int_a^b f(u) du = 1; \quad (1.45)$$

$$f(u) = 0 \quad \text{при} \quad u \notin (a, b). \quad (1.46)$$

Будем также предполагать, что при  $u \in (a, b)$  множество точек, таких, что  $f(u) = 0$ , имеет меру нуль. Из соотношений (1.42), (1.44) следует, что

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(u) du \quad (1.47)$$

и почти всюду (по мере Лебега) имеет место равенство  $f(u) = dF(u)/du$ . Из соотношения (1.47) следует, что абсолютно непрерывное распределение можно задавать не функцией распределения  $F(x)$ , а плотностью  $f(u)$ . Отметим также, что подавляющее большинство рассматриваемых далее распределений являются абсолютно непрерывными. Соответствующие случайные величины будем называть *непрерывными*.

Итак, пусть имеется непрерывная случайная величина  $\xi \in (a, b)$ , распределенная согласно плотности  $f(u)$ . С учетом того, что величины  $\xi$  и  $F^{-1}(\alpha)$  принадлежат интервалу  $(a, b)$ , а функция  $F(x)$  является возрастающей на этом интервале, перепишем (1.43) в эквивалентной форме  $F(\xi) = \alpha$ . В свою очередь, в силу соотношений (1.46), (1.47), последнее равенство можно переписать в виде

$$\int_a^\xi f(u) du = \alpha. \quad (1.48)$$

Распределение случайной величины  $\xi$  является элементарным, если решение уравнения (1.48) представимо в виде  $\xi = \psi(\alpha)$ , где  $\psi(x)$  – простая композиция элементарных функций, и вычисление значения  $\psi(x)$  на ЭВМ реализуется достаточно эффективно.

Уравнение (1.48) может быть неразрешимым по двум причинам. Первая причина связана с тем, что интеграл в левой части равенства (1.48) не берется (т.е. соответствующая первообразная не выражается в элементарных функциях); примером может служить *стандартное нормальное распределение* с плотностью

$$f(u) = \frac{e^{-u^2/2}}{\sqrt{2\pi}}, \quad -\infty < u < +\infty. \quad (1.49)$$

Для распределения (1.49) имеется эффективный алгоритм моделирования, связанный со свойствами изотропного вектора случайной длины (см. далее разд. 1.10).

Вторая причина, по которой распределение случайной величины может не оказаться элементарным, связана с тем, что даже если интеграл из (1.48) берется, получаемое уравнение может быть неразрешимым (в элементарных функциях) относительно  $\xi$ . В качестве примера такой ситуации можно привести *полиномиальное распределение* с плотностью

$$f(u) = \sum_{i=0}^A a_i u^i, \quad 0 < u < 1; \quad A = N \vee +\infty. \quad (1.50)$$

Получаемое при решении уравнения (1.48) для плотности (1.50) соотношение

$$\sum_{i=0}^A a_i \xi^{i+1} / (i+1) = \alpha$$

в общем случае неразрешимо (в элементарных функциях) относительно  $\xi$  при  $N \geq 2$  и  $a_i \neq 0$ . Специальные алгоритмы моделирования распределения (1.50) (в частности, метод суперпозиции для случая  $a_i \geq 0$  и метод исключения для произвольных коэффициентов  $\{a_i\}$ ) представлены далее в разд. 1.8.

Несмотря на перечисленные трудности, можно построить неограниченное количество примеров элементарных распределений. Эту возможность дает, в частности, теорема о замене случайных переменных (см. далее утверждение 1.9 и рассуждения из подразд. 1.4.4).

Продемонстрируем сначала простейшие примеры элементарных распределений и особо отметим важность этих распределений в приложениях метода Монте-Карло и теории вероятностей.

**Пример 1.4.** Рассмотрим *экспоненциальное распределение* с плотностью

$$f(u) = \lambda e^{-\lambda u}, \quad u > 0; \quad \lambda > 0. \quad (1.51)$$

Сфера применения этого распределения весьма широка. На основе этого распределения формируются пуассоновские потоки, используемые в теории массового обслуживания, в простейших моделях теории переноса излучения (см. далее главу 6), при моделировании случайных полей (см. далее разд. 2.4 и 2.7) и т. д.

Решая уравнение вида (1.48)  $\int_0^\xi \lambda e^{-\lambda u} du = \alpha$ , получаем формулу  $\xi = -\ln(1 - \alpha)/\lambda$ . Заметим, что величина  $\alpha' = 1 - \alpha$  равномерно распределена в  $(0, 1)$ . Действительно, в силу того, что  $\alpha \in (0, 1)$  имеем  $F_{\alpha'}(x) = 0$  при  $x \in (-\infty, 0]$  и  $F_{\alpha'}(x) = 1$  при  $x \in [1, +\infty)$ . Наконец, для  $x \in (0, 1)$  выполнено

$$F_{\alpha'}(x) = \mathbf{P}(1 - \alpha < x) = \mathbf{P}(\alpha > 1 - x) = 1 - (1 - x) = x, \quad (1.52)$$

т. е. случайная величина  $\alpha'$  имеет функцию распределения (1.2). Обращаясь к датчику типа *RANDOM*, мы можем считать, что реализуется выборочное значение  $\alpha'$ , и тогда моделирующая формула для экспоненциального распределения приобретает вид

$$\xi = -\frac{\ln \alpha'}{\lambda}. \quad (1.53)$$

Последнее, на первый взгляд, несущественное замечание о замене  $(1 - \alpha)$  на  $\alpha'$  является весьма важным с прикладной точки зрения, так как во многих практических расчетах количество обращений  $n$  к формуле (1.53) очень велико ( $n \gg 1$ ), и небольшая экономия  $\varepsilon$ , связанная с ликвидацией одного вычитания, может дать ощутимый выигрыш в эффективности на величину  $n\varepsilon$ . При практическом применении тех или иных моделирующих соотношений в трудоемких прецизионных расчетах следует весьма тщательно выверять эти формулы на предмет их эффективности. Например, соотношение (1.53) можно переписать в виде  $\xi = (\ln(1/\alpha'))/\lambda$ , однако последняя формула хуже с точки зрения практического применения, чем соотношение (1.53), т. к. операция деления более трудоемка, чем взятие минуса.

Для полиномиальной плотности (1.50) в разд. 1.8 представлены специальные методы суперпозиции и исключения. Построение этих методов основано на том, что при  $a_i > 0$  слагаемое  $a_i u^i$  суммы (1.50) пропорционально следующей плотности элементарного распределения.

**Пример 1.5.** Рассмотрим *степенное распределение* с плотностью

$$f(u) = cu^{c-1}, \quad 0 < u < 1, \quad c > 0. \quad (1.54)$$

Решая уравнение (1.48) для плотности (1.54), получаем  $\xi^c = \alpha$  или

$$\xi = \alpha^{1/c}. \quad (1.55)$$

**Пример 1.6.** Похожая на (1.55) формула получается при моделировании случайной величины  $\xi$  с *распределением Парето*

$$f(u) = cu^{-c-1}, \quad u > 1, \quad c > 0. \quad (1.56)$$

Распределение (1.56) встречается в задачах экономической статистики. Решением уравнения  $\int_1^\xi cu^{-c-1} du = \alpha$  является  $\xi = (1 - \alpha)^{-1/c}$ . Учитывая, что случайная величина

$\alpha' = 1 - \alpha$  равномерно распределена (см. соотношение (1.52)), целесообразно использовать формулу  $\xi = (\alpha')^{-1/c}$ .

**Пример 1.7.** При численном решении задач теории переноса излучения широко используется *индикатриса Хеньи–Гринштейна*, представляющая собой плотность распределения косинуса угла рассеяния при столкновении "фотона" с частицей среды следующего вида

$$f(u) = \frac{1 - \mu^2}{2(1 + \mu^2 - 2\mu u)^{3/2}} \quad \text{при } u, \mu \in (-1, +1) \quad (1.57)$$

Несложно показать, что  $\mathbf{E}\xi = \int_{-1}^1 u f(u) du = \mu$ . Для моделирования "рассеяния вперед" принимают  $\mu \approx 1$ , а для "рассеяния назад" берут  $\mu \approx -1$ . Решая уравнение (1.48)

$$\int_{-1}^{\xi} \frac{(1 - \mu^2) du}{2(1 + \mu^2 - 2\mu u)^{3/2}} = \alpha, \quad \text{получаем } \xi = \frac{1}{2\mu} \left( 1 + \mu^2 - \left( \frac{1 - \mu^2}{2\mu\alpha + 1 - \mu} \right)^2 \right). \quad (1.58)$$

**1.4.2. Обобщение метода обратной функции распределения.** В целом ряде приложений целесообразным является введение *дельта-плотности*

$$f(u) = \delta(u - x_0), \quad a < u < b, \quad (1.59)$$

где  $\delta(u - x_0)$  – *дельта-функция Дирака*, определяемая соотношением

$$\int_a^b \varphi(u) \delta(u - x_0) du = \begin{cases} \varphi(x_0) & \text{при } x_0 \in (a, b), \\ 0 & \text{при } x_0 \notin (a, b) \end{cases}$$

для произвольной функции  $\varphi(u)$ , непрерывной в точке  $u = x_0$ . Функция (1.59), очевидно, удовлетворяет соотношениям (1.45) при  $x_0 \in (a, b)$ .

Случайная величина  $\xi$ , имеющая плотность (1.59), принимает значение  $\xi = x_0$  с вероятностью единица. Наоборот, любое число  $x_0$  можно трактовать, как случайную величину  $\xi$  с плотностью (1.59).

В свою очередь, можно ввести обобщенную плотность для дискретной случайной величины с распределением (1.18):

$$f(u) = \sum_{i=1}^N p_i \delta(u - x_i), \quad -\infty < u < +\infty; \quad p_i \geq 0, \quad p_1 + \dots + p_N = 1. \quad (1.60)$$

Для простоты полагаем  $x_1 < x_2 < \dots < x_N$ . Соответствующая плотности (1.60) функция распределения имеет ступенчатый вид

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < x_1, \\ R_i = p_1 + \dots + p_i & \text{при } x \in [x_i, x_{i+1}); \quad i = 1, \dots, N - 1, \\ 1 & \text{при } x \geq x_N. \end{cases} \quad (1.61)$$

Такой вид функции распределения позволяет отнести дискретные случайные величины к "экзотическим" (в терминах подразд. 1.4.1). Определение функции, обратной к (1.61), неоднозначно. Однако можно ввести аналог функции  $F^{-1}(z)$  для распределения (1.61) с помощью соотношения  $G(z) = \inf_{x: z < F(x)} x$  и соответствующий аналог метода обратной функции распределения  $\xi = G(\alpha)$ . Несложно убедиться, что последняя формула дает стандартный алгоритм моделирования дискретной случайной величины (алгоритм 1.1). В связи с этим алгоритм 1.1 иногда называют *методом обратной функции распределения для дискретной случайной величины* с распределением (1.18). Мы, однако,

в дальнейшем будем различать стандартные алгоритмы 1.1 и 1.14 моделирования дискретных и непрерывных случайных величин соответственно.

**1.4.3. Составные плотности.** Рассмотрим случайную величину  $\xi \in (a, b)$ , имеющую *составную плотность распределения* вида

$$f(u) = \begin{cases} p_1 f_1(u) & \text{при } u \in (a, c), \\ p_2 f_2(u) & \text{при } u \in [c, b) \end{cases}$$

или

$$f(u) = p_1 f_1(u) \chi_{(a,c)}(u) + p_2 f_2(u) \chi_{[c,b)}(u); \quad (1.62)$$

Здесь  $\chi_A(u)$  – индикатор множества  $A$ ,  $p_1$  и  $p_2$  – положительные числа, дающие в сумме единицу, а  $f_1(u)$  и  $f_2(u)$  – плотности случайных величин  $\xi_1$  и  $\xi_2$ , имеющих элементарные распределения, т. е. для выборочных значений случайных величин  $\xi_i$  можно вывести эффективные моделирующие формулы вида (1.43):  $\xi_i = \psi_i(\alpha)$ . Алгоритм 1.14 для плотности (1.62) можно представить в следующем виде.

**Алгоритм 1.15.** Если  $\alpha \leq p_1$ , то  $\xi = \psi_1(\alpha/p_1)$ , иначе  $\xi = \psi_2((\alpha - p_1)/p_2)$ .

Действительно, при  $\alpha \leq p_1$  выборочное значение случайной величины  $\xi$  находится между  $a$  и  $c$ , и для получения формулы вида (1.43) следует рассматривать уравнение

$$\int_a^\xi p_1 f_1(u) du = \alpha \quad \text{или} \quad \int_a^\xi f_1(u) du = \frac{\alpha}{p_1}$$

и тогда  $\xi = \psi_1(\alpha/p_1)$ . Если же  $\alpha > p_1$ , то значение  $\xi$  располагается между  $c$  и  $b$  и уравнение типа (1.48) можно переписать в виде

$$\int_a^c p_1 f_1(u) du + \int_c^\xi p_2 f_2(u) du = \alpha \quad \text{или} \quad \int_c^\xi f_2(u) du = \frac{\alpha - p_1}{p_2}$$

и тогда  $\xi = \psi_2((\alpha - p_1)/p_2)$ .

В качестве примера приведем составную плотность, используемую при моделировании гамма-распределения с параметром  $\nu$  при  $0 < \nu < 1$  методом исключения (см. далее алгоритм 1.35 из подразд. 1.9.1).

**Пример 1.8.** Рассмотрим случайную величину  $\xi$ , имеющую плотность распределения вида

$$f(u) = \begin{cases} C u^{\nu-1} & \text{при } 0 < u < 1, \quad 0 < \nu < 1, \\ C e^{-\lambda u} & \text{при } u \geq 1, \quad \lambda > 0, \end{cases}$$

или

$$f(u) = C(u^{\nu-1} \chi_{(0,1)}(u) + e^{-\lambda u} \chi_{[1,\infty)}(u)),$$

где  $C = \lambda/(\lambda \nu^{-1} + e^{-\lambda})$ . Вычисляя интегралы от функций  $h_1(u) = C u^{\nu-1}$  и  $h_2(u) = C e^{-\lambda u}$ , перепишем эту плотность в виде (1.62):

$$f(u) = p_1 \times (\nu u^{\nu-1}) \times \chi_{(0,1)}(u) + p_2 \times (\lambda e^{-\lambda u} / \exp(-\lambda)) \times \chi_{[1,\infty)}(u),$$

где  $p_1 = (\lambda \nu^{-1})/(\lambda \nu^{-1} + e^{-\lambda}) = \lambda/(\lambda + \nu e^{-\lambda})$  и  $p_2 = 1 - p_1$ . Функция  $f_1(u) = \nu u^{\nu-1}$  является степенной плотностью (1.54) при  $c = \nu$ ; соответствующая моделирующая формула имеет вид (1.55):  $\xi_1 = \alpha^{1/\nu}$ . Функция  $f_2(u) = (\lambda e^{-\lambda u})/e^{-\lambda}$ ,  $u > 1$  является плотностью усеченного экспоненциального распределения. По аналогии с примером 1.4 несложно получить моделирующую формулу  $\xi_2 = 1 - (\ln(1 - \alpha))/\lambda$ . Алгоритм 1.15 выглядит здесь следующим образом: если  $\alpha \leq \lambda/(\lambda + \nu e^{-\lambda})$ , то

$$\xi = \left( \frac{\alpha (\lambda + \nu e^{-\lambda})}{\lambda} \right)^{1/\nu},$$

иначе

$$\xi = 1 - \frac{\ln(1 - (\alpha - p_1)/p_2)}{\lambda} = -\frac{\ln((1 - \alpha)(e^{-\lambda} + \lambda\nu^{-1}))}{\lambda}. \quad (1.63)$$

Заметим, что в отличие от формулы (1.53) замена  $\alpha' = 1 - \alpha$  в последнем соотношении невозможна, т. к. формула (1.63) верна только при условии  $\alpha > p_1$ .

Составные плотности можно также строить, разбивая  $(a, b)$  на более, чем два, непесекающихся интервала (см. далее подразд. 1.6.4). В качестве примеров таких распределений можно рассмотреть, в частности, кусочно-постоянную и кусочно-линейную плотности (см. разд. 1.8). Для составных плотностей с большим числом интервалов разбиения интервала  $(a, b)$  несложно построить аналог алгоритма 1.15, однако в ряде случаев в этот алгоритм целесообразно включить элементы метода суперпозиции (см. далее подразд. 1.6.4, 1.8.1).

**1.4.4. Теорема о замене случайных переменных. Конструирование плотностей элементарных распределений.** В ряде рассуждений, связанных с обоснованием алгоритмов численного моделирования случайных величин и случайных векторов, нам потребуется следующее

**Утверждение 1.9.** Пусть  $u_i = \Phi_i(v_1, \dots, v_l)$ ,  $i = 1, 2, \dots, l$ , – взаимно однозначное дифференцируемое отображение области  $A$  в пространстве с координатами  $v_1, \dots, v_l$  на область  $B$  в пространстве с координатами  $u_1, \dots, u_l$ . Если плотность случайного вектора  $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \dots, \eta_l)$  в  $A$  равна  $f_{\boldsymbol{\eta}}(v_1, \dots, v_l)$ , то плотность распределения случайного вектора  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_l)$  в  $B$ , где  $\xi_i = \Phi_i(\eta_1, \dots, \eta_l)$ , имеет вид

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u_1, \dots, u_l) = f_{\boldsymbol{\eta}}(v_1, \dots, v_l) \left| \frac{\partial(v_1, \dots, v_l)}{\partial(u_1, \dots, u_l)} \right|, \quad (1.64)$$

в правой части  $v_i$  должны быть выражены через  $u_i$  и  $\left| \frac{\partial(v_1, \dots, v_l)}{\partial(u_1, \dots, u_l)} \right|$  есть якобиан перехода от координат  $\{v_i\}$  к координатам  $\{u_i\}$ .

**Доказательство.** Пусть  $B'$  – произвольное борелевское подмножество  $B$ , а  $A'$  – его прообраз при рассматриваемом отображении  $\{u_i = \Phi_i(v_1, \dots, v_l)\}$ . По правилу замены переменных в интеграле имеем

$$\mathbf{P}(\boldsymbol{\eta} \in A') = \int_{A'} f_{\boldsymbol{\eta}}(v_1, \dots, v_l) dv_1 \dots dv_l = \int_{B'} f_{\boldsymbol{\eta}}(v_1, \dots, v_l) \left| \frac{\partial(v_1, \dots, v_l)}{\partial(u_1, \dots, u_l)} \right| du_1 \dots du_l.$$

Очевидно, что

$$\mathbf{P}(\boldsymbol{\eta} \in A') = \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi} \in B') = \int_{B'} f_{\boldsymbol{\xi}}(u_1, \dots, u_l) du_1 \dots du_l.$$

Учитывая произвольность  $B'$ , из определения 1.1 получим равенство (1.64).  $\square$

При рассмотрении численных моделей со случайными параметрами возникает необходимость, с одной стороны, на основании экспериментальных статистических данных выбрать законы распределения параметров, а с другой, иметь алгоритмы реализации выборочных значений параметров по выбранным вероятностным законам. В связи с этим можно заняться созданием "банка" распределений, допускающих построение эффективных алгоритмов численного моделирования. В частности, для построения плотностей элементарных распределений можно использовать следующую технологию, основанную на одномерном варианте утверждения 1.9.

Пусть  $f_{\eta}(v)$  – плотность случайной величины  $\eta$ , имеющей элементарное распределение в интервале  $(c, d)$ , т. е. из соотношения типа (1.48)  $\int_c^d f_{\eta}(v) dv = \alpha$  для соответствующего выборочного значения случайной величины  $\eta$  можно получить формулу типа

(1.43):  $\eta = \psi_\eta(\alpha)$ , где  $\psi_\eta(w)$  – простая композиция элементарных функций. Рассмотрим взаимно-однозначное преобразование, задаваемое монотонно возрастающей дифференцируемой функцией  $\varphi(u)$ , переводящей интервал  $(a, b)$  в интервал  $(c, d)$ ; в частности,  $\varphi(a) = c$ ,  $\varphi(b) = d$ . Полагаем также, что функцию  $\varphi$  и обратную к ней функцию  $\varphi^{-1}$  можно представить в виде простой композиции элементарных функций. Пусть случайная величина  $\xi$  имеет плотность распределения

$$f(u) = f_\eta(\varphi(u)) \varphi'(u), \quad u \in (a, b). \quad (1.65)$$

При сделанных выше предположениях можно утверждать, что  $f(u)$  является плотностью элементарного распределения, т. е. уравнение (1.48) разрешимо относительно  $\xi$  в элементарных функциях и справедлива формула  $\xi = \varphi^{-1}(\psi_\eta(\alpha))$ . Полученную плотность (1.65) можно взять в качестве исходной плотности  $f_\eta(v)$  и осуществить еще одно взаимно-однозначное преобразование типа  $\varphi(u)$ . С помощью таких вложенных замен можно получать неограниченное количество новых плотностей элементарных распределений. Графики этих плотностей можно сравнивать с полученными из эксперимента распределениями и выбирать подходящий для данной численной модели случайный элемент. В качестве иллюстрации подобного выбора можно привести, в частности, пример 1.7. В нем исходным является аналог усеченного распределения Парето с плотностью

$$f_\eta(v) = (a^c b^c / (b^c - a^c)) c v^{-c-1}, \quad 0 < a < v < b, \quad c > 0$$

при  $a = (1 - |\mu|)^2$ ,  $b = (1 + |\mu|)^2$ ,  $c = 1/2$  (для классического распределения Парето  $a = 1$ ,  $b = +\infty$  – см. соотношение (1.56)) с моделирующей формулой  $\eta = ab/\sqrt[2]{b^c - (b^c - a^c)\alpha}$ . Использована замена  $v = \varphi(u) = 1 + \mu^2 - 2\mu u$ , приводящая к плотности (1.57) и моделирующей формуле (1.58).

## 1.5. СТАНДАРТНЫЙ АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛУЧАЙНОГО ВЕКТОРА

**1.5.1. Представление плотности распределения случайного вектора в виде произведения условных плотностей.** В этом разделе мы займемся обоснованием и разбором примеров применения стандартного алгоритма моделирования многомерной случайной величины (случайного вектора).

Сначала напомним некоторые сведения из курса теории вероятностей. Пусть  $\xi$  и  $\eta$  – две многомерные случайные величины со значениями в  $R^{k_1}$  и  $R^{k_2}$  соответственно, причем распределение случайного вектора  $\eta$  имеет плотность  $f_\eta(\mathbf{v})$ . Обозначим также через  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  семейства борелевских множеств в  $R^{k_1}$  и  $R^{k_2}$ .

**Определение 1.2.** Измеримая по паре переменных  $\mathbf{u}$  и  $\mathbf{v}$  функция  $f_\xi(\mathbf{u}|\mathbf{v})$  называется **условной плотностью  $\xi$  при условии  $\eta = \mathbf{v}$** , если

- 1) при каждом  $\mathbf{v}$  функция  $f_\xi(\mathbf{u}|\mathbf{v})$  является плотностью распределения вероятностей,
- 2) для любых борелевских множеств  $A \in \mathbf{A}$  и  $B \in \mathbf{B}$  выполнено

$$\int_B \int_A f_\xi(\mathbf{u}|\mathbf{v}) f_\eta(\mathbf{v}) d\mathbf{u} d\mathbf{v} = \mathbf{P}\{(\xi \in A) \cap (\eta \in B)\}. \quad (1.66)$$

Согласно определению 1.1, равенство (1.66) означает, что для плотности случайного вектора  $\gamma$ , составленного из компонент векторов  $\xi$  и  $\eta$ , справедливо представление

$$f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = f_\eta(\mathbf{v}) f_\xi(\mathbf{u}|\mathbf{v}) \quad (1.67)$$





или, другими словами, условные плотности в (1.72) превращаются в "безусловные", и разница в представлениях вида (1.71) состоит лишь в порядке перемножения плотностей  $\{f_i(u_i)\}$ .

**1.5.2. Стандартный алгоритм. Примеры.** Сформулируем следующее

**Утверждение 1.11.** Пусть  $\xi_0$  – выборочное значение случайного вектора, распределенного согласно плотности  $f_{\xi}(\mathbf{u})$  из соотношения (1.70), а  $\eta_0$  – выборочное значение случайного вектора, распределенного согласно плотности  $f_{\eta}(\mathbf{v}|\xi_0)$ , где функция  $f_{\eta}(\mathbf{v}|\mathbf{u})$  задается формулой (1.70). Тогда пара  $(\xi_0, \eta_0)$ , рассматриваемая как случайный вектор, распределена с совместной плотностью  $f(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  из (1.69).

**Доказательство.** Опираясь на известные факты теории вероятностей (в частности, на определения 1.1 и 1.2), для малой окрестности  $\Delta(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \Delta\mathbf{u} \times \Delta\mathbf{v}$  произвольной точки  $(\mathbf{u}_0, \mathbf{v}_0)$  непрерывности плотности  $f(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{(\xi_0, \eta_0) \in \Delta(\mathbf{u}, \mathbf{v})\} &= \mathbf{P}(\xi_0 \in \Delta\mathbf{u}) \times \mathbf{P}(\eta_0 \in \Delta\mathbf{v}|\xi_0 \in \Delta\mathbf{u}) = \\ &= \mathbf{P}(\xi_0 \in \Delta\mathbf{u}) \times [\mathbf{P}(\eta_0 \in \Delta\mathbf{v}|\xi_0 = \mathbf{u}) + o(\overline{\Delta\mathbf{u}})] = [f_{\xi}(\mathbf{u})\overline{\Delta\mathbf{u}} + o(\overline{\Delta\mathbf{u}})] \times \\ &\times [f_{\eta}(\mathbf{v}|\mathbf{u})\overline{\Delta\mathbf{v}} + o(\overline{\Delta\mathbf{v}}) + o(\overline{\Delta\mathbf{u}})] = f_{\xi}(\mathbf{u})f_{\eta}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) \times \overline{\Delta\mathbf{u}} \times \overline{\Delta\mathbf{v}} + \\ &+ o(\overline{\Delta\mathbf{u}} \times \overline{\Delta\mathbf{v}}) = f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \times \overline{\Delta(\mathbf{u}, \mathbf{v})} + o(\overline{\Delta(\mathbf{u}, \mathbf{v})}); \end{aligned}$$

здесь  $\overline{A}$  обозначает объем области  $A$ . Из полученного равенства и определения 1.1 следует, что вектор  $(\xi_0, \eta_0)$  распределен с плотностью  $f(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ .  $\square$

Представлению (1.71), (1.72) (и его аналогам для  $l!$  перестановок  $(i_1, \dots, i_l)$  номеров  $(1, \dots, l)$ ) соответствует следующий алгоритм моделирования случайного вектора  $(\xi_1, \dots, \xi_l)$ .

**Алгоритм 1.16.** 1). Реализуем выборочное значение случайной компоненты  $\xi_1$  согласно плотности  $f_1(u)$ .

2). Реализуем выборочное значение компоненты  $\xi_2$  согласно плотности  $f_2(u|\xi_1)$ .

3). Реализуем выборочное значение компоненты  $\xi_3$  согласно плотности  $f_3(u|\xi_1, \xi_2)$ .

⋮

l). Реализуем выборочное значение компоненты  $\xi_l$  согласно плотности  $f_l(u|\xi_1, \dots, \xi_{l-1})$ .

Получаемое при применении алгоритма 1.16 выборочное значение  $(\xi_1, \dots, \xi_l)$ , рассматриваемое как случайный вектор, имеет плотность распределения  $f(u_1, \dots, u_l)$ . Это несложно показать с помощью утверждения 1.11, последовательно полагая  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_s)$  и  $\eta = \xi_{s+1}$  для  $s = 1, 2, \dots, l-1$ . Отметим, что описанная возможность рекуррентного построения вектора  $(\xi_1, \dots, \xi_l)$  в теории вероятностей известна и отмечена, например, в известной монографии Дж.Дуба [12].

В общем случае все  $l!$  представления вида (1.71), (1.72) (для всевозможных перестановок  $(i_1, \dots, i_l)$  номеров  $(1, \dots, l)$ ) различны, а значит различны (в том числе, и по эффективности) соответствующие алгоритмы 1.16. Продемонстрируем это для случая моделирования двумерного вектора ( $l = 2$ ).

**Пример 1.9.** Пусть требуется построить эффективный алгоритм моделирования двумерного случайного вектора  $(\xi, \eta)$  с плотностью распределения

$$f(u, v) = \frac{1}{2} v e^{-uv}, \quad u > 0, \quad 0 < v < 2.$$

Рассмотрим представление (1.67), (1.68) для вектора  $(\xi, \eta)$ :

$$f(u, v) = f_{\eta}(v)f_{\xi}(u|v); \quad f_{\eta}(v) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} v e^{-uv} du = \frac{1}{2}, \quad f_{\xi}(u|v) = \frac{f(u, v)}{f_{\eta}(v)} = v e^{-vu}.$$

Плотность  $f_\eta(v)$  является плотностью равномерного распределения на интервале  $(0, 2)$ . Соответствующее выборочное значение  $\eta_0$  случайной величины  $\eta$  равно  $\eta_0 = 2\alpha_1$ . Функция  $f_\xi(u|\eta_0)$  является плотностью экспоненциального распределения с параметром  $\lambda = \eta_0$  (см. формулу (1.51)), и, следовательно,  $\xi = -\ln \alpha_2/\eta_0$  (см. формулу (1.53)).

Теперь рассмотрим представление (1.69), (1.70) для вектора  $(\xi, \eta)$ :  $f(u, v) = f_\xi(u) f_\eta(v|u)$ . Интегрируя по частям, имеем

$$f_\xi(u) = \int_0^2 \frac{1}{2} v e^{-uv} dv = \frac{1 - (2u + 1)e^{-2u}}{2u^2}, \quad u > 0.$$

Полученная функция, очевидно, не является плотностью элементарного распределения, и поэтому для этого примера представление (1.69), (1.70) является заведомо худшим (с точки зрения реализации алгоритма 1.16) по сравнению с представлением (1.67), (1.68).

### 1.5.3. Случай независимых компонент. Векторы с марковским свойством.

Уже на примере векторов малой размерности  $l = 2$  мы убедились в том, что проблема выбора подходящего для эффективного применения алгоритма 1.16 представления (1.71), (1.72) плотности  $f(u_1, \dots, u_l)$  (из возможных  $l!$  представлений) часто оказывается весьма непростой. Причем трудность этого выбора нарастает с ростом  $l$ . Поэтому во многих приложениях, связанных с конструированием вероятностных плотностей, функция  $f(u_1, \dots, u_l)$  имеет вид (1.73). При этом каждая случайная компонента  $\xi_i$  моделируется согласно своей плотности  $f_i(u)$ , причем порядок моделирования, в отличие от алгоритма 1.16, произволен.

Для приближенного решения многомерных (в том числе, бесконечномерных) задач численного интегрирования рассматриваются (конструируются)  $(N + 1)$ -мерные случайные векторы  $(x_0, x_1, \dots, x_N)$  с плотностью распределения вида

$$f(x_0, x_1, \dots, x_N) = \pi(x_0)p_1(x_1|x_0)p_2(x_2|x_1) \times \dots \times p_N(x_N|x_{N-1}). \quad (1.74)$$

Соотношение (1.74) отражает то обстоятельство, что вектор  $(x_0, x_1, \dots, x_N)$  обладает *марковским свойством*: в одном из представлений вида (1.71) (конкретнее, для тождественной перестановки  $(i_0, i_1, \dots, i_N) = (0, 1, \dots, N)$ ) распределение случайной компоненты  $x_j$  полностью определяется значением предыдущей компоненты  $x_{j-1}$ :

$$f_j(x|x_0, \dots, x_{j-1}) \equiv p_j(x|x_{j-1}).$$

В этом случае неверно говорить, что "*случайная величина  $x_j$  зависит только от величины  $x_{j-1}$* ", т.к. опосредовано она зависит от всех предыдущих компонент  $x_0, \dots, x_{j-2}$ , ведь величина  $x_{j-1}$  зависит от  $x_{j-2}$ , величина  $x_{j-2}$  зависит от  $x_{j-3}$  и т.д.

Из соотношения (5.8) следует, что  $(x_0, x_1, \dots, x_N)$  представляет собой начальный отрезок длины  $(N + 1)$  цепи Маркова с начальной плотностью  $\pi(x)$  и переходной плотностью  $p_j(x|x_{j-1})$ . В случае, когда переходные плотности  $p_j(x|x_{j-1})$  одинаковы для всех  $j = 1, 2, \dots$ , цепь Маркова  $x_0, x_1, x_2, \dots$  называется *однородной*. Численное моделирование начальных выборочных значений  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_N$  траектории цепи Маркова происходит согласно следующему варианту алгоритма 1.16.

**Алгоритм 1.17.** Реализуем выборочное значение случайной компоненты  $x_0$  согласно начальной плотности  $\pi(x)$ . Затем последовательно для  $j = 1, 2, \dots, N$  реализуем выборочные значения случайных компонент  $x_j$  согласно переходным плотностям  $p_j(x|x_{j-1})$ .

Для однородной цепи Маркова розыгрыш компонент  $x_j$  в алгоритме 1.17 происходит согласно одинаковой для всех  $j = 1, \dots, N$  переходной плотности  $p(x|x_{j-1})$ . Кроме

того, в приложениях, связанных с решением интегральных уравнений, число  $N$  ("номер обрыва траектории") является случайным, и в алгоритмы типа 1.17 включаются специальные приемы для реализации выборочного значения  $N$  для данной траектории (см. главу 4).

**1.5.4. Моделирование случайного вектора с заданными одномерным распределением и корреляционной матрицей (метод повторения).** Рассмотрим  $l$ -мерный случайный вектор  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_l)$ . Если задана совместная плотность распределения компонент этого вектора, то можно определить практически все его характеристики: одномерные функции распределения, коэффициенты корреляции между компонентами, совместные распределения различных комбинаций компонент и др. Однако на практике достаточно часто общая совместная плотность компонент неизвестна, а имеется информация о распределениях векторов малой размерности, составленных из компонент исходного многомерного вектора.

Во многих случаях задаются только одномерные плотности распределения  $f_i(u_i)$  компонент  $x_i$  и коэффициенты корреляции между компонентами

$$r_{ij} = \mathbf{E} \left( \left( \frac{x_i - \mathbf{E}x_i}{\sqrt{\mathbf{D}x_i}} \right) \left( \frac{x_j - \mathbf{E}x_j}{\sqrt{\mathbf{D}x_j}} \right) \right)$$

(это усредненные характеристики двумерных распределений). Такая неполная информация может, с одной стороны, привести к неединственности вектора с заданными характеристиками (в этом случае ставится задача построения алгоритма моделирования хотя бы одной из возможных версий). С другой стороны, не для всякого набора чисел  $\{r_{ij}\}$  существует вектор с соответствующей корреляционной структурой.

Рассмотрим следующую оригинальную конструкцию, реализуемую для случая, когда одномерный закон распределения одинаков для всех компонент  $f_1(u) = \dots = f_l(u) \equiv f(u)$ ,  $u \in (a, b)$ , а коэффициенты корреляции  $\{r_{ij}\}$  неотрицательны. Через  $\Delta_m$  обозначим один из возможных вариантов разбиения вектора  $(x_1, \dots, x_l)$  на  $t_m$  векторов  $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{t_m}$  размерностей  $k_1, \dots, k_{t_m}$ , составленных из компонент  $\{x_i\}$ ; при этом  $k_1 + \dots + k_{t_m} = l$ . На множестве всевозможных разбиений  $\{\Delta_1, \dots, \Delta_N\}$  вводится распределение вероятностей  $\{p_1, \dots, p_N\}$  (соображения о конкретном выборе этого распределения см. далее).

**Алгоритм 1.18 (метод повторения).** 1). Реализуя выборочное значение  $\alpha_0$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{p_1, \dots, p_N\}$ , используя алгоритм 1.1 или его модификации, выбираем номер  $t$  разбиения  $\Delta_m$ .

2). Реализуем  $t_m$  независимых выборочных значений  $\xi_1, \dots, \xi_{t_m}$  согласно плотности распределения  $f(u)$ . Полагаем, что все компоненты вектора  $\mathbf{a}_1$  в выбранном разбиении  $\Delta_m$  равны  $\xi_1$ , все компоненты вектора  $\mathbf{a}_2$  равны  $\xi_2$  и т.д.; все компоненты вектора  $\mathbf{a}_{t_m}$  равны  $\xi_{t_m}$ . Полученный составной вектор принимаем за выборочное значение вектора  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_l)$ .

Компоненты вектора  $\mathbf{x}$ , получаемые в алгоритме 1.18, имеют требуемую одномерную плотность распределения  $f(u)$ . Для того, чтобы воспроизводилась заданная корреляционная матрица  $R = \{r_{ij}\}$ ,  $i, j = 1, \dots, l$ , нужно специальным образом выбирать вероятности  $\{p_1, \dots, p_N\}$ . Заметим, что для фиксированного разбиения  $\Delta_m$  корреляционная матрица  $R(\Delta_m) = \{r_{ij}^{(m)}\}$  вектора  $\mathbf{x}$ , получаемого в алгоритме 1.18, состоит из нулей и единиц:  $r_{ij}^{(m)} = r(\xi_s, \xi_s) = 1$ , если компоненты  $x_i$  и  $x_j$  принадлежат одному вектору  $\mathbf{a}_s$ , и  $r_{ij}^{(m)} = r(\xi_{s_1}, \xi_{s_2}) = 0$ , если  $x_i$  и  $x_j$  принадлежат разным векторам  $\mathbf{a}_{s_1}$  и  $\mathbf{a}_{s_2}$ .

По формуле полного математического ожидания получаем соотношение

$$R = \sum_{m=1}^N p_m R(\Delta_m). \quad (1.75)$$

Для определенности будем считать, что нумерация разбиения  $\Delta_m$  проводится в порядке убывания числа единиц в матрицах  $R(\Delta_m)$  (для одинакового числа единиц нумерация произвольна). В частности,  $R(\Delta_1)$  – это матрица, состоящая из единиц, а в  $R(\Delta_N)$  единицы стоят только на диагонали. Соотношение (1.75) можно переписать в виде системы из  $l(l-1)/2$  алгебраических уравнений для величин  $\{p_m\}$ :

$$p_1 + \sum_{m=1}^{N-1} p_m r_{ij}^{(m)} = r_{ij}, \quad i < j; \quad p_m \geq 0, \quad \sum_{m=1}^N p_m = 1. \quad (1.76)$$

Если решение с указанными свойствами существует, то вектор  $\mathbf{x}$  можно моделировать методом повторения, в противном случае алгоритм 1.18 нереализуем. Задачу (1.76) можно решать следующим образом. Стандартными приемами линейного программирования (например, симплекс-методом) определяется неотрицательное решение  $(p_1, \dots, p_{N-1})$  системы из (1.76) с минимальной суммой компонент  $P$ . Если  $P \leq 1$ , то полагаем  $p_N = 1 - P$ , и случайный вектор  $\mathbf{x}$  можно моделировать с помощью алгоритма 1.18, если  $P > 1$ , то метод повторения неприменим.

В заключение заметим, что метод повторения дает случайный вектор  $\mathbf{x}$  со специальным вырожденным многомерным распределением, плотность которого, например, в двумерном случае имеет вид

$$f(u, v) = q f(u) \delta(v - u) + (1 - q) f(u) f(v),$$

где  $\delta(v - u)$  – дельта-функция Дирака (см. подразд. 1.4.2). Предположим, что одномерное распределение с плотностью  $f(u)$  безгранично делимо. Это означает, что для любого натурального  $K$  случайная величина  $x$  представима в виде  $x = x^{(1)} + \dots + x^{(K)}$ , где  $x^{(k)}$ ,  $k = 1, \dots, K$  – независимые, одинаково распределенные согласно плотности  $f_{1/K}(u)$  случайные величины (см. также определение 1.7 из подразд. 1.9.1). Тогда моделируемое многомерное распределение можно улучшать, рассматривая реализации вида  $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(1)} + \dots + \mathbf{x}^{(K)}$ , где  $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$  – независимые реализации векторов, полученных с помощью алгоритма 1.18 согласно одномерному распределению с плотностью  $f_{1/K}(u)$  и корреляционной матрице  $R = \{r_{ij}\}$ .

## 1.6. МЕТОД СУПЕРПОЗИЦИИ

**1.6.1. Метод интегральной суперпозиции.** В этом и следующем разделах изучаются два метода реализации выборочных значений одномерных и многомерных случайных величин, для которых не удастся построить эффективные стандартные алгоритмы 1.14 и 1.16. Это методы суперпозиции и исключения, в которых предусматривается моделирование дополнительных вероятностных распределений.

Опишем сначала общую ситуацию, в которой применяется метод суперпозиции. Пусть требуется построить алгоритм численной реализации выборочных значений  $k_1$ -мерного случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$ , плотность которого может быть представлена в виде интеграла, зависящего от многомерного параметра  $\mathbf{u} \in R^{k_1}$

$$f(\mathbf{u}) = \int_{R^{k_2}} p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (1.77)$$

таким образом, что

- 1) функция  $p(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  является плотностью  $(k_1 + k_2)$ -мерного вектора  $(\xi, \eta)$ ;
- 2) соответственно формуле полной плотности вероятностей

$$f(\mathbf{u}) = \int_{R^{k_2}} f_{\eta}(\mathbf{v}) f_{\xi}(\mathbf{u}|\mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (1.78)$$

для выборочных значений случайных векторов  $\xi$  и  $\eta$  с плотностями  $f_{\eta}(\mathbf{v})$  и  $f_{\xi}(\mathbf{u}|\mathbf{v})$  имеются эффективные стандартные алгоритмы (формулы) численного моделирования вида  $\eta = \psi_{\eta}(\bar{\alpha}_1)$ ,  $\xi = \psi_{\xi}(\bar{\alpha}_2; \mathbf{v})$ , где  $\bar{\alpha}_i$  – соответствующие наборы стандартных случайных чисел.

При сделанных предположениях согласно утверждению 1.11 (переформулированному для разложения (1.67), (1.68)) можно использовать алгоритм метода суперпозиции.

**Алгоритм 1.19.** Реализуем выборочное значение случайного вектора  $\xi$ , имеющего плотность распределения вида (1.78), согласно алгоритму (формуле)  $\xi = \psi_{\xi}(\bar{\alpha}_2; \eta_0)$ , где выборочное значение  $\eta_0$  случайного вектора  $\eta$  моделируется согласно алгоритму (формуле)  $\eta_0 = \psi_{\eta}(\bar{\alpha}_1)$ .

Учитывая интегральное представление (1.78), в котором вспомогательный вектор  $\eta$  имеет абсолютно непрерывное распределение с плотностью  $f_{\eta}(\mathbf{v})$ , назовем алгоритм 1.19 методом интегральной суперпозиции (в отличие от метода дискретной суперпозиции, рассмотренного далее в подразд. 1.6.2).

**Пример 1.10.** Пусть требуется построить алгоритм моделирования случайной величины  $\xi$ , имеющей плотность распределения

$$f(u) = 2 \int_0^{\pi/2} v \cos v \cos uv \, dv, \quad 0 < u < 1.$$

Рассмотрим двумерный случайный вектор  $(\xi, \eta)$  с плотностью распределения  $p(u, v) = 2v \cos v \cos uv$ ,  $0 < u < 1$ ,  $0 < v < \pi/2$  и представление (1.78) для этой плотности (см. также соотношения (1.67), (1.68)):

$$f_{\eta}(v) = \int_0^1 2v \cos v \cos uv \, du = \sin 2v, \quad 0 < v < \pi/2;$$

$$f_{\xi}(u|v) = \frac{2v \cos v \cos uv}{2 \cos v \sin v} = \frac{v \cos uv}{\sin v}, \quad 0 < u < 1.$$

Полученные функции являются плотностями элементарных распределений. Решая уравнения

$$\int_0^{\eta_0} \sin 2v \, dv = \alpha_1 \quad \text{и} \quad \int_0^{\xi} \frac{\eta_0 \cos(\eta_0 u)}{\sin \eta_0} \, du = \alpha_2,$$

выписываем моделирующие формулы:

$$\eta_0 = \frac{\arccos(1 - 2\alpha_1)}{2} \quad \text{и} \quad \xi = \frac{\arcsin(\alpha_2 \sin \eta_0)}{\eta_0}.$$

Таким образом, выборочное значение случайной величины  $\xi$  можно получать по формуле:

$$\xi = \frac{\arcsin[\alpha_2 \sin((1/2) \arccos(1 - 2\alpha_1))]}{(1/2) \arccos(1 - 2\alpha_1)}.$$

**1.6.2. Метод дискретной суперпозиции.** Ситуация, когда плотность моделируемого распределения представляет собой интеграл (1.77), является достаточно редкой.

Гораздо чаще в качестве вектора  $\boldsymbol{\eta}$  используется одномерная целочисленная случайная величина  $\eta$  с распределением  $\mathbf{P}(\eta = i) = p_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, M$ ;  $M \leq \infty$ . В этом случае, формально подставляя в формулу (1.78) аналог соотношения (1.60)  $f_\eta(v) = \sum_{i=1}^M p_i \delta(v - i)$ , получаем

$$f(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(\mathbf{u}); \quad f_i(\mathbf{u}) = f_\xi(\mathbf{u} | \eta = i). \quad (1.79)$$

Согласно требованиям, при которых применим алгоритм 1.19, должны существовать эффективные алгоритмы получения выборочных значений случайной величины  $\eta$  (в рассматриваемом частном случае следует применять стандартный алгоритм 1.1 моделирования дискретного распределения или его модификации – см. разд. 1.2, 1.3) и вектора  $\boldsymbol{\xi}$  согласно плотности  $f_i(\mathbf{u})$  для любого  $i$ . Таким образом, соотношение (1.79) представляет собой взвешенную сумму (смесь) эффективно моделируемых плотностей  $\{f_i(\mathbf{u})\}$ . Метод суперпозиции для плотности (1.79) формулируется следующим образом.

**Алгоритм 1.20.** 1). Реализовав выборочное значение  $\alpha_1$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{p_i\}$ , используя алгоритм 1.1 или его модификации, выбираем номер  $\eta_0 = m$ .

2). Реализуем выборочное значение случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$  согласно плотности  $f_m(\mathbf{u})$ .

Алгоритм 1.20 называется *методом дискретной суперпозиции* или просто *методом суперпозиции*. Этот метод нетрудно обосновать путем вычисления функции распределения реализуемой случайной величины  $\boldsymbol{\xi}$  по формуле полной вероятности, рассматривая в качестве гипотез значения  $\eta = i$  с вероятностями  $p_i$ :  $F_\xi(\mathbf{u}) = \sum_i p_i F_i(\mathbf{u})$ .

**Пример 1.11.** Пусть требуется построить алгоритм моделирования случайной величины  $\xi$ , имеющей плотность распределения

$$f(u) = \frac{3}{8}(1 + u^2), \quad -1 < u < 1. \quad (1.80)$$

Соотношение (1.80) представляет так называемый *закон Релея молекулярного рассеяния фотонов в атмосфере*, используемый в теории переноса излучения. Функция (1.80) не является плотностью элементарного распределения, так как уравнение  $\int_{-1}^{\xi} f(u) du = \alpha$  сводится к соотношению  $\xi^3 + 3\xi - 8\alpha - 4 = 0$ , которое неразрешимо относительно  $\xi$ . Плотность (1.80) представима в виде (1.79):

$$f(u) = \frac{3}{4} \times \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \times \frac{3}{2} u^2, \quad -1 < u < 1,$$

то есть  $p_1 = 3/4$ ,  $f_1(u) = 1/2$ ;  $p_2 = 1/4$ ;  $f_2(u) = 3u^2/2$ . Функция  $f_1(u)$  является плотностью равномерного распределения на интервале  $(-1, 1)$ , а функция  $f_2(u)$  является аналогом плотности степенного распределения (пример 1.5) на том же интервале. Алгоритм 1.20 здесь выглядит следующим образом: если  $\alpha_1 < 3/4$ , то  $\xi = 2\alpha_2 - 1$ , иначе  $\xi = \sqrt[3]{2\alpha_2 - 1}$ .

Отметим, что случайная величина с плотностью (1.80) принадлежит классу случайных величин с полиномиальными плотностями, особенности моделирования которых отражены далее в разд. 1.8.

**1.6.3. Модифицированный метод суперпозиции.** Рассмотрим алгоритм 1.20 для случая моделирования одномерной случайной величины  $\xi \in (a, b)$  с плотностью распределения вида (1.79). Предполагаем дополнительно, что во втором пункте алгоритма 1.20 выборочное значение случайной величины  $\xi$  моделируется методом обратной

функции распределения, т. е. выражение  $\xi = \psi_m(\alpha_2)$  получается с помощью решения уравнения вида (1.48):

$$\int_a^\xi f_m(u) du = \alpha_2. \quad (1.81)$$

Согласно утверждению 1.2, в случае, когда в первом пункте алгоритма 1.20 выбран номер  $\eta = m$ , случайная величина  $\alpha_1$ , попадая в интервал  $\Delta_m = \left(\sum_{i=1}^{m-1} p_i, \sum_{i=1}^m p_i\right)$ , равномерно распределена в  $\Delta_m$ , и тогда справедливо

**Утверждение 1.12.** *Случайная величина  $\beta = \left(\alpha_1 - \sum_{i=1}^{m-1} p_i\right) p_m^{-1}$  равномерно распределена в интервале  $(0, 1)$ .*

**Доказательство.** В силу того, что  $\alpha_1 \in \Delta_m$ , имеем  $F_\beta(x) = \mathbf{P}(\beta < x) = 0$  при  $x \leq 0$  и  $F_\beta(x) = 1$  при  $x \geq 1$ . Далее, для  $0 < x < 1$  получаем

$$\begin{aligned} F_\beta(x) &= \mathbf{P}(\beta < x | \eta = m) = \frac{\mathbf{P}\{(\beta < x) \cap (\eta = m)\}}{\mathbf{P}(\eta = m)} = \\ &= \mathbf{P}\left(\sum_{i=1}^{m-1} p_i \leq \alpha_1 < \sum_{i=1}^{m-1} p_i + x p_m\right) / p_m = x, \end{aligned}$$

т. е. функция  $F_\beta(x)$  совпадает с функцией распределения  $F(x)$  стандартного случайного числа  $\alpha$  (см. соотношение (1.2)).  $\square$

Утверждение 1.12 обосновывает следующую модификацию алгоритма 1.20.

**Алгоритм 1.21.** 1). *Реализовав выборочное значение  $\alpha$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{p_i\}$ , используя алгоритм 1.1 или его модификации, выбираем номер  $m$ .*

2). *Реализуем выборочное значение случайной величины  $\xi \in (a, b)$  по формуле  $\xi = \psi_m(\beta)$ , полученной с помощью решения уравнения*

$$\int_a^\xi f_m(u) du = \beta, \quad \beta = \left(\alpha - \sum_{i=1}^{m-1} p_i\right) p_m^{-1} \quad (1.82)$$

*относительно переменной  $\xi$ .*

Модификация состоит в замене  $\alpha_2$  на  $\beta$  в уравнении (1.81). Это позволяет ликвидировать одну из двух трудоемких операций обращения к генератору стандартных случайных чисел *RANDOM* (см. замечание 1.2).

**Пример 1.12.** Пусть требуется построить алгоритм моделирования случайной величины  $\xi$ , имеющей плотность распределения

$$f(u) = \frac{5}{12} (1 + (u - 1)^4), \quad 0 < u < 2.$$

Эта функция не является плотностью элементарного распределения, т. к. соотношение  $\int_0^\xi f(u) du = \alpha$  равносильно уравнению  $(\xi - 1)^5 + 5\xi = 12\alpha - 1$ , которое неразрешимо относительно  $\xi$ . Справедливо представление

$$f(u) = p_1 f_1(u) + p_2 f_2(u); \quad p_1 = \frac{5}{6}, \quad p_2 = \frac{1}{6}; \quad f_1(u) \equiv \frac{1}{2}, \quad f_2(u) = \frac{5}{2} (u - 1)^4.$$

Моделирующие формулы метода суперпозиции выглядят следующим образом:

$$\xi = \begin{cases} 2\alpha_2 & \text{при } \alpha_1 < 5/6, \\ 1 + (2\alpha_2 - 1)^{1/5} & \text{при } \alpha_1 \geq 5/6. \end{cases}$$

Для модифицированного метода суперпозиции величина  $\beta$  равна  $(6/5)\alpha$  при  $m = 1$  и  $\beta = 6\alpha - 5$  при  $m = 2$  и, следовательно,

$$\xi = \begin{cases} (12/5)\alpha & \text{при } \alpha < 5/6, \\ 1 + (12\alpha - 11)^{1/5} & \text{при } \alpha \geq 5/6. \end{cases}$$

Модифицированный метод имеет для этого примера преимущество, т. к. при его применении не требуется реализовывать второе стандартное случайное число (а затраты на остальные операции у стандартного и модифицированного методов практически совпадают).

**1.6.4. Метод суперпозиции для составных плотностей.** Рассмотрим следующее обобщение формулы (1.62), определяющей составную плотность, сосредоточенную на двух интервалах:

$$f(u) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(u) \chi_{(a_i, b_i)}(u), \quad u \in (a_1, b_1) \cup \dots \cup (a_M, b_M). \quad (1.83)$$

Здесь  $\{f_i(u)\}$  – элементарные плотности, а  $\{(a_i, b_i)\}$  – непересекающиеся интервалы. Алгоритм метода обратной функции распределения (алгоритм 1.15), сформулированный в подразд. 1.4.3 для случая  $M = 2$ , легко распространяется на составные плотности вида (1.83) для  $M > 2$ .

Пусть в объединении  $(a_1, b_1) \cup \dots \cup (a_M, b_M)$  для определенности выполнено  $b_i \leq a_{i+1}$ ,  $i = 1, 2, \dots, M - 1$ . Выпишем уравнение вида (1.48) для плотности (1.83):

$$\int_{a_1}^{\xi} \sum_{i=1}^M p_i f_i(u) \chi_{(a_i, b_i)}(u) du = \alpha. \quad (1.84)$$

**Алгоритм 1.22.** Находим номер  $t$  такой, что  $\alpha \in \Delta_m = \left[ \sum_{i=1}^{m-1} p_i, \sum_{i=1}^m p_i \right)$  (см. алгоритм 1.1), и полагаем  $\xi = \psi_m(\beta)$ , где  $\xi = \psi_m(\alpha)$  – формула метода обратной функции распределения, соответствующая элементарной плотности  $f_m(u)$ , и  $\beta = \left( \alpha - \sum_{i=1}^{m-1} p_i \right) p_m^{-1}$ .

Действительно, при  $\alpha \in \Delta_m$  имеем  $\xi \in (a_m, b_m)$  и уравнение (1.84) приобретает вид

$$\int_{a_1}^{b_1} p_1 f_1(u) du + \dots + \int_{a_m}^{\xi} p_m f_m(u) du = \alpha \quad \text{или} \quad \int_{a_m}^{\xi} f_m(u) du = \beta. \quad (1.85)$$

Сравнивая соотношения (1.82) и (1.85), получаем следующее

**Утверждение 1.13.** Метод обратной функции распределения для случайной величины  $\xi$  с составной плотностью вида (1.83) (алгоритм 1.22) совпадает с модифицированным методом суперпозиции (алгоритм 1.21) с определением номера  $t$  согласно стандартному алгоритму моделирования дискретной случайной величины (алгоритм 1.1).

**Замечание 1.4.** Для достаточно больших  $M$  целесообразно выбирать из эквивалентных алгоритмов 1.21 и 1.22 модифицированный метод суперпозиции 1.21 и использовать на первом шаге этого алгоритма эффективные модификации стандартного алгоритма 1.1 из разд. 1.3 (метод Уолкера, квантильный метод и др.). Примерами эффективного использования этого соображения могут служить алгоритмы 1.30 и 1.31, сформулированные далее в подразд. 1.8.1 для случайных величин с кусочно-постоянными и



кусочно-линейными плотностями.

## 1.7. МЕТОДЫ ИСКЛЮЧЕНИЯ

### 1.7.1. Общие принципы построения и трудоемкость методов исключения.

В теории статистического моделирования широко используются так называемые *методы исключения* (иногда применяются термины *методы отбора* и *методы отказов*, которые также соответствуют, хотя и в меньшей степени, английскому термину *rejection technique*).

Суть этих методов состоит в следующем. Пусть случайный вектор (случайная точка)  $\zeta$  распределен в некотором множестве  $X$  и дано подмножество  $A \subseteq X$ .

**Алгоритм 1.23.** *Проводится некоторое статистическое испытание  $T$  и считается, что  $T$  состоялось, если численная реализация вектора  $\zeta$  принадлежит  $A$ , и  $T$  не состоялось, если  $\zeta \notin A$ .*

Назовем *трудоемкостью*  $\tilde{s}$  алгоритма 1.23 средние затраты на построение выборочных значений вектора  $\zeta$  до реализации  $T$ . Очевидно, что величина  $\tilde{s}$  пропорциональна математическому ожиданию целочисленной случайной величины, имеющей геометрическое распределение с параметром  $p = \mathbf{P}(\zeta \in A)$  (см. пример 1.1). Согласно формуле (1.31) имеем

$$\tilde{s} \sim s = \frac{1}{p} = \frac{1}{\mathbf{P}(\zeta \in A)}. \quad (1.86)$$

Очевидно, что  $s \geq 1$ . Оптимизация алгоритма 1.23 связана с приближением величины  $s$  к единице.

**1.7.2. Мажорантный метод исключения.** В подавляющем числе случаев алгоритм 1.23 применяется в следующей ситуации. Пусть требуется моделировать случайный вектор (случайную величину)  $\xi$ , распределенный в области  $U \in R^l$  согласно плотности  $f(\mathbf{u})$ , которая пропорциональна заданной неотрицательной функции  $g(\mathbf{u})$ , т. е.

$$f(\mathbf{u}) = \frac{g(\mathbf{u})}{\bar{G}}, \quad \bar{G} = \int_U g(\mathbf{u}) d\mathbf{u}. \quad (1.87)$$

Предполагается, что ни один из рассмотренных ранее методов не дает эффективного алгоритма моделирования вектора  $\xi$ . Надежду на построение моделирующего алгоритма для случайного вектора с плотностью (1.87) дает следующее

**Утверждение 1.14.** *Пусть точка  $(\xi, \eta)$  равномерно распределена в области*

$$G = \{\mathbf{u} \in U, 0 < v < g(\mathbf{u})\}, \quad (1.88)$$

*т.е. в "подграфике" функции  $g(\mathbf{u})$ ; при этом  $\xi \in U$  и  $\eta \in (0, g(\xi))$ . Тогда случайный вектор  $\xi$  распределен согласно плотности (1.87).*

**Доказательство.** То, что  $(l + 1)$ -мерная точка  $(\xi, \eta)$  равномерно распределена в области  $G$ , означает, что совместная плотность  $f_{(\xi, \eta)}(\mathbf{u}, v)$  тождественно равна  $1/\bar{G}$  при  $(\mathbf{u}, v) \in G$  и нулю иначе. Согласно формуле (1.70) для  $\eta = v$  имеем

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{(\xi, \eta)}(\mathbf{u}, v) dv = \int_0^{g(\mathbf{u})} \frac{dv}{\bar{G}} = \frac{g(\mathbf{u})}{\bar{G}}.$$

□

Таким образом, если получить выборочное значение точки  $(\xi, \eta)$ , равномерно распределенной в  $G$ , то значение  $\xi$  будет распределено согласно плотности (1.87).

Возникает вопрос: каким образом можно реализовать точку, равномерно распределенную в "подграфике" заданной функции? Ответ на этот вопрос дает следующее утверждение, которое является по сути обратным к утверждению 1.14.

**Утверждение 1.15.** Пусть случайный вектор  $\xi_1$  распределен согласно плотности

$$f_1(\mathbf{u}) = \frac{g_1(\mathbf{u})}{\bar{G}_1}, \quad \bar{G}_1 = \int_U g_1(\mathbf{u}) d\mathbf{u}, \quad (1.89)$$

а условное распределение при фиксированном значении  $\xi_1$  случайной величины  $\eta$  является равномерным на интервале  $(0, g_1(\xi_1))$ . Тогда случайная точка  $(\xi_1, \eta)$  равномерно распределена в "подграфике"

$$G_1 = \{\mathbf{u} \in U, 0 < v < g_1(\mathbf{u})\} \quad (1.90)$$

функции  $g_1(\mathbf{u})$ .

**Доказательство.** То, что случайная величина  $\eta$  условно равномерно распределена на интервале  $(0, g_1(\xi_1))$  означает, что плотность  $f_\eta(v|\xi_1)$  тождественно равна  $1/g_1(\xi_1)$  при  $v \in (0, g_1(\xi_1))$  и нулю иначе. Согласно формулам (1.69), (1.70) для  $\xi = \xi_1$  и  $\eta = \eta$ , имеем, что плотность распределения случайной точки  $(\xi_1, \eta)$  равна

$$f_{(\xi_1, \eta)}(\mathbf{u}, v) = f_1(\mathbf{u})f_\eta(v|\mathbf{u}) = \frac{g_1(\mathbf{u})}{\bar{G}_1} \times \frac{1}{g_1(\mathbf{u})} \equiv \frac{1}{\bar{G}_1}, \quad (\mathbf{u}, v) \in G_1.$$

□

Если в утверждении 1.15 выбрать  $\xi_1 = \xi$ , то в совокупности с утверждением 1.14 получаем логический круг: нам нужно разыграть случайную точку  $(\xi, \eta)$ , равномерно распределенную в "подграфике"  $G$  (и тогда координата  $\xi$  имеет требуемое распределение с плотностью (1.87)), но для этого нужно реализовать вектор  $\xi$  по плотности (1.87). Имеется еще, однако, утверждение 1.1, из которого следует, что если погрузить "подграфик"  $G$  в область  $G_1$  в системе координат  $(\mathbf{u}, v)$  (т.е.  $G \subseteq G_1$ ) и реализовать выборочное значение случайного вектора  $(\xi_1, \eta)$ , равномерно распределенного в  $G_1$ , то при условии  $(\xi_1, \eta) \in G$  пара  $(\xi_1, \eta)$  равномерно распределена в  $G$ . Тогда, согласно утверждению 1.14, вектор  $\xi_1$  имеет требуемое распределение с плотностью (1.87).

Конструирование области  $G_1$  связано с расширением "подграфика"  $G$  в направлении оси  $v$ . Другими словами, рассматривается мажоранта  $g_1(\mathbf{u})$  функции  $g(\mathbf{u})$  такая, что  $g(\mathbf{u}) \leq g_1(\mathbf{u})$  при  $\mathbf{u} \in U$ . Первое требование к мажоранте  $g_1(\mathbf{u})$  таково, что для плотности (1.89) имеется эффективный алгоритм (формула) вида  $\xi_1 = \psi_1(\bar{\alpha}_1)$  для реализации выборочного значения случайного вектора  $\xi_1$  согласно одному из вариантов алгоритма 1.16 (здесь  $\bar{\alpha}_1$  – соответствующий набор стандартных случайных чисел). Это дает мажорантный метод исключения.

**Алгоритм 1.24.** 1). Реализуем выборочное значение  $\xi_1$  согласно плотности (1.89):  $\xi_1 = \psi_1(\bar{\alpha}_1)$ , а также значение  $\eta = \alpha_2 g_1(\xi_1)$ .

2). Если

$$\eta < g(\xi_1), \quad (1.91)$$

то в качестве искомого выборочного значения принимаем  $\xi = \xi_1$ . В случае, когда неравенство (1.91) не выполнено, повторяем пункт 1 данного алгоритма и т.д.

Согласно утверждению 1.15, точка  $(\xi_1, \eta)$ , реализуемая в первом пункте алгоритма 1.24, равномерно распределена в области  $G_1$ . Если выполнено условие (1.91), то пара  $(\xi_1, \eta)$  принадлежит области  $G$  и, согласно утверждению 1.1, равномерно распределена в этой области, и тогда, согласно утверждению 1.14, величину  $\xi_1$  можно принять в качестве искомого выборочного значения  $\xi$ .

Согласно формуле (1.86) и утверждению 1.1, трудоемкость  $\tilde{s}$  алгоритма 1.24 пропорциональна величине

$$s = \frac{1}{\mathbf{P}((\boldsymbol{\xi}_1, \eta) \in G)} = \frac{\bar{G}_1}{\bar{G}}. \quad (1.92)$$

Таким образом, мажоранту  $g_1(\mathbf{u})$  функции  $g(\mathbf{u})$  следует подбирать так, чтобы объемы  $\bar{G}_1$  и  $\bar{G}$  были близки; это выполнено при  $g_1(\mathbf{u}) \approx g(\mathbf{u})$ .

Как указано выше, мажорантный метод исключения используется намного чаще других методов отбора, поэтому в литературе часто алгоритм 1.24 называется просто *методом исключения*.

**Пример 1.13.** Рассмотрим случайную величину  $\xi$ , имеющую плотность распределения  $f(u)$ , пропорциональную функции

$$g(u) = \left(1 + \frac{\sin u}{2}\right) e^{-u}, \quad u > 0. \quad (1.93)$$

Интегрируя по частям, получаем:

$$\int_0^{+\infty} g(u) du = \left(-e^{-u} - \frac{(\cos u + \sin u) e^{-u}}{4}\right) \Big|_0^{+\infty} = 5/4, \quad (1.94)$$

то есть

$$f(u) = \frac{4}{5} \left(1 + \frac{\sin u}{2}\right) e^{-u}, \quad u > 0.$$

Из соотношения (1.94) следует, что функция  $f(u)$  не является плотностью элементарного распределения, т. е. уравнение метода обратной функции распределения  $\int_0^\xi f(u) du = \alpha$  (см. соотношение (1.48)) неразрешимо относительно  $\xi$ . В силу того, что  $|\sin u| \leq 1$ , в качестве мажоранты функции (1.93) можно взять функцию  $g_1(u) = 3e^{-u}/2$ . Легко вычислить интеграл  $\int_0^{+\infty} g_1(u) du = 3/2$ . Следовательно,  $f_1(u) = e^{-u}$ ,  $u > 0$ . Это частный случай экспоненциальной плотности (1.51) для  $\lambda = 1$ . Отсюда получаем следующий алгоритм метода исключения:

1. Согласно формуле (1.53) получаем выборочное значение  $\xi_1 = -\ln \alpha_1$ . Реализуем также величину  $\eta = \alpha_2 g_1(\xi_1) = 3\alpha_2 \exp(-\xi_1)/2$ .

2. Проверяем неравенство  $\eta < g(\xi_1)$  или  $3\alpha_2 < 2 + \sin \xi_1$ . Если это неравенство выполнено, то полагаем, что выборочное значение случайной величины  $\xi$  равно  $\xi = \xi_1$ , иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоемкость этого алгоритма пропорциональна величине  $s = 3/2 : 5/4 = 1,2$  (см. соотношение (1.92)).

**1.7.3. Специальные методы построения мажорант.** Наиболее простой вариант мажорантного метода исключения получается в случае, когда функция  $g(\mathbf{u})$  определена на ограниченном множестве  $U$  в  $R^l$  и существует (известна) константа  $C$ , такая, что  $g(\mathbf{u}) \leq C$  при  $\mathbf{u} \in U$ . В качестве мажоранты здесь можно выбрать  $g_1(\mathbf{u}) \equiv C$ , и на первом этапе алгоритма 1.24 выборочное значение вектора  $\boldsymbol{\xi}_1$  реализуется согласно равномерному распределению в множестве  $U$ . В одномерном случае для  $U = (a, b) \subset R$  алгоритм 1.24 выглядит здесь следующим образом.

**Алгоритм 1.25.** 1. Реализуем  $\xi_1 = a + \alpha_1(b - a)$  и  $\eta = \alpha_2 C$ .

2. Если  $\eta \leq g(\xi_1)$ , то в качестве выборочного значения случайной величины  $\xi \in (a, b)$  принимаем  $\xi = \xi_1$ , иначе повторяем п. 1 и т. д.

В свое время Дж.Нейман первым предложил мажорантный метод исключения именно в такой форме, и часто этот простой частный случай называют *методом Неймана* (мы также будем придерживаться этой терминологии). В литературе по методам Монте-Карло иногда методами Неймана называют все методы исключения.

Важное обобщение алгоритма 1.25 связано с использованием кусочно-постоянных мажорант, когда интервал  $(a, b)$  разбит на полуинтервалы  $\Delta_i = (u_{i-1}, u_i]$ ,  $i = 1, \dots, M$  точками  $a = u_0 < u_1 < \dots < u_{M-1} < u_M = b$ , и для каждого  $\Delta_i$  известна константа  $C_i$  такая, что  $g(u) \leq C_i$  при  $u \in \Delta_i$ . Если  $g_1(u) \equiv C_i$  при  $u \in \Delta_i$ , то на первом этапе алгоритма 1.24 требуется моделировать выборочное значение случайной величины  $\xi_1$  согласно кусочно-постоянной плотности (особенности такого моделирования подробно разобраны в подразд. 1.8.1).

Для построения мажоранты можно использовать другие (кроме ограниченности) свойства заданной функции  $g(\mathbf{u})$ . В следующем примере использовано свойство выпуклости (в одномерном случае).

**Пример 1.14.** Рассмотрим случайную величину  $\xi$ , имеющую плотность распределения

$$f(u) = \frac{2 \arcsin u}{\pi - 2}, \quad 0 < u < 1 \quad (1.95).$$

Функция (1.95) не является плотностью элементарного распределения, т. к. интегрирование по частям дает

$$\int_0^\xi f(u) du = \frac{2}{\pi - 2} (\xi \arcsin \xi + \sqrt{1 - \xi^2} - 1);$$

к слову, последнее соотношение обосновывает правильность нормирующей константы  $2/(\pi - 2)$  плотности (1.95). Функция (1.95) выпукла вниз и возрастает ( $f'(u) > 0$ ,  $f''(u) > 0$  при  $0 < u < 1$ ). Из этого следует, что  $g(u) = \arcsin u \leq g_1(u) = (\pi/2)u$ . Несложно вычислить  $\bar{G} = (\pi - 2)/2$ ,  $\bar{G}_1 = \int_0^1 g_1(u) du = \pi/4$ . Таким образом,  $f_1(u) = 2u$ . Отсюда получаем следующий алгоритм метода исключения:

1. Согласно плотности  $f_1(u)$  методом обратной функции распределения получаем выборочное значение  $\xi_1 = \sqrt{\alpha_1}$  (см. пример 1.5). Реализуем также  $\eta = \alpha_2 \pi \sqrt{\alpha_1}/2$ .

2. Проверяем неравенство  $\eta < g(\xi_1)$  или  $\pi \xi_1 \alpha_2 < 2 \arcsin \xi_1$ . Если это неравенство выполнено, то в качестве выборочного значения случайной величины  $\xi$  принимаем  $\xi = \xi_1$ , иначе повторяем п. 1 и т. д.

Трудоёмкость этого алгоритма пропорциональна величине  $s = \bar{G}_1/\bar{G} = \pi/(2(\pi - 2)) \approx 1,38$ .

Важное обобщение примера 1.14 связано с использованием кусочно-линейных мажорант, когда на каждом полуинтервале  $\Delta_i$  удается построить линейную функцию  $g_1^{(i)}(u) = A_i u + B_i$  такую, что  $g(u) \leq g_1^{(i)}(u)$  при  $u \in \Delta_i$ . Если  $g_1(u) = g_1^{(i)}(u)$  при  $u \in \Delta_i$ , то на первом этапе алгоритма 1.24 требуется моделировать выборочное значение случайной величины  $\xi_1$  согласно кусочно-линейной плотности (особенности такого моделирования подробно разобраны в подразд. 1.8.1).

**1.7.4. Двусторонний метод исключения.** Следующая модификация алгоритма 1.24 эффективна в достаточно распространенном случае, когда требуется моделировать выборочное значение случайного вектора  $\xi$ , плотность которого пропорциональна функции  $g(\mathbf{u})$ , вычисление значений которой весьма трудоёмко. В этом случае помимо мажоранты  $g_1(\mathbf{u})$  строим миноранту  $g_2(\mathbf{u})$  такую, что

$$g_2(\mathbf{u}) \leq g(\mathbf{u}) \leq g_1(\mathbf{u}); \quad \mathbf{u} \in U. \quad (1.96)$$

**Алгоритм 1.26.** 1). Реализуем выборочное значение  $\xi_1 = \psi_1(\bar{\alpha}_1)$  согласно плотности (1.89), а также значение  $\eta = \alpha_2 g_1(\xi_1)$ .

2). Вместо неравенства (1.91) проверяем сначала соотношение  $\eta < g_2(\xi_1)$ . Если оно выполнено, то пара  $(\xi_1, \eta)$  принадлежит "подграфику" функции  $g_2(\mathbf{u})$ , а значит,

и области  $G$ . Тогда можно положить, что выборочное значение случайного вектора  $\xi$  равно  $\xi = \xi_1$ . В случае же  $\eta \geq g_2(\xi_1)$  проверяем неравенство (1.91). Если оно выполнено, то  $\xi = \xi_1$ , иначе повторяется пункт 1 данного алгоритма и т. д.

В связи с соотношением (1.96) алгоритм 1.26 называют *двусторонним методом исключения*. В случае, когда все три функции из неравенства (1.96) близки, а миноранта  $g_2(\mathbf{u})$  и мажоранта  $g_1(\mathbf{u})$  легко вычислимы, проверка (1.91), связанная с трудоемким вычислением значения  $g(\xi_1)$  будет происходить относительно редко, и двусторонний метод может дать существенный выигрыш по сравнению с "односторонним" алгоритмом 1.24. В качестве функций  $g_2(\mathbf{u})$  и  $g_1(\mathbf{u})$  часто используются кусочно-постоянные и кусочно-линейные приближения снизу и сверху для функции  $g(\mathbf{u})$ .

**1.7.5. Моделирование усеченных распределений.** Рассмотрим случайный вектор  $\xi_1$ , распределенный в области  $V \in R^l$  согласно плотности  $f_1(\mathbf{u})$ .

**Определение 1.3.** Случайный вектор  $\xi$  имеет усеченное распределение вектора  $\xi_1$ , если он распределен в подобласти  $U \subset V$  и его плотность распределения  $f(\mathbf{u})$  пропорциональна в  $U$  плотности  $f_1(\mathbf{u})$ :

$$f(\mathbf{u}) = H f_1(\mathbf{u}) = \frac{f_1(\mathbf{u})}{\int_U f_1(\mathbf{w}) d\mathbf{w}}, \quad \mathbf{u} \in U \subset V. \quad (1.97)$$

В случае, когда имеется эффективный алгоритм моделирования выборочного значения случайного вектора  $\xi_1$ , можно использовать следующий алгоритм исключения для моделирования выборочного значения вектора  $\xi$ , имеющего усеченное распределение (1.97).

**Алгоритм 1.27.** 1). Реализуем выборочное значение случайного вектора  $\xi_1$  в области  $V$  согласно плотности  $f_1(\mathbf{u})$ .

2). Если  $\xi_1 \in U$ , то  $\xi = \xi_1$ , иначе повторяется пункт 1 данного алгоритма и т. д.

Несложно понять, что алгоритм 1.27 является частным случаем алгоритма 1.24 в области  $V$ , в котором для функции (1.97) рассмотрена мажоранта  $H f_1(\mathbf{u})$  при  $\mathbf{u} \in V$  (при  $\mathbf{u} \in U$  имеем  $f(\mathbf{u}) = H f_1(\mathbf{u})$ , а при  $\mathbf{u} \in V \setminus U$  выполнено  $f(\mathbf{u}) = 0 < H f_1(\mathbf{u})$ ). Моделирование значения случайной величины  $\eta$  не требуется (см. п. 1 алгоритма 1.24), т. к. при  $\xi_1 \in U$  неравенство (1.91) заведомо выполнено, а при  $\xi_1 \in V \setminus U$  – заведомо не выполнено. Трудоемкость алгоритма 1.27 пропорциональна величине  $s = H$  (см. соотношения (1.92), (1.97)).

Заметим, что во многих случаях для моделирования случайного вектора  $\xi$  с плотностью вида (1.97) удастся построить более эффективную, чем алгоритм 1.27, численную процедуру, не связанную с включением области  $U$  в множество  $V$ .

**Пример 1.15.** Рассмотрим случайную величину  $\xi$ , имеющую плотность распределения

$$f(u) = \frac{\lambda e^{-\lambda u}}{1 - e^{-\lambda A}}, \quad 0 < u < A, \quad \lambda > 0. \quad (1.98).$$

С учетом примера 1.4 и определения 1.3, распределение (1.98) можно назвать *усеченным экспоненциальным распределением*. Это распределение широко используется в приложениях (например, оно позволяет реализовать так называемое *блуждание без вылета* при моделировании переноса частиц).

Алгоритм 1.27 здесь выглядит следующим образом: реализуем выборочное значение случайной величины  $\xi_1$  согласно формуле (1.53):  $\xi_1 = -\ln \alpha / \lambda$ ; если  $\xi_1 \leq A$ , то в качестве выборочного значения случайной величины  $\xi$  выбираем  $\xi = \xi_1$ , иначе снова реализуем  $\xi_1$  и т. д. Трудоемкость этого алгоритма пропорциональна величине  $s = 1/(1 - e^{-\lambda A})$ . При малых  $A$  это значение может быть достаточно большим.

С другой стороны, непосредственно решая уравнение (1.48) метода обратной функции распределения, получаем моделирующую формулу:  $\xi = -(1/\lambda) \ln(1 - \alpha(1 - e^{-\lambda A}))$ . Последнее соотношение ненамного сложнее формулы (1.53), и не требует процедуры исключения, как в алгоритме 1.27.

## 1.8. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ И КУСОЧНО-ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ ПЛОТНОСТЕЙ

**1.8.1. Моделирование кусочно-постоянной и кусочно-линейной плотностей.** Полиномиальные и кусочно-полиномиальные плотности используются во многих приложениях численного статистического моделирования. В число этих приложений входят алгоритмы, связанные с приближением сложных ("немоделируемых") плотностей, метод выборки по важности (см. разд. 3.2), алгоритмы метода исключения с кусочно-полиномиальными мажорантами (см. разд. 1.7), алгоритмы моделирования порядковых статистик (см. подразд. 1.8.4), методы моделирования случайных параметров с использованием гистограмм и полигонов частот и многие другие. Для некоторых из перечисленных алгоритмов необходимо построение эффективных методов моделирования случайных величин с кусочно-постоянными и кусочно-линейными плотностями.

Рассмотрим случайную величину  $\xi_1$ , имеющую кусочно-постоянную плотность распределения

$$f_1(u) = v_i, \quad x_{i-1} \leq u < x_i; \quad i = 1, \dots, M; \quad a = x_0 < x_1 < \dots < x_M = b. \quad (1.99)$$

Значения  $\{v_i\}$  в формуле (1.99) положительны. Рассмотрим методы численной реализации выборочного значения случайной величины  $\xi_1$ . Соотношение (1.48) метода обратной функции распределения  $\int_a^{\xi_1} f_1(u) du = \alpha$  может быть переписано в виде

$$\sum_{k=1}^{N_1} v_k (x_k - x_{k-1}) - v_{N_1} (x_{N_1} - \xi_1) = \alpha, \quad \text{где} \quad N_1 = \min \left( n_1 : \sum_{k=1}^{n_1} v_k (x_k - x_{k-1}) \geq \alpha \right)$$

и, следовательно,

$$\xi_1 = x_{N_1} + Q_1/v_{N_1}, \quad Q_1 = \left( \alpha - \sum_{k=1}^{N_1} v_k (x_k - x_{k-1}) \right). \quad (1.100)$$

Соотношение (1.100) порождает следующий простой алгоритм моделирования выборочного значения случайной величины  $\xi_1$ .

**Алгоритм 1.28.** *Реализуем значение  $q_1 := \alpha$  и полагаем  $n_1 := 1$ . Производим переприсваивание*

$$q_1 := q_1 - v_{n_1} (x_{n_1} - x_{n_1-1}). \quad (1.101)$$

*Если новое значение  $q_1$  не положительно, то полагаем  $\xi_1 = x_{n_1} + q_1/v_{n_1}$ , иначе производим переприсваивания  $n_1 := n_1 + 1$  и (1.101) и вновь производим проверку величины  $q_1$  на положительность и т.д.*

Рассмотрим также случайную величину  $\xi_2$  с кусочно-линейной плотностью

$$f_2(u) = v_{i-1} + (u - x_{i-1}) \frac{\Delta v_i}{\Delta x_i}, \quad u \in [x_{i-1}, x_i], \quad \Delta x_i = x_i - x_{i-1}, \quad \Delta v_i = v_i - v_{i-1}; \quad (1.102)$$

здесь, как и в соотношении (1.99), величины  $v_i$  неотрицательны. Для численной реализации выборочного значения случайной величины  $\xi_2$  можно рассмотреть метод обратной функции распределения (см. соотношение (1.48)). Соответствующее уравнение

$\int_a^{\xi_2} f_2(u) du = \alpha$  можно переписать в виде

$$\sum_{k=1}^{N_2} \frac{(v_{k-1} + v_k)\Delta x_k}{2} - \frac{(x_{N_2} - \xi_2)(f_2(\xi_2) + v_{N_2})}{2} = \alpha, \quad (1.103)$$

где  $N_2 = \min\left(n_2 : \sum_{k=1}^{n_2} \frac{(v_{k-1} + v_k)\Delta x_k}{2} \geq \alpha\right)$ . Заметим, что  $f_2(\xi_2) = v_{N_2} + (\xi_2 - x_{N_2})\Delta v_{N_2}/\Delta x_{N_2}$ . Обозначим также  $Q_2 = \alpha - \sum_{k=1}^{N_2} (v_{k-1} + v_k)\Delta x_k/2$ . Тогда соотношение (1.103) примет вид

$$\left(2v_{N_2} + (\xi_2 - x_{N_2})\frac{\Delta v_{N_2}}{\Delta x_{N_2}}\right)(\xi_2 - x_{N_2}) = 2Q_2, \quad \text{или} \quad \frac{\Delta v_{N_2}}{\Delta x_{N_2}}(\xi_2 - x_{N_2})^2 + 2v_{N_2}(\xi_2 - x_{N_2}) - 2Q_2 = 0,$$

$$\text{или} \quad \xi_2 - x_{N_2} = \frac{-v_{N_2} \pm \sqrt{v_{N_2}^2 + 2Q_2 \Delta v_{N_2}/\Delta x_{N_2}}}{\Delta v_{N_2}/\Delta x_{N_2}}.$$

Знак перед радикалом должен быть "+", так как при  $Q_2 = 0$  должно выполняться  $\xi_2 = x_{N_2}$  (см. соотношения (1.102), (1.103)), а при  $Q_2 = -(v_{N_2} + v_{N_2-1})\Delta v_{N_2}/2$  должно быть  $\xi_2 = x_{N_2-1}$ . Следовательно,

$$\xi_2 = x_{N_2} + \frac{-v_{N_2}\Delta x_{N_2} + \sqrt{v_{N_2}^2 \Delta^2 x_{N_2} + 2Q_2 \Delta v_{N_2} \Delta x_{N_2}}}{\Delta v_{N_2}}. \quad (1.104)$$

Таким образом, алгоритм реализации выборочного значения случайной величины  $\xi_2$  состоит в следующем.

**Алгоритм 1.29.** Реализуем значение  $q_2 := \alpha$  и полагаем  $n_2 := 1$ . Производим переприсваивание

$$q_2 := q_2 - (v_{n_2-1} + v_{n_2})(x_{n_2} - x_{n_2-1})/2. \quad (1.105)$$

Если новое значение  $q_2$  не положительно, то вычисляем значение  $\xi_2$  по формуле (1.104) для  $Q_2 = q_2$  и  $N_2 = n_2$ , иначе производим переприсваивания  $n_2 := n_2 + 1$  и (1.105) и вновь производим проверку величины  $q_2$  на положительность и т.д.

Очевидно, что трудоемкость алгоритмов 1.28 и 1.29 возрастает с ростом  $M$  из-за необходимости реализации вычитаний (1.101), (1.105). Для построения модификаций, позволяющих преодолеть это обстоятельство, заметим, что плотности (1.99) и (1.102) являются составными (см. подразд. 1.4.3 и 1.6.4). По аналогии с соотношением (1.83) они могут быть представлены в виде

$$f_1(u) = \sum_{i=1}^M p_i^{(1)} f_i^{(1)}(u) \chi_{[x_{i-1}, x_i)}(u); \quad p_i^{(1)} = v_i(x_i - x_{i-1}); \quad f_i^{(1)}(u) \equiv 1/(x_i - x_{i-1}); \quad (1.106)$$

$$f_2(u) = \sum_{i=1}^M p_i^{(2)} f_i^{(2)}(u) \chi_{[x_{i-1}, x_i)}(u); \quad p_i^{(2)} = (v_{i-1} + v_i)(x_i - x_{i-1})/2; \quad f_i^{(2)}(u) = A_i u + B_i; \quad (1.107)$$

$$A_i = \frac{2\Delta v_i}{(v_{i-1} + v_i)(\Delta x_i)^2}; \quad B_i = \frac{2(v_{i-1}x_i - v_i x_{i-1})}{(v_{i-1} + v_i)(\Delta x_i)^2}.$$

Согласно утверждению 1.13, метод обратной функции распределения для плотностей вида (1.106), (1.107) совпадает с модифицированным методом суперпозиции (см. алгоритм 1.21). Таким образом, алгоритмы 1.28 и 1.29 могут быть переписаны в следующем виде

**Алгоритм 1.30.** 1). Реализовав выборочное значение  $\alpha$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{p_i^{(1)} = v_i(x_i - x_{i-1})\}$ , используя алгоритм 1.1 или его модификации, выбираем номер  $N'_1$  и полагаем  $N_1 = N'_1 + 1$ .

2). Реализуем выборочное значение случайной величины  $\xi_1$  по формуле  $\xi_1 = x_{N_1} + Q_1/v_{N_1}$ , полученной с помощью решения уравнения

$$\int_{x_{N_s-1}}^{\xi_s} f_{N_s}^{(s)}(u) du = \beta_s; \quad \beta_s = (Q_s + p_{N_s}^{(s)})/p_{N_s}^{(s)} \quad (1.108)$$

для  $s = 1$ .

**Алгоритм 1.31.** 1). Реализовав выборочное значение  $\alpha$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{p_i^{(2)} = (v_{i-1} + v_i)(x_i - x_{i-1})/2\}$ , используя алгоритм 1.1 или его модификации, выбираем номер  $N'_2$  и полагаем  $N_2 = N'_2 + 1$ .

2). Реализуем выборочное значение случайной величины  $\xi_2$  по формуле (1.104), полученной с помощью решения уравнения (1.108) для  $s = 2$ .

Согласно замечанию 1.4, такая трактовка алгоритмов 1.28 и 1.29 позволяет обоснованно применять различные модификации алгоритма 1.1 (см. первые пункты алгоритмов 1.30, 1.31) – метод Уолкера, квантильный метод и др. (см. разд. 1.3).

**1.8.2. Использование кусочно-постоянных плотностей распределения для обоснования алгоритмов моделирования дискретных целочисленных случайных величин.** Как показано в разделах 1.2 и 1.3, ключевым моментом реализации выборочного значения дискретной случайной величины является определение номера из набора  $\{1, 2, \dots, N\}$  по полученному значению  $\alpha$  стандартного случайного числа и набору вероятностей  $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$ . Другими словами, речь идет о моделировании целочисленной случайной величины  $m$  с распределением  $\mathbf{P}(m = i) = p_i$ . Для обоснования модификаций основного алгоритма 1.1 (в частности, метода Уолкера – см. алгоритм 1.6, и метода 'мажорантной частоты' – см. алгоритм 1.9) целесообразно рассмотреть непрерывную случайную величину  $\xi$ , принимающую значения на интервале  $(1, N + 1)$ , с кусочно-постоянной плотностью распределения

$$f(u) = \begin{cases} p_1 & \text{при } u \in (1, 2), \\ p_2 & \text{при } u \in [2, 3), \\ \dots & \\ p_N & \text{при } u \in [N, N + 1), \\ 0 & \text{при } u \notin (1, N + 1), \end{cases} \quad (1.109)$$

названной в подразд. 1.3.3 "диаграммой". Заметим, что

$$\mathbf{P}(\xi \in [i, i + 1)) = \int_i^{i+1} f(u) du = p_i \quad \text{и} \quad m = [\xi]; \quad (1.110)$$

здесь  $[A]$  обозначает целую часть числа  $A$ .

При сделанных предположениях несложно увидеть, что в алгоритме 1.9 выбор номера  $m$  соответствует простейшей модификации мажорантного метода исключения – методу Неймана (см. алгоритм 1.25), где в качестве мажоранты функции  $f(u)$  берется постоянная функция  $g_1(u) \equiv \max\{p_1, \dots, p_N\}$  при  $u \in (1, N + 1)$ . Другими словами, алгоритм 1.9 можно переписать в следующем виде:

1). Реализуем  $\xi_1 = \alpha_1 N + 1$  и  $\eta = \alpha_2 \max\{p_1, \dots, p_N\}$ .

2). Если  $\eta \leq f(\xi_1)$ , то  $\xi = \xi_1$  и  $m = [\xi_1]$ , иначе повторяем п. 1 и т.д.

Аналогичную трактовку допускает метод Уолкера (алгоритм 1.6). Здесь происходит розыгрыш точки ( $\xi_1 = \alpha_1 N + 1$ ;  $\eta_1 = \alpha_2$ ), равномерно распределенной в области



$A = \{1 < u < N + 1; 0 < v < 1/N\}$  единичной площади, причем суммарная вероятность попадания этой точки в подстолбцы  $F_m$  и  $E_m \setminus F_m$ , соответствующие номеру  $i$ , равна  $p_i$ . Такой розыгрыш эквивалентен моделированию точки  $(\xi, \eta)$ , равномерно распределенной в "подграфике"  $G$  функции  $g(u) = f(u)$ , т.к.  $\bar{G} = 1$  и площадь столбца диаграммы (1.109)  $I_i = \{i \leq u < i + 1; 0 < v < p_i\}$ , соответствующего  $i$ -му номеру, равна  $S_{I_i} = p_i$  (см. соотношение (1.110)). В силу утверждения 1.14, компонента  $\xi$  распределена согласно плотности (1.109). Тогда из соотношения  $m = [\xi]$  следует, что в методе Уолкера моделируется требуемое дискретное распределение.

**1.8.3. Основные методы моделирования полиномиальных плотностей.** В подразд. 1.4.1 была рассмотрена случайная величина  $\xi$ , имеющая полиномиальное распределение с плотностью

$$f(u) = \sum_{i=0}^A a_i u^i, \quad 0 < u < 1, \quad A = N \vee +\infty \quad (1.111)$$

(см. также формулу (1.50)). Для реализации выборочного значения случайной величины  $\xi$  используют различные алгоритмы в зависимости от вида коэффициентов  $\{a_i\}$ . Так, метод обратной функции распределения (алгоритм 1.14) заведомо реализуем для  $A = 0$  (при этом  $f(u) \equiv 1$ ,  $0 < u < 1$  и  $\xi = \alpha$ ), для  $A = 1$  (при этом  $\xi = (-a_0 + \sqrt{a_0^2 + 2a_1\alpha})/a_1$ ), а также для случая  $a_i = (i + 1)$  и  $a_j = 0$  при  $j \neq i$ ; при этом

$$f(u) = (i + 1)u^i \quad \text{и} \quad \xi = \alpha^{1/(i+1)} = {}^{i+1}\sqrt{\alpha}. \quad (1.112)$$

В общем случае (при  $A > 1$  и при наличии достаточно большого числа ненулевых коэффициентов  $a_i$ ) попытка применить метод обратной функции распределения приводит к уравнению  $\sum_{i=0}^A a_i \xi^{i+1}/(i + 1) = \alpha$ , которое, как правило, неразрешимо относительно  $\xi$ , и нужно использовать специальные алгоритмы моделирования (метод суперпозиции, метод исключения и др.).

Для случая  $a_i \geq 0$ , в частности, удается представить плотность (1.111) в виде

$$f(u) = \sum_{i=0}^A p_i f_i(u); \quad p_i = a_i/(i + 1); \quad f_i(u) = (i + 1)u^i, \quad (1.113)$$

и построить следующий метод суперпозиции (см. алгоритм 1.20).

**Алгоритм 1.32.** 1). Реализовав выборочное значение  $\alpha_1$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{a_i/(i + 1)\}$ , используя алгоритм 1.1 или его модификации, выбираем номер  $m$ .

2). Реализуем выборочное значение случайной величины  $\xi$  согласно плотности  $f_m(u) = (m + 1)u^m$  по формуле вида (1.112):  $\xi = {}^{m+1}\sqrt{\alpha_2}$ .

В случае наличия отрицательных чисел среди коэффициентов  $\{a_i\}$  величины  $\{p_i\}$  из соотношения (1.113) нельзя считать вероятностями, так как они не являются положительными числами (хотя соотношение  $\sum_{i=0}^A p_i = 1$  выполнено в любом случае). Положим  $A = N < \infty$ . Для функции (1.111) можно построить мажоранту

$$f(u) \leq g_1(u) = \sum_{i=0}^N a_i^+ u^i, \quad (1.114)$$

где  $a_i^+ = a_i$  при  $a_i \geq 0$  и  $a_i^+ = 0$  при  $a_i < 0$ . Тогда можно предложить следующий метод исключения (см. алгоритм 1.24).

**Алгоритм 1.33.** 1). Реализуем выборочное значение случайной величины  $\xi_1$ , распределенной с плотностью

$$\tilde{f}_1(u) = \sum_{i=0}^N p_i^+ f_i(u), \quad p_i^+ = \frac{a_i^+}{(i+1) \int_0^1 g_1(w) dw} = \frac{a_i^+}{(i+1) \sum_{j=0}^N (a_j^+ / (j+1))},$$

согласно алгоритму 1.32 (при этом используются два стандартных случайных числа  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ ).

2). Реализуем также значение  $\eta = \alpha_3 g_1(\xi_1)$ .

3). Проверяем неравенство  $\eta < f(\xi_1)$ . Если оно выполнено, то полагаем, что выборочное значение случайной величины  $\xi$  равно  $\xi = \xi_1$ , иначе повторяем пункты 1 и 2 и т.д.

Трудоёмкость этого алгоритма (среднее число повторений пунктов 1 и 2 до выполнения неравенства  $\eta < f(\xi_1)$ ) пропорциональна величине  $s_1 = \int_0^1 g_1(w) dw = \sum_{j=0}^N (a_j^+ / (j+1))$  (см. соотношение (1.92)).

Выбор мажоранты вида (1.114) неоднозначен. Можно, например, рассмотреть функцию  $g_2(u) = \sum_{i=0}^N |a_i| u^i$  и использовать для нее алгоритм 1.33 с заменой  $\xi_1$  на  $\xi_2$ . Такой выбор мажоранты заведомо хуже, чем (1.114), т.к.  $g_2(u) > g_1(u)$  и

$$s_2 = \int_0^1 g_2(w) dw = \sum_{j=0}^N (|a_j| / (j+1)) > s_1.$$

Однако несложно построить пример, в котором мажоранта (1.114) не является лучшей.

**Пример 1.16.** Рассмотрим случайную величину  $\xi$  с квадратичной плотностью распределения  $f(u) = 6u - 6u^2$ ,  $0 < u < 1$ . В этом случае  $g_1(u) = 6u$  и трудоёмкость соответствующего алгоритма 1.33 пропорциональна величине  $s_1 = \int_0^1 6w dw = 3$ . С другой стороны, для простейшего метода Неймана (алгоритм 1.25) с постоянной мажорантой

$$g_3(u) \equiv \max_{u \in (0,1)} f(u) = f(1/2) = 3/2$$

имеем  $s_3 = 3/2$ . Эта величина в два раза меньше, чем  $s_1$ .

#### 1.8.4. Использование порядковых статистик.

**Определение 1.4.** Пусть имеется набор  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$  из  $n$  независимых одинаково распределенных случайных величин, а  $\xi_1^{(n)}, \xi_2^{(n)}, \dots, \xi_n^{(n)}$  – те же случайные величины, расположенные в порядке возрастания. Случайная величина  $\xi_r^{(n)}$  называется  $r$ -й порядковой статистикой.

В частности,  $\xi_1^{(n)} = \min\{\xi_1, \dots, \xi_n\}$  и  $\xi_n^{(n)} = \max\{\xi_1, \dots, \xi_n\}$ . Справедливо следующее

**Утверждение 1.16.** Пусть случайные величины  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$  имеют функцию распределения  $F(u)$  и плотность  $f(u)$ . Тогда  $r$ -я порядковая статистика  $\xi_r^{(n)}$  имеет плотность распределения

$$f_r^{(n)}(u) = n C_{n-1}^{r-1} F^{r-1}(u) (1 - F(u))^{n-r} f(u), \quad (1.115)$$

где  $C_n^k = n! / (k!(n-k)!)$  – число сочетаний из  $n$  элементов по  $k$ .

Для получения выборочных значений случайной величины  $\xi_r^{(n)}$  можно использовать следующую процедуру. Предполагаем, что имеется эффективный алгоритм выбора максимального элемента  $A_M$  и номера  $M$  соответствующей ячейки массива  $(a_1, \dots, a_r)$ , состоящего из  $r$  компонент. Здесь годится, в частности, такой алгоритм: полагаем сначала  $A_M := a_1$ ,  $M := 1$  и последовательно для  $s = 2, \dots, r$  проверяем неравенство  $a_s > A_M$ ; если оно выполнено, то делаем переприсваивания  $A_M := a_s$ ,  $M := s$ .

**Алгоритм 1.34.** 1). Реализуем  $r$  выборочных значений  $\Xi = (\xi_1, \dots, \xi_r)$  случайной величины  $\xi$  согласно функции распределения  $F(u)$  (или плотности распределения  $f(u)$ ), параллельно выбирая максимальный элемент  $A_M$  получаемого массива  $\Xi$ . Полагаем  $\xi_r^{(n)} := A_M$ .

2). Для  $s = r + 1, \dots, n$  реализуем выборочные значения  $\xi_s$ . Если  $\xi_s < A_M$ , то заменяем  $M$ -ю компоненту массива  $\Xi$ :  $\xi_M := \xi_s$  и находим максимальный элемент  $A_M$  и номер  $M$  для преобразованного массива  $\Xi$ . Полагаем  $\xi_r^{(n)} := A_M$ .

В ряде частных случаев алгоритм 1.34 допускает эффективные модификации. Например, при  $r = n$  не нужен пункт 2, а при  $r = 1$  требуется искать минимум из полного набора выборочных значений  $(\xi_1, \dots, \xi_n)$ .

В частном случае, когда  $\xi_i = \alpha_i$ , плотность порядковой статистики  $\alpha_r^{(n)}$  независимой выборки объема  $n$  из совокупности с равномерным распределением в интервале  $(0, 1)$  имеет вид

$$f_r^{(n)}(u) = n C_{n-1}^{r-1} u^{r-1} (1-u)^{n-r}, \quad u \in (0, 1), \quad (1.116)$$

так как  $F(u) = u$ ,  $f(u) \equiv 1$  (см. соотношения (1.1), (1.2)). Алгоритм 1.34 для этого случая дает специальный метод моделирования полиномиальной плотности (1.111), допускающей представление (1.116).

Заметим, что плотность  $f(u) = (i+1)u^i$ ,  $0 < u < 1$  из (1.112) является частным случаем формулы (1.116) для  $n = r = i + 1$ . Таким образом, помимо формулы метода обратной функции распределения  $\xi = \sqrt[i+1]{\alpha}$  (см. соотношение (1.112)) можно рассмотреть формулу, порождаемую алгоритмом 1.34:  $\xi = \max\{\alpha_1, \dots, \alpha_{i+1}\}$ . Следует, однако, отметить, что для современных компьютеров с математическими сопроцессорами (для которых, в частности, вычисление корня  $(i+1)$ -й степени в формуле (1.112), происходит достаточно быстро) и для современных языков программирования (типа СИ++) формула (1.112) является более эффективной (экономичной).

**1.8.5. Моделирование распределений с плотностями, являющимися B-сплайнами.** В теории приближения функций широко применяется следующее понятие.

**Определение 1.5.** B-сплайном порядка  $r$  называется  $(r+1)$ -й член  $\beta^{(r)}(u)$  рекуррентной последовательности  $\beta^{(i+1)}(u) = \beta^{(0)} * \beta^{(i)}(u)$ , где

$$\beta^{(0)}(u) = \begin{cases} 1 & \text{при } -1/2 \leq u < 1/2; \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1.117)$$

где знак  $*$  обозначает свертку

$$g_1 * g_2(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(w) g_2(u-w) dw.$$

Несложно понять, что B-сплайн представляют собой кусочно-полиномиальные функции  $r$ -й степени, причем для нечетных  $r$  соответствующие узлы являются целыми точками, симметрично расположенными около нуля. Наиболее часто используются сплайны первого порядка (или "функция-крышка")

$$\beta^{(1)}(u) = \begin{cases} 1+u & \text{для } -1 \leq u \leq 0, \\ 1-u & \text{для } 0 \leq u \leq 1, \\ 0 & \text{иначе} \end{cases}$$

и третьего порядка

$$\beta^{(3)}(u) = \begin{cases} 0 & \text{при } u > 2; \\ (2-u)^3/6 & \text{при } 1 \leq u \leq 2; \\ (1+3(1-u) + 3(1-u)^2 - 3(1-u)^3)/6 & \text{при } 0 \leq u \leq 1; \\ \beta^{(3)}(-u) & \text{при } u \leq 0. \end{cases}$$

Будучи включенными в конструкции, используемые для приближения функций, В-сплайны позволяют получить хорошие свойства аппроксимации и особенно устойчивости соответствующего приближения. Однако есть еще одно замечательное свойство функций  $\beta^{(r)}(u)$ , позволяющее использовать их в алгоритмах метода Монте-Карло.

**Утверждение 1.17.** *Функция  $\beta^{(r)}(u)$  является плотностью распределения случайной величины*

$$\xi^{(r)} = \alpha_1 + \dots + \alpha_r + \alpha_{r+1} - (r+1)/2,$$

где  $\alpha_i$  – независимые стандартные случайные величины, равномерно распределенные в  $(0, 1)$ .

**Доказательство.** Для начала напомним следующий вероятностный факт. Если имеются две независимых случайных величины  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  с плотностями распределения  $f_1(u)$  и  $f_2(u)$  соответственно, то случайная величина  $\zeta = \gamma_1 + \gamma_2$  имеет плотность распределения  $f_\zeta(u) = f_1 * f_2(u)$ .

Теперь докажем утверждение 1.17 по индукции. Для  $r = 0$  из формулы (1.117) следует, что функция  $\beta^{(0)}(u)$  является плотностью распределения случайной величины  $\xi^{(0)} = \alpha_1 - 1/2$ . Предположим, что для  $r = k$  выполнено, что  $\beta^{(k)}(u)$  является плотностью распределения случайной величины  $\xi^{(k)}$ . Заметим, что  $\xi^{(k+1)} = (\alpha_{k+2} - 1/2) + \xi^{(k)}$ . Полагая  $\gamma_1 = \alpha_{k+2} - 1/2$  и  $\gamma_2 = \xi^{(k)}$ , из сформулированного утверждения о свертке плотностей получаем, что случайная величина  $\zeta = \xi^{(k+1)}$  имеет плотность распределения  $\beta^{(0)} * \beta^{(k)}(u) = \beta^{(k+1)}(u)$ . Таким образом, индуктивный переход обоснован, и утверждение 1.17 верно для любого  $r$ .  $\square$

## 1.9. МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАММА- И БЕТА-РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

### 1.9.1. Основные алгоритмы моделирования гамма-распределения.

**Определение 1.6.** *Случайная величина  $\xi_{\lambda,\nu}^{(\gamma)}$  имеет гамма-распределение Пирсона, если ее плотность распределения представима в виде*

$$f_{\lambda,\nu}^{(\gamma)}(u) = \frac{\lambda^\nu u^{\nu-1} e^{-\lambda u}}{\Gamma(\nu)}, \quad u > 0; \quad \lambda > 0, \quad \nu > 0; \quad (1.118)$$

здесь  $\Gamma(\nu) = \int_0^{+\infty} w^{\nu-1} e^{-w} dw$  – гамма-функция.

Заметим, что при  $\nu = 1$  соотношение (1.118) представляет собой знакомую нам по подразд. 1.4.1 плотность показательного распределения:  $f_{\lambda,1}^{(\gamma)}(u) = \lambda e^{-\lambda u}$ ,  $u > 0$ ,  $\lambda > 0$  (см. пример 1.4) с моделирующей формулой

$$\xi_{\lambda,1}^{(\gamma)} = -\frac{\ln \alpha}{\lambda} \quad (1.119)$$

(см. соотношение (1.53)). При целом положительном  $\nu = n > 1$  соотношение (1.118) иногда называют *распределением Эрланга*, и, учитывая, что для натуральных  $\nu = n$  выполнено  $\Gamma(n) = (n-1)!$ , плотность (1.118) в этом случае имеет вид

$$f_{\lambda,n}^{(\gamma)}(u) = \frac{\lambda^n u^{n-1} e^{-\lambda u}}{(n-1)!}, \quad n > 1. \quad (1.120)$$

При  $\lambda = 1/2$ ,  $\nu = l/2$  и целом положительном  $l$  соотношение (1.118) является плотностью  $\chi^2$ -распределения с  $l$  степенями свободы:

$$f_{\chi_l^2}(u) = f_{1/2,l/2}^{(\gamma)}(u) = \frac{u^{l/2-1} e^{-u/2}}{2^{l/2} \Gamma(l/2)}. \quad (1.121)$$

При моделировании случайной величины  $\xi_{\lambda,\nu}^{(\gamma)}$  широко используется следующее свойство гамма-распределения.

**Утверждение 1.18.** *Если случайные величины  $\xi_{\lambda,\nu}^{(\gamma)}$  и  $\xi_{\lambda,\mu}^{(\gamma)}$  независимы, то  $\xi_{\lambda,\nu}^{(\gamma)} + \xi_{\lambda,\mu}^{(\gamma)} = \xi_{\lambda,\nu+\mu}^{(\gamma)}$ ; равенство означает здесь совпадение распределений соответствующих случайных величин.*

Сформулированное свойство тесно связано со следующим понятием.

**Определение 1.7.** *Распределение случайной величины  $\zeta$  называется безгранично делимым, если для любого натурального  $n$  справедливо представление  $\zeta = \zeta_1^{(n)} + \dots + \zeta_n^{(n)}$ , где  $\zeta_j^{(n)}$ ,  $j = 1, \dots, n$  – независимые и одинаково распределенные случайные величины.*

Индукцией по  $n$  несложно показать, что из утверждения 1.18 следует безграничная делимость гамма-распределения (1.118): здесь следует взять  $\zeta_j^{(n)} = \xi_{\lambda,\nu/n}^{(\gamma)}$ . Свойство безграничной делимости обуславливает достаточно широкое применение гамма-распределения при моделировании случайных векторов и случайных функций.

Утверждение 1.18 позволяет представить случайную величину  $\xi_{\lambda,\nu}^{(\gamma)}$  в виде суммы

$$\xi_{\lambda,\nu}^{(\gamma)} = \xi_{\lambda,\nu_1}^{(\gamma)} + \xi_{\lambda,\nu_2}^{(\gamma)}, \quad (1.122)$$

где  $\nu_1 = [\nu]$  – целая часть, а  $\nu_2 = \{\nu\}$  – дробная часть параметра  $\nu$ .

Для моделирования первого слагаемого суммы (1.122) можно еще раз использовать свойство безграничной делимости гамма-распределения и представить  $\xi_{\lambda,\nu_1}^{(\gamma)}$  в виде суммы из  $\nu_1$  слагаемых:

$$\xi_{\lambda,\nu_1}^{(\gamma)} = (\xi_{\lambda,1}^{(\gamma)})_1^{(\nu_1)} + \dots + (\xi_{\lambda,1}^{(\gamma)})_{\nu_1}^{(\nu_1)}.$$

Согласно примеру 1.4 и соотношениям (1.53) и (1.119), для получения выборочного значения случайной величины  $\xi_{\lambda,\nu_1}^{(\gamma)}$  можно предложить формулу

$$\xi_{\lambda,\nu_1}^{(\gamma)} = \left(-\frac{\ln \alpha_1}{\lambda}\right) + \dots + \left(-\frac{\ln \alpha_{\nu_1}}{\lambda}\right) = -\frac{\ln(\alpha_1 \times \dots \times \alpha_{\nu_1})}{\lambda}. \quad (1.123)$$

Полученное соотношение дает алгоритм моделирования выборочного значения  $\xi_{\lambda,n}^{(\gamma)}$  распределения Эрланга (1.120) (следует лишь заменить  $\nu_1$  на  $n$  в формуле (1.123)). В дальнейшем нам также понадобится моделирующая формула для  $\chi^2$ -распределения с четным числом  $l = 2k$  степеней свободы (см. формулу (1.121)), которая непосредственно получается из соотношения (1.123):

$$\chi_{2k}^2 = \xi_{1/2,k}^{(\gamma)} = -2 \ln(\alpha_1 \times \dots \times \alpha_k). \quad (1.124)$$

Для моделирования выборочного значения второго слагаемого  $\xi_{\lambda,\nu_2}^{(\gamma)}$  суммы (1.122) можно предложить следующий мажорантный метод исключения (см. алгоритм 1.24). Заметим, что для функции  $g(u) = u^{\nu_2-1} e^{-\lambda u}$ , пропорциональной плотности (1.118), справедливо неравенство

$$g(u) \leq g_1(u) = \begin{cases} u^{\nu_2-1} & \text{при } 0 < u < 1, \\ e^{-\lambda u} & \text{при } u \geq 1. \end{cases}$$

Отсюда получаем следующий алгоритм мажорантного метода исключения.

**Алгоритм 1.35.** 1. Реализуем выборочное значение  $\xi_1 = \psi_1(\alpha_1)$  согласно плотности  $f_1(u) = C g_1(u)$  (несложно подсчитать, что нормирующая константа равна  $C = \lambda/(\lambda \nu_2^{-1} + e^{-\lambda})$ ); здесь

$$\psi_1(\alpha_1) = \begin{cases} (\alpha_1(\lambda \nu_2 e^{-\lambda})/\lambda)^{1/\nu_2} & \text{при } \alpha_1 \leq \lambda/(\lambda + \nu_2 e^{-\lambda}), \\ -(1/\lambda) \ln((1 - \alpha_1)(e^{-\lambda} + \lambda \nu_2^{-1})) & \text{иначе} \end{cases}$$

(вывод этого соотношения подробно описан в примере 1.8). Реализуем также значение  $\eta = \alpha_2 g_1(\xi_1)$ .

2. Если выполнено условие  $\eta < g(\xi_1)$ , то полагаем  $\xi_{\lambda, \nu_2}^{(\gamma)} = \xi_1$ , иначе повторяем п. 1 и т.д.

Согласно формуле (1.92), трудоемкость алгоритма 1.35 пропорциональна величине

$$s = \frac{\int_0^{+\infty} g_1(w) dw}{\int_0^{+\infty} g(w) dw} = \frac{\lambda \nu_2^{-1} + e^{-1}}{\lambda \Gamma(\nu_2)}.$$

Например, для  $\nu_2 = 1/2$  имеем  $s = (2\lambda + e^{-1})/(\lambda\sqrt{\pi})$ . Заметим также, что при  $\lambda = 1$  величина  $s$  монотонно растет от  $s = 1$  (при  $\nu_2 \downarrow 0$ ) до  $s = 1 + e^{-1} \approx 1.36$  при  $\nu_2 = 1$ . В частности, при  $\nu_2 = 1/2$  имеем  $s \approx 1.33$ .

**1.9.2. Моделирование одного специального класса распределений.** Для дальнейших рассуждений нам понадобится следующий вспомогательный результат.

**Утверждение 1.19.** Пусть случайная величина  $\zeta$  распределена на интервале  $(0, A)$ ,  $0 < A \leq +\infty$  с плотностью  $\tilde{f}(u)$  такой, что  $\tilde{f}(A) = 0$ , и для некоторого  $a > -1$  функция  $\tilde{f}(u) u^{-a}$  абсолютно непрерывна и монотонно убывает при  $u > 0$ . Предположим также, что случайная величина  $\xi_1$  распределена с плотностью  $f_1(u) = (a+1)u^a$  при  $0 < u < 1$ , а  $\xi_2$  распределена с плотностью

$$f_2(u) = \frac{-u^{a+1}(\tilde{f}(u) u^{-a})'}{a+1} \quad \text{при } 0 < u < A.$$

Тогда справедливо представление  $\zeta = \xi_1 \xi_2$ .

**Доказательство.** Заметим сначала, что функция  $f_2(u)$  действительно является плотностью, т.к. она положительна в силу монотонности функции  $\tilde{f}(u) u^{-a}$ , а интегрирование по частям дает

$$\int_0^A \frac{-w^{a+1}(\tilde{f}(w) w^{-a})' dw}{a+1} = -\frac{w \tilde{f}(w)}{a+1} \Big|_0^A + \int_0^A \frac{\tilde{f}(w) w^{-a} dw^{a+1}}{a+1} = \int_0^A \tilde{f}(w) dw = 1.$$

Для  $u$  такого, что  $0 < u < A$ , имеем

$$\mathbf{P}(\xi_1 \xi_2 < u | \xi_1 = v) = \mathbf{P}(\xi_2 < u/v) = F_2(u/v),$$

где  $F_2(x) = \int_0^x f_2(w) dw$  – функция распределения случайной величины  $\xi_2$ . По формуле полной вероятности получаем

$$\mathbf{P}(\xi_1 \xi_2 < u) = F_{\xi_1 \xi_2}(u) = \int_0^1 F_2(u/v) (a+1) v^a dv.$$

Дифференцируя это выражение по  $u$  и произведя замену  $y = u/v$ , имеем

$$f_{\xi_1 \xi_2}(u) = \int_0^1 f_2(u/v) (a+1) v^{a-1} dv = \int_u^\infty f_2(y) (a+1) \frac{u^a}{y^{a+1}} dy = u^a \int_u^A (\tilde{f}(y) y^{-a})' dy = \tilde{f}(u).$$

□

Утверждение 1.19 позволяет построить как численную процедуру реализации выборочных значений случайных величин, имеющих бета-распределение (см. подразд. 1.9.3), так и алгоритмы моделирования ряда специальных распределений.

**Пример 1.17.** Рассмотрим случайную величину  $\zeta$  с плотностью распределения

$$\tilde{f}(u) = -C u^b \ln u; \quad 0 < u < 1, \quad b > -1,$$

т.е. здесь  $A = 1$ . Интегрируя функцию  $\tilde{f}(u)$  от нуля до единицы по частям, несложно получить, что  $C = (b + 1)^2$ .

**Алгоритм 1.36.** 1. Полагаем  $a = b$  и моделируем значение случайной величины  $\xi_1$  согласно плотности степенного распределения  $f_1(u) = (b + 1) u^b : \xi_1 = \alpha_1^{1/(b+1)}$ .

2. Реализуем значение случайной величины  $\xi_2$ , которая при  $0 < u < 1$  имеет плотность распределения

$$f_2(u) = \frac{-u^{a+1}(\tilde{f} u^{-a})'}{a + 1} = \frac{u^{b+1}(C u^{-1})}{b + 1} = (b + 1) u^b,$$

по формуле  $\xi_2 = \alpha_2^{1/(b+1)}$ .

3. Вычисляем значение  $\zeta = \xi_1 \xi_2 = (\alpha_1 \alpha_2)^{1/(b+1)}$ .

**Пример 1.18.** Рассмотрим случайную величину  $\zeta$  с плотностью распределения

$$\tilde{f}(u) = C \arccos u, \quad 0 < u < 1,$$

т.е. здесь снова  $A = 1$ . Интегрируя функцию  $\tilde{f}(u)$  от нуля до единицы по частям, получаем  $C = 1$ .

**Алгоритм 1.37.** 1. Полагаем  $a = 0$  (т.е.  $f_1(u) = 1$  при  $0 < u < 1$ ) и моделируем значение случайной величины  $\xi_1 = \alpha_1$ .

2. Реализуем значение случайной величины  $\xi_2$ , которая при  $0 < u < 1$  имеет плотность распределения

$$f_2(u) = -u \tilde{f}'(u) = \frac{u}{\sqrt{1 - u^2}}.$$

При этом используем метод обратной функции распределения и получаем моделирующую формулу:  $\xi_2 = \sqrt{1 - \alpha_2^2}$ .

3. Вычисляем значение  $\zeta = \xi_1 \xi_2 = \alpha_1 \sqrt{1 - \alpha_2^2}$ .

### 1.9.3. Моделирование бета-распределения.

**Определение 1.8.** Случайная величина  $\xi_{\nu, \mu}^{(\beta)}$  имеет бета-распределение, если ее плотность представима в виде

$$f_{\nu, \mu}^{(\beta)}(u) = \frac{u^{\nu-1} (1 - u)^{\mu-1}}{B(\nu, \mu)}, \quad 0 < u < 1; \quad \nu > 0, \quad \mu > 0; \quad (1.125)$$

здесь  $B(\nu, \mu) = \int_0^1 w^{\nu-1} (1 - w)^{\mu-1} dw$  – бета-функция.

В дальнейшем нам понадобится следующее известное представление

$$B(\nu, \mu) = \frac{\Gamma(\nu) \Gamma(\mu)}{\Gamma(\nu + \mu)} = B(\mu, \nu). \quad (1.126)$$

Согласно утверждению 1.16 и формуле (1.116) (см. подразд. 1.8.4), для целых  $\nu$  и  $\mu$  плотность (1.125) является плотностью распределения  $\nu$ -й порядковой статистики для  $(\nu + \mu - 1)$  независимых значений стандартного случайного числа  $\alpha$ , что и определяет способ моделирования бета-распределения в этом случае:  $\xi_{\nu, \mu}^{(\beta)} = \alpha_{\nu}^{(\nu + \mu - 1)}$  (см. алгоритм 1.34).

Теперь построим алгоритмы моделирования бета-распределения для других сочетаний параметров  $\nu$  и  $\mu$ . Рассмотрим сначала случай, когда  $\mu$  – целое, а  $\nu$  – нецелое (все дальнейшее подходит и для случая, когда  $\nu$  – нецелое, а  $\mu$  – целое, достаточно лишь произвести в (1.125) замену переменных  $v = 1 - u$ ).

Применим утверждение 1.19 для  $\tilde{f}(u) = f_{\mu,\nu}^{(\beta)}(u)$ ,  $A = 1$  и  $a = \nu - 1$ . Тогда  $\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)} = \xi_1 \hat{\xi}_2$ , где случайная величина  $\xi_1$  распределена с плотностью  $f_1(u) = \nu u^{\nu-1}$ ,  $0 < u < 1$ , а  $\hat{\xi}_2$  распределена с плотностью

$$\hat{f}_2(u) = \frac{-u^{a+1}(\tilde{f}(u)u^{-a})'}{a+1} = \frac{u^\nu(1-u)^{\mu-2}}{B(\nu+1, \mu-1)}.$$

Вновь применяем утверждение 1.19 для  $\tilde{f}(u) = \hat{f}_2(u)$ ,  $A = 1$  и  $a = \nu$ . Тогда  $\hat{\xi}_2 = \xi_2 \hat{\xi}_3$ , где случайная величина  $\xi_2$  распределена с плотностью  $f_2(u) = (\nu+1)u^\nu$ ,  $0 < u < 1$ , а  $\hat{\xi}_3$  распределена с плотностью  $\hat{f}_3(u) = (u^{\nu+1}(1-u)^{\mu-3})/B(\nu+2, \mu-3)$ .

Этот процесс продолжаем до тех пор пока индекс  $j$  плотности  $\hat{f}_j$  не станет равным  $\mu$ ; при этом показатель степени при  $(1-u)$  будет равен нулю. Получаем представление  $\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)} = \xi_1 \times \dots \times \xi_\mu$ , где случайные величины  $\xi_i$  распределены со степенными плотностями  $f_i(u) = (\nu+i-1)u^{\nu+i-2}$ ,  $0 < u < 1$ . Согласно формуле (1.55) из примера 1.5, для  $\xi_i$  имеем моделирующие формулы  $\xi_i = \alpha_i^{1/(\nu+i-1)}$ ;  $i = 1, \dots, \mu$ . Тогда для случая натурального  $\mu$  имеем следующий

**Алгоритм 1.38.** Реализуем  $\mu$  стандартных случайных чисел  $\alpha_1, \dots, \alpha_\mu$  и вычисляем выборочное значение случайной величины  $\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)}$  по формуле

$$\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)} = \prod_{i=1}^{\mu} \alpha_i^{1/(\nu+i-1)}. \quad (1.127)$$

Наконец, рассмотрим случай, когда и  $\nu$  и  $\mu$  не являются целыми. Пусть  $m = [\mu] + 1 - \mu$ , где  $[\mu]$  обозначает целую часть числа  $\mu$ . Представим плотность  $f_{\nu,\mu}^{(\beta)}(u)$  следующим образом:

$$f_{\nu,\mu}^{(\beta)}(u) = \frac{u^{\nu-1}(1-u)^{[\mu]}(1-u)^{-m}}{B(\nu, \mu)}$$

и разложим  $(1-u)^{-m}$  по формуле Маклорена:

$$(1-u)^{-m} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{C_i u^i}{i!}; \quad C_0 = 1, \quad C_i = m(m+1) \times \dots \times (m+i-1) = \frac{\Gamma(m+i)}{\Gamma(m)},$$

здесь  $i = 1, 2, \dots$ . В последнем соотношении использовано свойство гамма-функции

$$\Gamma(\nu) = (\nu-1)\Gamma(\nu-1). \quad (1.128)$$

Следовательно,

$$f_{\nu,\mu}^{(\beta)}(u) = \sum_{i=0}^{\infty} \left( \frac{B(i+\nu, [\mu]+1)\Gamma(m+i)}{B(\nu, \mu) i! \Gamma(m)} \times \frac{u^{i+\nu-1}(1-u)^{[\mu]}}{B(i+\nu, [\mu]+1)} \right) = \sum_{i=0}^{\infty} p_i f_{i+\nu, [\mu]+1}^{(\beta)}(u), \quad (1.129)$$

где величины  $\{p_i\}$  представляют собой вероятности и имеют вид

$$p_0 = \frac{[\mu]!}{B(\nu, \mu)\nu(\nu+1) \times \dots \times (\nu+[\mu])}; \quad p_i = \frac{\Gamma(i+\nu)\Gamma([\mu]+1)\Gamma(m+i)}{\Gamma(i+\nu+[\mu]+1)B(\nu, \mu) i! \Gamma(m)} = \\ = \frac{[\mu]! m(m+1) \times \dots \times (m+i-1)}{B(\nu, \mu) i! (i+\nu)(i+\nu+1) \times \dots \times (i+\nu+[\mu])}; \quad i = 1, 2, \dots;$$

здесь использовано свойство гамма-функции (1.128) и свойство бета-функции (1.126).



Из формулы (1.129) следует алгоритм метода суперпозиции (см. алгоритм 1.20) для реализации значений  $\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)}$  при нецелых параметрах.

**Алгоритм 1.39.** 1. Реализовав выборочное значение  $\alpha_1$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{p_i\}$ , используя алгоритм 1.4 или его модификации, выбираем номер  $k$  плотности  $f_{k+\nu, [\mu]+1}^{(\beta)}(u)$ .

2. Реализуем выборочное значение  $\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)}$  согласно выбранной плотности по алгоритму 1.38 (см. формулу (1.127)):

$$\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)} = \prod_{i=1}^{[\mu]+1} \alpha_i^{1/(k+\nu+i-1)}.$$

Согласно формуле (1.29) из подразд. 1.2.3, трудоемкость стандартного алгоритма 1.4 выбора значения  $k$  целочисленной случайной величины  $\eta$  согласно вероятностям  $\{p_i\}$  (см. п. 1 алгоритма 1.39) пропорциональна величине  $\mathbf{E}\eta$ . Нетрудно показать, что  $\mathbf{E}\eta = +\infty$  при  $[\mu] = 0$ . Поэтому в случае  $\nu > 1$ ,  $0 < \mu < 1$  следует воспользоваться заменой переменных  $v = 1 - u$ , которая меняет местами параметры  $\nu$  и  $\mu$ , а в случае  $0 < \nu < 1$ ,  $0 < \mu < 1$  можно провести дополнительную рандомизацию и реализовать соответствующий метод суперпозиции на основе соотношения

$$f_{\nu,\mu}^{(\beta)}(u) = u f_{\nu,\mu}^{(\beta)}(u) + (1 - u) f_{\nu,\mu}^{(\beta)}(u) = \frac{\nu}{\nu + \mu} f_{\nu+1,\mu}^{(\beta)}(u) + \frac{\mu}{\nu + \mu} f_{\nu,\mu+1}^{(\beta)}(u);$$

здесь использован вид плотности  $f_{\nu,\mu}^{(\beta)}(u)$  (см. соотношение (1.125)) и свойства (1.126) и (1.128).

**1.9.4. Методы исключения для моделирования бета-распределения.** Описанные в подразд. 1.9.3 алгоритмы моделирования бета-распределения требуют во многих случаях частого обращения к генератору псевдослучайных чисел, что резко снижает их эффективность (см. замечание 1.2). Поэтому целесообразно исследовать альтернативные возможности построения моделирующих алгоритмов для распределения (1.125). В данном подразделе мы изучим различные варианты мажорантного метода исключения (алгоритм 1.24).

Плотность бета-распределения (1.125) пропорциональна функции

$$g(u) = u^{\nu-1} (1 - u)^{\mu-1}, \quad 0 < u < 1. \quad (1.130)$$

Способы построения мажорант для функции (1.130) весьма разнообразны, причем эти построения и эффективность соответствующих алгоритмов метода исключения существенно зависят от значений параметров  $\nu$  и  $\mu$ . Так, для описанного выше "сложного" случая  $0 < \nu < 1$ ,  $0 < \mu < 1$  можно построить мажоранту

$$g(u) \leq g_1^{(1)}(u) = u^{\nu-1} + (1 - u)^{\mu-1}. \quad (1.131)$$

Действительно,

$$u^{\nu-1} (1 - u)^{\mu-1} = (u + (1 - u)) u^{\nu-1} (1 - u)^{\mu-1} = u^{\nu} (1 - u)^{\mu-1} + u^{\nu-1} (1 - u)^{\mu} \leq (1 - u)^{\mu-1} + u^{\nu-1}.$$

Здесь использовано то обстоятельство, что при  $0 < u < 1$  и  $t > 0$  выполнено

$$u^t < 1, \quad (1 - u)^t < 1. \quad (1.132)$$

Тогда для случая  $0 < \nu < 1$ ,  $0 < \mu < 1$  можно реализовать следующий алгоритм метода исключения (см. алгоритм 1.24).

**Алгоритм 1.40.** Реализуем выборочное значение  $\xi_1$  согласно плотности  $f_1(u) = C g_1^{(1)}(u)$  (несложно подсчитать, что  $C = \nu \mu / (\nu + \mu)$ ) методом суперпозиции: если  $\alpha_1 < \mu / (\nu + \mu)$ , то  $\xi_1 = \alpha_2^{1/\nu}$ , иначе  $\xi_1 = 1 - \alpha_2^{1/\mu}$ .

2. Реализуем величину  $\eta = \alpha_3 g_1^{(1)}(\xi_1)$ .

3. Если  $\eta < g(\xi_1)$ , то  $\xi_{\nu, \mu}^{(\beta)} = \xi_1$ , иначе повторяем пп. 1 и 2 и т. д.

Трудоёмкость алгоритма 1.40 пропорциональна величине

$$s^{(1)} = \frac{\int_0^1 g_1^{(1)}(w) dw}{\int_0^1 g(w) dw} = \frac{\nu + \mu}{\nu \mu B(\nu, \mu)}. \quad (1.133)$$

Например, для  $\nu = \mu = 1/2$  имеем  $s^{(1)} = 4/\pi \approx 1.27$ .

Для случая  $0 < \nu < 1$  и  $\mu > 1$  с учетом соотношения (1.132) в качестве мажоранты функции (1.130) можно взять

$$g(u) \leq g_1^{(2)}(u) = u^{\nu-1}, \quad 0 < u < 1. \quad (1.134)$$

Очевидно, что для заданных ограничениях на параметры  $\nu$  и  $\mu$  выполнено  $g_1^{(2)}(u) < g_1^{(1)}(u)$  при  $0 < u < 1$ . Соответствующий алгоритм метода исключения выглядит следующим образом.

**Алгоритм 1.41.** Реализуем выборочное значение  $\xi_1$  согласно плотности  $f_1(u) = C g_1^{(2)}(u) = \nu u^{\nu-1}$  (это случай моделирования степенной плотности – см. пример 1.5 и формулу (1.55)):  $\xi_1 = \alpha_1^{1/\nu}$ . Реализуем также величину  $\eta = \alpha_2 g_1^{(2)}(\xi_1)$ .

2. Если  $\eta < g(\xi_1)$ , то  $\xi_{\nu, \mu}^{(\beta)} = \xi_1$ , иначе повторяем п. 1 и т. д.

Трудоёмкость алгоритма 1.41 пропорциональна величине

$$s^{(2)} = \frac{\int_0^1 g_1^{(2)}(w) dw}{\int_0^1 g(w) dw} = \frac{1}{\nu B(\nu, \mu)}. \quad (1.135)$$

Аналогично для случая  $\nu > 1$  и  $0 < \mu < 1$  можно вновь воспользоваться соотношением (1.132) и в качестве мажоранты функции (1.130) можно взять

$$g(u) \leq g_1^{(3)}(u) = (1 - u)^{\mu-1}, \quad 0 < u < 1, \quad (1.136)$$

и тогда соответствующий алгоритм метода исключения выглядит следующим образом.

**Алгоритм 1.42.** Реализуем выборочное значение  $\xi_1$  согласно плотности  $f_1(u) = C g_1^{(3)}(u) = \mu (1 - u)^{\mu-1}$ :  $\xi_1 = 1 - \alpha_1^{1/\mu}$ . Реализуем также величину  $\eta = \alpha_2 g_1^{(3)}(\xi_1)$ .

2. Если  $\eta < g(\xi_1)$ , то  $\xi_{\nu, \mu}^{(\beta)} = \xi_1$ , иначе повторяем п. 1 и т. д.

Трудоёмкость алгоритма 1.42 пропорциональна величине  $s^{(3)} = 1/(\mu B(\nu, \mu))$ .

Заметим, что мажоранту  $g_1^{(2)}(u)$  из (1.134) и алгоритм 1.41 целесообразно использовать и в случае  $\nu \geq \mu \geq 1$ . Здесь используется следующее соображение:

$$\int_0^1 u^{\nu-1} du = \frac{1}{\nu - 1} \leq \frac{1}{\mu - 1} = \int_0^1 (1 - u)^{\mu-1} du. \quad (1.137)$$

Аналогично при  $\mu \geq \nu \geq 1$  можно использовать мажоранту  $g_1^{(3)}(u)$  из (1.136) и алгоритм 1.42 (здесь справедливо неравенство, противоположное (1.137)). Следует, однако, отметить, что трудоёмкость  $s^{(2)}$  из (1.135) (и ее аналог  $s^{(3)}$ ) достаточно быстро растет с увеличением параметров  $\nu$  и  $\mu$ . Например, при  $\nu = 3$  и  $\mu = 2$  имеем  $s^{(2)} = \Gamma(5)/(3\Gamma(2)\Gamma(3)) = 4$ .

В связи с последним соображением для больших  $\nu$  и  $\mu$  целесообразно использовать мажоранту

$$g(u) \leq g_1^{(4)}(u) = Ku^{[\nu]-1}(1-u)^{[\mu]-1}, \quad K = \frac{\{\nu\}^{\{\nu\}}\{\mu\}^{\{\mu\}}}{(\{\nu\} + \{\mu\})^{\{\nu\} + \{\mu\}};$$

здесь  $[A]$  и  $\{A\}$  – соответственно целая и дробная части числа  $A$ . В последнем соотношении использовано то обстоятельство, что функция  $g(u)/(u^{[\nu]-1}(1-u)^{[\mu]-1}) = u^{\{\nu\}}(1-u)^{\{\mu\}}$  имеет единственный локальный максимум, равный  $K$ , в точке  $u_{max} = \{\nu\}/(\{\nu\} + \{\mu\})$ . Как указано выше, плотность  $f_1^{(4)}(u) = f_{[\nu],[\mu]}^{(\beta)}(u)$  является плотностью распределения  $[\nu]$ -й порядковой статистики для  $([\nu] + [\mu] - 1)$  независимых значений стандартного случайного числа  $\alpha$ . Отсюда возникает следующий метод исключения.

**Алгоритм 1.43.** Реализуем выборочное значение  $\xi_1$  согласно алгоритму 1.34:  $\xi_1 = \alpha_{[\nu]}^{([\nu]+[\mu]-1)}$ . Реализуем также величину  $\eta = \alpha_2 g_1^{(4)}(\xi_1)$ .

2. Если

$$\eta < g(\xi_1), \quad \text{то есть} \quad K\alpha_2 < \xi_1^{\{\nu\}}(1 - \xi_1)^{\{\mu\}},$$

то  $\xi_{\nu,\mu}^{(\beta)} = \xi_1$ , иначе повторяем п. 1 и т. д.

Трудоемкость этого алгоритма пропорциональна величине  $s^{(4)} = KB([\nu], [\mu])/B(\nu, \mu)$ . Эта величина невелика. Например, для  $\nu = \mu = 2.5$  имеем

$$s^{(4)} = \frac{(1/2)^{1/2}(1/2)^{1/2}}{(1/2 + 1/2)^{1/2+1/2}} \times \frac{\Gamma(2)\Gamma(2)}{\Gamma(4)} \times \frac{\Gamma(5)}{\Gamma(2.5)\Gamma(2.5)} = \frac{(1/2) \times 4!}{3!(3/2)^2(1/2)^2\pi} = \frac{32}{9\pi} \approx 1.13;$$

здесь использованы соотношения (1.126), (1.128) и  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ . Однако следует учитывать, что при реализации величины  $\xi_1 = \alpha_{[\nu]}^{([\nu]+[\mu]-1)}$  в первом пункте алгоритма 1.43 требуется  $([\nu] + [\mu] - 1)$  обращений к датчику случайных чисел (см. замечание 1.2).

Отметим также, что для нецелых значений  $\nu$  и  $\mu$  вычисление значений  $g(\xi_1)$  в алгоритмах 1.40–1.43 может оказаться трудоемким. В этом случае можно использовать двусторонний метод исключения (алгоритм 1.26) с кусочно-постоянными или кусочно-линейными мажорантой и минорантой.

## 1.10. МОДЕЛИРОВАНИЕ НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТРОПНОГО НАПРАВЛЕНИЯ

**1.10.1. Реализация пары выборочных значений случайной величины, имеющей стандартное нормальное распределение.** В этом разделе мы рассмотрим вопрос о моделировании случайной величины  $\eta$ , имеющей плотность *нормального распределения*

$$f_\eta(u) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(u-m)^2/(2\sigma^2)} \quad -\infty < u < +\infty$$

с параметрами  $(m, \sigma^2)$ :  $m = \mathbf{E}\eta$ ,  $\sigma^2 = \mathbf{D}\eta$ . Заметим, что для реализации значений  $\eta$  достаточно моделировать значения *стандартной нормальной случайной величины*  $\xi$  с параметрами  $(0, 1)$  и плотностью распределения

$$f(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2}, \quad -\infty < u < +\infty, \quad (1.138)$$

а затем использовать преобразование  $\eta = m + \sigma\xi$ .

**Утверждение 1.20.** Случайные величины

$$\xi_1 = \sqrt{-2\ln\alpha_1} \sin 2\pi\alpha_2, \quad \xi_2 = \sqrt{-2\ln\alpha_1} \cos 2\pi\alpha_2, \quad (1.139)$$

где  $(\alpha_1, \alpha_2)$  – пара независимых случайных чисел, являются независимыми и распределенными согласно плотности (1.138).

**Доказательство.** Вектор  $(\xi_1, \xi_2)$ , рассматриваемый в декартовых координатах  $(u, v)$ , в полярных координатах  $(r, t)$ , где

$$u = r \sin t, \quad v = r \cos t, \quad (1.140)$$

имеет вид  $(\rho, \varphi)$ , причем  $\rho = \sqrt{-2 \ln \alpha_1}$  и  $\varphi = 2\pi\alpha_2$ . Функция распределения случайной величины  $\rho$  равна

$$F_\rho(r) = \mathbf{P} \left( \sqrt{-2 \ln \alpha_1} < r \right) = \mathbf{P}(\alpha_1 > e^{-r^2/2}) = 1 - e^{-r^2/2}; \quad (1.141)$$

здесь  $r > 0$ . Дифференцируя последнюю функцию по  $r$ , получаем плотность распределения  $f_\rho(r) = r e^{-r^2/2}$ . Случайная величина  $\varphi$  имеет равномерное распределение в интервале  $(0, 2\pi)$  с плотностью  $f_\varphi(t) \equiv 1/(2\pi)$ . Совместная плотность независимых случайных величин  $(\rho, \varphi)$  имеет вид

$$f_{\rho, \varphi}(r, t) = \frac{r e^{-r^2/2}}{2\pi}.$$

Заметим, что  $r = \sqrt{u^2 + v^2}$ . Согласно теореме о замене случайных переменных (утверждение 1.9), учитывая, что якобиан  $J(r, t)$  перехода от полярных координат  $(r, t)$  к декартовым равен  $1/r$ , получаем, что плотность случайного вектора  $(\xi_1, \xi_2)$  имеет вид

$$\begin{aligned} f_{(\xi_1, \xi_2)}(u, v) &= f_{(\rho, \theta)}(r(u, v), t(u, v)) J(r(u, v), t(u, v)) = \\ &= \frac{\sqrt{u^2 + v^2} \times e^{-(u^2 + v^2)/2}}{2\pi \sqrt{u^2 + v^2}} = \frac{e^{-u^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \times \frac{e^{-v^2/2}}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned}$$

Из последнего соотношения следует, что случайные величины  $\xi_1$  и  $\xi_2$  независимы и имеют стандартное нормальное распределение (1.138).  $\square$

В литературе по методам Монте-Карло также упоминается следующая формула моделирования стандартной нормальной случайной величины:

$$\xi = \xi^{(n)} = \sqrt{\frac{12}{n}} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - 1/2). \quad (1.142)$$

Согласно центральной предельной теореме, величина  $\xi^{(n)}$  асимптотически нормальна, кроме того,  $\mathbf{E}\xi^{(n)} = 0$ ,  $\mathbf{D}\xi^{(n)} = 1$ . Формула (1.142) особенно удобна для  $n = 12$ :

$$\xi^{(12)} = \sum_{i=1}^{12} \alpha_i - 6.$$

Соотношения типа (1.142), в частности, "обрубают хвосты" распределения стандартной нормальной случайной величины  $\xi$  (например,  $|\xi^{(12)}| \leq 6$ ), и поэтому такие формулы обычно используют в случаях, когда большие значения величины  $|\xi|$  не играют существенной роли. Недостатком формулы (1.142) является также необходимость реализации достаточно большого количества стандартных случайных чисел  $\alpha_i$  (см. замечание 1.2).

**1.10.2. Теоремы об изотропном векторе.** Утверждение 1.20 допускает обобщение на  $l$ -мерный случай, где  $l \geq 2$ .

**Определение 1.9.** Случайный вектор  $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_l)$  называется **изотропным**, если точка  $\zeta/|\zeta|$  равномерно распределена на поверхности сферы единичного радиуса с центром в начале координат и не зависит от  $|\zeta|$ .

**Утверждение 1.21.** Если  $\xi$  – изотропный вектор, квадрат длины которого имеет  $\chi^2$ -распределение с  $l$  степенями свободы, то его компоненты  $\xi_1, \dots, \xi_l$  независимы и нормальны с параметрами  $(0, 1)$ .

**Доказательство.** В сферической системе координат случайный вектор  $\xi$  имеет компоненты  $(\hat{\chi}_l, \omega_1, \dots, \omega_{l-1})$ , где  $(\omega_1, \dots, \omega_{l-1})$  – соответствующая точка единичной сферы, а  $\hat{\chi}_l = \sqrt{\chi_l^2}$ . Здесь  $\chi_l^2$  – случайная величина, имеющая  $\chi^2$ -распределение с  $l$  степенями свободы (см. формулу (1.121)). По аналогии с (1.141) получим функцию распределения случайной величины  $\hat{\chi}_l$ :

$$\begin{aligned} F_{\hat{\chi}_l}(r) &= \mathbf{P}(\hat{\chi}_l < r) = \mathbf{P}(\chi_l^2 < r^2) = \int_0^{r^2} \frac{t^{l/2-1} e^{-t/2}}{2^{l/2} \Gamma(l/2)} dt = \\ &= \frac{1}{2^{l/2} \Gamma(l/2)} \int_0^{r^2} t^{l/2-1} e^{-t/2} dt, \quad r \geq 0. \end{aligned}$$

Дифференцируя полученную функцию по  $r$ , получаем плотность

$$f_{\hat{\chi}_l}(r) = \frac{1}{2^{l/2} \Gamma(l/2)} (r^2)^{l/2-1} e^{-r^2/2} (2r) = \frac{1}{2^{l/2-1} \Gamma(l/2)} r^{l-1} e^{-r^2/2}.$$

В силу изотропности вектора  $\xi$ , плотность совместного распределения случайных величин  $\hat{\chi}_l$  и  $(\omega_1, \dots, \omega_{l-1})$  имеет вид

$$f_1(r, w_1, \dots, w_{l-1}) = \frac{1}{2^{l/2-1} \Gamma(l/2)} r^{l-1} e^{-r^2/2} \times \frac{1}{\hat{S}_l} = \frac{1}{(2\pi)^{l/2}} r^{l-1} e^{-r^2/2},$$

где  $\hat{S}_l = (2\pi^{l/2})/\Gamma(l/2)$  – "площадь" поверхности  $l$ -мерной единичной сферы (на самом деле это объем размерности  $(l-1)$ ).

Якобиан перехода от сферических координат  $(r, w_1, \dots, w_{l-1})$  к декартовым координатам  $(x_1, \dots, x_l)$  равен

$$\left| \frac{\partial(r, w_1, \dots, w_{l-1})}{\partial(x_1, \dots, x_l)} \right| = \frac{1}{r^{l-1}} = \frac{1}{(x_1^2 + \dots + x_l^2)^{(l-1)/2}},$$

так как "декартовый  $n$ -мерный объем"  $dV$  выражается в сферических координатах следующим образом:  $dV = r^{l-1} dr dw_1 \dots dw_{l-1}$ . Далее из утверждения 1.9 получаем плотность распределения вектора  $\xi$  в декартовых координатах  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_l)$ :

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f_1(r(\mathbf{x}), w_1(\mathbf{x}), \dots, w_{l-1}(\mathbf{x})) \left| \frac{\partial(r, w_1, \dots, w_{l-1})}{\partial(x_1, \dots, x_l)} \right| = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{l/2}} (x_1^2 + \dots + x_l^2)^{(l-1)/2} e^{-(x_1^2 + \dots + x_l^2)/2} \times \frac{1}{(x_1^2 + \dots + x_l^2)^{(l-1)/2}} = \prod_{i=1}^l \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x_i^2/2} \right). \end{aligned}$$

Таким образом, компоненты  $\xi_1, \dots, \xi_l$  независимы и одинаково распределены с плотностью (1.138).  $\square$

Используя известное из теории вероятностей представление  $\chi_l^2 = \xi_1^2 + \dots + \xi_l^2$ , несложно доказать обратное утверждение.

**Утверждение 1.22.** Если случайные величины  $\xi_1, \dots, \xi_l$  независимы и распределены нормально с параметрами  $(0, 1)$ , то вектор  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_l)$  является изотропным.

Утверждение 1.21 дает возможность получать большое количество независимых выборочных значений  $\xi_1, \dots, \xi_l$  стандартной нормальной случайной величины. Здесь для использования формулы (1.124) разумно положить  $l = 2k$ .

**Алгоритм 1.44.** 1). Реализуем  $l$ -мерный изотропный случайный вектор  $(\omega_1, \dots, \omega_l)$  единичной длины.

2). Вычисляем значения  $\xi_i = \sqrt{-2 \ln(\alpha_1 \times \dots \times \alpha_k)} \omega_i$ ,  $i = 1, \dots, 2k$ , где  $\alpha_1, \dots, \alpha_k$  – независимые реализации стандартного случайного числа.

Формулы (1.139) являются частным случаем алгоритма 1.44 для  $l = 2$  и  $k = 1$ , так как двумерный вектор

$$(\omega_1, \omega_2) = (\sin 2\pi\alpha, \cos 2\pi\alpha) \quad (1.143)$$

является единичным изотропным. Забегая вперед, заметим, что алгоритм 1.44 эффективен только для случая  $l = 2$  и  $k = 1$  из-за отсутствия экономичных процедур численного построения многомерного единичного изотропного вектора  $(\omega_1, \dots, \omega_l)$  (см. следующий подразд. 1.10.3).

**1.10.3. Моделирование единичного изотропного вектора.** Особо важными для приложений являются алгоритмы моделирования единичного изотропного вектора в двумерном и трехмерном случае. Для двумерного случая эффективным является алгоритм, определяемый формулами (1.143).

Теперь рассмотрим трехмерное пространство. Рассмотрим в таком пространстве некоторую фиксированную ось, например, ось  $OX$ . Единичный вектор, исходящий из начала координат, будем определять следующими двумя величинами:  $\mu$  – косинус угла между вектором и осью  $OX$ ,  $\varphi$  – угол между плоскостью "вектор – ось  $OX$ " и некоторой фиксированной плоскостью, проходящей через ось  $OX$ . Очевидно, что для изотропного вектора угол  $\varphi$  распределен равномерно в интервале  $(0, 2\pi)$ , а распределение  $\mu$  симметрично относительно точки  $\mu = 0$ . Далее для  $x \geq 0$  имеем

$$\mathbf{P}(x \leq \mu \leq x + dx) = c dx,$$

где  $c = \text{const}$ , так как площадь сферического пояса пропорциональна его высоте. Следовательно, величина  $\mu$  распределена равномерно в интервале  $(-1, 1)$ .

Таким образом, единичный изотропный вектор  $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$  можно моделировать по формулам

$$\omega_1 = 1 - 2\alpha', \quad \omega_2 = \sqrt{1 - \omega_1^2} \cos 2\pi\alpha'', \quad \omega_3 = \sqrt{1 - \omega_1^2} \sin 2\pi\alpha''.$$

Построение алгоритмов реализации компонент единичного  $l$ -мерного изотропного вектора может также основано на том очевидном соображении, что вектор  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\zeta}/|\boldsymbol{\zeta}|$  является единичным изотропным в случае, когда случайная точка  $\boldsymbol{\zeta}$  равномерно распределена в  $l$ -мерном шаре радиуса  $R$ .

Отметим прежде всего следующий алгоритм метода исключения.

**Алгоритм 1.45.** Реализуем  $l$  независимых значений, равномерно распределенных в интервале  $(-R, R)$ :

$$\zeta_1 = R(2\alpha_1 - 1), \dots, \zeta_l = R(2\alpha_l - 1). \quad (1.144)$$

Проверяем неравенство  $\zeta_1^2 + \dots + \zeta_l^2 < R^2$ . Если оно выполнено, то, в силу утверждения 1.1,  $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_1, \dots, \zeta_l)$  – искомая точка, равномерно распределенная в  $l$ -мерном шаре, иначе вновь реализуем вектор (1.144) и т.д..

В силу утверждения 1.1 и формулы (1.86), трудоемкость  $\tilde{s}$  алгоритма 1.45 пропорциональна отношению объемов  $l$ -мерного куба (с ребром  $2R$ ) и  $l$ -мерного шара радиуса  $R$ :

$$\tilde{s} \sim s = \frac{(2R)^l}{\pi^{l/2} R^l / \Gamma(l/2 + 1)} = (4/\pi)^{l/2} \times \Gamma(l/2 + 1).$$

Например, для  $l = 2k$  имеем  $s = (4/\pi)^k \times k!$ . Эта величина очень быстро возрастает. По сути алгоритм 1.45 используется только в случае  $l = 2$  (здесь  $s \approx 1.27$ , а для  $l = 3$  уже  $s \approx 1.91$ ) и тогда, когда элементарные функции, используемые в формуле (1.143), вычисляются относительно медленно.

Из приведенных рассуждений следует, что для моделирования единичного изотропного вектора  $\boldsymbol{\omega}$  при  $l > 3$  целесообразно использовать алгоритм, который следует из утверждения 1.22 и формулы (1.139).

**Алгоритм 1.46.** Пусть для простоты  $l = 2k$ . Применяя  $k$  раз формулу (1.139), формируем вектор  $\boldsymbol{\zeta} = (\xi_1^{(1)}, \xi_2^{(1)}, \dots, \xi_1^{(k)}, \xi_2^{(k)})$  и полагаем  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\zeta}/|\boldsymbol{\zeta}|$ .

**1.10.4. Моделирование гауссовского случайного вектора с зависимыми компонентами.** Рассмотрим вопрос о моделировании случайного вектора  $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \dots, \eta_l)$ , имеющего многомерное нормальное распределение. Это распределение однозначно определяется вектором математических ожиданий  $\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_l)$  и корреляционной матрицей

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & \dots & R_{1l} \\ R_{21} & R_{22} & \dots & R_{2l} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ R_{l1} & R_{l2} & \dots & R_{ll} \end{pmatrix}$$

где  $R_{ij} = \mathbf{E}((\eta_i - m_i)(\eta_j - m_j))$ .

**Алгоритм 1.47.** Используя формулу (1.139), реализуем вектор  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_l)$ , состоящий из независимых стандартных нормальных величин  $\xi_i$ . Полагаем  $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{A}\boldsymbol{\xi} + \mathbf{m}$ , где  $\mathbf{A}$  – нижняя треугольная матрица

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{l1} & a_{l2} & \dots & a_{ll} \end{pmatrix}$$

Коэффициенты матрицы  $\mathbf{A}$  определяются с помощью следующей рекуррентной процедуры. Поскольку  $\eta_1 = a_{11}\xi_1 + m_1$ , то

$$a_{11} = \sqrt{R_{11}} = \sqrt{\mathbf{D}\eta_1}. \quad (1.145)$$

Далее имеем  $\eta_2 = a_{21}\xi_1 + a_{22}\xi_2 + m_2$  и

$$\mathbf{E}(a_{11}\xi_1(a_{21}\xi_1 + a_{22}\xi_2)) = R_{12}, \quad \mathbf{E}(a_{21}\xi_1 + a_{22}\xi_2)^2 = R_{22}.$$

Следовательно,

$$a_{21} = \frac{R_{12}}{a_{11}} = \frac{R_{12}}{\sqrt{R_{11}}}, \quad a_{22} = \sqrt{R_{22} - \frac{R_{12}^2}{R_{11}}}. \quad (1.146)$$

Общая рекуррентная формула такова:

$$a_{ij} = \frac{R_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{ik} a_{jk}}{\sqrt{R_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}^2}}, \quad (1.147)$$

причем  $\sum_{k=1}^0 a_{ik} a_{jk} = 0$ ,  $1 \leq j \leq i \leq l$ . Формула (1.147) проверяется путем рассмотрения величины  $\mathbf{E}((\eta_i - m_i)(\eta_j - m_j))$  сначала для  $i = j$ , а затем для  $j < i$ .

Под знаком радикала в знаменателе выражения (1.147) стоит главный минор порядка  $j$  корреляционной матрицы  $\mathbf{R}$ . Если эта матрица оценивается статистически, то возможны отрицательные значения главных миноров. В это случае целесообразно найти такую ортогональную матрицу  $\mathbf{Q}$ , что  $\mathbf{R} = \mathbf{Q} \text{diag}(r_1, r_2, \dots, r_l) \mathbf{Q}^T$  (здесь  $T$  – знак транспонирования), а для моделирования использовать уточненную корреляционную матрицу

$$\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{Q} \text{diag}(|r_1|, |r_2|, \dots, |r_l|) \mathbf{Q}^T.$$

Если  $r_i = 0$ , то осуществляется замена  $r_i \rightarrow \varepsilon > 0$ .

Дополнительно отметим, что выполняется равенство  $\mathbf{R} = \mathbf{A} \mathbf{A}^T$ , которое принято называть *разложением Холецкого*.

**Пример 1.19.** Пусть требуется построить моделирующие формулы для трехмерного нормального случайного вектора  $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3)$  с параметрами

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \end{pmatrix}.$$

Тогда для матрицы  $\mathbf{A}$  преобразования  $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{A} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{m}$ , согласно формулам (1.145) (примененным для  $a_{11}$  и  $a_{22}$ ) и (1.146) (для  $a_{32}$  и  $a_{33}$ ), имеем

$$a_{12} = a_{13} = a_{21} = a_{31} = a_{23} = 0, \quad a_{11} = \sqrt{R_{11}} = 3, \quad a_{22} = \sqrt{R_{22}} = 2,$$

$$a_{32} = \frac{R_{23}}{\sqrt{R_{22}}} = 1, \quad a_{33} = \sqrt{R_{33} - \frac{R_{23}^2}{R_{22}}} = \sqrt{2}$$

и, следовательно, алгоритм 1.47 имеет вид

$$\eta_1 = 3 \xi_1 + 3, \quad \eta_2 = 2 \xi_2 + 2, \quad \eta_3 = \xi_2 + \sqrt{2} \xi_3 + 4,$$

где независимые стандартные нормальные случайные величины  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  реализуются согласно формуле (1.139).

## ГЛАВА 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ

### 2.1. ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТРАЕКТОРИЙ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ

**2.1.1. Выборочное вероятностное пространство случайной функции.** Трудности построения, описания и исследования численных алгоритмов моделирования траекторий случайных процессов и полей связаны прежде всего с тем обстоятельством, что само понятие *случайной функции* является во многом более сложным для изучения математическим объектом, чем понятие *случайной величины*. Традиционные (не специализированные) курсы теории вероятностей посвящены, как правило, изучению только случайных величин. В связи с этим нам необходимо ввести начальные понятия теории случайных процессов и полей [1–4].

**Определение 2.1.** *Случайной функцией* называется семейство случайных величин  $\xi(\mathbf{t}) = \xi(\mathbf{t}, \omega)$ , заданных на одном вероятностном пространстве  $\Omega$  с  $\sigma$ -алгеброй



$\dot{A}$  и мерой  $\mathbf{P}(A)$ ,  $A \in \dot{A}$ , и зависящих от параметра  $\mathbf{t}$ , принимающего значения из некоторого множества  $T$ . Если  $T$  есть счетное множество в  $R$ , то  $\xi(t)$  – **случайный процесс с дискретным временем** (примерами таких процессов служат **случайные последовательности, цепи Маркова, мартингалы и др.**), а если  $T = (a, b) \subseteq R$ , то  $\xi(t)$  – **случайный процесс с непрерывным временем**. Если  $T$  является подмножеством  $R^l$ , то  $\xi(\mathbf{t})$  называют **случайным полем размерности  $l$** .

В дальнейшем для случайных процессов и полей с непрерывным временем в качестве  $T$  будем рассматривать выпуклую ограниченную область с границей в  $R^l$  (для процессов это просто отрезок  $[a, b]$ ). Отметим также, что если значения  $\xi(\mathbf{t})$  принадлежат  $R^s$  при  $s > 1$ , то ко всем введенным понятиям добавляется прилагательное "векторный" (*векторный случайный процесс, векторное случайное поле* и т.п.) и используется обозначение  $\xi(\mathbf{t})$ .

Если зафиксировать  $\omega_0 \in \Omega$ , то мы получаем неслучайную функцию  $\xi(\mathbf{t}, \omega_0) = \xi_0(\mathbf{t})$ ,  $\mathbf{t} \in T$ .

**Определение 2.2.** *Функция  $\xi_0(\mathbf{t})$  называется траекторией, или выборочной функцией, или реализацией случайной функции.*

Таким образом, в роли случайных величин выступают функции. Рассмотрим пространство  $Z(T)$  функций  $z(\mathbf{t})$ ,  $\mathbf{t} \in T$ , в котором с вероятностью единица лежат траектории случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$ . Обозначим через  $\dot{A}_Z$   $\sigma$ -алгебру подмножеств из  $Z(T)$ , порожденную (с помощью операций объединения, пересечения и дополнения) так называемыми *цилиндрическими множествами* вида

$$A = \{z \in Z : z(\mathbf{t}_1) \in Y_1, \dots, z(\mathbf{t}_n) \in Y_n\}$$

для всевозможных значений  $n$  и  $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_n$  из  $T$  и борелевских множеств  $Y_1, \dots, Y_n$  из  $R$ . Если случайная функция  $\xi(\mathbf{t}, \omega)$  задана, то она определяет измеримое отображение пространства  $\Omega$  с  $\sigma$ -алгеброй  $\dot{A}$  в пространство  $Z(T)$  с  $\sigma$ -алгеброй  $\dot{A}_Z$ , так как, очевидно,  $\xi^{-1}(A) = \{\omega : \xi(\mathbf{t}, \omega) \in A\} \in \dot{A}$  для любого цилиндрического множества  $A$ , и поэтому  $\xi^{-1}(B) \in \dot{A}$  для любого  $B \in \dot{A}_Z$ . Это отображение индуцирует *распределение случайной функции*  $\mathbf{P}_\xi(B)$  на  $Z(T)$ , определяемое равенствами  $\mathbf{P}_\xi(B) = \mathbf{P}(\xi^{-1}(B))$  для всевозможных  $B \in \dot{A}_Z$ .

**Определение 2.3.** *Пространство  $Z(T)$  с  $\sigma$ -алгеброй  $\dot{A}_Z$  и мерой  $\mathbf{P}_\xi(B)$  называется выборочным вероятностным пространством.*

Еще раз подчеркнем, что элементарный исход " $\tilde{\omega}$ " для выборочного вероятностного пространства отождествляется с траекторией процесса.

Для случайных функций с непрерывным временем в качестве  $Z(T)$  мы будем рассматривать в основном два пространства:  $C(T)$  и  $D(T)$ . Множество  $C(T)$  – это пространство непрерывных на  $T$  функций, причем  $\sigma$ -алгебра  $\dot{A}_C$  совпадает в этом пространстве с  $\sigma$ -алгеброй, порожденной множествами, открытыми относительно равномерной метрики

$$\rho_C(z_1, z_2) = \sup_{\mathbf{t} \in T} |z_1(\mathbf{t}) - z_2(\mathbf{t})|, \quad z_1(\mathbf{t}), z_2(\mathbf{t}) \in C(T).$$

Пространство  $D(T)$  определим сначала для одномерного случая при  $T = [a, b] \subset R$ : это пространство функций  $z(t)$ , заданных на отрезке  $[a, b]$ , без разрывов второго рода, т.е. в каждой точке  $t \in (a, b)$  существуют конечные пределы  $z(t+0)$  и  $z(t-0)$ , причем значение  $z(t)$  совпадает либо с  $z(t+0)$ , либо с  $z(t-0)$ . Для определенности принимаем  $z(t) = z(t+0)$  и  $z(b) = z(b-0)$ . Здесь соответствующая метрика, порождающая  $\dot{A}_D$ , носит название *метрики Скорохода* и определяется следующим образом:

$$\rho_D(z_1, z_2) = \inf_{\theta(t) \in \Theta} \{ \rho_C(z_1(t), z_2(\theta(t))) + \sup_{a \leq t \leq b} |t - \theta(t)| \},$$

где  $z_1(t), z_2(t) \in D([a, b])$ , а  $\Theta$  – совокупность всех непрерывных монотонно возрастающих на  $[a, b]$  функций  $\theta(t)$ , для которых  $\theta(a) = a, \theta(b) = b$ .

Спецификой многомерного случая  $T \subset R^l$  является то обстоятельство, что имеется несколько подходов к определению функционального нормированного пространства  $D(T)$ . Здесь мы реализуем подход Н.Н.Ченцова [5], состоящий в следующем.

Пусть  $T = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_l, b_l]$ . Для каждого  $i$  ( $i = 1, \dots, l$ ) будем рассматривать функцию  $z(\mathbf{t}) = z(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i, t_{i+1}, \dots, t_l)$ , заданную на  $T$ , как функцию главного аргумента  $t_i$ , ставящую в соответствие каждому  $t_i = t_i^{(0)} \in [a_i, b_i]$  элемент

$$g(\mathbf{s}) = z(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(0)}, t_{i+1}, \dots, t_l), \quad \mathbf{s} = (t_1, \dots, t_{i-1}, t_{i+1}, \dots, t_l),$$

нормированного функционального пространства  $G_i$  с нормой

$$\|g\|_{G_i} = \sup_{\mathbf{s} \in T_{(i)}} |g(\mathbf{s})|,$$

где  $T_{(i)} = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_{i-1}, b_{i-1}] \times [a_{i+1}, b_{i+1}] \times \dots \times [a_l, b_l]$ . Тогда отсутствие  $t_i$ -разрывов второго рода вводится по аналогии с одномерным случаем: в каждой точке  $t_i^{(0)} \in [a_i, b_i]$  для любого  $\varepsilon > 0$  существует  $\delta > 0$  такое, что  $t_i^{(0)} + \delta \leq b_i$  и для всех  $t_i^{(1)} \in (t_i^{(0)}, t_i^{(0)} + \delta)$  выполнено

$$\|z(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(1)}, t_{i+1}, \dots, t_l) - z(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(0)}, t_{i+1}, \dots, t_l)\|_{G_i} < \varepsilon.$$

Получаем  $D(T)$  – пространство функций без разрывов второго рода по каждой координате с обобщенной метрикой Скорохода:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_D(z_1, z_2) = \max_{i=1, \dots, l} \inf_{\theta^{(i)} \in \Theta^{(i)}} \left\{ \sup_{a_i \leq t_i^{(0)} \leq b_i} \|z_1(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(0)}, t_{i+1}, \dots, t_l) - \right. \\ \left. - z_2(t_1, \dots, t_{i-1}, \theta^{(i)}(t_i^{(0)}), t_{i+1}, \dots, t_l)\|_{G_i} + \sup_{a_i \leq t_i^{(0)} \leq b_i} |t_i^{(0)} - \theta^{(i)}(t_i^{(0)})| \right\}. \end{aligned}$$

**2.1.2. Конечномерные распределения случайной функции. Функция математических ожиданий. Корреляционная функция. Гауссовское случайное поле.** При определении и моделировании случайных функций важным является следующее понятие. Если при рассмотрении случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$  зафиксировать значения  $\mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(K)}$  из  $T$ , то мы получим многомерную случайную величину (случайный вектор)  $(\xi(\mathbf{t}^{(1)}), \dots, \xi(\mathbf{t}^{(K)}))$ .

**Определение 2.4.** *Распределения величин  $(\xi(\mathbf{t}^{(1)}), \dots, \xi(\mathbf{t}^{(K)}))$  для различных  $K$  и различных наборов  $\mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(K)}$  называют конечномерными распределениями случайной функции.*

Случайная функция, как правило, задается своими конечномерными распределениями. При этом они должны удовлетворять специальным условиям согласованности. Кроме того, следует учитывать, что если не дается дополнительной информации о свойствах траекторий функции, то данный набор конечномерных распределений определяет целый класс стохастически эквивалентных случайных функций. Однако, если потребовать, чтобы траектории случайной функции принадлежали пространствам  $C(T)$  или  $D(T)$ , то конечномерные распределения определяют случайную функцию однозначно.

**Определение 2.5.** *Функция  $m(\mathbf{t}) = \mathbf{E}\xi(\mathbf{t})$  называется функцией математического ожидания случайной функции, а функция двух переменных*

$$R(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)}) = \mathbf{E}(\xi(\mathbf{t}^{(1)}) - m(\mathbf{t}^{(1)}))(\xi(\mathbf{t}^{(2)}) - m(\mathbf{t}^{(2)})) \quad (2.1)$$

**корреляционной функцией.** Для комплекснозначных функций  $\xi(\mathbf{t})$  эта функция имеет вид

$$R(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)}) = \mathbf{E}(\xi(\mathbf{t}^{(1)}) - m(\mathbf{t}^{(1)})) (\xi(\mathbf{t}^{(2)}) - m(\mathbf{t}^{(2)}))^*, \quad (2.2)$$

где знак "\*" обозначает комплексное сопряжение. Функция  $\mathbf{D}(\mathbf{t}) = R(\mathbf{t}, \mathbf{t})$  называется **функцией дисперсии** случайной функции.

В некоторых работах функция вида (2.1) (или (2.2)) называется *автокорреляционной функцией, ковариационной функцией, автоковариационной функцией.*

Функции  $m(\mathbf{t})$  и  $R(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)})$  являются усредненными характеристиками одномерных и двумерных распределений и, вообще говоря, полностью не определяют случайную функцию. Имеется один важный частный случай, когда функции  $m(\mathbf{t})$  и  $R(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)})$  полностью определяют случайное поле  $\xi(\mathbf{t})$  (случайный процесс  $\xi(t)$ ).

**Определение 2.6.** Действительное случайное поле (процесс) называется **гауссовским**, если все его согласованные конечномерные распределения являются гауссовскими. Комплекснозначное случайное поле  $\xi(\mathbf{t}) = \xi_1(\mathbf{t}) + i\xi_2(\mathbf{t})$ ,  $\mathbf{t} \in R^l$  называется гауссовским, если пара  $(\xi_1(\mathbf{t}), \xi_2(\mathbf{t}))$  образует действительное двумерное гауссовское поле.

На практике во многих случаях имеется информация только о функции математического ожидания и корреляционной функции изучаемого случайного поля. Поэтому достаточно часто делается предположение о гауссовости этого поля. В связи с этим в литературе по численному статистическому моделированию особое внимание уделяется построению моделей именно гауссовских случайных функций [6–10]. Важным аргументом в пользу использования гауссовских случайных моделей является использование центральной предельной теоремы при изучении сходимости конечномерных распределений конструируемых моделей (см. далее подразд. 2.3.1).

**2.1.3. Основы корреляционной теории стационарных случайных функций.** Представим еще одно важное понятие.

**Определение 2.7.** Случайный процесс  $\xi(t)$ ,  $t \in R$  называется **стационарным (в узком смысле)**, если при любых  $K$  и  $t^{(1)}, \dots, t^{(K)}$  из  $T$  распределение многомерной случайной величины  $(\xi(t^{(1)} + u), \dots, \xi(t^{(K)} + u))$  не зависит от  $u$ . При этом  $m(t) = \text{const}$ , а корреляционная функция  $R(t^{(1)}, t^{(2)}) \equiv R(u)$  зависит только от разности  $u = t^{(1)} - t^{(2)}$ . Последние два свойства определяют **стационарность в широком смысле** случайных процессов и полей, причем для полей вместо термина "стационарность в широком смысле" используют термин "однородность".

Большую роль (сравнимую с теорией гильбертовых пространств в 'обычном' – не стохастическом – функциональном анализе) играет так называемая *корреляционная теория стационарных (в широком смысле) случайных функций* [4]. Основы этой теории мы изложим для случая комплекснозначных случайных функций (в этом случае необходимые обозначения более компактны и наглядны).

Для того чтобы функция  $R(\mathbf{u})$  была корреляционной функцией комплекснозначного однородного случайного поля (стационарного в широком смысле случайного процесса) с непрерывным временем, необходимо и достаточно, чтобы она допускала представление вида

$$R(\mathbf{u}) = \int_{\Lambda} e^{i(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})} F(d\boldsymbol{\lambda}), \quad (2.3)$$

где  $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})$  обозначает скалярное произведение векторов  $\mathbf{u}$  и  $\boldsymbol{\lambda}$  из  $R^l$ :  $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = u_1\lambda_1 + \dots + u_l\lambda_l$ , а  $F(\boldsymbol{\lambda})$  – некоторую конечную меру на борелевских множествах *спектрального пространства*  $\Lambda \subseteq R^l$ .

**Определение 2.8.** Соотношение (2.3) называется **спектральным разложением** корреляционной функции  $R(\mathbf{u})$ . Мера  $F(\Lambda)$  из (2.3) называется **спектральной мерой**. Если спектральная мера абсолютно непрерывна  $F(A) = \int_A f(\lambda) d\lambda$ , то  $f(\lambda)$  называют **спектральной плотностью**.

Согласно теореме Бохнера–Хинчина (см. далее утверждение 2.1), для комплекснозначных стационарных в широком смысле случайных функций с непрерывными траекториями справедливо соотношение

$$\xi(\mathbf{t}) = m + \int_{\Lambda} e^{i(\lambda, \mathbf{t})} d\Phi(\lambda), \quad (2.4)$$

где  $m \equiv \mathbf{E} \xi(\mathbf{t})$ ,  $\Phi(\lambda)$  – случайная функция с некоррелированными приращениями и нулевым средним, такая что для любых борелевских множеств  $A_1$  и  $A_2$  из  $\Lambda$  выполнено

$$\mathbf{E} \int_{A_1} d\Phi(\lambda) \left( \int_{A_2} d\Phi(\lambda) \right)^* = F(A_1 \cap A_2).$$

Интеграл в (2.4) понимается как предел в среднеквадратическом соответствующих интегральных сумм (см. далее утверждение 2.1 и подразд. 2.3.1).

**Определение 2.9.** Соотношение (2.4) называется **спектральным представлением** стационарной случайной функции.

Для вещественнозначных случайных функций  $\xi(\mathbf{t})$  спектральная плотность  $f(\lambda)$  является четной по каждой координате функции:

$$f(\lambda) = f(\lambda_1, \dots, \lambda_{i-1}, \lambda_i, \lambda_{i+1}, \dots, \lambda_l) = f(\lambda_1, \dots, \lambda_{i-1}, -\lambda_i, \lambda_{i+1}, \dots, \lambda_l).$$

Кроме того, мнимая часть  $\Phi(\lambda)$  – нечетная, а действительная часть – четная функция от  $\lambda$ , т.е. для симметричных относительно начала координат областей  $A_1$  и  $A_2$  ( $\lambda \in A_1 \iff -\lambda \in A_2$ ) выполнено  $\int_{A_1} d\Phi(\lambda) = \left( \int_{A_2} d\Phi(\lambda) \right)^*$ , причем для сохранения некоррелированности необходимо, чтобы  $\Phi_1 = \text{Re} \int_{A_1} d\Phi(\lambda)$  и  $\Phi_2 = \text{Im} \int_{A_1} d\Phi(\lambda)$  были независимы и

$$\mathbf{E} \Phi_1 = \mathbf{E} \Phi_2 = 0, \quad \mathbf{D} \Phi_1 = \mathbf{D} \Phi_2 = \frac{1}{2} \int_{A_1} f(\lambda) d\lambda.$$

Тогда выражения (2.3) и (2.4) имеют вид

$$R(\mathbf{u}) = \int_{\Lambda} \cos(\mathbf{u}, \lambda) f(\lambda) d\lambda = 2 \int_{\Lambda_+} \cos(\mathbf{u}, \lambda) f(\lambda) d\lambda,$$

$$\xi(\mathbf{t}) = m + \int_{\Lambda_+} \cos(\mathbf{t}, \lambda) d\Phi_1(\lambda) + \int_{\Lambda_+} \sin(\mathbf{t}, \lambda) d\Phi_2(\lambda),$$

где  $\Lambda_+ = \{\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_l) : \lambda_i \geq 0\}$ , а  $\Phi_1(\lambda)$  и  $\Phi_2(\lambda)$  – вещественные случайные функции с некоррелированными приращениями и совпадающими дисперсиями приращений, причем

$$\Phi(\lambda) = \frac{\Phi_1(\lambda) - \Phi_2(\lambda)}{2} \quad \text{при } \lambda \in \Lambda_+.$$

Последние соотношения показывают, что в вещественнозначном случае формулы для спектрального разложения корреляционной функции и для спектрального представления случайной функции действительно являются более громоздкими, чем в комплекснозначном случае.

Утверждение о существовании спектрального представления (2.4) доказывается с помощью предельного перехода от случая конечного спектра (который соответствует стохастической интегральной сумме), при этом используется следующая *теорема Бохнера–Хинчина*.

**Утверждение 2.1.** *Если  $\Lambda_1, \dots, \Lambda_n$  – разбиение спектрального пространства  $\Lambda$  на простые пространственно-односвязные области такие, что  $\Lambda_i \cap \Lambda_j = \emptyset$  при  $i \neq j$ ;  $\Lambda_n = \{|\lambda| \geq t_n\}$ , а  $\Lambda_1, \dots, \Lambda_{n-1}$  разбивают область  $\{|\lambda| < t_n\}$  так, что при  $n \rightarrow \infty$  одновременно выполнено*

$$t_n \rightarrow +\infty \quad \text{и} \quad \max_{1 \leq k \leq n-1} \text{diam } \Lambda_k \rightarrow 0, \quad (2.5)$$

*то имеет место соотношение*

$$\int_{\Lambda} e^{i(t, \lambda)} d\Phi(\lambda) = \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \left( e^{i(t, \lambda_k)} \int_{\Lambda_k} d\Phi(\lambda) \right), \quad (2.6)$$

где  $\lambda_k \in \Lambda_k$ , а l.i.m. – предел в среднеквадратическом:

$$\text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \xi_n(\mathbf{t}) = \xi(\mathbf{t}), \quad \text{если} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{E}|\xi(\mathbf{t}) - \xi_n(\mathbf{t})|^2 = 0. \quad (2.7)$$

Доказательство утверждения 2.1 непосредственно следует из доказательства утверждения 2.15, в котором получена скорость сходимости (2.6) (см. далее подразд. 2.6.3). Отметим также, что соотношение (2.6) служит основой построения спектральных моделей случайных полей (см. далее подразд. 2.6.2).

**2.1.4. Особенности численного моделирования случайных функций.** Уже при исследовании алгоритмов реализации значений случайных величин мы видели, что тот или иной метод моделирования имеет ограниченную область применимости. Для случайной функции, являющейся более сложным математическим объектом, построение процедур численного моделирования траекторий является весьма непростой задачей. Эффективные алгоритмы разработаны лишь для достаточно узкого класса случайных функций [6–10].

Если случайная функция  $\xi(\mathbf{t})$  с непрерывным временем задана своими (согласованными) конечномерными распределениями, то разлагая совместные плотности этих распределений (если они существуют) в произведение условных плотностей, можно последовательно моделировать значения случайной функции в соответствующем конечном наборе точек  $\mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(n)}$  согласно стандартному методу реализации выборочных значений случайного вектора (см. алгоритм 1.16 из разд. 1.5), а затем восполнять траектории по полученным значениям  $\tilde{\xi}(\mathbf{t}^{(1)}), \dots, \tilde{\xi}(\mathbf{t}^{(n)})$  (см. далее алгоритм 2.4). В ряде изданий такая процедура называется *методом условных математических ожиданий*. Однако при больших  $n$  этот алгоритм (даже если он осуществим) оказывается чрезвычайно трудоемким. Следует также отметить, что в прикладных задачах полная информация о конечномерных распределениях известна крайне редко.

На практике относительно моделируемой случайной функции делается ряд предположений, часто недостаточно полный для того, чтобы случайная функция была определена однозначно. Особенно это проявляется при реализации негауссовских функций, для которых спектр эффективных алгоритмов моделирования недостаточно широк, и для соответствующих моделей выполняются лишь весьма общие предположения (стационарность, негауссовость реализаций, воспроизведение одномерного распределения, сохранение первых моментов), а остальные характеристики принимаются такими, какими получаются при моделировании.

Ряд моделей представляет собой последовательность случайных функций  $\xi_n(\mathbf{t})$ , для которой требуемые свойства моделируемых траекторий получаются только при  $n \rightarrow \infty$ . Для таких моделей требуется изучать сходимость последовательности  $\xi_n(\mathbf{t})$  в различных вероятностных смыслах (см. далее разд. 2.3).

Следует также отметить, что теория численного моделирования случайных функций является относительно новым научным направлением с не вполне устоявшейся терминологией. Кроме того, конкретные приложения требуют, как правило, использования специальных конструкций и приемов при моделировании случайных процессов и полей, при этом имеющаяся общность вычислительных конструкций не очевидна в силу наличия большого количества специальных нестандартных терминов.

## 2.2. АДЕКВАТНОСТЬ МОДЕЛЕЙ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ

**2.2.1. Воспроизведение одномерных распределений. Метод обратной функции распределения.** Как указано в разд. 2.1, в общем случае построение численных моделей случайных функций с точным воспроизведением всех конечномерных распределений либо крайне трудоемко, либо невозможно. Как правило, ставится задача реализации требуемого одномерного распределения и некоторых усредненных характеристик многомерных распределений (в первую очередь, корреляционной функции).

Укажем прежде всего следующую возможность реализации заданной непрерывной функции  $F_\xi(x)$  одномерного распределения случайного поля  $\xi(\mathbf{t})$ .

**Алгоритм 2.1.** *Реализуем экономичную модель  $\tilde{\eta}(\mathbf{t})$  случайной функции  $\eta(\mathbf{t})$  с непрерывной функцией  $F_\eta(y)$  одномерного распределения. Случайную функцию  $\xi(\mathbf{t})$  моделируем согласно формуле*

$$\tilde{\xi}(\mathbf{t}) = F_\xi^{-1}(F_\eta(\tilde{\eta}(\mathbf{t}))). \quad (2.8)$$

Алгоритм 2.1 называется *методом обратной функции распределения*. Случайная функция  $\tilde{\xi}(\mathbf{t})$  имеет функцию одномерного распределения  $F_\xi(x)$ . Это следует из того простого факта, что стандартное случайное число  $\alpha$  и  $F_\eta(\eta)$  одинаково распределены (здесь  $F_\eta(x)$  – непрерывная функция распределения случайной величины  $\eta$ ) – см. подразд. 1.4.1.

Отметим, что алгоритм 2.1, как правило, используется для моделирования стационарных случайных функций, причем в качестве  $\tilde{\eta}(\mathbf{t})$  используется модель  $\tilde{\gamma}(\mathbf{t})$  однородного гауссовского случайного поля  $\gamma(\mathbf{t})$  с математическим ожиданием  $\mathbf{E}\gamma(\mathbf{t}) \equiv 0$ , корреляционной функцией  $\rho(u)$  и дисперсией  $\mathbf{D}\gamma(\mathbf{t}) = \rho(0) = 1$ . При этом соотношение (2.8) приобретает вид

$$\tilde{\xi}(\mathbf{t}) = F_\xi^{-1}(\Phi(\tilde{\gamma}(\mathbf{t}))), \quad (2.9)$$

где  $\Phi(y)$  – функция стандартного нормального распределения. Именно в этой форме метод обратной функции распределения в большинстве случаев представлен в литературе по моделированию случайных процессов и полей (см., например, [8]).

Определенное затруднение при использовании формулы (2.9) связано с тем, что функция  $\Phi(y)$  не имеет аналитического представления; ее приходится табулировать. Не всегда также удается аналитически выразить функцию  $F_\xi^{-1}(z)$ . Поэтому здесь поступают следующим образом. Вместо функции  $F_\xi^{-1}(\Phi(y))$  в формулу (2.9) подставляют легко вычисляемые функции  $\psi(y)$ :

$$\tilde{\xi}_\psi(\mathbf{t}) = \psi(\tilde{\gamma}(\mathbf{t})), \quad (2.10)$$

и изучают возможные вероятностные распределения случайных величин  $\psi(\gamma)$ , где  $\gamma$  – стандартная нормальная случайная величина. Например, в случае, когда  $\psi(y)$  – непрерывно дифференцируемая строго возрастающая функция, по аналогии с формулой (1.65) из подразд. 1.4.4 получаем следующий вид плотности одномерного распределения случайной функции (2.10):

$$f_\xi(x) = f_\gamma(q(x))q'(x), \quad (2.11)$$

где  $q(x) = \psi^{-1}(x)$ .

**Пример 2.1.** Если  $\psi(y) = e^y$ , то согласно (2.11) имеем

$$f_\xi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi x}} \exp\left(-\frac{\ln^2 x}{2}\right), \quad x > 0.$$

Последнее распределение называется *логарифмически нормальным*. Учитывая стационарность случайного процесса  $\gamma(t)$  (а значит, и  $\xi(t)$ ), соответствующая корреляционная функция имеет вид  $R(u) = (\exp(\rho(u)) - 1)/(e - 1)$ , где  $\rho(u)$  – корреляционная функция процесса  $\gamma(t)$  (см. далее общую формулу (2.12)); здесь  $l = 1$ .

**2.2.2. Воспроизведение корреляционных функций.** В предыдущем подразделе 2.2.1 показано, что уже на уровне воспроизведения одномерных распределений случайных функций возникают определенные трудности. Что касается двумерных распределений (а тем более конечномерных распределений размерности три и выше), то здесь не всегда удается получить даже усредненные характеристики, в частности, корреляционную функцию (2.1).

Для ряда конструкций можно получить корреляционные функции частного вида – с экспоненциальными, дробно-рациональными спектральными плотностями (см. далее разд. 2.4, 2.5, 2.7) и др. Иногда требуемая корреляционная функция получается для приближенной модели  $\xi_n(\mathbf{t})$  случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$  асимптотически при  $n \rightarrow \infty$ . Имеется ряд приемов, обеспечивающих точное численное воспроизведение корреляционной функции моделируемой случайной функции. Один из таких приемов связан с понятием *рандомизированной спектральной модели*, описанной далее в разд. 2.6.

Имеются также исследования, связанные с возможностью точного воспроизведения корреляционной функции при применении метода обратной функции распределения (см. алгоритм 2.1) [10]. Приведем соответствующие соображения для одномерного случая – для моделирования случайного процесса  $\xi(t)$ .

Справедливо следующее представление для корреляционной функции случайного процесса  $\tilde{\xi}(t)$  из (2.9):

$$\tilde{R}_\rho(t^{(2)} - t^{(1)}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F_{\xi(t^{(1)})}^{-1}(\Phi(v_1))F_{\xi(t^{(2)})}^{-1}(\Phi(v_2)) dv_1 dv_2}{2\pi\sqrt{1 - \rho^2 \exp((v_1^2 + v_2^2 - 2\rho v_1 v_2)/(2(1 - \rho^2)))}}, \quad (2.12)$$

где  $\rho = \rho(t^{(2)} - t^{(1)})$  – корреляционная функция соответствующего стандартного стационарного гауссовского процесса  $\gamma(t)$ . Если требуется моделировать стационарный случайный процесс  $\xi(t)$  с корреляционной функцией  $r(u)$ , то возможна следующая модификация алгоритма 2.1.

**Алгоритм 2.2.** Вычислим функцию  $\rho(u)$  путем решения уравнения  $\tilde{R}_\rho(u) = r(u)$ , построим однородный гауссовский процесс  $\tilde{\gamma}(t)$  с этой корреляционной функцией и применим преобразование (2.9).

Функция  $\tilde{R}_\rho(u)$  обладает следующими свойствами:  $|\tilde{R}_\rho(u)| \leq |\rho(u)|$ ; при  $\rho(u) \geq 0$  функция  $\tilde{R}_\rho(u)$  выпукла вниз;  $\tilde{R}_\rho(u) \equiv 1$  при  $\rho(u) \equiv 1$  и  $\tilde{R}_\rho(u) \equiv A \geq -1$  при  $\rho(u) \equiv -1$  (равенство достигается только для симметричных относительно нуля одномерных распределений, определяемых функцией  $F_\xi(x)$ ). Модификация метода обратной функции

распределения – алгоритм 2.2 – применим только для корреляционных функций  $r(u)$ , удовлетворяющих неравенству  $r(u) \geq A$ .

**2.2.3. Воспроизведение многомерных конечномерных распределений. Моделирование гауссовского марковского случайного процесса.** Точное моделирование всех конечномерных распределений удается крайне редко. В качестве примеров приведем две модели марковского процесса.

**Определение 2.10.** Марковским называется случайный процесс  $\xi(t)$  такой, что для любого момента времени  $t_0$  и фиксированного состояния  $\xi(t_0) = x'$  случайные величины  $\xi(t)$ ,  $t > t_0$  не зависят от величин  $\xi(t)$ ,  $t < t_0$ .

Марковский процесс задается переходной функцией (или вероятностями перехода)  $P(t', x', t, A)$ , где  $t', t$  принадлежат множеству параметров  $T \subseteq R$  и  $t' \leq t$ ,  $x'$  принадлежит множеству значений из  $R^s$  с  $\sigma$ -алгеброй борелевских множеств  $\dot{A}$ ,  $A \in \dot{A}$ . При  $s > 1$  получаем векторный марковский процесс  $\xi(t)$ .

Переходная функция обладает следующими свойствами:

- 1) при фиксированных  $t', x'$  и  $t$  она является вероятностной мерой на  $\sigma$ -алгебре  $\dot{A}$ ;
- 2) при фиксированных  $t', t$  и  $A$  она  $\dot{A}$ -измерима по  $x'$ ;
- 3) при фиксированных  $t'$  и  $t$  с вероятностью единица она совпадает с условной вероятностью  $P(t', x', t, A) = \mathbf{P}(\xi(t) \in A | \xi(t') = x')$ ;
- 4) выполнено уравнение Чепмена–Колмогорова

$$P(t_1, x_1, t_3, A) = \int_{R^s} P(t_2, x_2, t_3, A) P(t_1, x_1, t_2, dx_2),$$

в соответствии с которым процесс, выходящий из точки  $x_1$  в момент времени  $t_1$  и попавший в  $A$  в момент времени  $t_3$ , должен пройти промежуточное состояние  $x_2$  в момент времени  $t_2$ :  $t_1 \leq t_2 \leq t_3$ .

В дальнейшем будем также предполагать существование (быть может, обобщенной) переходной плотности, т.е. неотрицательной функции  $p(t', x', t, x)$  такой, что

$$\mathbf{P}(\xi(t) \in A | \xi(t') = x') = P(t', x', t, A) = \int_A p(t', x', t, x) dx.$$

Широкий класс методов Монте-Карло для решения интегральных уравнений второго рода, прямого моделирования процессов переноса частиц излучения или вещества, решения краевых задач основан на моделировании марковских процессов с дискретным временем или цепей Маркова.

**Определение 2.11.** Переходной плотностью цепи Маркова (или плотностью вероятности перехода за один шаг) называют функцию  $p(t_i, x', t_{i+1}, x)$ , где  $t_i$  и  $t_{i+1}$  – два последовательных дискретных момента времени из  $T$ . Марковскую цепь называют однородной, если переходная плотность не зависит от  $t_i, t_{i+1}$  для любого  $i$ :  $p(t_i, x', t_{i+1}, x) = p(x' \rightarrow x) = p(x', x)$ .

В реальных вероятностных моделях множество  $T$  имеет минимальный элемент  $t_0$ , и тогда однородная цепь Маркова однозначно определяется плотностью распределения начального состояния  $\pi(x)$  и переходной плотностью  $p(x', x)$ . После того как эти плотности определены, алгоритм моделирования цепи Маркова строится весьма просто с учетом того обстоятельства, что при фиксированном  $x'$  переходная плотность  $p(x', x)$  является плотностью распределения следующего состояния, представляющего собой случайную величину или случайный вектор. Используя весь арсенал методов моделирования случайных величин и случайных векторов, рассмотренных нами в главе 1,



можно осуществлять последовательную реализацию состояний цепи Маркова, в результате чего мы получаем нужную нам траекторию (см. также алгоритм 1.17 из подразд. 1.5.3).

Второй пример численного воспроизведения конечномерных распределений связан с моделированием непрерывного векторного марковского гауссовского процесса  $\boldsymbol{\xi}(t) = (\xi_1(t), \dots, \xi_m(t))$  на полуинтервале  $(t_0, \infty)$ . Пусть требуется получить  $K$ -мерное выборочное значение  $(\boldsymbol{\xi}(t_1), \dots, \boldsymbol{\xi}(t_K))$  этого процесса; здесь  $t_1 < \dots < t_K$ .

Векторный марковский процесс  $\boldsymbol{\xi}(t)$  однозначно определяется распределением начального случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}(t_0)$  и условной вероятностью  $\mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}(t) \in A | \boldsymbol{\xi}(s) = x)$  для всех  $t > s$ . Поскольку процесс  $\boldsymbol{\xi}(t)$  предполагается также гауссовским (см. определение 2.6), то он может быть определен своей векторной функцией математических ожиданий  $\mathbf{a}(t) = (a_1(t), \dots, a_m(t))$  и матричной корреляционной функцией

$$\mathbf{R}(t^{(1)}, t^{(2)}) = \{R_{ij}(t^{(1)}, t^{(2)}) = \mathbf{E}(\xi_i(t^{(1)}) - a(t^{(1)}))(\xi_j(t^{(2)}) - a(t^{(2)}))\}; \quad i, j = 1, \dots, m.$$

Предположим, что функции  $\mathbf{a}(t)$  и  $\mathbf{R}(t^{(1)}, t^{(2)})$  заданы. Для  $t^{(2)} > t^{(1)} \geq t_0$  справедливы формулы

$$\mathbf{a}(t^{(2)} | \boldsymbol{\xi}(t^{(1)})) = \mathbf{E}(\boldsymbol{\xi}(t^{(2)}) | \boldsymbol{\xi}(t^{(1)}) = \mathbf{z}_1) = \mathbf{a}(t^{(2)}) + \mathbf{R}(t^{(1)}, t^{(2)})\mathbf{R}^{-1}(t^{(1)}, t^{(1)})(\mathbf{z}_1 - \mathbf{a}(t^{(1)})), \quad (2.13)$$

$$\mathbf{R}(t^{(2)}, t^{(2)} | \boldsymbol{\xi}(t^{(1)}) = \mathbf{z}_1) = \mathbf{R}(t^{(2)}, t^{(2)}) + \mathbf{R}(t^{(1)}, t^{(2)})\mathbf{R}^{-1}(t^{(1)}, t^{(1)})\mathbf{R}(t^{(2)}, t^{(1)}). \quad (2.14)$$

**Алгоритм 2.3.** *Реализуем начальное значение  $\boldsymbol{\xi}(t_0) = \mathbf{z}_0$  согласно алгоритму 1.47 моделирования случайного нормального вектора со средним  $\mathbf{a}(t_0)$  и корреляционной матрицей  $\mathbf{R}(t_0, t_0)$  (см. подразд. 1.10.4). Дальнейшие значения получаем по формуле*

$$\boldsymbol{\xi}(t_i) = \mathbf{z}_i = \mathbf{a}(t_i | \boldsymbol{\xi}(t_{i-1}) = \mathbf{z}_{i-1}) + \mathbf{A}\mathbf{w}, \quad i = 1, 2, \dots, K.$$

Здесь  $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_m)$  – реализация случайного нормального вектора с независимыми компонентами ( $\mathbf{E}w_k = 0$ ,  $\mathbf{D}w_k = 1$ ;  $k = 1, \dots, m$ ), а  $\mathbf{A}$  – нижняя треугольная матрица такая, что  $\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{R}(t_i, t_i | \boldsymbol{\xi}(t_{i-1}) = \mathbf{z}_{i-1})$ . В свою очередь, функции  $\mathbf{a}(t_i | \boldsymbol{\xi}(t_{i-1}) = \mathbf{z}_{i-1})$  и  $\mathbf{R}(t_i, t_i | \boldsymbol{\xi}(t_{i-1}) = \mathbf{z}_{i-1})$  находятся по формулам (2.13) и (2.14) соответственно.

Представление матрицы  $\mathbf{R}$  в виде  $\mathbf{R} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$  (здесь  $T$  – знак транспонирования) называют ее разложением Холесского (или факторизацией; см. также подразд. 1.10.4). Кроме моделирования конечномерных распределений  $(\boldsymbol{\xi}(t_1), \dots, \boldsymbol{\xi}(t_K))$  алгоритм 2.3 можно использовать при реализации алгоритма 2.4 (см. далее раздел 2.4), связанного с дискретизацией случайного процесса с непрерывным временем с последующим восполнением. Такая трактовка алгоритма 2.3 использована далее в разделе 2.5 при построении алгоритма 2.11.

## 2.3. СХОДИМОСТЬ МОДЕЛЕЙ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ

### 2.3.1. Сходимость конечномерных распределений. Сходимость в среднем.

Многие модели случайных функций  $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{t})$  представляют собой последовательности случайных процессов и полей  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$ , определенных на одном вероятностном пространстве, для которых требуемые свойства выполняются асимптотически при  $n \rightarrow \infty$ . Существуют разные виды вероятностной сходимости последовательностей случайных функций [1, 2].

**Определение 2.11.** Говорят, что конечномерные распределения последовательности  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  сходятся к конечномерным распределениям случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$ , если для любого  $K$  и любого набора точек  $\{\mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(K)}\}$  функция распределения

$$F_{\xi_n}^{(K)}(\mathbf{x}) = F_{\xi_n}^{(K)}(x_1, \dots, x_K) = \mathbf{P}(\xi_n(\mathbf{t}^{(1)}) < x_1, \dots, \xi_n(\mathbf{t}^{(K)}) < x_K)$$

сходится к функции  $F_{\xi}^{(K)}(\mathbf{x})$  в каждой точке  $\mathbf{x}$ , где функция  $F_{\xi}^{(K)}(\mathbf{x})$  непрерывна.

Сформулированное определение эквивалентно тому, что для любой ограниченной непрерывной функции  $K$  переменных  $f(\mathbf{x})$  выполнено

$$\mathbf{E}f(\xi_n(\mathbf{t}^{(1)}), \dots, \xi_n(\mathbf{t}^{(K)})) \rightarrow \mathbf{E}f(\xi(\mathbf{t}^{(1)}), \dots, \xi(\mathbf{t}^{(K)})) \quad \text{при } n \rightarrow \infty;$$

последнее соотношение часто принимается за определение сходимости конечномерных распределений.

**Определение 2.12.** Говорят, что последовательность  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  сходится (почти) к случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$  в среднем степени  $p$ ,  $0 < p < \infty$ , если для любого  $\mathbf{t} \in T$  выполнено соотношение

$$\mathbf{E}|\xi_n(\mathbf{t}) - \xi(\mathbf{t})|^p \rightarrow 0 \quad \text{при } n \rightarrow \infty. \quad (2.15)$$

В классическом функциональном анализе этот вид сходимости называют *сходимостью в  $L_p(T)$* . При  $p = 2$  эту сходимость называют также *сходимостью в среднеквадратическом* и пишут  $\xi(\mathbf{t}) = \text{l.i.m. } \xi_n(\mathbf{t})$  (здесь l.i.m. – сокращение от *limit in mean* – "сходимость в среднем") – см., например, соотношение (2.7). Отметим также, что определение 2.12 используется, как правило, для  $p \geq 1$  в силу того, что для этого случая функциональное (вероятностное) пространство  $L_p(T)$  является *полным*, т.е. всякая фундаментальная последовательность является сходящейся.

**2.3.2. Функциональная (слабая) сходимость в  $Z(T)$ . Достаточные условия функциональной сходимости в  $C(T)$  и  $D(T)$  в терминах приращений.** В приложениях метода Монте-Карло случайная функция  $\xi(\mathbf{t})$ , как правило, входит в описание моделируемого реального процесса таким образом, что в конечном итоге требуется исследовать вероятностные характеристики случайных величин  $\{F(\xi(\mathbf{t}))\}$  для некоторого набора функционалов  $\{F\}$ . При использовании вместо функции  $\xi(\mathbf{t})$  ее численной модели  $\xi_n(\mathbf{t})$  важна *функциональная сходимость* последовательности  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  при  $n \rightarrow \infty$ , т.е. сходимость распределений последовательностей  $\{F(\xi_n(\mathbf{t}))\}$  к  $\{F(\xi(\mathbf{t}))\}$ .

Введем соответствующие понятия и критерии [1, 11, 12]. Рассмотрим последовательность случайных функций  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$ , почти все траектории которых лежат в функциональном пространстве  $Z(T)$  с метрикой  $\rho_Z$  (обозначение  $\xi_n \in Z(T)$ ). Везде далее полагаем, что  $\mathbf{t} \in T$ , где  $T$  – выпуклая область с границей в  $R^l$ .

Пусть на  $Z(T)$  определен класс непрерывных в метрике  $\rho_Z$  функционалов

$$\mathbf{F} \subset \{F : \mathbf{Z}(T) \rightarrow \mathbf{R}, F \text{ измеримо относительно } \mathring{A}_Z\}.$$

**Определение 2.13.** Говорят, что последовательность случайных функций  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  слабо сходится в  $Z(T)$  к  $\xi(\mathbf{t})$ , если для всех  $F$  из  $\mathbf{F}$  и  $x$  из  $R$  выполнено

$$\mathbf{P}_{\xi_n}(z \in \mathbf{Z}(T) : F(z) < x) \rightarrow \mathbf{P}_{\xi}(z \in \mathbf{Z}(T) : F(z) < x) \quad \text{при } n \rightarrow \infty.$$

Здесь  $\mathbf{P}_{\xi}(B)$  – распределение случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$  на  $Z(T)$  – см. определение 2.3.

В дальнейшем понятия *слабой* и *функциональной* сходимости в  $Z(T)$  будем считать эквивалентными. В общей теории функциональной сходимости формулируется общий критерий слабой сходимости, включающий абстрактные (трудно проверяемые) условия *сходимости на алгебре* и *слабой компактности* [11, 12]. В случае  $Z(T) = C(T) \vee D(T)$ , используя в первую очередь то обстоятельство, что эти пространства являются полными и сепарабельными, удастся существенно упростить условия слабой сходимости. В частности, условие сходимости на алгебре для пространств  $C(T)$  и  $D(T)$  можно переписать в виде

$$\text{Конечномерные распределения случайных функций } \xi_n(\mathbf{t}) \text{ сходятся} \\ \text{к конечномерным распределениям функции } \xi(\mathbf{t}) \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (2.16)$$

В свою очередь, условие слабой компактности переписывается в терминах *модуля непрерывности*. Это условие часто сложно проверить, и для приложений удобнее использовать более ограничительные, но простые достаточные условия [1, 5].

Введем следующее обозначение:  $\Delta^{\mathbf{h}}\xi(\mathbf{t}) = \Delta_1^{h_1}(\Delta_2^{h_2}(\dots(\Delta_l^{h_l}\xi(t_1, \dots, t_l))\dots))$  – *смешанная разность по всем координатам*, здесь

$$\Delta_i^{h_i}\xi(t_1, \dots, t_l) = \xi(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i + h_i, t_{i+1}, \dots, t_l) - \xi(t_1, \dots, t_l), \quad (2.17)$$

$\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_l)$ ,  $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_l)$ ,  $\mathbf{t} + \mathbf{h} \in T$ .

**Утверждение 2.2** (условия слабой сходимости в  $C(T)$  в терминах приращений). *Если для последовательности  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  выполнено условие (2.16) и, кроме того, существуют положительные числа  $p, r$  и  $H$  такие, что для любых  $\mathbf{t}$  и  $\mathbf{h}$ , где  $\mathbf{t}, \mathbf{t} + \mathbf{h} \in T$ , и  $n = 1, 2, \dots$  выполнено*

$$\mathbf{E}|\Delta^{\mathbf{h}}\xi_n(\mathbf{t})|^p \leq H \left| \prod_{j=1}^l h_j \right|^{1+r}, \quad (2.18)$$

то  $\xi_n \in C(T)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  (то есть функции  $\xi_n$  выборочно непрерывны) и последовательность  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  слабо сходится к  $\xi(\mathbf{t})$ .

В случае  $h_j = 0$  разность (2.17) по  $j$ -й координате в  $\Delta^{\mathbf{h}}\xi_n(\mathbf{t})$  не берется и нулевое  $h_j$  отсутствует в правой части (2.18). В частности, при  $h_1 = \dots = h_l = 0$  выполнено неравенство  $\mathbf{E}|\xi_n(\mathbf{t})|^p < H$  для всех  $\mathbf{t} \in T$ .

**Утверждение 2.3** (условия слабой сходимости в  $D(T)$  в терминах приращений). *Если для последовательности  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  выполнено условие (2.16) и, кроме того, существуют положительные числа  $r, H$  и числа  $p, q$  ( $p \geq 0, q \geq 0, p + q > 0$ ) такие, что для любых  $i$ ,  $i = 1, \dots, l$ ;  $t_i^{(1)}, t_i^{(2)}, t_i^{(3)} \in [a_i, b_i]$  (по-прежнему  $T = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_l, b_l]$ ) таких, что  $t_i^{(1)} < t_i^{(2)} < t_i^{(3)}$ ; и  $n = 1, 2, \dots$  выполнено*

$$\mathbf{E} \left( |\Delta^{\mathbf{h}^-} \xi_n(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(1)}, t_{i+1}, \dots, t_l)|^p |\Delta^{\mathbf{h}^+} \xi_n(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(2)}, \right. \\ \left. t_{i+1}, \dots, t_l)|^q \right) \leq H \left| \left( \prod_{j=1}^l {}^{(i)}h_j \right) (t_i^{(3)} - t_i^{(1)}) \right|^{1+r}, \quad (2.19)$$

то  $\xi_n \in D(T)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  и последовательность  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  слабо сходится к  $\xi(\mathbf{t})$ . Здесь

$$\mathbf{h}_{(i)}^- = (h_1, \dots, h_{i-1}, t_i^{(2)} - t_i^{(1)}, h_{i+1}, \dots, h_l), \quad \mathbf{h}_{(i)}^+ = (h_1, \dots, h_{i-1}, t_i^{(3)} - t_i^{(2)}, h_{i+1}, \dots, h_l),$$

$$\prod_{j=1}^l {}^{(i)}h_j = h_1 \cdot \dots \cdot h_{i-1} \cdot h_{i+1} \cdot \dots \cdot h_l; \quad t_j + h_j \in [a_j, b_j].$$

Утверждение 2.3 использовано далее в разд. 2.7 для обоснования функциональной сходимости моделей случайных функций на потоках Пальма.

**2.3.3. Дифференциальные условия функциональной сходимости в  $C(T)$ .** Дальнейшее упрощение условий слабой компактности в  $C(T)$  связано с переходом от условия в терминах приращений (2.24) к так называемым *дифференциальным* и *моментным* условиям. Здесь для случайных функций нужно строить "математический анализ в среднем степени  $p, p > 1$ ", используя "модуль"  $\mathbf{E}|\xi|^p$  в области значений случайной функции вместо обычного модуля для неслучайных функций. Наиболее распространенный случай – 'математический анализ в среднеквадратическом' – для  $p = 2$ . Примером соответствующего вероятностного аналога понятия классического математического анализа служит следующее

**Определение 2.14.** Случайная функция  $\varphi(t_1, \dots, t_l)$  называется **производной случайной функции  $\xi(t_1, \dots, t_l)$  по  $i$ -й координате в среднем степени  $p, p > 1$**  и обозначается

$$\varphi(t_1, \dots, t_l) = \frac{\partial \xi(t_1, \dots, t_l)}{\partial t_i}, \quad \text{если } \mathbf{E}|\Delta_i^{h_i} \xi(t_1, \dots, t_l) / h_i - \varphi(t_1, \dots, t_l)|^p \rightarrow 0 \text{ при } h_i \rightarrow 0.$$

**Смешанная производная случайной функции  $\xi$  в среднем степени  $p, p > 1$ , определяется рекуррентно:**

$$\frac{\partial^l \xi(t_1, \dots, t_l)}{\partial t_1 \dots \partial t_l} = \frac{\partial}{\partial t_1} \left( \frac{\partial}{\partial t_2} \dots \left( \frac{\partial}{\partial t_l} \xi(t_1, \dots, t_l) \right) \dots \right).$$

**Утверждение 2.4** (дифференциальные условия слабой сходимости в  $C(T)$ ). Пусть при  $p > 1$  случайные функции  $\xi_n(\mathbf{t})$ ,  $n = 1, 2, \dots$  непрерывны на множестве  $T$  в среднем степени  $p$  и для любого  $k : 1 \leq k \leq l$  существуют производные

$$D_{m_1 \dots m_l} \xi_n(\mathbf{t}) = \frac{\partial^k \xi_n(t_1, \dots, t_l)}{\partial t_1^{m_1} \dots \partial t_l^{m_l}}, \quad m_i = 0 \text{ или } m_i = 1, \quad m_1 + \dots + m_l = k$$

(смешанные производные порядка  $k$ , по каждой координате не более первого порядка) в среднем степени  $p$ , ограниченные на  $T$  константой  $H$ , не зависящей от  $n$ . Тогда, если выполнено условие (2.16), то последовательность  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  слабо сходится к  $\xi(\mathbf{t})$ .

При доказательстве утверждения 2.4 используются: вероятностный аналог формулы Ньютона-Лейбница для случайных процессов, теорема Фубини, а также соображения из доказательства леммы о конечном приращении. Отметим также следующий результат из [10].

**Утверждение 2.5.** Если для случайных функций  $\xi_n(\mathbf{t})$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , выполнено условие (2.16) и существуют всевозможные ограниченные в совокупности производные  $D_{m_1 \dots m_l} \xi_n(\mathbf{t})$ ,  $m_i \geq 0$ , до порядка  $k = m_1 + \dots + m_l = [l/2] + 1$  (здесь  $[A]$  – целая часть числа  $A$ ) включительно в среднем степени  $p$ ,  $p \geq 2$ , для  $\mathbf{t} \in T$ , то последовательность  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  слабо сходится к  $\xi(\mathbf{t})$ .

Утверждения 2.4 и 2.5, вообще говоря, независимы, так как из существования смешанных производных не более чем первого порядка по каждой координате, до порядка  $l$  включительно, не следует существования всевозможных смешанных производных порядка  $([l/2] + 1)$ .

**2.3.4. Моментные условия функциональной сходимости в  $C(T)$ .** Для случая  $p \geq 2$  можно применить следующее утверждение из корреляционной теории стационарных случайных функций (см. подразд. 2.1.3 и [4]).

**Утверждение 2.6.** Если  $\xi(\mathbf{t})$  – однородное случайное поле с корреляционной функцией  $R(\mathbf{u})$  и  $f(\boldsymbol{\lambda})$  – его спектральная плотность, то для того, чтобы существовала производная

$$\frac{\partial^k \xi(t_1, \dots, t_l)}{\partial t_1^{m_1} \dots \partial t_l^{m_l}}, \quad k = m_1 + \dots + m_l$$

в смысле сходимости в среднеквадратическом (то есть в среднем степени  $p = 2$ ), непрерывная в этом же смысле, необходимо и достаточно выполнения одного из следующих условий:

- 1) существует  $\frac{\partial^{2k} R(u_1, \dots, u_l)}{\partial u_1^{2m_1} \dots \partial u_l^{2m_l}}$ , и эта производная непрерывна;
- 2) ограничен смешанный спектральный момент

$$\int_{\Lambda} |\lambda_1|^{2m_1} \dots |\lambda_l|^{2m_l} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}, \quad \boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_l), \quad \Lambda \subseteq R^l.$$

Из утверждения 2.6 для  $m_1 = \dots = m_l = 1$ , утверждения 2.4 для  $p = 2$  и очевидного неравенства  $|\lambda_1|^{2m_1} \dots |\lambda_l|^{2m_l} \leq |\boldsymbol{\lambda}|^{2k}$  следует

**Утверждение 2.7** (моментные условия слабой сходимости в  $C(T)$ ). Если для однородных случайных полей  $\xi_n(\mathbf{t})$ ,  $n = 1, 2, \dots$  со спектральными плотностями  $f_n(\boldsymbol{\lambda})$  выполнено условие (2.16) и существует положительная константа  $H$  такая, что выполнено

$$\sup_n \int_{\Lambda} |\boldsymbol{\lambda}|^\beta f_n(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} < H \quad (2.20)$$

для  $\beta = 2l$ , то последовательность  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  слабо сходится к  $\xi(\mathbf{t})$ .

Здесь уместно заметить, что из утверждений 2.5, 2.6 можно получить менее ограничительное моментное условие слабой сходимости (2.20) с  $\beta = 2([l/2] + 1)$ .

**2.3.5. Непрерывность важнейших функционалов в  $C(T)$  и  $D(T)$ .** В ряде приложений (в том числе, при использовании спектральных моделей однородных случайных полей и при обосновании функциональных оценок метода Монте-Карло) важна сходимость (а значит, и непрерывность) функционалов

$$\tilde{F}_C(z) = \sup_{\mathbf{t} \in T} z(\mathbf{t}), \quad z \in C(T) \quad \text{и} \quad \tilde{F}_D(z) = \sup_{t \in [a, b]} z(t), \quad z \in D([a, b]).$$

Несложно доказать следующее

**Утверждение 2.8.** Функционал  $\tilde{F}_C$  непрерывен в метрике  $\rho_C$ . Функционал  $\tilde{F}_D$  непрерывен в метрике  $\rho_D$ .

В ряде случаев требуется непрерывность в  $C(T)$  функционала  $\hat{F}(z) = \int_T z(\mathbf{t}) d\mathbf{t}$ ,  $z \in C(T)$ , которая следует из соотношения

$$|\hat{F}(z_1) - \hat{F}(z_2)| \leq \int_T |z_1(\mathbf{t}) - z_2(\mathbf{t})| d\mathbf{t} \leq \text{mes } T \rho_C(z_1, z_2).$$

## 2.4. МОДЕЛИ СЛУЧАЙНЫХ ФУНКЦИЙ С ДИСКРЕТНЫМ ВРЕМЕНЕМ

**2.4.1. Дискретизация и восполнение случайных функций с непрерывным временем. Метод условных математических ожиданий.** Пусть случайная функция  $\xi(\mathbf{t})$  с непрерывным временем задана своими (согласованными) конечномерными распределениями и требуется получать траектории  $\xi(\mathbf{t})$  на ограниченном множестве

Г. Как отмечено в подразд. 2.1.5 и 2.2.3, точное воспроизведение конечномерных распределений возможно только в редких частных случаях. Поэтому часто применяется следующий приближенный

**Алгоритм 2.4.** Строим сетку  $\{\mathbf{t}^{(0)}, \mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(M)}\}$  на Г. Реализуем выборочное значение  $(M + 1)$ -мерного вектора

$$\tilde{\boldsymbol{\xi}} = (\tilde{\xi}(\mathbf{t}^{(0)}), \tilde{\xi}(\mathbf{t}^{(1)}), \dots, \tilde{\xi}(\mathbf{t}^{(M)})) = (\tilde{\xi}_0, \tilde{\xi}_1, \dots, \tilde{\xi}_M) \quad (2.21)$$

согласно плотности распределения  $f_{\xi}^{(M)}(\mathbf{x})$ , соответствующей функции распределения  $F_{\xi}^{(M)}(\mathbf{x})$  (см. определение 2.11); здесь используется стандартный алгоритм 1.16 из разд. 1.5 или его модификации. В качестве модельной траектории случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$  возьмем приближение

$$\tilde{\xi}^{(M)}(\mathbf{t}) = L_M \tilde{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{t}) = \sum_{i=0}^M w_m(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) \chi_m(\mathbf{t}), \quad (2.22)$$

где  $\{\chi_m(\mathbf{t})\}$  – заданные "базисные" функции, согласованные с узловыми точками  $\{\mathbf{t}^{(0)}, \mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(M)}\}$ , а  $\{w_m\}$  – коэффициенты, зависящие от значений  $\{\tilde{\xi}_i\}$ .

Учитывая, что модельные траектории (2.22), как правило, используются для приближенного вычисления средних вида  $\mathbf{E}F(\xi(\mathbf{t}))$  для некоторого набора функционалов  $F(z)$ , по аналогии с алгоритмом 3.3 (см. далее раздел 3.4) алгоритм 2.4 называют *методом условных математических ожиданий*. Если рассмотреть (2.22) как случайную функцию, то можно обнаружить, что характеристики исходной функции  $\xi(\mathbf{t})$  воспроизводятся в лучшем случае при  $h \downarrow 0$ , где  $h$  – шаг сетки  $\{\mathbf{t}^{(0)}, \mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(M)}\}$ ; соответствующие исследования проводятся, в частности, методами, представленными в разд. 2.3. Весьма интересным и сложным является изучение того, для каких восполнений  $L_M \tilde{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{t})$  можно воспроизвести свойство стационарности исходной функции, какие корреляционные функции получаются для приближений вида (2.22) и др. Перечисленные проблемы весьма актуальны, в частности, в задачах гидрометеорологии, в которых информация о случайных полях температур, осадков, ветра и др. имеется только в заданных точках – на метеостанциях – и требуется восстановить поля по этой информации [8].

**2.4.2. Моделирование процесса с независимыми приращениями.** Для того, чтобы алгоритм 2.4 давал хорошее приближение траекторий случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$ , требуется, чтобы размерность  $(M + 1)$  вектора  $\tilde{\boldsymbol{\xi}}$  из (2.21) была достаточно велика. При этом соответствующий алгоритм 1.16 оказывается весьма трудоемким. Отметим также, что на практике информация о конечномерных распределениях большой размерности  $(M + 1)$  известна относительно редко. Здесь мы выделим важный частный случай, когда реализация вектора  $\tilde{\boldsymbol{\xi}}$  относительно проста.

**Определение 2.15.** Процесс  $\xi(t)$ ,  $t \in [a, b] \subset R$  называется **процессом с независимыми приращениями**, если для любых  $n$  и  $t_0 < t_1 < \dots < t_n$  из  $[a, b]$  случайные величины

$$\xi_0, \xi_1 - \xi_0, \dots, \xi_n - \xi_{n-1}, \quad \text{где } \xi_i = \xi(t_i),$$

независимы.

Конечномерные распределения процесса  $\xi(t)$  полностью определяются распределениями величин  $\xi(t)$  и  $\xi(t_2) - \xi(t_1)$ ; здесь  $t, t_1, t_2 \in [a, b]$  и  $t_2 > t_1$ . Полагаем, что  $a = t^{(0)} < t^{(1)} < \dots < t^{(M)} = b$  и  $t^{(i+1)} - t^{(i)} = (b - a)/M = h$ . Реализацию случайного вектора  $\tilde{\boldsymbol{\xi}} = (\tilde{\xi}_0, \tilde{\xi}_1, \dots, \tilde{\xi}_M)$  для такого процесса дает следующий

**Алгоритм 2.5.** Реализуем  $\tilde{\xi}_0$  согласно распределению случайной величины  $\xi(t^{(0)})$ . Далее полагаем  $\tilde{\xi}_{i+1} = \tilde{\xi}_i + \tilde{\delta}_i$ , где  $\tilde{\delta}_i$  – реализация случайной величины  $\delta_i = \xi(t^{(i)} + h) - \xi(t^{(i)}) = \xi(t^{(i+1)}) - \xi(t^{(i)})$ ; здесь  $i = 0, 1, \dots, M - 1$ .

**Пример 2.2.** Процесс с независимыми приращениями  $\xi(t)$ ,  $t \geq 0$ , называется *одно-родным процессом Пуассона*, если  $\xi(t)$  имеет распределение Пуассона и для всех  $h > 0$  и натуральных  $k$  выполнено равенство

$$\mathbf{P}\{\xi(h) = k\} = \mathbf{P}\{\xi(t+h) - \xi(t) = k\} = \frac{(\lambda h)^k e^{-\lambda h}}{k!} \quad (2.23)$$

для некоторого  $\lambda > 0$ .

Опишем общую (достаточно распространенную в приложениях) ситуацию, описываемую с помощью процесса Пуассона. Пусть в некотором эксперименте наблюдаются появления некоторых событий. Предполагаем, что

- 1) число событий, которые произошли на промежутке  $[t, t+h]$ , не зависит от того, сколько и когда произошло событий в промежутке  $[0, t]$ ;
- 2) вероятность того, что на промежутке  $[t, t+h]$  произойдет одно событие, равна  $\lambda h + o(h)$ ;
- 3) вероятность того, что на промежутке  $[t, t+h]$  произойдет более одного события, равна  $o(h)$ .

При сделанных предположениях величина  $\xi(t)$ , равная числу событий, которые произошли на промежутке  $[0, t]$ , как функция  $t$  будет процессом Пуассона. В алгоритме 2.5 можно взять  $t^{(0)} = 0$ ,  $\tilde{\xi}_0 = 0$  и  $\tilde{\xi}_{i+1} = \tilde{\xi}_i + \tilde{k}_i$ , где  $\tilde{k}_i$  реализуется согласно распределению Пуассона (2.23) (см. алгоритмы 1.4, 1.12, 1.13).

Здесь уместно заметить, что моменты времени  $\hat{t}_0 = 0 < \hat{t}_1 < \hat{t}_2 < \dots$ , в которые происходят описанные выше события, образуют так называемый *пуассоновский поток точек*, причем случайные величины  $\theta_i = \hat{t}_i - \hat{t}_{i-1}$  независимы и распределены согласно экспоненциальной плотности  $f_\theta(u) = \lambda e^{-\lambda u}$ ,  $u > 0$ . Справедливо соотношение  $\xi(t) = \max\{k' : \sum_{i=1}^{k'} \theta_i \leq t\}$ , которое дает еще один алгоритм моделирования процесса Пуассона. Пуассоновские потоки точек используются во многих приложениях, в частности, в теории массового обслуживания [6]. В этой главе пуассоновские потоки используются для построения специальных моделей негауссовских процессов и полей (см. далее разд. 2.7).

**Пример 2.3.** Процесс с независимыми приращениями  $\xi(t)$ ,  $t \geq 0$ , называется *винеровским процессом*, если  $\xi(t)$  имеет гауссовское распределение с плотностью  $f_t(x) = e^{-x^2/2t} / \sqrt{2\pi t}$ . Несложно показать, что приращения  $\xi(t_2) - \xi(t_1)$  этого процесса имеют гауссовское распределение с нулевым средним и дисперсией  $\mathbf{D}(\xi(t_2) - \xi(t_1)) = t_2 - t_1$ ,  $t_2 > t_1$ . В алгоритме 2.5 можно взять  $t^{(0)} = 0$ ,  $\tilde{\xi}_0 = 0$  и  $\tilde{\xi}_{i+1} = \tilde{\xi}_i + \sqrt{h}\gamma_i$ , где  $\gamma_i$  — реализации стандартной нормальной случайной величины (см. формулу (1.139) из разд. 1.10). Такая процедура, включенная в алгоритм 2.4 с кусочно-линейным восполнением  $L_M \xi(\mathbf{t})$  из (2.22), используется, в частности, при вычислении винеровских интегралов (см. далее подразд. 2.4.3).

**2.4.3. Моделирование и использование диффузионного процесса.** Рассмотрим следующую модель марковского случайного процесса  $\xi(t)$ ,  $t \in [0, T]$ . Полагаем, что  $0 = t^{(0)} < t^{(1)} < \dots < t^{(M)} = T$  и  $t^{(i+1)} - t^{(i)} = T/M = h$ .

**Алгоритм 2.6.** Реализуем  $\tilde{\xi}_0$  согласно распределению случайной величины  $\xi(t^{(0)})$ . Далее вычисляем

$$\tilde{\xi}_{i+1} = \tilde{\xi}_i + a(t^{(i)}, \tilde{\xi}_i)h + \sigma(t^{(i)}, \tilde{\xi}_i)\tilde{w}_i, \quad (2.24)$$

где  $\tilde{w}_i = \sqrt{h}\gamma_i$  — реализация приращения винеровского процесса  $w_i = w(t^{(i)} + h) - w(t^{(i)})$ ; здесь  $i = 0, 1, \dots, M-1$ .

Построенный алгоритм воспроизводит модель одномерного *диффузионного процесса*  $\xi(t)$ . Такое название связано с тем, что соотношение (2.24) описывает (с точностью

до  $o(h)$ ) элементарное перемещение диффундирующей частицы за время от  $t^{(i)}$  до  $t^{(i)} + h$ . Слагаемое  $a(t^{(i)}, \xi_i)h$  отражает неслучайное смещение, связанное с макроскопическим движением среды (функция  $a(t, x)$  называется *коэффициентом сноса*), а слагаемое  $\sigma(t^{(i)}, \tilde{\xi}_i)\tilde{w}_i$  описывает хаотическое тепловое движение частицы (функцию  $\sigma(t, x)$  называют *коэффициентом диффузии*).

При переходе в соотношении (2.24) к дифференциалам (т.е. при  $h \rightarrow 0$ ) получаем классическое *стохастическое дифференциальное уравнение (СДУ)*

$$d\xi(t) = a(t, \xi(t)) dt + \sigma(t, \xi(t)) dw(t). \quad (2.25)$$

Чтобы придать смысл этому уравнению, его записывают в интегральной форме

$$\xi(t) = \xi(0) + \int_0^t a(s, \xi(s)) ds + \int_0^t \sigma(s, \xi(s)) dw(s).$$

Имеются некоторые трудности в определении *стохастического интеграла по винеровской мере*  $\int_0^t \sigma(s, \xi(s)) dw(s)$ , так как винеровский процесс с вероятностью единица имеет неограниченную вариацию на каждом промежутке, и поэтому этот интеграл нельзя понимать в смысле Стильтеса. Здесь требуется рассмотрение специальных ступенчатых случайных процессов и интегральных сумм, которые сходятся к соответствующему интегралу в среднеквадратическом. В частности, рассмотренная оценка (2.24) сходится при  $h \rightarrow 0$  с порядком  $O(h)$ , если коэффициенты СДУ достаточно регулярны.

Алгоритм 2.6, таким образом, можно рассматривать как численную схему решения стохастического дифференциального уравнения (2.25), которая носит название *метод Эйлера для решения СДУ*.

Второе важное приложение алгоритма 2.6 связано с тем обстоятельством, что переходная плотность  $p(s, x, t, y)$  марковского диффузионного процесса  $\xi(t)$  (см. определение 2.10) удовлетворяет *уравнению Фоккера–Планка* (или *прямому уравнению Колмогорова*)

$$\frac{\partial p(s, x, t, y)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 (\sigma^2(t, y) p(s, x, t, y))}{\partial^2 y} - \frac{\partial (a(t, y) p(s, x, t, y))}{\partial y}, \quad 0 \leq s < t. \quad (2.26)$$

Таким образом, модели диффузионного процесса вида (2.24) можно использовать для построения стохастических оценок решения дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа (см. далее главу 7).

Отметим также, что несложно построить аналог алгоритма 2.6 для векторного диффузионного процесса  $\boldsymbol{\xi}(t)$ . Это дает возможность строить численные алгоритмы решения систем стохастических дифференциальных уравнений и многомерных аналогов уравнения (2.26).

**2.4.4. Использование цепей Маркова. Блуждание по решетке. Ветвящиеся процессы.** Теперь приведем ряд практически важных примеров использования специальных алгоритмов моделирования отрезка траектории дискретного случайного процесса (случайного вектора)  $\tilde{\boldsymbol{\xi}}$  из соотношения (2.21). В первую очередь упомянем применение цепей Маркова, обрывающихся с вероятностью единица (при этом размерность  $(M + 1)$  является целочисленной случайной величиной), для вычисления интегралов большой и бесконечной кратности (см. алгоритм 1.17 из разд. 1.5). Наиболее важным приложением здесь является приближенное вычисление линейных функционалов от решения интегрального уравнения второго рода (см. далее главу 4).

При рандомизации разностных схем решения прикладных задач используется алгоритм *блуждания по решетке*. Опишем этот алгоритм в двумерном случае. Пусть в  $R^2$



введена равномерная сетка  $(ih, jh)$ , где  $i, j$  – целые числа, а положительное число  $h$  – шаг сетки. Определяем начальную точку  $(i_0h, j_0h)$  и множество "поглощающих" узлов (попадание в такой узел означает обрыв соответствующей траектории).

**Алгоритм 2.7.** Для  $k = 0, 1, 2, \dots$  осуществляем переход из точки  $(i_kh, j_kh)$  в одну из соседних точек  $((i_k - 1)h, j_kh), ((i_k + 1)h, j_kh), (i_kh, (j_k - 1)h), (i_kh, (j_k + 1)h)$  согласно вероятностям  $p_1^{(k)}, p_2^{(k)}, p_3^{(k)}, p_4^{(k)}$  соответственно (чаще всего  $p_i^{(k)} = 1/4$ ). Процесс прекращается после попадания точки в одно из "поглощающих" состояний.

**Пример 2.4.** Рассмотрим первую краевую задачу для уравнения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -g(x, y); \quad u|_{\Gamma} = \psi(x, y) \quad (2.27)$$

в единичном квадрате с границей  $\Gamma$ . Заменяя приближенно частные производные в уравнении (2.27) вторыми разделенными разностями с учетом граничных условий, получим систему  $(L - 1)^2$  линейных алгебраических уравнений вида

$$u_{i,j} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} + h^2 g_{i,j}), \quad 1 \leq i, j \leq L - 1. \quad (2.28)$$

Здесь  $u_{i,j}$  есть приближенное значение  $u(ih, jh)$  для внутреннего узла  $(ih, jh)$ ; если же точка  $(ih, jh)$  принадлежит границе  $\Gamma$ , то значение  $u_{i,j}$  считается известным и равным  $\psi(ih, jh)$ . Значения  $g_{i,j}$  равны  $g(ih, jh)$ . Соотношение (2.28) имеет вид полного математического ожидания (если положить  $g_{i,j} = 0$ ). Именно такому уравнению удовлетворяет среднее значение случайной величины  $\xi_{i,j}$ , реализации которой строятся с использованием алгоритма 2.7 следующим образом:

- 1) начальную точку помещаем в узел  $(ih, jh)$ , положив начальное значение счетчика равным  $h^2 g_{i,j}/4$ ; "поглощающими" объявляем точки границы  $\Gamma$ ;
- 2) с равными вероятностями  $1/4$  перемещаем точку в один из соседних узлов, прибавив к счетчику соответствующее значение  $h^2 g/4$ ;
- 3) снова выполняем п. 2 и т.д., пока точка не выйдет на границу;
- 4) после выхода на границу к счетчику прибавляется соответствующее значение  $\psi$  и траектория обрывается; результативное значение счетчика дает выборочное значение случайной величины  $\xi_{i,j}$ .

Численные процедуры такого типа исследуются далее в главе 7.

Следующая вероятностная конструкция позволяет описывать и численно моделировать многие реальные явления в физике, технике, биологии, демографии и др.

**Определение 2.16.** Однородная цепь Маркова  $\xi_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$  с неотрицательными целочисленными значениями называется **ветвящимся процессом с одним типом частиц** или **процессом Гамильтона–Ватсона**, если ее переходные вероятности  $p_{mn}(i) = \mathbf{P}(\xi_i = n | \xi_0 = m)$  за  $i$  шагов удовлетворяют условиям

$$p_{mn}(i) = \delta_{0n} \quad \text{при} \quad m = 0, \quad (2.29)$$

где  $\delta_{mn}$  – символ Кронеккера, и

$$p_{mn}(i) = \sum_{n_1 + \dots + n_m = n} p_{1n_1}(i) \times p_{1n_2}(i) \times \dots \times p_{1n_m}(i). \quad (2.30)$$

Принята следующая терминология. Модель, описываемую ветвящимся процессом, часто называют *популяцией*. Значение ветвящегося процесса  $\xi_i$  в момент  $i$  называют *числом частиц* или *индивидуумов* в популяции в поколении с номером  $i$ . Говорят также,

что  $\xi_i$  есть общее число потомков  $\xi_0$  частиц нулевого поколения в поколении с номером  $i$ . Равенство (2.29) означает отсутствие самовозрождения популяции после того, как все частицы исчезли, либо отсутствие иммиграции (притока частиц извне). Равенство (2.30), означающее, что  $p_{mn}(i)$  при  $i \geq 1$  является  $m$ -кратной сверткой распределения  $p_{1n}(i)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  с собой, эквивалентно предположению, что каждая из  $m$  первоначальных частиц эволюционирует (гибнет, превращается в новые частицы того же типа) независимо от других. Это равенство называют также *условием ветвления*.

Укажем эффективный алгоритм последовательного вычисления значений  $\xi_i$ . Введем  $\zeta_{st}$ ,  $s, t = 1, 2, \dots$  – независимые одинаково распределенные случайные величины, интерпретируемые как число потомков, даваемых любой из  $t$  частиц в момент превращения в  $i$ -ом поколении, т.е.  $\mathbf{P}(\zeta_{st} = n) = p_{1n}$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Пусть задано целое положительное число  $\zeta_0 = q$ .

**Алгоритм 2.8.** Если  $q = 1$ , то полагаем  $\zeta_{0t} = \delta_{0t}$ . Если  $q > 1$ , то полагаем  $\zeta_{0t} = 1$  при  $t = 1, \dots, q$ . Для следующих поколений вычисляем значения  $\xi_i$  согласно рекуррентной формуле  $\xi_{i+1} = \sum_{t=0}^{\xi_i} \zeta_{it}$  для  $i = 0, 1, 2, \dots$

В заключение отметим, что с помощью алгоритма 2.8 можно строить численные процедуры решения нелинейных интегральных уравнений (см. далее главу 4).

**2.4.5. Процесс скользящего среднего.** Пусть  $\{\zeta_k\}$  – стандартная некоррелированная последовательность, т.е. набор независимых одинаково распределенных случайных величин с нулевым средним и единичной дисперсией; здесь  $k \in \mathbb{Z}$ , т.е.  $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Рассмотрим случайный процесс с дискретным временем

$$\xi_i = a_0 \zeta_i + a_1 \zeta_{i-1} + \dots + a_N \zeta_{i-N}, \quad (2.31)$$

где  $\{a_0, a_1, \dots, a_N\}$  – фиксированный набор действительных чисел. Последовательность (2.31) называется *процессом скользящего среднего порядка  $N$* . Численная реализация выборочных значений  $\xi_i$  достаточно проста.

**Алгоритм 2.9.** 1). Для моделирования начального значения  $\xi_0$  реализуем  $N+1$  значений  $\{\zeta_{-N}, \zeta_{-N+1}, \dots, \zeta_1, \zeta_0\}$  случайной величины  $\zeta$  согласно соответствующей функции распределения  $F_\zeta(x)$  и вычисляем требуемое значение по формуле (2.31) для  $i = 0$ .

2). Для моделирования значения  $\xi_1$  реализуем дополнительно одно значение  $\zeta_1$  согласно функции распределения  $F_\zeta(x)$  и применяем формулу (2.31) и т.д.

Таким образом, для моделирования каждого из последующих значений  $\xi_i$ ,  $i \geq 1$  требуется одно дополнительное случайное число  $\zeta$ . Процесс (2.31) является стационарным в широком смысле. Корреляционная функция имеет вид

$$R(n) = \int_{-\pi}^{\pi} e^{i\lambda n} f(\lambda) d\lambda, \quad (2.32)$$

а соответствующая спектральная плотность равна

$$f(\lambda) = \frac{1}{2\pi} |a_0 + a_1 e^{-i\lambda} + \dots + a_N e^{-iN\lambda}|^2. \quad (2.33)$$

Например, для  $a_n \equiv A/(N+1)$ ,  $n = 0, 1, \dots, N$  имеем

$$f(\lambda) = \frac{A^2}{2\pi(N+1)^2} \times \frac{\sin^2((N+1)\lambda/2)}{\sin^2(\lambda/2)}.$$

Одномерное распределение процесса (2.31) представляет собой свертку распределений случайных величин  $\{a_n \zeta_{i-n}\}$ . Чаще всего модель (2.31) используется для случая,

когда  $\zeta$  – стандартная нормальная случайная величина. В этом случае случайные величины  $\xi_i$  будут гауссовскими (ведь линейная комбинация гауссовских случайных величин имеет нормальное распределение).

В ряде прикладных задач известна только корреляционная функция  $R(n)$ , и требуется построить модель вида (2.31). В этом случае находится спектральная плотность  $f(\lambda)$  (как преобразование Фурье от  $R(n)$ ), затем функция  $\sqrt{f(\lambda)}$  разлагается в ряд Фурье для определения коэффициентов  $\{a_n\}$  из формулы (2.31).

**2.4.6. Процесс авторегрессии.** Пусть  $\{\zeta_k\}$  – стандартная некоррелированная последовательность. Рассмотрим следующее уравнение для определения процесса  $\{\xi_i\}$ :

$$\xi_i + b_1\xi_{i-1} + \dots + b_M\xi_{i-M} = \zeta_i. \quad (2.34)$$

Решение этого уравнения, если оно существует как стационарный в широком смысле процесс, называется *процессом авторегрессии порядка  $M$* . Стационарное решение уравнения (2.34) существует, если нули полинома  $Q(z) = 1 + b_1z + \dots + b_Mz^M$  лежат вне единичного круга в комплексной плоскости. Формула (2.34) порождает простой алгоритм реализации процесса  $\xi_i$ .

**Алгоритм 2.10.** 1). Выберем начальные значения  $\{\xi_{-M}, \xi_{-M+1}, \dots, \xi_{-2}, \xi_{-1}\}$ . Реализуем выборочное значение  $\zeta_0$  согласно функции распределения  $F_\zeta(x)$  и вычисляем  $\xi_0 = \zeta_0 - b_1\xi_{-1} - \dots - b_M\xi_{-M}$ .

2). Реализуем выборочное значение  $\zeta_1$  согласно функции распределения  $F_\zeta(x)$  и вычисляем  $\xi_1 = \zeta_1 - b_1\xi_0 - b_2\xi_{-1} - \dots - b_M\xi_{-M+1}$  и т.д.

Определенную проблему представляет собой выбор значений  $\{\xi_{-M}, \xi_{-M+1}, \dots, \xi_{-2}, \xi_{-1}\}$  в первом пункте алгоритма 2.10. "Неудачный" выбор этих значений может привести, например, к тому, что стационарность процесса  $\xi_i$  возникает только при достаточно больших  $i$ . При моделировании гауссовского процесса чаще всего реализуют значения  $\{\xi_{-M}, \xi_{-M+1}, \dots, \xi_{-2}, \xi_{-1}\}$  и  $\{\zeta_k\}$  как стандартные нормальные по формуле (1.139) (см. разд. 1.10).

Стационарная версия процесса авторегрессии имеет корреляционную функцию (2.32) со спектральной плотностью

$$f(\lambda) = \frac{1}{2\pi |1 + b_1e^{-i\lambda} + \dots + b_Me^{-iM\lambda}|^2}. \quad (2.35)$$

**2.4.7. Смешанная модель авторегрессии и скользящего среднего.** Комбинирование процессов авторегрессии и скользящего среднего приводит к уравнению

$$\xi_i + b_1\xi_{i-1} + \dots + b_M\xi_{i-M} = a_0\zeta_i + a_1\zeta_{i-1} + \dots + a_N\zeta_{i-N} \quad (2.36)$$

и численной процедуре

**Алгоритм 2.11.** 1). Выберем начальные значения  $\{\xi_{-M}, \dots, \xi_{-1}\}$ . Реализуем выборочные значения  $\{\zeta_{-N}, \dots, \zeta_0\}$  согласно функции распределения  $F_\zeta(x)$  и вычисляем

$$\xi_0 = \zeta_0 + a_1\zeta_{-1} + \dots + a_N\zeta_{-N} - b_1\xi_{-1} - \dots - b_M\xi_{-M}.$$

2). Реализуем выборочное значение  $\zeta_1$  согласно функции распределения  $F_\zeta(x)$  и вычисляем

$$\xi_1 = \zeta_1 + a_1\zeta_0 + \dots + a_N\zeta_{-N+1} - b_1\xi_0 - b_2\xi_{-1} - \dots - b_M\xi_{-M+1}$$

и т.д.

Если нули полинома  $Q(z) = 1 + b_1z + \dots + b_Mz^M$  лежат вне единичного круга, то уравнение (2.36) имеет стационарное решение  $\{\xi_i\}$ , называемое *смешанным процессом*

авторегрессии и скользящего среднего порядка  $(M, N)$ . Этот процесс имеет корреляционную функцию (2.32) со спектральной плотностью

$$f(\lambda) = \left| \frac{a_0 + a_1 e^{-i\lambda} + \dots + a_N e^{-iN\lambda}}{1 + b_1 e^{-i\lambda} + \dots + b_M e^{-iM\lambda}} \right|^2. \quad (2.37)$$

Формула (2.37), являющаяся комбинацией соотношений (2.33) и (2.35), подтверждает известный тезис о том, что стационарные процессы с дробно-рациональными плотностями представимы в виде процессов скользящего суммирования. Примечателен и тот факт, что адекватное описание наблюдаемых на практике явлений, моделируемых стационарными процессами, достигается (смешанными) моделями авторегрессии и скользящего среднего, порядок которых не превышает 2.

## 2.5. МОДЕЛИ ГАУССОВСКИХ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ С НЕПРЕРЫВНЫМ ВРЕМЕНЕМ

**2.5.1. Моделирование гауссовского процесса с дробно-рациональной спектральной плотностью.** Рассмотрим следующий аналог алгоритма 2.11 для случая непрерывного аргумента  $t$  гауссовского стационарного случайного процесса  $\xi(t), t \geq 0$ . Полагаем, что для спектральной плотности этого процесса справедлив следующий аналог соотношения (2.37):

$$f(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{a_0 + a_1(i\lambda) + \dots + a_N(i\lambda)^N}{1 + b_1(i\lambda) + \dots + b_M(i\lambda)^M} \right|^2. \quad (2.38)$$

Коэффициенты  $\{a_n, b_m\}$  – действительные числа;  $M > N$  и нули полинома  $Q(z) = 1 + b_1 z + \dots + b_M z^M$  лежат в левой полуплоскости комплексной плоскости. Аналогом формулы (2.36) для непрерывного аргумента  $t$  является соотношение

$$\xi(t) = a_0 \varphi^{(N-1)}(t) + \dots + a_N \varphi(t), \quad (2.39)$$

где  $\varphi(t)$  – решение линейного стохастического дифференциального уравнения с постоянными коэффициентами

$$\varphi^{(M)}(t) + b_1 \varphi^{(M-1)}(t) + \dots + b_M \varphi(t) = \sigma \varepsilon(t), \quad \sigma = \text{const}, \quad (2.40)$$

а  $\varepsilon(t)$  есть процесс *белого шума* (производная от винеровского процесса) – стационарный в широком смысле процесс, любые два нормально распределенных значения которого при различных значениях времени  $t_1$  и  $t_2$  некоррелированы (точнее,  $\mathbf{E}(\varepsilon(t_1)\varepsilon(t_2)) = \delta(t_2 - t_1)$ , где  $\delta(t)$  – дельта-функция Дирака – см. подразд. 1.4.2).

Если ввести вектор  $\varphi(t) = (\varphi(t), \varphi'(t), \dots, \varphi^{(M-1)}(t))^T$ , то уравнение (2.40) можно записать в виде

$$\frac{d\varphi}{dt} = \mathbf{B}\varphi(t) + \varphi_0(t), \quad (2.41)$$

где  $\varphi_0(t) = (0, 0, \dots, 0, \sigma \varepsilon(t))^T$  и

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -b_M & -b_{M-1} & -b_{M-2} & \dots & -b_1 \end{pmatrix}$$

Относительно вектора  $\varphi(t)$  уравнение (2.41) имеет марковский вид, поэтому для моделирования гауссовского процесса, являющегося его решением, можно применить алгоритм 2.3. Заметим, что стационарное решение уравнения (2.41) имеет корреляционную функцию

$$R_1(t_1, t_2) = \mathbf{E}(\varphi(t_1), (\varphi(t_2))^*) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda(t_1-t_2)} f_1(\lambda) d\lambda$$

со спектральной плотностью, аналогичной (2.35):  $f_1(\lambda) = 1/(2\pi|Q(i\lambda)|^2)$ . Матрица корреляций  $\mathbf{R}(t_1, t_2)$  вектора  $\varphi(t)$  имеет компоненты

$$R_{ij} = \mathbf{E}(\varphi^{(i)}(t_1)(\varphi^{(j)}(t_2))^*) = \frac{\partial^{i+j} R_1(t_1, t_2)}{\partial t_1^i \partial t_2^j}.$$

Приведенные рассуждения позволяют сформулировать следующий алгоритм моделирования  $K$ -мерного распределения  $(\xi(t^{(1)}), \dots, \xi(t^{(K)}))$ , где  $0 < t^{(1)} < \dots < t^{(K)}$ .

**Алгоритм 2.12.** 1). *Задаем начальное значение  $\varphi(0)$ . Вычисляем  $\xi(0)$  по формуле (2.39):  $\xi(0) = a_0\varphi^{(N-1)}(0) + \dots + a_N\varphi(0)$ .*

2). *Реализуем значение  $\varphi(t^{(1)})$  согласно алгоритму 2.3 для  $t_{i-1} = t^{(0)} = 0$  и вычисляем  $\xi(t^{(1)}) = a_0\varphi^{(N-1)}(t^{(1)}) + \dots + a_N\varphi(t^{(1)})$ .*

3). *Реализуем значение  $\varphi(t^{(2)})$  согласно алгоритму 2.3 для  $t_{i-1} = t^{(1)}$  и вычисляем  $\xi(t^{(2)}) = a_0\varphi^{(N-1)}(t^{(2)}) + \dots + a_N\varphi(t^{(2)})$  и т.д.*

Здесь, как и в "дискретном" варианте процесса авторегрессии (см. алгоритм 2.10 из разд. 2.4), определенную проблему представляет собой выбор начального значения вектора  $\varphi(0) = (\varphi(0), \varphi'(0), \dots, \varphi^{(M-1)}(0))^T$ . При произвольном задании этого вектора может нарушиться свойство стационарности процесса  $\xi(t)$ , поэтому его значения можно использовать лишь после того, как пройдет достаточно большой промежуток времени и моделируемый процесс станет стационарным.

Выборочное значение начального гауссовского вектора  $\varphi(0)$  можно получить согласно алгоритму 1.47 из разд. 1.10 по формуле  $\varphi(0) = \mathbf{C}\mathbf{w}$ , где  $\mathbf{w}$  – вектор с независимыми стандартными гауссовскими компонентами, а матрица  $\mathbf{C}$  такова, что  $\mathbf{C}\mathbf{C}^T = \mathbf{R}(0, 0) = \mathbf{E}(\varphi(0), (\varphi^T(0))^*)$ . В свою очередь, компоненты  $R_{ij}^{(0)}$  матрицы  $\mathbf{R}(0, 0)$  равны нулю, если  $(i+j)$  нечетно и величине  $(-1)^{(j-i)/2}k_{(i+j)/2}$  в противном случае. Числа  $k_s$  определяются из соотношений

$$(-1)^l \sum_{l/2 < q < (M+l)/2} (-1)^q b_{M-2q+l} k_q = \begin{cases} 0 & \text{при } l = 0, 1, \dots, M-2, \\ 1/2 & \text{при } l = M-1. \end{cases}$$

**2.5.2. Алгоритм Франклина.** Согласно уравнению (2.41), если известно значение векторного процесса  $\varphi(t)$ , то значение через промежуток времени  $\Delta t$  определяется следующим образом:  $\varphi(t + \Delta t) = e^{\Delta t \mathbf{B}} \varphi(t) + \mathbf{r}(t)$ , где  $\mathbf{r}(t)$  – гауссовский случайный вектор вида  $\mathbf{r}(t) = \int_0^{\Delta t} e^{(\Delta t-s)\mathbf{B}} \varphi_0(t+s) ds$ . Этот вектор некоррелирован со случайным вектором  $\varphi(t) = \int_{-\infty}^t e^{(t-u)\mathbf{B}} \varphi_0(u) du$ .

**Алгоритм 2.13.** 1). *Задаем начальное значение  $\varphi(t^{(0)}) = \varphi(0)$  и вычисляем  $\xi(t^{(0)}) = a_0\varphi^{(N-1)}(t^{(0)}) + \dots + a_N\varphi(t^{(0)})$ .*

2). *Реализуем выборочное значение гауссовского вектора  $\mathbf{r}(t^{(0)})$ . Вычисляем значение  $\varphi(t^{(1)})$  по формуле  $\varphi(t^{(1)}) = e^{(t^{(1)}-t^{(0)})\mathbf{B}} \varphi(t^{(0)}) + \mathbf{r}(t^{(0)})$  и затем полагаем  $\xi(t^{(1)}) = a_0\varphi^{(N-1)}(t^{(1)}) + \dots + a_N\varphi(t^{(1)})$ .*

3). *Реализуем выборочное значение вектора  $\mathbf{r}(t^{(1)})$ . Вычисляем  $\varphi(t^{(2)}) = e^{(t^{(2)}-t^{(1)})\mathbf{B}} \varphi(t^{(1)}) + \mathbf{r}(t^{(1)})$  и затем полагаем  $\xi(t^{(2)}) = a_0\varphi^{(N-1)}(t^{(2)}) + \dots + a_N\varphi(t^{(2)})$  и т.д.*

Моделирование векторов  $\mathbf{r}(t)$  для  $t = t^{(0)}, t^{(1)}, \dots$  происходит согласно алгоритму 1.47 из разд. 1.10 по формуле  $\mathbf{r}(t) = \mathbf{G}\mathbf{w}$ , где  $\mathbf{w}$  – вектор с независимыми стандартными гауссовскими компонентами, а матрица  $\mathbf{G}$  такова, что

$$\begin{aligned} \mathbf{G}\mathbf{G}^T = \mathbf{R}_r = \mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^T) &= \mathbf{E} \int_0^{\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{(\Delta t - s_1)\mathbf{B}} \boldsymbol{\varphi}_0(t + s_1) \times \\ &\times \boldsymbol{\varphi}_0^T(t + s_2) (e^{(\Delta t - s_2)\mathbf{B}})^T ds_1 ds_2 = \int_0^{\Delta t} e^{s\mathbf{B}} \mathbf{H} (e^{s\mathbf{B}})^T ds; \end{aligned}$$

здесь  $\mathbf{H}$  – матрица размера  $M \times M$ , все элементы которой, кроме  $H_{MM} = 1$ , равны нулю. Симметрическую матрицу  $\mathbf{R}_r$  находят из соотношения

$$e^{\Delta t \mathbf{B}} \mathbf{H} (e^{\Delta t \mathbf{B}})^T - \mathbf{H} = \mathbf{B}\mathbf{R}_r + \mathbf{R}_r \mathbf{B}^T.$$

**2.5.3. Моделирование гауссовского случайного процесса с использованием канонического разложения.** Гауссовский случайный процесс может быть представлен в виде

$$\xi(t) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} w_i \chi_i(t), \quad (2.42)$$

где  $\{w_i\}$  – независимые стандартные нормальные величины, а  $\{\chi_i(t)\}$  – неслучайные координатные функции канонического разложения (2.42).

Разложение (2.42) в общем случае представляет собой бесконечный ряд. На практике он заменяется конечной суммой. Если удастся найти координатные функции  $\chi_i(t)$  для  $i = -n, -n + 1, \dots, n - 1, n$ , то, получив один раз  $2n + 1$  стандартных нормальных чисел (здесь целесообразно использовать формулу (1.139) из разд. 1.10), можно вычислить значения процесса  $\xi(t)$  в произвольном наборе точек. Однако задача нахождения функций  $\{\chi_i(t)\}$  достаточно трудна, и данный метод следует использовать только в специальных случаях, например, для получения нескольких реализаций с разными временными шагами на одном и том же участке и в других подобных ситуациях.

Один из способов построения координатных функций состоит в нахождении собственных значений  $\lambda_i$  и собственных функций  $\psi_i(t)$  интегрального оператора, ядром которого является корреляционная функция  $R(t, s)$  процесса  $\xi(t)$ . При этом нужно рассмотреть уравнение

$$\int_{-\infty}^{+\infty} R(t, s) \psi(s) ds = \lambda \psi(t). \quad (2.43)$$

В качестве координатных функций разложения (2.42) следует выбирать  $\chi_i(t) = \sqrt{\lambda_i} \psi_i(t)$ .

Описанный способ построения координатных функций используется сравнительно редко в связи с трудностями, которые возникают при решении уравнения (2.43). Эти трудности особенно велики при численном его решении. Если же функция  $R(t, s)$  такова, что легко указать аналитические решения уравнения (2.43), то описанный здесь способ моделирования может быть очень удобным.

## 2.6. ПРИБЛИЖЕННЫЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ ОДНОРОДНЫХ ГАУССОВСКИХ СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ

**2.6.1. Рандомизированная модель с разбиением спектра.** В разделе 2.5 представлены алгоритмы моделирования стационарных гауссовских случайных процессов с дробно-рациональными спектральными плотностями (2.38), в основе которых лежат

линейные преобразования белого шума с подходящими спектральными характеристиками, а также модели, основанные на каноническом разложении (2.42). Каждый из этих подходов может привести к трудоемким алгоритмам. В первом случае требуется решать стохастическое дифференциальное уравнение (2.40) (или систему (2.41)), а во втором – задачу поиска собственных значений и собственных функций (2.43). Перечисленные трудности усугубляются при переходе к многомерному случаю (т.е. к моделированию соответствующих случайных полей). Следующий прием дает не вполне адекватный (в смысле воспроизведения конечномерных распределений), но весьма простой метод построения гауссовского случайного поля с произвольной спектральной плотностью. Забегая вперед, отметим, что простота и неплохие аппроксимационные свойства представляемой модели обуславливает ее самое широкое применение в прикладных задачах (см. далее подразд. 2.6.7).

Пусть  $\xi(\mathbf{t})$  ( $\mathbf{t} \in T \subset R^l$ ) –  $l$ -мерное однородное гауссовское вещественное случайное поле с корреляционной функцией

$$R(\mathbf{u}) = \int_{\Lambda} \cos(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}, \quad (2.44)$$

где  $f(\boldsymbol{\lambda})$  – соответствующая спектральная плотность (см. определение 2.8 из подразд. 2.1.3). Для простоты изложения будем полагать, что  $m = \mathbf{E}\xi(\mathbf{t}) \equiv 0$  и  $\mathbf{D}\xi(\mathbf{t}) = R(0) \equiv 1$ .

Построим следующую простейшую кубатурную формулу приближения интеграла (2.44) (см. далее разд. 3.10). Для этого рассмотрим разбиение спектрального пространства  $\Lambda$  на простые пространственно-односвязные области  $\Lambda_1, \dots, \Lambda_n$  и приближение

$$R(\mathbf{u}) \approx R_n(\mathbf{u}) = \sum_{k=1}^n p_k \cos(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{u}), \quad (2.45)$$

где  $\boldsymbol{\lambda}_k \in \Lambda_k$  и  $p_k = \int_{\Lambda_k} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}$ . Хорошо известен факт, что случайное поле

$$\xi_n(\mathbf{t}) = \sum_{k=1}^n p_k^{1/2} \left( \gamma_k^{(1)} \sin(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) + \gamma_k^{(2)} \cos(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) \right), \quad (2.46)$$

где  $\{\gamma_k^{(1)}, \gamma_k^{(2)}\}$  – независимые в совокупности стандартные нормальные случайные величины, имеет корреляционную функцию  $R_n(\mathbf{u})$  из (2.45).

Соотношение (2.46) определяет *спектральную модель (с разбиением спектра) однородного гауссовского вещественного случайного поля*. Учитывая соотношение (1.139) из раздела 1.10, выборочные значения стандартных нормальных случайных величин можно получать по формулам

$$\gamma_k^{(1)} = (-2 \ln \alpha'_k)^{1/2} \sin 2\pi \alpha''_k, \quad \gamma_k^{(2)} = (-2 \ln \alpha'_k)^{1/2} \cos 2\pi \alpha''_k.$$

Отсюда, используя тригонометрическую формулу "косинус разности", получаем более удобное для практического использования представление модели (2.46):

$$\xi_n(\mathbf{t}) = \sum_{k=1}^n (-2p_k \ln \alpha'_k)^{1/2} \cos((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) - 2\pi \alpha''_k). \quad (2.47)$$

Модель (2.46) воспроизводит одномерное распределение: при фиксированном  $\mathbf{t}_0$  случайная величина  $\xi_n(\mathbf{t}_0)$  имеет гауссовское распределение (ведь выражение (2.46) представляет собой линейную комбинацию стандартных гауссовских случайных величин). Несложно убедиться и в том, что  $\mathbf{E}\xi_n(\mathbf{t}_0) = 0$  и  $\mathbf{D}\xi_n(\mathbf{t}_0) = 1$ .

Многомерные распределения поля  $\xi_n(\mathbf{t})$  являются гауссовскими, однако эти распределения не совпадают с соответствующими конечномерными распределениями поля  $\xi(\mathbf{t})$ . Однако при  $n \rightarrow \infty$  и  $p_k \rightarrow 0$  все конечномерные распределения модели (2.46) сходятся к соответствующим распределениям поля  $\xi(\mathbf{t})$  (см. далее подразд. 2.6.4).

В качестве иллюстрации несовпадения конечномерных распределений полей  $\xi_n(\mathbf{t})$  и  $\xi(\mathbf{t})$  можно использовать соотношение (2.45), показывающее, что характеристики двумерных распределений этих полей – корреляционные функции  $R_n(\mathbf{u})$  и  $R(\mathbf{u})$  – вообще говоря, не равны. Тем не менее, имеется прием, позволяющий добиться совпадения корреляционных функций  $R_n(\mathbf{u})$  и  $R(\mathbf{u})$ . Для его описания нам понадобится следующее

**Утверждение 2.9.** Пусть однородное поле  $\xi(\mathbf{t})$  стохастически связано со случайным вектором  $\chi$ , имеющим распределение  $P_\chi(d\mathbf{v})$ . Тогда корреляционную функцию  $R(\mathbf{u})$  поля  $\xi(\mathbf{t})$  можно записать в виде

$$R(\mathbf{u}) = \int R(\mathbf{u}, \mathbf{v}) P_\chi(d\mathbf{v}) = \mathbf{E}R(\mathbf{u}, \chi), \quad (2.48)$$

где  $R(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  – условная корреляционная функция поля  $\xi(\mathbf{t})$  при условии  $\chi = \mathbf{v}$ .

Сформулированное утверждение является прямым следствием элементарной формулы полного математического ожидания. Оно показывает, что строить поле с корреляционной функцией (2.48) можно в два этапа: сначала выбрать значение вектора  $\chi$ , а затем построить реализацию рандомизированного поля с корреляционной функцией  $R(\mathbf{u}, \chi)$ . На таком подходе основана следующая модификация спектральной модели (2.46).

**Алгоритм 2.14.** 1). В каждом элементе  $\Lambda_k$  разбиения спектрального пространства реализуем выборочное значение  $\lambda_k$  случайной точки  $\tilde{\lambda}_k$ , распределенной согласно усеченному распределению:

$$\lambda_k \sim f_k(\lambda) = \frac{f(\lambda)}{p_k}, \quad p_k = \int_{\Lambda_k} f(\lambda) d\lambda. \quad (2.49)$$

2). Для полученного набора  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$  реализуем траекторию случайного поля  $\xi_n(\mathbf{t})$  по формуле (2.47).

Модель (2.47) со случайным выбором точек  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$  называется *рандомизированной моделью с разбиением спектра*. Несложно убедиться в том, что для такой модели

$$R_n(\mathbf{u}) = \mathbf{E} \sum_{k=1}^n p_k \cos(\lambda_k, \mathbf{u}) = R(\mathbf{u});$$

это следствие утверждения 2.9 (см. также далее соотношение (2.52)).

Условное одномерное распределение рандомизированной модели (2.46) при фиксированных значениях  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$  является стандартным гауссовским; следовательно, одномерное распределение рандомизированного поля  $\xi_n(\mathbf{t})$  тоже стандартно. Аналогичные соображения показывают, что многомерные распределения рандомизированной модели (2.46) не являются гауссовскими. Поле  $\xi_n(\mathbf{t})$  однородно, но не эргодично. Эти недостатки ослабевают при  $n \rightarrow \infty$  и при равномерном измельчении спектрального пространства  $\Lambda$  (точнее, при выполнении условий типа (2.5)) – см. далее подразд. 2.6.3–2.6.5.

**2.6.2. Обобщение модели с разбиением спектра. Негауссовские спектральные модели.** Описанные в предыдущем подразделе модели являются частными случаями следующей общей конструкции.



Для простоты обозначений рассмотрим комплекснозначное однородное (вообще говоря, негауссовское) случайное поле  $\xi(\mathbf{t})$  с нулевым средним и единичной дисперсией. Приведенная в разделе 2.1 теорема Бохнера-Хинчина (см. утверждение 2.1) гласит о том, что поле допускает спектральное представление (2.4) (см. определение 2.9). Это означает, что при выполнении условий (2.5) справедливо равенство

$$\xi(\mathbf{t}) = \int_{\Lambda} e^{i(\mathbf{t}, \boldsymbol{\lambda})} d\Phi(\boldsymbol{\lambda}) = \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \xi_n(\mathbf{t}), \quad (2.50)$$

где

$$\xi_n(\mathbf{t}) = \sum_{k=1}^n \gamma_k e^{i(\mathbf{t}, \boldsymbol{\lambda}_k)}, \quad \gamma_k = \int_{\Lambda_k} d\Phi(\boldsymbol{\lambda}). \quad (2.51)$$

Интегральную сумму  $\xi_n(\mathbf{t})$  из (2.51) можно использовать в качестве модели случайного поля  $\xi(\mathbf{t})$ . Несложно понять, что приближение (2.46) совпадает с (2.51) для случая моделирования вещественного гауссовского однородного поля (см. подразд. 2.1.3).

Использование представления спектральной модели в виде (2.51) вместо (2.46) позволяет упростить многие выкладки. Покажем это на примере тезиса о том, что рандомизированная модель из алгоритма 2.14 воспроизводит корреляционную функцию моделируемого поля. Учитывая соотношение (2.49) и свойства случайной меры  $\Phi(\boldsymbol{\lambda})$ , описанные в подразд. 2.1.3, получаем

$$\begin{aligned} R_{\xi_n}(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2) &= \mathbf{E} \left( \sum_{k,j=1}^n e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}_1) - i(\boldsymbol{\lambda}_j, \mathbf{t}_2)} \int_{\Lambda_k} d\Phi(\boldsymbol{\lambda}) \left( \int_{\Lambda_j} d\Phi(\boldsymbol{\lambda}) \right)^* \right) = \\ &= \mathbf{E} \left( \sum_{i=1}^n e^{i(\boldsymbol{\lambda}_i, \mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2)} \left| \int_{\Lambda_i} d\Phi(\boldsymbol{\lambda}) \right|^2 \right) = \sum_{k=1}^n \left( \mathbf{E} \left| \int_{\Lambda_k} d\Phi(\boldsymbol{\lambda}) \right|^2 \times \int_{\Lambda_k} e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2)} \frac{f(\boldsymbol{\lambda})}{p_k} d\boldsymbol{\lambda} \right) = \\ &= \sum_{k=1}^n \int_{\Lambda_k} e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2)} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} = \int_{\Lambda} e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2)} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} = R(\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Обычно модель (2.51) используется для моделирования только гауссовских случайных полей. Это связано с тем, что случайные величины  $\gamma_k$  из (2.51) реализуются на ЭВМ как независимые случайные величины, а в этом случае при выполнении условий (2.5) конечномерные распределения модели (2.51) сходятся к гауссовским распределениям при  $n \rightarrow \infty$  (это следует из центральной предельной теоремы – см. далее утверждение 2.11 из подразд. 2.6.4).

Для реализации негауссовских полей  $\xi(\mathbf{t})$  при использовании формул (2.50), (2.51) следует моделировать зависимые величины  $\{\gamma_k\}$ , что, вообще говоря, непросто. Кроме того, для получения информации о конечномерных распределениях предельного поля требуется доказывать более тонкие (по сравнению с центральной) предельные теоремы, которые будут к тому же обладать малой степенью общности. Здесь достаточно перспективным видится использование преобразований гауссовских моделей вида (2.10), рассмотренных в подразд. 2.2.1. В частности, для получения требуемого одномерного распределения можно использовать метод обратной функции распределения – алгоритм 2.1 – в форме (2.9).

**2.6.3. Скорость сходимости в среднеквадратическом.** Приведем еще один пример эффективного использования компактного представления (2.51) спектральной модели вместо (2.46). Речь пойдет о скорости сходимости  $\xi_n(\mathbf{t})$  к  $\xi(\mathbf{t})$  при  $n \rightarrow \infty$  в среднеквадратическом смысле (сам факт такой сходимости непосредственно следует из теоремы Бохнера-Хинчина – см. утверждение 2.1).

**Утверждение 2.10.** Если для некоторого  $\beta > 0$  выполнено соотношение

$$\int_{\Lambda} |\boldsymbol{\lambda}|^{\beta} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} < H_1 \quad (2.53)$$

и, кроме того,

$$d_k = \text{diam } \Lambda_k < H_2 a_n n^{-1/l}, \quad k = 1, \dots, n-1 \quad (2.54)$$

(такое разбиение области  $\{|\boldsymbol{\lambda}| < a_n\}$  можно получить, используя, например, равномерную прямоугольную решетку с шагом по каждой оси порядка  $n^{-1/l}$ ), то при  $a_n = H_3 n^{2/(l(2+\beta))}$  для достаточно большого  $n$  имеет место оценка

$$\mathbf{E}|\xi_n(\mathbf{t}) - \xi(\mathbf{t})|^2 < H_4 n^{-2\beta/(l(2+\beta))},$$

где константа  $H_4$  не зависит от аргумента  $\mathbf{t}$ , принадлежащего ограниченному множеству  $T$ .

**Доказательство.** По аналогии с выкладками (2.52) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{E}|\xi_n(\mathbf{t}) - \xi(\mathbf{t})|^2 &= \mathbf{E} \sum_{k,j=1}^n \left( \int_{\Lambda_k} \left( e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t})} - e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t})} \right) d\Phi(\boldsymbol{\lambda}) \times \right. \\ &\times \left. \left( \int_{\Lambda_j} \left( e^{i(\boldsymbol{\lambda}_j, \mathbf{t})} - e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t})} \right) d\Phi(\boldsymbol{\lambda}) \right)^* \right) = \sum_{k=1}^n \int_{\Lambda_k} \left| e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t})} - e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t})} \right|^2 f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}. \end{aligned}$$

Несложно вычислить (учитывая, что  $e^{iu} = \cos u + i \sin u$ ), что

$$\left| e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t})} - e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t})} \right|^2 = 2 - 2 \cos((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) - (\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t})).$$

Заметим, что  $|\boldsymbol{\lambda}_k - \boldsymbol{\lambda}| < d_k$  при  $\boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\lambda} \in \Lambda_k$  и  $k = 1, \dots, n-1$ , и в силу неравенства Коши – Буняковского  $((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) - (\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t}))^2 \leq |\mathbf{t}|^2 |\boldsymbol{\lambda}_k - \boldsymbol{\lambda}|^2$ . Из ограниченности  $T$  следует, что существует константа  $H_5 > 0$  такая, что  $|\mathbf{t}|^2 < H_5$ . При достаточно больших  $n$  величины  $d_k$  равномерно малы и разложение  $\cos((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) - (\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t}))$  по малому аргументу  $((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) - (\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t}))$  дает оценку

$$\left| e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t})} - e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t})} \right|^2 < H_6 d_k^2 < H_7 a_n^2 n^{-2/l}, \quad k = 1, \dots, n-1;$$

здесь использовано неравенство (2.54). Следовательно,

$$\mathbf{E}|\xi_n(\mathbf{t}) - \xi(\mathbf{t})|^2 \leq H_7 a_n^2 n^{-2/l} \int_{|\boldsymbol{\lambda}| < a_n} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} + H_8 \int_{|\boldsymbol{\lambda}| \geq a_n} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}. \quad (2.55)$$

Наконец, учитывая, что

$$\int_{|\boldsymbol{\lambda}| \geq a_n} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} \leq a_n^{-\beta} \int_{|\boldsymbol{\lambda}| \geq a_n} |\boldsymbol{\lambda}|^{\beta} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} \quad \text{и} \quad a_n = H_3 n^{2/(l(2+\beta))},$$

получаем

$$\mathbf{E}|\xi_n(\mathbf{t}) - \xi(\mathbf{t})|^2 \leq H_9 n^{4/(l(2+\beta))} n^{-2/l} + H_{10} n^{-2\beta/(l(2+\beta))} = H_4 n^{-2\beta/(l(2+\beta))}.$$

□

Нетрудно заметить, что оценка (2.55) оптимальна по порядку, если  $a_n$  определяется уравнением  $a_n^2 n^{-2/l} = \int_{|\boldsymbol{\lambda}| \geq a_n} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}$ . При этом, если  $f(\boldsymbol{\lambda})$  достаточно быстро (например, экспоненциально) убывает при  $|\boldsymbol{\lambda}| \rightarrow +\infty$ , то  $\mathbf{E}|\xi_n(\mathbf{t}) - \xi(\mathbf{t})|^2$  не превосходит величины  $H n^{-2/l} L(n)$ , где  $L(n)$  – медленно растущая функция.

Отметим, что в ряде случаев из сходимости в среднеквадратическом случайных функций  $\xi_n(\mathbf{t})$  и ее производных можно получить скорость равномерной (в среднем) сходимости последовательности  $\{\xi_n(\mathbf{t})\}$  к  $\xi(\mathbf{t})$ , используя теоремы вложения. В частности, для случайного процесса  $\xi(t)$  (т.е. для  $l = 1$ ), используя вложение соболевского пространства  $W_2^1[a, b]$  в  $C[a, b]$ , имеем оценку

$$\mathbf{E} \sup_{t \in [a, b]} |\xi_n(t) - \xi(t)| \leq H_{11} n^{-\beta_0/(2+\beta_0)}$$

при выполнении условия (2.53) при  $\beta = 2 + \beta_0$  для некоторого положительного  $\beta_0$ .

**2.6.4. Сходимость конечномерных распределений.** Справедливо следующее

**Утверждение 2.11** (центральная предельная теорема для случайных функций)[1]. Пусть дана последовательность сумм случайных функций

$$\psi_n(\mathbf{t}) = \sum_{k=1}^{M_n} \zeta_{nk}(\mathbf{t}), \quad \mathbf{t} \in T, \quad n, M_n \in \mathbf{N},$$

и выполнены следующие условия:

1) при фиксированном  $n$  случайные величины  $\zeta_{n1}(\mathbf{t}^{(1)}), \dots, \zeta_{nM_n}(\mathbf{t}^{(M_n)})$  взаимно независимы при любых  $\mathbf{t}^{(1)}, \dots, \mathbf{t}^{(M_n)}$ , обладают моментами второго порядка, причем  $\mathbf{E}\zeta_{nk}(\mathbf{t}) = 0$ ,  $\mathbf{E}\zeta_{nk}^2(\mathbf{t}) = b_{nk}^2(\mathbf{t})$  и  $\max_k b_{nk}^2(\mathbf{t}) \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ ;

2) при  $n \rightarrow \infty$  корреляционная функция  $\hat{R}_n(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)})$  сходится к некоторому предельному:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{R}_n(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)}) = \hat{R}(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)});$$

3) суммы  $\psi_n(\mathbf{t})$  при каждом  $\mathbf{t}$  удовлетворяют условию Линдберга: при любом  $\tau > 0$  выполнено

$$\frac{1}{B_n^2(\mathbf{t})} \sum_{k=1}^{M_n} \int_{|w|^2 > \tau^2 B_n^2(\mathbf{t})} w^2 dF_{nk}(\mathbf{t}, w) \rightarrow 0 \quad \text{при } n \rightarrow \infty,$$

где  $B_n^2(\mathbf{t}) = \sum_{k=1}^{M_n} b_{nk}^2(\mathbf{t})$ , а  $F_{nk}(\mathbf{t}, w)$  – функция распределения случайной величины  $\zeta_{nk}(\mathbf{t})$ . Тогда конечномерные распределения случайных функций  $\psi_n(\mathbf{t})$  сходятся к конечномерным распределениям гауссовской случайной функции  $\psi(\mathbf{t})$  с математическим ожиданием  $\mathbf{E}\psi(\mathbf{t}) \equiv 0$  и корреляционной функцией  $\hat{R}(\mathbf{t}^{(1)}, \mathbf{t}^{(2)})$ .

Применим это утверждение для рандомизированной модели (2.51) с независимыми случайными величинами  $\{\gamma_k\}$ . Заметим, что из соотношения (2.51) и свойств случайной меры  $\Phi(\boldsymbol{\lambda})$  следует, что каждая из независимых величин  $\gamma_k$  представима в виде  $\gamma_k = \sqrt{p_k} \theta_k$ , причем величины  $\{\theta_k\}$  независимы и для всех  $k = 1, \dots, n$  выполнено  $\mathbf{E}\theta_k = 0$  и  $\mathbf{D}\theta_k = 1$ .

**Утверждение 2.12.** Если

$$\max_{k=1, \dots, n} \mathbf{E} |\theta_k|^{2+\sigma} < H_1 \tag{2.56}$$

для некоторых  $\sigma > 0$  и  $H_1 > 0$  ( $\sigma$  и  $H_1$  не зависят от  $n$ ) и

$$\max_{k=1, \dots, n} p_k \rightarrow 0 \quad \text{при } n \rightarrow \infty, \tag{2.57}$$

то конечномерные распределения случайного поля  $\xi_n(\mathbf{t})$  сходятся к конечномерным распределениям гауссовской случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$ .

**Доказательство.** Проверим условия утверждения 2.11. В нашем случае  $M_n = n$ ,  $\zeta_{nk}(\mathbf{t}) = e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t})} \sqrt{p_k} \theta_k$ . Первое условие утверждения 2.11 выполнено в силу соотношений (2.56), (2.57). Второе условие справедливо вследствие равенства (2.52). Остается проверить условие Линдберга, которое можно переписать в виде: для любого  $\tau > 0$

$$\sum_{k=1}^n \mathbf{E}(\zeta_{nk}^2(\mathbf{t}); |\zeta_{nk}(\mathbf{t})| > \tau) \rightarrow 0 \quad \text{при } n \rightarrow \infty.$$

С учетом соотношения (2.56) имеем

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n \mathbf{E}(\zeta_{nk}^2; |\zeta_{nk}| > \tau) &\leq \sum_{k=1}^n \mathbf{E}\left(\frac{|\zeta_{nk}|^{2+\sigma}}{\tau^\sigma}; |\zeta_{nk}| > \tau\right) \leq \frac{1}{\tau^\sigma} \sum_{k=1}^n \mathbf{E}|\zeta_{nk}|^{2+\sigma} = \\ &= \frac{1}{\tau^\sigma} \sum_{k=1}^n \mathbf{E}(|e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t})}| \sqrt{p_k} |\theta_k|)^{2+\sigma} \leq \frac{H_1}{\tau^\sigma} \sum_{k=1}^n p_k^{1+\sigma/2} \leq \frac{H_1}{\tau^\sigma} \left(\max_{k=1, \dots, n} p_k\right)^{\sigma/2} \sum_{k=1}^n p_k, \end{aligned}$$

и тогда из соотношений (2.57) и  $\sum_{k=1}^n p_k = 1$  следует условие 3 утверждения 2.11.  $\square$

Для гауссовской модели (2.46) величины  $\theta_k$  являются гауссовскими, и условие (2.56), безусловно, выполнено. Что касается условия (2.57), то оно является менее ограничительным по сравнению с условием (2.5). Соотношение (2.57), в частности, выполнено для практически удобного разбиения спектрального пространства на "кольца"

$$\Lambda_k = \{\boldsymbol{\lambda} : a_{k-1} \leq |\boldsymbol{\lambda}| < a_k\}, \quad k = 1, \dots, n-1; \quad \Lambda_n = \{\boldsymbol{\lambda} : |\boldsymbol{\lambda}| \geq a_n\};$$

здесь  $0 = a_0 < a_1 < \dots < a_n$  и  $\max_{k=1, \dots, n} (a_k - a_{k-1}) \rightarrow 0$  (для такого разбиения условие (2.5) не выполнено).

**2.6.5. Функциональная сходимост: моментные условия.** Спектральную модель  $\xi_n(\mathbf{t})$  можно трактовать как последовательность случайных функций, сходящуюся (в различных вероятностных смыслах) к моделируемой функции  $\xi(\mathbf{t})$ . Заметим также, что  $\xi_n(\mathbf{t}) \in C(T)$ , т.е. траектории случайной функции  $\xi_n(\mathbf{t})$  непрерывны. Рассмотрим вопрос о функциональной сходимости гауссовской рандомизированной модели из алгоритма 2.14 к моделируемой случайной функции  $\xi(\mathbf{t})$  в  $C(T)$ .

Согласно общей теории слабой сходимости, рассмотренной нами в разд. 2.3, помимо условий сходимости конечномерных распределений (2.57) или (2.5) требуется наложить дополнительное условие слабой компактности в терминах смешанных разностей (утверждение 2.2), или смешанных производных в среднем степени  $p$  (утверждения 2.4 и 2.5), или спектральных моментов (утверждение 2.7). Мы рассмотрим самые наглядные моментные условия (2.20) для гауссовской рандомизированной модели (2.46). Для этой модели корреляционные функции  $R_n(\mathbf{u})$  и  $R(\mathbf{u})$  совпадают, а значит, совпадают и спектральные плотности:  $f_n(\boldsymbol{\lambda}) = f(\boldsymbol{\lambda})$ . Следовательно, вместо условия (2.20) можно рассматривать соотношение (2.53) для некоторого  $\beta$ .

Из утверждения 2.7 имеем  $\beta = 2l$ . Из утверждений 2.5, 2.6 следует, что величину  $\beta$  можно уменьшить до  $2(\lfloor l/2 \rfloor + 1)$ . Учитывая специфику построения спектральной модели (2.46) и гауссовость предельного поля  $\xi(\mathbf{t})$ , удастся ослабить моментное условие слабой сходимости последовательности  $\xi_n(\mathbf{t})$ .

**Утверждение 2.13** [10]. *Слабая сходимост модели (2.46) к однородному гауссовскому полю  $\xi(\mathbf{t})$  следует из условий (2.5) и (2.53) для произвольного  $\beta > 0$ .*

**2.6.6. Рандомизированная модель без разбиения спектра.** При реализации рандомизированной гауссовской спектральной модели согласно алгоритму 2.14 определенные трудности связаны с построением разбиения  $\{\Lambda_1, \dots, \Lambda_n\}$  спектрального пространства  $\Lambda$  и моделирование выборочных значений векторов  $\boldsymbol{\lambda}_k$  согласно усеченным плотностям  $f_k(\boldsymbol{\lambda}) = f(\boldsymbol{\lambda})/p_k$ . Во многих случаях более простой (и экономичной) оказывается рандомизированная модель вида

$$\xi_n(\mathbf{t}) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \left( \gamma_k^{(1)} \sin(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) + \gamma_k^{(2)} \cos(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) \right) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n (-2 \ln \alpha'_k)^{1/2} \cos((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{t}) - 2\pi\alpha''_k), \quad (2.58)$$

где  $\{\gamma_k^{(1)}, \gamma_k^{(2)}\}$  по-прежнему независимые стандартные нормальные случайные величины, а случайные векторы  $\{\boldsymbol{\lambda}_k\}$  независимы и одинаково распределены во всем спектральном пространстве  $\Lambda$  согласно плотности  $f(\boldsymbol{\lambda})$ . Рандомизированная модель (2.58) воспроизводит гауссовские одномерные распределения и корреляционную функцию:  $R_{\xi_n}(\mathbf{u}) = R(\mathbf{u})$ . Из утверждения 2.11 следует сходимость конечномерных распределений последовательности (2.58) к соответствующим распределениям поля  $\xi(\mathbf{t})$ . Функциональную сходимость последовательности (2.58) обеспечивает моментное условие (2.53) с  $\beta = 2$ .

**2.6.7. Некоторые приложения спектральных моделей случайных полей.** Спектральные модели случайных полей используются при описании облачной структуры (в частности, кучевой облачности), поверхности морского ветрового волнения, поля функции тока при гипотезе о хаотичности распределения потенциального вихря и др. Известны эффективные векторные спектральные модели, описывающие процессы турбулентности. Отметим также, что траектории спектральных моделей случайных полей используются для тестирования численных алгоритмов, в частности, алгоритмов численного интегрирования.

## 2.7. МОДЕЛИ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ, СВЯЗАННЫХ С ТОЧЕЧНЫМИ ПОТОКАМИ ПАЛЬМА

**2.7.1. Простейшая одномерная модель.** Пусть требуется построить стационарный случайный процесс  $\xi(t; R)$ ,  $t \in [0, A]$ , с заданной одномерной функцией распределения  $F(x)$  и нормированной корреляционной функцией  $R(u)$ , удовлетворяющей условиям

$$R''(u) \geq 0, \quad u \geq 0; \quad |R'(0)| < +\infty, \quad R(0) = 1, \quad R(+\infty) = 0. \quad (2.59)$$

Таким условиям удовлетворяет, например, экспоненциальная корреляционная функция

$$R(u) = e^{-u}, \quad u \geq 0; \quad \text{здесь } R''(u) = |R'(u)| = e^{-u}. \quad (2.60)$$

**Алгоритм 2.15.** 1. Моделируем последовательность

$$\tau_k = \sum_{i=1}^k \eta_i, \quad \tau_0 = 0, \quad k = \min\{k' : \tau_{k'} \geq A\}; \quad (2.61)$$

здесь  $\eta_i$  – независимые неотрицательные случайные величины,  $\eta_1$  распределена с плотностью  $q_1(u) = -R'(u)$ ,  $u \geq 0$  (из (2.59) непосредственно следует, что  $R'(u) \leq 0$ ), а  $\eta_i$ ,  $i = 2, 3, \dots$  с плотностью  $q(u) = -R''(u)/R'(0)$ ,  $u \geq 0$ .

2. При  $t \in [\tau_{i-1}, \tau_i)$ ,  $i = 1, \dots, k$  полагаем  $\xi(t; R) \equiv \xi_i$ , где  $\xi_i$  – независимые реализации случайной величины  $\xi$  с функцией распределения  $F(x)$ .

**Определение 2.14.** *Стационарные потоки (2.61) называются потоками Пальма.*

Потоки Пальма можно строить методом обратной функции распределения, решая уравнения

$$R(\eta_1) = \alpha_1, \quad R'(\eta_i) = \alpha_i R'(0), \quad i = 2, 3, \dots,$$

относительно  $\{\eta_i\}$ . В частности, для корреляционной функции (2.60) имеем  $q_1(u) = q(u) = e^{-u}$ ,  $u \geq 0$  и  $\eta_i = -\ln \alpha_i$ ; при этом  $\tau_k$  из (2.61) является пуассоновским потоком точек (см. пример 2.2 из подразд. 2.4.2).

При выполнении условий (2.59) значение  $R(u)$  равно вероятности

$$R(u) = \mathbf{P}(k = 0; u) = \mathbf{P}(\eta_1 > u),$$

и поэтому, с учетом свойства отсутствия последействия потоков Пальма, последовательно получаем соотношения

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\tilde{\xi}(t'; R) \tilde{\xi}(t' + t; R)) &= \mathbf{E}(\tilde{\xi}(0; R) \tilde{\xi}(t; R)), \quad \mathbf{E}(\tilde{\xi}(t'; R) \tilde{\xi}(t' + t; R)) = \\ &= R(t) \mathbf{E}\xi^2 + (1 - R(t)) (\mathbf{E}\xi)^2 \quad \text{и} \quad \mathbf{E}((\tilde{\xi}(t'; R) - \mathbf{E}\xi) (\tilde{\xi}(t' + t; R) - \mathbf{E}\xi)) = R(t) (\mathbf{E}\xi^2 - (\mathbf{E}\xi)^2), \end{aligned}$$

то есть  $R(t)$  действительно является нормированной корреляционной функцией построенной согласно алгоритму 2.15 модели  $\tilde{\xi}(t; R)$  процесса  $\xi(t; R)$ .

**2.7.2. Модификации простейшей модели.** Ступенчатый вид траекторий модельного процесса  $\tilde{\xi}(t; R)$  является неестественным для ряда приложений, где помимо воспроизведения основных вероятностных характеристик желательно иметь непрерывные (или близкие к непрерывным) траектории модели случайного процесса. В случае, когда распределение  $\xi$  безгранично делимо (см. определение 1.7 из разд. 1.9), то есть для любого  $n$  справедливо представление  $\xi = \xi_1^{(n)} + \dots + \xi_n^{(n)}$ , где  $\xi_j^{(n)}$  – независимые и одинаково распределенные случайные величины с функцией распределения  $F_{1/n}(x)$ , возможна следующая модификация алгоритма 2.15.

**Алгоритм 2.16.** *Реализуем случайный процесс  $\zeta_n(t; R) = \sum_{j=1}^n \tilde{\xi}_j^{(n)}(t; R)$ , где  $\tilde{\xi}_j^{(n)}(t; R)$  – независимые реализации случайного процесса с корреляционной функцией  $R(u)$  и функцией одномерного распределения  $F_{1/n}(x)$  (эти реализации строим согласно алгоритму 2.15).*

Процесс  $\zeta_n(t; R)$  имеет одномерное распределение  $F(x)$  и корреляционную функцию  $R(u)$ . Реализации  $\zeta_n(t; R)$  улучшены по сравнению с  $\tilde{\xi}(t; R)$  в смысле близости к непрерывным функциям, так как  $\zeta_n(t; R)$  принимает постоянные значения в меньших областях, и эти значения зависимы. На практике алгоритм 2.16 достаточно часто применяется в случае, когда  $F(x)$  представляет собой гамма-распределение (см. разд. 1.9), которое является безгранично делимым. С помощью алгоритма 2.16 можно строить и гауссовские процессы (гауссовское распределение также безгранично делимо), однако здесь целесообразнее использовать модели из разд. 2.5 и 2.6.

Класс моделируемых корреляционных функций можно расширить с помощью замены  $u$  на  $(\lambda u)$  и введения дополнительной рандомизации по  $\lambda$ . Например, если "исходная" корреляционная функция имеет вид (2.60), то "рандомизированная"

$$R_{rand}(u) = \int_0^{+\infty} e^{-\lambda u} \mu(d\lambda),$$

где  $\mu$  – вероятностная мера на  $(0, +\infty)$  такая, что  $\mathbf{P}(\lambda = 0) = 0$  и  $\int_0^{+\infty} \lambda \mu(d\lambda) < +\infty$ . В силу известной теоремы Бернштейна, именно в таком виде можно представить любую

абсолютно монотонную корреляционную функцию (по определению бесконечно дифференцируемая функция  $f$  абсолютно монотонна, если  $(-1)^k f^{(k)}(u) \geq 0$ ;  $k = 0, 1, 2, \dots$ ). Для функции  $R_{rand}(u)$  выполнены условия (2.59) и плотности  $q_1(u)$  и  $q(u)$  имеют вид

$$q_1(u) = \int_0^{+\infty} \lambda e^{-\lambda u} \mu(d\lambda), \quad q(u) = \frac{\int_0^{+\infty} \lambda^2 e^{-\lambda u} \mu(d\lambda)}{\int_0^{+\infty} \lambda \mu(d\lambda)}.$$

Если меры  $\mu$  и  $\lambda \mu$  удобно моделируются, то для построения реализаций величин  $\eta_i$ ;  $i = 1, 2, \dots$  целесообразно использовать интегральный метод суперпозиции (см. подразд. 1.6.1).

**2.7.3. Модели случайных полей.** Изложенное выше можно использовать для моделирования однородного случайного поля  $\xi(\mathbf{t}; R)$ ;  $\mathbf{t} \in T = [0, A_1] \times \dots \times [0, A_l]$  с безгранично делимым одномерным распределением. Рассмотрим следующую процедуру.

**Алгоритм 2.17.** Для каждого  $j$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$ :

1) на  $i$ -й координатной оси строим поток Пальма  $\{\tau_{k_i}^{(i,j)}\}$  для корреляционной функции  $R^{(i)}(u_i)$ ,  $i = 1, \dots, l$  (функции  $R^{(i)}(u_i)$  удовлетворяют условию (2.59));

2) при  $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_l) \in [\tau_{k_1-1}^{(1,j)}, \tau_{k_1}^{(1,j)}] \times \dots \times [\tau_{k_l-1}^{(l,j)}, \tau_{k_l}^{(l,j)}]$  полагаем

$$\tilde{\xi}_j^{(n)}(\mathbf{t}; \tilde{R}) \equiv \xi_{k_1 \dots k_l}, \quad \tilde{R} = (R^{(1)}, \dots, R^{(l)}),$$

где  $\xi_{k_1 \dots k_l}$  – независимые для разных наборов  $\{k_i\}$  реализации случайной величины с функцией распределения  $F_{1/n}(x)$ . Тогда однородное случайное поле

$$\beta_n(\mathbf{t}; R_1) = \sum_{j=1}^n \tilde{\xi}_j^{(n)}(\mathbf{t}; \tilde{R}) \quad (2.62)$$

имеет одномерное распределение  $F(x)$  и нормированную корреляционную функцию  $R_1(\mathbf{u}) = \prod_{i=1}^l R^{(i)}(u_i)$ .

Можно также рассмотреть следующую модель.

**Алгоритм 2.18.** Строим

$$\gamma_n(\mathbf{t}; R_2) = \sum_{i=1}^l \tilde{\xi}_n^{(i)}(t_i; R^{(i)}), \quad \tilde{\xi}_n^{(i)}(t_i; R^{(i)}) = \sum_{j=1}^n \tilde{\xi}_j^{(n,i)}(t_i; R^{(i)}), \quad (2.63)$$

где  $\tilde{\xi}_j^{(n,i)}(t_i; R^{(i)})$  – независимые реализации случайного процесса с корреляционной функцией  $R^{(i)}(u_i)$  и функцией одномерного распределения  $F_{1/(nl)}(x)$ ; эти реализации моделируются согласно алгоритму 2.15. Поле (2.63) имеет одномерное распределение  $F(x)$  и нормированную корреляционную функцию  $R_2(\mathbf{u}) = (1/l) \times \sum_{i=1}^l R^{(i)}(u_i)$ .

В связи с тем что основное время ЭВМ при использовании моделей (2.62) и (2.63) идет на реализацию случайных величин с функциями распределения  $F_{1/n}(x)$  и  $F_{1/(nl)}(x)$ , модель (2.63) является более экономичной, так как для ее реализации требуется моделировать в среднем  $(\nu l n)$  значений случайной величины, а для модели (2.62) –  $(\nu^l n)$  значений; здесь  $\nu$  – среднее количество точек потока Пальма на каждой координатной оси.

Модели (2.62) и (2.63) являются разными хотя бы в том смысле, что они воспроизводят отличные друг от друга корреляционные функции  $R_1(\mathbf{u})$  и  $R_2(\mathbf{u})$ . Как и в одномерном случае, класс моделируемых корреляционных функций можно расширить, заменяя  $u_i$  в выражениях для  $R_1(\mathbf{u})$  и  $R_2(\mathbf{u})$  на  $(\lambda_i u_i)$  и реализуя дополнительную рандомизацию по параметру  $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_l)$ . Например, если все "исходные"  $R^{(i)}(u_i)$

экспоненциальные:  $R^{(i)}(u_i) = \exp(-u_i)$ ,  $u_i \geq 0$ , то соответствующие "рандомизированные" корреляционные функции имеют вид

$$R_{1,rand}(\mathbf{u}) = \int_{\Lambda} \exp(-\lambda_1 u_1 - \dots - \lambda_l u_l) \mu(d\boldsymbol{\lambda}), \quad \Lambda = [0, +\infty)^l,$$

где  $\mu(\boldsymbol{\lambda})$  – вероятностная мера на  $\Lambda$ , и

$$R_{2,rand}(\mathbf{u}) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \int_0^{+\infty} \exp(-\lambda_i u_i) \mu_i(d\lambda_i),$$

где  $\mu_i(\lambda)$  – вероятностные меры на  $[0, +\infty)$ .

**2.7.4. Функциональная сходимостъ: одномерный случай.** Заметим, что траектории построенных в алгоритмах 2.16–2.18 моделей случайных процессов и полей принадлежат пространству функций без разрывов второго рода по каждой координате  $D(T)$  (см. подразд. 2.1.1). Поэтому при доказательстве факта слабой сходимости соответствующей последовательности достаточно проверить условия утверждения 2.3. Обратимся сначала к одномерной модели  $\zeta_n(t; R)$  из алгоритма 2.16.

Предельные конечномерные распределения последовательности  $\zeta_n(t; R)$  получаются из следующих достаточно громоздких комбинаторных рассуждений. Заметим сначала, что если  $\varphi(w)$  – характеристическая функция процесса  $\zeta_n(t; R)$ , то характеристические функции слагаемых  $\tilde{\xi}_j^{(n)}(t; R)$  одинаковы и равны  $\varphi_n(w) = \varphi^{1/n}(w)$  (так как характеристическая функция суммы независимых случайных величин равна произведению характеристических функций слагаемых). Аналогично, если  $\varphi_{m,n}(T_m; w_1, \dots, w_m)$ , где  $T_m = (t_1, \dots, t_m)$ ,  $t_1 \leq \dots \leq t_m$ , – характеристическая функция  $m$ -мерного частного распределения слагаемых  $\tilde{\xi}_j^{(n)}(t; R)$ , то  $\varphi_{m,n}^n(T_m; w_1, \dots, w_m)$  – соответствующая характеристическая функция суммы  $\zeta_n(t; R)$ . Каждая реализация потока точек для  $\tilde{\xi}_j^{(n)}(t; R)$  разбивает фиксированный набор точек  $T_m$  (в смысле попадания в один и тот же полуинтервал  $[\tau_{i-1}^{(j)}, \tau_i^{(j)})$ ) на подмножества с количеством точек  $k_1^{(s)}, \dots, k_{n_s}^{(s)}$ , где  $s$  – номер варианта разбиения. Полное количество таких вариантов равно  $2^{m-1}$  (этот факт доказывается по индукции: очередная точка  $t_i$ ,  $i = 1, \dots, m$  может попасть либо в один полуинтервал с  $t_{i-1}$  для различных вариантов разбиений  $(i-1)$  точек, либо в следующий полуинтервал для тех же вариантов, то есть получается удвоение числа вариантов). Вероятность осуществления очередного  $s$ -го варианта обозначим через  $p_s$ .

**Утверждение 2.14.** *Предельные  $m$ -мерные распределения при  $n \rightarrow \infty$  последовательности  $\zeta_n(t; R)$  имеют характеристическую функцию*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_{m,n}^n(T_m; w_1, \dots, w_m) &= \prod_{s=1}^{2^{m-1}} \left( \prod_{j=1}^{n_s} \varphi(w_{q(s,j)} + \dots + w_{q(s,j+1)-1}) \right)^{p_s} = \\ &= \psi_m(T_m; w_1, \dots, w_m), \quad q(s, j) = \sum_{i=1}^{j-1} k_i^{(s)} + 1, \quad q(s, 1) = 1, \end{aligned} \quad (2.64)$$

причем функции  $\psi_m$  удовлетворяют условиям согласованности.

**Доказательство.** Проведем его подробно для случая  $m = 2$ . Обозначим  $\tilde{\xi}_j^{(n)}(t_i; R) = \xi_i$ ,  $i = 1, 2$  и  $t_2 - t_1 = \Delta t$ . Учитывая, что  $R(u) = \mathbf{P}(k = 0; u)$ , имеем

$$\begin{aligned} \varphi_{2,n}(T_2; w_1, w_2) &= \mathbf{E} \exp(i(\xi_1 w_1 + \xi_2 w_2)) = R(\Delta t) \varphi^{1/n}(w_1 + w_2) + (1 - R(\Delta t)) \varphi^{1/n}(w_1) \times \\ &\times \varphi^{1/n}(w_2) = R(\Delta t) \exp((1/n) \ln \varphi(w_1 + w_2)) + (1 - R(\Delta t)) \exp((1/n) \ln(\varphi(w_1) \varphi(w_2))). \end{aligned}$$

Разлагая экспоненты в ряд Тейлора, получаем

$$\varphi_{2,n}(T_2; w_1, w_2) = 1 + n^{-1} \left( R(\Delta t) \ln \varphi(w_1 + w_2) + (1 - R(\Delta t)) \ln(\varphi(w_1) \varphi(w_2)) \right) + o(n^{-1}).$$



Учитывая, что  $\lim_{n \rightarrow \infty} (1 + A/n)^n = e^A$ , получаем

$$\varphi_{2_n}^n(T_2; w_1, w_2) \rightarrow (\varphi(w_1 + w_2))^{R(\Delta t)} (\varphi(w_1) \varphi(w_2))^{1-R(\Delta t)} = \psi_2(T_2; w_1, w_2).$$

Функция  $\psi_2(T_2; w_1, w_2)$  обладает всеми свойствами характеристической функции и, кроме того,  $\psi_2(T_2; w, 0) = \psi_2(T_2; 0, w) = \varphi(w)$ , то есть условия согласованности для  $m = 2$  выполнены. Для  $m > 2$  доказательство аналогично (но формулы более громоздкие).  $\square$

Продолжаем проверять условия утверждения 2.3. Неравенство (2.19) для  $l = 1$  выглядит следующим образом:

$$\mathbf{E}(|\zeta_n(t_3; R) - \zeta_n(t_2; R)|^p |\zeta_n(t_2; R) - \zeta_n(t_1; R)|^q) \leq H_1 (t_3 - t_1)^{1+r} \quad (2.65)$$

при  $t_1 \leq t_2 \leq t_3$ ,  $0 \leq p \leq 2$ ,  $0 \leq q \leq 2$ ,  $p + q > 0$ ,  $r > 0$ ,  $H_1 > 0$ .

**Утверждение 2.15.** Если  $|R''(u)| < H_2$  на  $[0, A]$  и  $\xi \geq 0$ , где  $\xi$  обозначает случайную величину с функцией распределения  $F(x)$ , то выполнено (2.65) для  $p = q = r = 1$ , и, следовательно, модель  $\zeta_n(t; R)$  слабо сходится в  $D([0, A])$  к процессу, определяемому предельными конечномерными распределениями (2.64), с нормированной корреляционной функцией  $R(u)$  и функцией одномерного распределения  $F(x)$ .

**Доказательство.** Непосредственно из определения последовательности  $\zeta_n(t; R)$  (см. алгоритм 2.16) следует, что

$$|\zeta_n(t''; R) - \zeta_n(t'; R)| \leq \sum_{i=1}^{\nu(t''-t')} \left( \hat{\xi}_{i,n}^{(1)} + \hat{\xi}_{i,n}^{(2)} \right),$$

где  $t' \leq t''$ ,  $\nu(t'' - t')$  – случайное число соответствующих  $\{\tilde{\xi}_j^{(n)}(t; R)\}$  реализаций потока, имеющих хотя бы одну точку в  $(t', t'')$ ; величины  $\hat{\xi}_{i,n}^{(1)}$  и  $\hat{\xi}_{i,n}^{(2)}$  – соответствующие вклады, то есть независимые в совокупности и одинаково распределенные согласно функции распределения  $F_{1/n}(x)$  случайные величины (далее для таким образом распределенных случайных величин используется обозначение  $\hat{\xi}_{i,n}$  без верхнего индекса). Используя тождество Вальда, можно получить оценку

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(|\zeta_n(t_3; R) - \zeta_n(t_2; R)| |\zeta_n(t_2; R) - \zeta_n(t_1; R)|) &\leq 4 \mathbf{E}(\nu(t_3 - t_2) \nu(t_2 - t_1)) (\mathbf{E} \hat{\xi}_{i,n}^2)^2 + \\ &+ n \mathbf{P} \left( (\tilde{\xi}_j^{(n)}(t_3; R) - \tilde{\xi}_j^{(n)}(t_2; R)) (\tilde{\xi}_j^{(n)}(t_2; R) - \tilde{\xi}_j^{(n)}(t_1; R)) > 0 \right) \mathbf{E}(\hat{\xi}_{i,n}^2)^2. \end{aligned}$$

Несложно показать, что выполнены соотношения

$$\mathbf{P} \left( (\tilde{\xi}_j^{(n)}(t_3; R) - \tilde{\xi}_j^{(n)}(t_2; R)) (\tilde{\xi}_j^{(n)}(t_2; R) - \tilde{\xi}_j^{(n)}(t_1; R)) > 0 \right) \leq H_3 (t_3 - t_2)(t_2 - t_1),$$

$$\mathbf{E}(\nu(t_3 - t_2) \nu(t_2 - t_1)) \leq H_4 n^2 (t_3 - t_2)(t_2 - t_1), \quad \mathbf{E} \tilde{\xi}_j^{(n)} = \frac{\mathbf{E} \xi}{n}, \quad \mathbf{D} \tilde{\xi}_j^{(n)} = \frac{\mathbf{D} \xi}{n}.$$

В итоге получаем неравенство

$$\mathbf{E}(|\zeta_n(t_3; R) - \zeta_n(t_2; R)| |\zeta_n(t_2; R) - \zeta_n(t_1; R)|) \leq H_5 (t_3 - t_2)(t_2 - t_1) \leq H_5 (t_3 - t_1)^2. \quad \square$$

**2.7.5. Функциональная сходимость: многомерный случай.** Аналогичные результаты можно получить для моделей (2.62), (2.63).

**Утверждение 2.16.** Если  $|(R^{(i)})''(u_i)| < H^{(i)}$  на  $[0, A_i]$ ,  $i = 1, \dots, l$  и  $\xi \geq 0$ , то модель  $\beta_n(\mathbf{t}; R_1)$  слабо сходится в  $D(T)$  к полю, определяемому предельными конечномерными распределениями, с корреляционной функцией  $R_1(\mathbf{u})$  и функцией одномерного распределения  $F(x)$ .

**Доказательство.** Проверяем условия утверждения 2.3. Существование согласованных предельных конечномерных распределений модели  $\beta_n(\mathbf{t}; R_1)$  доказывается с помощью комбинаторных рассуждений точно так же, как в одномерном случае (см. утверждение 2.14).

Далее, ясно, что смешанная разность в соотношении (2.19) для одного слагаемого из (2.62) отлична от нуля тогда и только тогда, когда в соответствующем параллелепипеде есть хотя бы одна точка объемного потока  $\{\tau_{k_i}^{(i)}\}$ ,  $i = 1, \dots, l$ . Поэтому по аналогии с одномерным случаем (см. доказательство утверждения 2.15) можно получить оценку

$$\begin{aligned} & \mathbf{E} \left( \left| \Delta^{h^-} \beta_n(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(1)}, t_{i+1}, \dots, t_l) \right| \left| \Delta^{h^+} \beta_n(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(2)}, t_{i+1}, \dots, t_l) \right| \right) \leq \\ & \leq H_1(t_i^{(3)} - t_i^{(2)})(t_i^{(2)} - t_i^{(1)}) \left( \prod_{j=1}^l {}^{(i)}h_j \right)^2 (\mathbf{E} \hat{\xi}_{i,n})^2 + n \mathbf{P} \left( \left| \Delta^{h^-} \beta_n(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(1)}, \right. \right. \\ & \quad \left. \left. t_{i+1}, \dots, t_l) \right| \left| \Delta^{h^+} \beta_n(t_1, \dots, t_{i-1}, t_i^{(2)}, t_{i+1}, \dots, t_l) \right| > 0 \right) \mathbf{E}(\hat{\xi}_{i,n})^2 \leq \\ & \leq H_2(t_i^{(3)} - t_i^{(2)})(t_i^{(2)} - t_i^{(1)}) \left( \prod_{j=1}^l {}^{(i)}h_j \right)^2 \leq H_2(t_i^{(3)} - t_i^{(1)})^2 \left( \prod_{j=1}^l {}^{(i)}h_j \right)^2. \end{aligned}$$

Следовательно, выполнено неравенство (2.19) для  $p = q = r = 1$ .  $\square$

**Утверждение 2.17.** Если выполнены условия утверждения 2.16, то модель  $\gamma_n(\mathbf{t}; R_2)$  слабо сходится в  $D(T)$  к полю, определяемому предельными конечномерными распределениями, с корреляционной функцией  $R_2(\mathbf{u})$  и функцией одномерного распределения  $F(x)$ .

**Доказательство.** Сходимость модели (2.63) непосредственно следует из утверждений 2.14 и 2.15, так как поле  $\gamma_n(\mathbf{t}; R_2)$  из (2.63) представляет собой сумму независимых случайных процессов  $\tilde{\zeta}_n^{(i)}(t_i; R^{(i)})$  типа  $\zeta_n(t; R)$  из алгоритма 2.16. В частности, характеристические функции предельных конечномерных распределений поля (2.63) получаются из утверждения 2.14 и того факта, что характеристическая функция суммы независимых случайных величин равна произведению характеристических функций этих величин

$$\bar{\psi}_m(\bar{T}_m; \bar{w}_1, \dots, \bar{w}_m) = \prod_{i=1}^l \left( \psi_m^{(i)}(T_m^{(i)}; w_1^{(i)}, \dots, w_m^{(i)}) \right)^{1/l},$$

а частные характеристические функции  $\psi_m^{(i)}(T_m^{(i)}; w_1^{(i)}, \dots, w_m^{(i)})$ ,  $i = 1, \dots, l$ , определяются по формулам (2.64).

Что касается условия (2.19), то для модели  $\gamma_n(\mathbf{t}; R_2)$  смешанные разности порядка больше единицы тождественно равны нулю и проверка (2.19) сводится к проверке условия

$$\mathbf{E} \left( \left| \tilde{\zeta}_n^{(i)}(t_i^{(3)}; R^{(i)}) - \tilde{\zeta}_n^{(i)}(t_i^{(2)}; R^{(i)}) \right| \left| \tilde{\zeta}_n^{(i)}(t_i^{(2)}; R^{(i)}) - \tilde{\zeta}_n^{(i)}(t_i^{(1)}; R^{(i)}) \right| \right) \leq \tilde{H}^{(i)}(t_i^{(3)} - t_i^{(1)})^2$$

(здесь мы вновь положили  $p = q = r = 1$ ), которое выполнено в силу утверждения 2.15.  $\square$

**2.7.6. Свойства предельных распределений. Моделирование векторных полей.** Указанные в утверждениях 2.14–2.17 предельные случайные процессы и поля обладают безгранично делимыми распределениями, так как для любого  $m$  и достаточно большого  $n$  суммы из  $\zeta_n(t; R)$ ,  $\beta_n(\mathbf{t}; R_1)$  и  $\gamma_n(\mathbf{t}; R_2)$  можно разбить на  $m$  частичных сумм объема  $k$  ( $mk = n$ ) и затем устремить  $k$  к бесконечности.

Полученные результаты можно распространить на векторные поля, взяв в качестве  $\xi$  случайный вектор с заданным распределением. При этом корреляционная функция моделируемого векторного поля представляется произведением скалярной функции одного из рассмотренных выше типов  $R_1(\mathbf{u})$  и  $R_2(\mathbf{u})$  на корреляционную матрицу вектора  $\xi$ . Класс моделируемых корреляционных функций здесь также можно расширить путем дополнительной рандомизации каким-либо образом введенных параметров. Теория слабой сходимости для векторных полей аналогична скалярному случаю, следует только заменить знак модуля в (2.19) на соответствующую векторную норму.

**2.7.7. Моделирование стохастических сред.** Построенные в этом разделе численные схемы с успехом используются для моделирования стохастических сред. В ряде работ трехмерные модельные поля вида (2.62) использованы для широкомасштабных расчетов радиационных характеристик сплошной стохастической облачности. На основе существенного использования кусочно-слоистой структуры одномерных и трехмерных стохастических сред, получающейся при реализации модели (2.62), удалось исследовать возможности частичного аналитического осреднения весовых оценок теории переноса излучения по распределению случайной плотности. Это позволило, в частности, оценить изменение характеристик процесса переноса излучения при переходе от детерминированной среды к стохастической с той же средней плотностью.

## ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

### 3.1. СТАНДАРТНЫЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

**3.1.1. Стандартный алгоритм.** Пусть требуется приближенно вычислить  $l$ -кратный интеграл

$$I = \int_{R^l} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (3.1)$$

Здесь  $d\mathbf{x} = dx_1 \dots dx_l$ , то есть, с учетом замечания в п. 0.3, вычисляется интеграл Римана. Переход к случаю, когда (3.1) – интеграл Римана–Стилтьеса несложен. Во многих ситуациях интеграл (3.1) удобнее записывать в виде  $I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ , где  $X$  – замыкание множества тех  $\mathbf{x} \in R^l$ , для которых  $g(\mathbf{x}) \neq 0$ .

Выберем плотность распределения  $f(\mathbf{x})$  случайного вектора  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_l)$  в  $R^l$  такую, что

$$f(\mathbf{x}) \geq 0; \quad \int f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \quad \text{и} \quad f(\mathbf{x}) \neq 0 \quad \text{при} \quad g(\mathbf{x}) \neq 0 \quad \text{для} \quad \mathbf{x} \in R^l.$$

Перепишем интеграл (3.1) в виде математического ожидания

$$I = \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta, \quad \text{где} \quad q(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})}, \quad \zeta = q(\xi). \quad (3.2)$$

На основании закона больших чисел строится

**Алгоритм 3.1.** 1. Реализуем  $n$  выборочных значений  $\xi_1, \dots, \xi_n$  случайного вектора  $\xi$  согласно выбранной плотности  $f(\mathbf{x})$ .

2. Вычисляем приближенное значение интеграла (3.1):

$$I \approx \bar{\zeta}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q(\xi_i). \quad (3.3)$$

Следуя [1–5], будем называть алгоритм 3.1 *стандартным алгоритмом метода Монте-Карло для вычисления интеграла* (3.1). Если рассматривать  $\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_n$  из (3.3) как набор независимых одинаково распределенных случайных векторов с плотностью распределения  $f(\mathbf{x})$ , то случайные величины  $\zeta_1 = q(\boldsymbol{\xi}_1), \dots, \zeta_n = q(\boldsymbol{\xi}_n)$  будут также независимыми одинаково распределенными с математическим ожиданием  $I$  (см. соотношение (3.2)) и дисперсией

$$\sigma^2 = \mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}q^2(\boldsymbol{\xi}) - (\mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi}))^2 = \int q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 = \int \frac{g^2(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} d\mathbf{x} - I^2. \quad (3.4)$$

В свою очередь, величина  $\bar{\zeta}_n$  из (3.3) имеет математическое ожидание  $I$  и дисперсию  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n = \sigma^2/n$ .

**3.1.2. Погрешность стандартного алгоритма.** Если величина  $\sigma^2$  из (3.4) конечна, то погрешность  $\delta_n = |\bar{\zeta}_n - I|$  алгоритма 3.1 представима в виде

$$\delta_n = \left| \frac{S_n - nI}{n} \right| = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \left| \frac{S_n - n\mathbf{E}\zeta}{\sigma\sqrt{n}} \right|,$$

где  $S_n = \zeta_1 + \dots + \zeta_n$ . Из центральной предельной теоремы следует, что при достаточно большом  $n$  случайная величина  $(S_n - n\mathbf{E}\zeta)/(\sigma\sqrt{n})$  близка по распределению к стандартной нормальной случайной величине  $\omega \in N(0, 1)$ . Поэтому для малого  $\varepsilon > 0$  найдется константа  $\beta_\varepsilon$ , для которой выполнено соотношение

$$\mathbf{P} \left( \delta_n \leq \beta_\varepsilon \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right) \approx \mathbf{P} \{ |\omega| < \beta_\varepsilon \} \geq 1 - \varepsilon. \quad (3.5)$$

Например, для  $\varepsilon = 0.003$  имеем  $\beta_\varepsilon \approx 3$  (это соотношение отражает "правило трех сигма"). Используют также  $\varepsilon = 0.05$  (при этом  $\beta_\varepsilon \approx 2$ );  $\varepsilon = 0.32$  (при этом  $\beta_\varepsilon \approx 1$ );  $\varepsilon = 0.5$  (при  $\beta_\varepsilon \approx 0.6745$ ). Последняя пара служит для определения так называемой *вероятной ошибки метода*  $r_n = 0.6745 \sigma/\sqrt{n}$ , для которой

$$\mathbf{P}(|\bar{\zeta}_n - \mathbf{E}\zeta| < r_n) \approx \mathbf{P}(|\bar{\zeta}_n - \mathbf{E}\zeta| > r_n).$$

Величина  $r_n$  используется на практике для приближенной оценки порядка ошибки.

Из соотношения (3.5) следует, что скорость сходимости метода Монте-Карло определяется величиной  $n^{-1/2}$ , то есть относительно невелика. Для того, чтобы получить следующий знак после запятой величины  $I$  (то есть уменьшить погрешность примерно в десять раз) требуется в сто раз увеличить число испытаний  $n$ . Поэтому характерные числа испытаний в практических вычислениях по методу Монте-Карло весьма велики.

Для сравнения при вычислении однократного интеграла  $I$  с гладкой подынтегральной функцией  $g(x)$  для  $x \in [a, b]$  погрешность простейшей формулы прямоугольников, определяемая числом  $n$  вычислений подынтегральной функции  $g(x)$  из (3.1), имеет порядок  $n^{-2}$  (см. далее утверждение 3.10 из разд. 3.10) – на четыре порядка лучше метода Монте-Карло, а чуть более сложная формула Симпсона имеет еще более высокий порядок погрешности  $n^{-3}$ . Упомянутые формулы являются частными случаями так называемых квадратурных формул Ньютона-Котеса (см. далее подразд. 3.10.1), построение которых основано на интегрировании полиномиальных интерполяций подынтегральной функции  $g(x)$ . Хорошо известно, что при переходе к размерностям  $l$  интеграла (3.1), больших единицы, и при рассмотрении негладких подынтегральных функций  $g(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in R^l$ , построение интерполяций для  $g(\mathbf{x})$  и соответствующих им кубатурных формул значительно усложняется и порядок  $t$  погрешности  $\delta_n \sim n^{-t}$  уменьшается с

ростом  $l$  (см., например, утверждение 3.11 из разд. 3.10). Скорость сходимости  $n^{-1/2}$  метода Монте-Карло (3.3) не зависит от размерности  $l$  (эта скорость сохраняется, в том числе, и для интегралов бесконечно возрастающей кратности – см. далее гл. 4). Свойства функции  $g(\mathbf{x})$  влияют лишь на величину  $\mathbf{D}\zeta$  из (3.4).

Таким образом, при переходе к сложным многомерным задачам конкурентоспособность методов Монте-Карло возрастает. Принято считать, что для  $1 \leq l \leq 3$  предпочтительнее использовать кубатурные формулы, для  $l \geq 10$  не имеет конкурентов простейший метод Монте-Карло или его модификации, например, связанные с введением аппарата цепей Маркова, обрывающихся с вероятностью единица (см. гл. 4). Для размерностей  $3 < l < 10$  имеет смысл рассматривать смешанные дискретно-стохастические методы численного интегрирования (см. далее разд. 3.2 и 3.6). Ряд замечаний о соотношении кубатурных формул и метода Монте-Карло сформулирован также в разделах 3.9, 3.10.

**3.1.3. Трудоемкость метода Монте-Карло.** Важным преимуществом метода Монте-Карло является простота учета вычислительных затрат, позволяющая проводить оптимизацию алгоритма 3.1 за счет специального выбора плотности  $f(\mathbf{x})$ . Действительно, затраты на вычисление величины  $\bar{\zeta}_n$  равны  $s = nt$ , где  $t$  – среднее время для получения одного выборочного значения  $\zeta_i$  случайной величины  $\zeta$  (затратами на суммирование и деление на  $n$  в формуле (3.3) можно пренебречь). Полагая, что величина  $\beta_\varepsilon \sigma / \sqrt{n}$  из (3.5) определяет погрешность  $\delta_n$ :

$$\delta_n = \frac{\beta_\varepsilon \sigma}{\sqrt{n}},$$

получаем, что при заданном уровне погрешности  $\delta_n = \delta = \text{const}$  и при фиксированном  $\varepsilon$  выполнено

$$n = A\sigma^2; \quad A = \frac{\beta^2(\varepsilon)}{\delta^2}.$$

Следовательно, число испытаний  $n$  пропорционально дисперсии  $\sigma^2 = \mathbf{D}\zeta$ , и поэтому можно заменить величину  $s$  на

$$S = t \times \mathbf{D}\zeta. \quad (3.6)$$

Величина (3.6), называемая *трудоемкостью метода Монте-Карло*, является критерием качества алгоритма 3.1. Тот выбор плотности  $f(\mathbf{x})$  считается лучше, для которого величина  $S$  меньше.

Неизвестная величина  $\sigma = \sqrt{\mathbf{D}\zeta}$  из (3.5) допускает эффективное оценивание с помощью реализуемых выборочных значений  $\zeta_1, \dots, \zeta_n$ . Простейшее приближение несложно получить из соотношения (3.2) для  $q(u) = u^2$ :

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}\zeta^2 - (\mathbf{E}\zeta)^2 \approx \mathbf{D}_n^{(1)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i^2 - \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i \right)^2. \quad (3.7)$$

Если в (3.7) трактовать  $\zeta_1, \dots, \zeta_n$  как независимые и одинаково распределенные (так же как случайная величина  $\zeta$ ) случайные величины, то несложно показать, что

$$\mathbf{E}\mathbf{D}_n^{(1)} = \left( 1 - \frac{1}{n} \right) \mathbf{D}\zeta. \quad (3.8)$$

Действительно,  $\mathbf{E}\mathbf{D}_n^{(1)} = \mathbf{E}\zeta^2 - \mathbf{E}\bar{\zeta}_n^2 = \mathbf{D}\zeta - \mathbf{D}\bar{\zeta}_n$ , так как  $\mathbf{E}\bar{\zeta}_n = \mathbf{E}\zeta$ . Учитывая, что  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n = \mathbf{D}\zeta/n$ , получаем (3.8). Несмещенную оценку дисперсии можно получить, разделив  $\mathbf{D}_n^{(1)}$

на  $(1 - 1/n)$ :

$$\mathbf{D}_n^{(2)} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \zeta_i^2 - \frac{1}{n(n-1)} \left( \sum_{i=1}^n \zeta_i \right)^2. \quad (3.9)$$

Отметим, что замена в соотношении (3.5) величины  $\sigma$  на  $\sqrt{\mathbf{D}_n}$  изменяет "доверительную границу"  $\beta_\varepsilon \sigma / \sqrt{n}$  на величину порядка  $O(1/n)$ , если  $\mathbf{E}\zeta^4 < +\infty$ .

Имеется ряд приемов, позволяющих уменьшать дисперсию  $\mathbf{D}\zeta$  для случайной величины  $\zeta$  из (3.2) (см. далее разделы 3.2–3.9). Способы уменьшения времени  $t$  направлены, как правило, на оптимизацию моделирования случайного вектора  $\xi$ .

## 3.2. ВЫБОРКА ПО ВАЖНОСТИ

**3.2.1. Теорема о минимуме дисперсии.** В разделах 3.2–3.9 исследуются возможности уменьшения множителя  $\mathbf{D}\zeta = \sigma^2$  в выражении для трудоемкости  $S = t \times \mathbf{D}\zeta$  алгоритма 3.1 (см. соотношения (3.4), (3.6)). Во-первых, выясним, для какой плотности  $f(\mathbf{x})$  дисперсия (3.4) случайной величины  $\zeta$  из (3.2) является минимальной.

**Утверждение 3.1.** *Минимальная дисперсия  $\sigma_{min}^2$  реализуется в случае, когда плотность  $f(\mathbf{x})$  пропорциональна модулю подынтегральной функции:*

$$f_{min}(\mathbf{x}) = \frac{|g(\mathbf{x})|}{\int |g(\mathbf{y})| d\mathbf{y}}, \quad (3.10)$$

и равна

$$\sigma_{min}^2 = \left( \int |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \right)^2 - I^2. \quad (3.11)$$

**Доказательство.** Соотношение (3.11) получается непосредственной подстановкой выражения (3.10) в (3.4) с учетом того, что  $g^2(\mathbf{x})/|g(\mathbf{x})| = |g(\mathbf{x})|$ . Далее, из формул (3.4) и (3.11) следует, что дисперсия  $\sigma_{min}^2$  является действительно наименьшей, так как для любой плотности  $f(\mathbf{x})$  величина

$$\begin{aligned} \sigma^2 - \sigma_{min}^2 &= \left( \int \frac{g^2(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} d\mathbf{x} - I^2 \right) - \\ &- \left( \left( \int |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \right)^2 - I^2 \right) = \int \frac{g^2(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} d\mathbf{x} - \left( \int |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \right)^2 \end{aligned}$$

является дисперсией (то есть величиной неотрицательной) случайной величины  $|g(\xi)|/f(\xi)$ , где случайный вектор  $\xi$  имеет плотность распределения  $f(\mathbf{x})$ .  $\square$

Сформулируем также важное следствие утверждения 3.1 для случая знакопостоянной подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$ .

**Утверждение 3.2.** *Пусть*

$$g(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in R^l. \quad (3.12)$$

Если

$$f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})/I \quad \text{при } \mathbf{x} \in R^l, \quad (3.13)$$

то  $\mathbf{D}\zeta = \sigma_{min}^2 = 0$ .

Плотности (3.10) и (3.13) не используется для вычисления интеграла  $I$  по той причине, что нахождение величины  $\int |g(\mathbf{y})| d\mathbf{y}$  из соотношения (3.10) представляет собой задачу, эквивалентную по сложности исходной задаче (3.1) (в случае (3.12) – в точности

эквивалентную). Более того, для случая (3.12) алгоритм 3.1 "вырождается" и приближенное равенство (3.3) превращается в тождество  $I = (1/n) \times \sum_{i=1}^n I$ .

**3.2.2. Выборка по важности и ее погрешность.** Из утверждений 3.1 и 3.2 можно сделать вывод, что в ряде случаев можно добиться уменьшения трудоемкости  $S = t \times \mathbf{D}\zeta$  алгоритма 3.1, выбирая плотность  $f(\mathbf{x})$ , близкой (с точностью до постоянного множителя  $H_1$ ) к функции (3.10):

$$f(\mathbf{x}) \approx H_1 \frac{|g(\mathbf{x})|}{\int |g(\mathbf{y})| d\mathbf{y}}. \quad (3.14)$$

Алгоритм 3.1 в этом случае называется *выборкой по важности*, что соответствует английскому термину "*important sampling*". Такое название объясняется тем, что если  $f(\mathbf{x})$  пропорциональна модулю подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$ , то в тех частях области  $X$ , в которых  $|g(\mathbf{x})|$  больше и вклад которых в интеграл  $I$  более существенен, будет выбираться больше случайных точек  $\{\xi_i\}$ .

Соотношение (3.14) позволяет надеяться получить алгоритм метода Монте-Карло (3.3) с малой дисперсией. Продемонстрируем это сначала для случая (3.12). Обозначим через  $X$  замыкание множества тех  $\mathbf{x} \in R^l$ , для которых  $g(\mathbf{x}) > 0$ . Полагаем также, что  $f(\mathbf{x}) = 0$  при  $\mathbf{x} \notin X$ .

**Утверждение 3.3.** *Предположим, что*

$$0 \leq m_1 \leq q(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} \leq m_2 < +\infty, \quad \mathbf{x} \in X. \quad (3.15)$$

Тогда имеет место следующая оценка для дисперсии

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{D}q(\xi) \leq \frac{(m_2 - m_1)^2}{4}. \quad (3.16)$$

**Доказательство.** Заметим, что

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \left( \zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2 &= \mathbf{E} \left( (\zeta - \mathbf{E}\zeta) + \left( \mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right) \right)^2 = \mathbf{D}\zeta + \\ &+ \left( \mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2 + 2\mathbf{E} \left( (\zeta - \mathbf{E}\zeta) \left( \mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right) \right) = \mathbf{D}\zeta + \left( \mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\mathbf{D}\zeta \leq \mathbf{E} \left( \zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2 \leq \frac{(m_2 - m_1)^2}{4}.$$

Здесь использовано то, что  $m_1 \leq \zeta \leq m_2$  (ведь  $\zeta = q(\xi)$ ) и что линейная функция  $\varphi(t) = t - (m_1 + m_2)/2$ ,  $m_1 \leq t \leq m_2$  принимает свое максимальное и минимальное значения в точках  $t_1 = m_1$  и  $t_2 = m_2$ .  $\square$

Случай  $m_2 - m_1 \approx 0$  соответствует соотношению (3.14) для  $g(\mathbf{x}) \geq 0$  для  $H_1 \approx m_1 \approx m_2$ . Неравенства (3.15) и (3.16) дают способ априорной оценки дисперсии при использовании выборки по важности (3.14) для случая (3.12).

**Пример 3.1.** Рассмотрим интеграл

$$I = \frac{1}{(2\pi)^5} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x_1^2 + \dots + x_{10}^2)/2} \sqrt{1 + \frac{\sin^2(x_1 \dots x_{10})}{4}} dx_1 \dots dx_{10}.$$

При построении алгоритма 3.1 целесообразно положить

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, \dots, x_{10}) = \frac{1}{(2\pi)^5} e^{-(x_1^2 + \dots + x_{10}^2)/2} = \prod_{j=1}^{10} \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x_j^2/2} \right). \quad (3.17)$$

При этом  $q(\mathbf{x}) = \sqrt{1 + (\sin^2(x_1 \dots x_{10}))/4}$  и выполнено соотношение (3.15) для  $m_1 = 1$  и  $m_2 = \sqrt{5}/2$ . Случайный вектор  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_{10})$ , распределенный согласно плотности (3.17), состоит из независимых стандартных нормальных случайных величин  $\{\xi_j\}$ . Используя формулы (1.139) из разд. 1.10, получаем выборочные значения  $\boldsymbol{\xi}_i = (\xi_{1,i}, \dots, \xi_{10,i})$ , где

$$\xi_{2s-1,i} = \sqrt{-\ln \alpha_{1,i}^{(s)}} \sin 2\pi \alpha_{2,i}^{(s)}, \quad \xi_{2s,i} = \sqrt{-\ln \alpha_{1,i}^{(s)}} \cos 2\pi \alpha_{2,i}^{(s)},$$

$s = 1, \dots, 5; i = 1, \dots, n$ . Формула (3.3) из алгоритма 3.1 имеет вид

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sqrt{1 + (\sin^2(\xi_{1,i} \dots \xi_{10,i}))/4}.$$

Погрешность этого приближения пропорциональна величине  $\sqrt{\mathbf{D}\zeta/n}$ . Согласно соотношению (3.16), дисперсия оценивается сверху величиной  $\mathbf{D}\zeta \leq (m_2 - m_1)^2/4 \approx 3.6 \times 10^{-3}$ . Более точные значения величины  $\mathbf{D}\zeta$  дают статистические оценки вида (3.7), (3.9).

**3.2.3. Включение особенности в плотность.** Возможность выбора плотности вида (3.14) позволяет также обеспечить конечность дисперсии (3.4) при вычислении несобственных интегралов.

**Пример 3.2.** Рассмотрим интеграл

$$I = \int_0^1 g(x) dx = \int_0^1 \frac{\varphi(x)}{\sqrt{x}} dx,$$

где  $\varphi(x)$  – непрерывная на  $[0, 1]$  функция такая, что  $\varphi(0) \neq 0$ . Если в качестве  $f(x)$  выбрать плотность распределения стандартного случайного числа  $\xi = \alpha$  (то есть  $f(x) \equiv 1, 0 < x < 1$ ), то оценка  $q(\xi) = \varphi(\alpha)/\sqrt{\alpha}$  имеет бесконечную дисперсию (3.4) и алгоритм 3.1 неприменим. Однако можно выбрать плотность  $f(x)$  таким образом, чтобы отношение  $|g(x)|/f(x)$  (а с ним и дисперсия  $\mathbf{D}q(\xi)$ ) были ограничены. Такой прием называют *включением особенности в плотность*. В нашем случае можно взять  $f(x) = 1/(2\sqrt{x})$  (соответствующая моделирующая формула  $\xi = \alpha^2$ ), и тогда оценка  $q(\xi) = 2\varphi(\xi)$  имеет уже конечную дисперсию (3.4).

Приведенный пример имеет "искусственный" характер, т.к. метод Монте-Карло, как правило, не используется для вычисления однократных интегралов (см. подразд. 3.1.2). Отметим, однако, что несложно построить многомерный аналог примера 3.2, и что описанная ситуация является показательной иллюстрацией того, что *простота реализации того или иного алгоритма метода Монте-Карло не гарантирует эффективность этого алгоритма*.

В ряде приложений особенности подынтегральной функции описываются обобщенными функциями:

$$I = \int s(\mathbf{x}) \left( \sum_{j=1}^A \varphi_j(\mathbf{x}) \delta(F_j(\mathbf{x})) \right) d\mathbf{x}, \quad A = J \vee \infty.$$



Здесь функции  $\varphi_j(\mathbf{x})$  принимают положительные значения на гиперповерхностях  $\Gamma_j$ , определяемых уравнениями  $F_j(\mathbf{x}) = 0$ . Как правило, стандартные кубатурные формулы не дают эффективных алгоритмов подсчета таких интегралов. Выберем *допустимую плотность* вида

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^A p_j \psi_j(\mathbf{x}) \delta(F_j(\mathbf{x})).$$

Здесь функции  $\psi_j(\mathbf{x})$  являются плотностями распределения на гиперповерхностях  $\Gamma_j$ , а  $\{p_j\}$  – вероятности. Учитывая, что при  $\mathbf{x} \in \Gamma_j$  выполнено  $f(\mathbf{x}) = p_j \psi_j(\mathbf{x})$ , перепишем исходный интеграл в виде (3.2):

$$\begin{aligned} I &= \int s(\mathbf{x}) \left( \sum_{j=1}^A \frac{\varphi_j(\mathbf{x}) \delta(F_j(\mathbf{x}))}{p_j \psi_j(\mathbf{x})} p_j \psi_j(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} = \\ &= \int \left( \sum_{j=1}^A \frac{s(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \delta(F_j(\mathbf{x}))}{p_j \psi_j(\mathbf{x})} \right) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta. \end{aligned}$$

Здесь

$$\zeta = \sum_{j=1}^A \frac{s(\boldsymbol{\xi}) \varphi_j(\boldsymbol{\xi}) \delta(F_j(\boldsymbol{\xi}))}{p_j \psi_j(\boldsymbol{\xi})},$$

а случайный вектор  $\boldsymbol{\xi}$  имеет плотность распределения  $f(\mathbf{x})$ . Таким образом, можно реализовать алгоритм 3.1, причем при моделировании выборочных значений  $\boldsymbol{\xi}_i$  применяется метод суперпозиции (алгоритм 1.20): сначала согласно вероятностям  $\{p_j\}$  выбирается номер  $m_i$ , а затем согласно плотности  $\psi_{m_i}(\mathbf{x})$  реализуется точка  $\boldsymbol{\xi}_i$  на гиперповерхности  $\Gamma_{m_i}$ . Соответствующий вклад в оценку (3.3) равен  $\zeta_i = s(\boldsymbol{\xi}_i) \varphi_{m_i}(\boldsymbol{\xi}_i) / (p_{m_i} \psi_{m_i}(\boldsymbol{\xi}_i))$ . По аналогии с утверждением 3.1 несложно показать, что минимальная дисперсия  $\mathbf{D}\zeta$  достигается в случае, когда плотность  $f(\mathbf{x})$  пропорциональна функции

$$f(\mathbf{x}) \sim \sum_{j=1}^A |s(\mathbf{x})| \varphi_j(\mathbf{x}) \delta(F_j(\mathbf{x})).$$

Из этого результата следует, в частности, что если мы оцениваем сумму абсолютно сходящегося ряда  $\sum_{j=1}^{\infty} a_j$ , реализуя с вероятностью  $p_j$  величину  $a_j/p_j$  и беря среднее арифметическое таких реализаций в качестве приближения (3.3), то наименьшая дисперсия будет соответствовать значениям  $\{p_j\}$ , пропорциональным  $\{|a_j|\}$ .

**3.2.4. Построение плотности  $f(\mathbf{x})$  как приближения функции  $|g(\mathbf{x})|$ .** Из соотношения (3.14) следует, что в качестве плотности  $f(\mathbf{x})$  целесообразно выбирать классические (чаще всего – кусочно-полиномиальные) приближения модуля подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  вида

$$f(\mathbf{x}) = H_2 L_M |g(\mathbf{x})| = H_2 \sum_{m=1}^M w_m(\mathbf{g}) \chi_m(\mathbf{x}). \quad (3.18)$$

Здесь  $\{\chi_m(\mathbf{x})\}$  – заданные "базисные" функции, согласованные с заданными узловыми точками  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$ , коэффициенты  $\{w_m(\mathbf{g})\}$  зависят от значений  $\mathbf{g} = (|g(\mathbf{x}_1)|, \dots, |g(\mathbf{x}_M)|)$ , а  $H_2$  – нормирующая константа. В этом случае соответствующий алгоритм выборки по важности можно причислить к *дискретно-стохастическим алгоритмам численного интегрирования* – см. далее разд. 5.3.

Здесь возникают требования "моделируемости" приближения  $L_M|g(\mathbf{x})|$ , связанные с необходимостью существования эффективного алгоритма реализации выборочных значений вектора  $\boldsymbol{\xi}$  согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ . Из соотношения (3.18) следует, что для моделирования вектора  $\boldsymbol{\xi}$  можно использовать алгоритм метода суперпозиции (алгоритм 1.20). При этом требуется неотрицательность коэффициентов  $\{w_m(\mathbf{g})\}$ . Кроме того, "базисные" функции  $\{\chi_m(\mathbf{x})\}$  должны быть пропорциональными плотностям распределения случайных векторов, для которых имеются эффективные алгоритмы реализации выборочных значений.

Проведенные исследования известных приближений вида (3.18) показали, что требованиям "моделируемости" наилучшим образом удовлетворяет конечно-элементная аппроксимация Стренга–Фикса (см. далее разд. 5.3). Здесь "базисные" функции  $\{\chi_m(\mathbf{x})\}$  пропорциональны  $B$ -сплайнам (см. подразд. 1.8.5) и свойство "моделируемости" приближения (3.18) следует из утверждения 1.17.

**3.2.5. Использование существенной выборки.** Рассмотрим следующую задачу. Пусть имеется набор выборочных значений

$$\Xi = (\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_n), \quad n \gg 1 \quad (3.19)$$

(или эффективный численный алгоритм для получения такого набора)  $l$ -мерного случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$  с плотностью распределения вида

$$f(\mathbf{x}) = A g(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in X \subseteq R^l, \quad (3.20)$$

где  $A = \text{const}$  и  $g(\mathbf{x})$  – заданная неотрицательная функция, причем  $X$  – замыкание множества тех  $\mathbf{x} \in R^l$ , для которых  $g(\mathbf{x}) > 0$ . Требуется вычислить величину

$$A = 1/I, \quad \text{где} \quad I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

методом Монте-Карло, используя набор  $\Xi$ , который будем называть *существенной выборкой*.

Такая задача возникает, например, при изучении стационарных распределений цепей Маркова, а также в случае, когда по выборочным значениям (3.19) строится приближение плотности (3.20).

Решение сформулированной задачи сводится к вычислению интеграла  $I$  с использованием стандартного алгоритма 3.1. Как отмечалось в подразд. 3.2.1, напрямую использовать плотность (3.20) в алгоритме 3.1 невозможно, так как нам неизвестна константа  $A$ . Следующий прием позволяет использовать существенную выборку (3.19) для вычисления интеграла  $I$ .

Рассмотрим функцию  $G(\mathbf{x})$ , заданную на  $X$ , такую, что  $G(\mathbf{x}) \neq 0$  при  $\mathbf{x} \in X$ ,  $G(\mathbf{x}) = 0$  при  $\mathbf{x} \notin X$  и известно значение  $J$  интеграла  $J = \int_X G(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ . Перепишем последнее равенство в виде

$$\frac{J}{I} = \int_X \frac{G(\mathbf{x})}{g(\mathbf{x})} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta_G,$$

где  $\zeta_G = G(\boldsymbol{\xi})/g(\boldsymbol{\xi})$ .

**Алгоритм 3.2.** *Вычисляем величину  $J/I$  согласно алгоритму 3.1, используя существенные выборочные значения (3.19):*

$$\frac{J}{I} \approx \bar{\zeta}_{G,n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_{G,i} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{G(\boldsymbol{\xi}_i)}{g(\boldsymbol{\xi}_i)} \quad \text{и полагаем} \quad I \approx \frac{J}{\bar{\zeta}_{G,n}}. \quad (3.21)$$

Рассмотрим вопрос о погрешности алгоритма 3.2. Из соотношений (3.5), (3.21) следует, что с вероятностью  $1 - \varepsilon$  выполнено

$$\bar{\zeta}_{G,n} = \frac{J}{I} + \beta \sqrt{\frac{\mathbf{D}\zeta_G}{n}}, \quad |\beta| < \beta_\varepsilon.$$

Следовательно,

$$I \approx \frac{J}{J/I + \beta \sqrt{\mathbf{D}\zeta_G/n}} = \frac{I}{1+v}, \quad v = \frac{\beta I}{J} \sqrt{\frac{\mathbf{D}\zeta_G}{n}}.$$

Учитывая, что при достаточно большом  $n$  величина  $v$  мала, и разлагая функцию  $\varphi(v) = I/(1+v)$  в ряд Тейлора, получаем

$$I \approx I - Iv + O(v^2) = I - \frac{\beta I^2}{J} \sqrt{\frac{\mathbf{D}\zeta_G}{n}} + O(1/n).$$

Из последнего соотношения следует, что погрешность алгоритма 3.2 имеет по вероятности порядок сходимости  $1/\sqrt{n}$ , и что при выборе функции  $G(\mathbf{x})$  следует минимизировать величину

$$S_1 = t_1 \times (\mathbf{D}\zeta_G/J^2),$$

где  $t_1$  – среднее время ЭВМ, затрачиваемое на вычисление одной реализации случайной величины  $\zeta_G$  (см. соотношение (3.21)). По аналогии с доказательством утверждения 3.1 несложно получить, что множитель  $(\mathbf{D}\zeta_G/J^2)$  минимален в случае, когда  $G(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$ , из чего следует, что функцию  $G(\mathbf{x})$  желательно выбирать близкой к функции  $g(\mathbf{x})$ . В качестве  $G(\mathbf{x})$ , в частности, можно использовать конечно-элементную аппроксимацию подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$ .

Если выбрать функцию  $G(\mathbf{x})$  так, что выполнены соотношения:  $G(\mathbf{x}) \geq g(\mathbf{x})$  при  $\mathbf{x} \in X$ ,  $G(\mathbf{x}) = 0$  при  $\mathbf{x} \notin X$ ,  $\int_X G(\mathbf{x}) d\mathbf{x} < \infty$ , и, кроме того, имеются эффективные моделирующие формулы для получения выборочных значений компонент случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$ , имеющего плотность распределения

$$f_1(\mathbf{x}) = \frac{G(\mathbf{x})}{\int_X G(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}, \quad (3.22)$$

то можно применить метод исключения (алгоритм 1.24) с мажорантой  $g_1(\mathbf{x}) = G(\mathbf{x})$  для получения новых существенных выборочных значений, имеющих плотность распределения (3.20). Для минимизации затрат алгоритма 1.24 нужно выбирать мажоранту  $G(\mathbf{x})$ , близкую к  $g(\mathbf{x})$  (см. подразд. 1.7.2).

Следует, однако, заметить, что если существенная выборка (3.19) не задана и ставится задача вычисления константы  $A$  (или интеграла  $I$ ), то не обязательно получать существенные выборочные значения (3.19) согласно алгоритму 1.24 и применять алгоритм 3.2, а лучше использовать выборку по важности: выбрать неотрицательную функцию  $G(\mathbf{x})$  (не обязательно мажоранту), близкую к  $g(\mathbf{x})$  и такую, что моделирующие формулы, соответствующие совместной плотности (3.22) являются эффективными, и применить алгоритм 3.1 с плотностью  $f(\mathbf{x})$ , тождественно равной функции  $f_1(\mathbf{x})$  из (3.22).

### 3.3. ВЫБОРКА ПО ВАЖНОСТИ ПО ЧАСТИ ПЕРЕМЕННЫХ

**3.3.1. Разбиение переменных на две группы.** В разделах 3.3–3.5 представлены методы уменьшения дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$ , основанные на разбиении переменных  $\mathbf{x} =$

$(x_1, \dots, x_l)$  на две группы:  $\mathbf{u} = (x_1, \dots, x_{k_1})$ ,  $\mathbf{v} = (x_{k_1+1}, \dots, x_l)$ ,  $0 < k_1 < l$ , и представлении интеграла (3.2) формулой полного математического ожидания:

$$\begin{aligned} I &= \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \int q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{u} d\mathbf{v} = \\ &= \mathbf{E}q(\boldsymbol{\gamma}) = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}}\mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}}(q(\boldsymbol{\gamma})|\boldsymbol{\xi}) = \int \mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}}(q(\boldsymbol{\gamma})|\mathbf{u})f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}) d\mathbf{u}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Здесь  $\boldsymbol{\gamma}$  –  $l$ -мерный случайный вектор, распределенный согласно плотности  $f(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  и составленный из компонент  $k_1$ -мерного вектора  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_{k_1})$  и  $k_2$ -мерного вектора  $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \dots, \eta_{k_2})$ ,  $k_1 + k_2 = l$ . Кроме того, в соотношении (3.23) введены обозначения  $\mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}}(q(\boldsymbol{\gamma})|\mathbf{u}) = \int q(\mathbf{u}, \mathbf{v})f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) d\mathbf{v}$ ,

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}) = \int f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) = f(\mathbf{u}, \mathbf{v})/f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}). \quad (3.24)$$

Последнее соотношение воспроизводит представление (1.69), (1.70) для вектора  $\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$  (см. подразд. 1.5.1). Равенство (3.23) проверяется прямой подстановкой формул (3.24) с учетом теоремы Фубини о представлении двойного интеграла в виде повторного.

**3.3.2. Выборка по важности по переменной  $\mathbf{u}$ .** В ряде приложений возникает следующая задача. Интеграл (3.2) оценивается с помощью стандартного алгоритма 3.1, причем плотность  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})$  из представления (3.24) задана и требуется выбрать плотность  $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u})$ , минимизирующую величину дисперсии  $\sigma^2$  из формулы (3.4). В этом случае алгоритм 3.1 с оптимальной плотностью  $f_{\boldsymbol{\xi}, \min}(\mathbf{u})$  называют *выборкой по важности по части переменных*. Заметим, что

$$\sigma^2 = \int \frac{d\mathbf{u}}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u})} \int \frac{g^2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})} - I^2.$$

Обозначим

$$g_1(\mathbf{u}) = \left( \int \frac{g^2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})} \right)^{1/2}$$

и перепишем формулу (3.4) в виде

$$\sigma^2 = \int \frac{g_1^2(\mathbf{u}) d\mathbf{u}}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u})} - I^2. \quad (3.25)$$

По аналогии с утверждением 3.1 докажем

**Утверждение 3.4.** *Минимальная дисперсия  $\sigma_{\min}^2$  вида (3.25) реализуется в случае, когда плотность  $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u})$  пропорциональна функции  $g_1(\mathbf{u})$ , то есть*

$$f_{\boldsymbol{\xi}, \min}(\mathbf{u}) = \frac{g_1(\mathbf{u})}{\int g_1(\mathbf{w}) d\mathbf{w}} = \left( \int \frac{g^2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})} \right)^{1/2} \bigg/ \int \left( \int \frac{g^2(\mathbf{w}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{w})} \right)^{1/2} d\mathbf{w} \quad (3.26)$$

и равна

$$\sigma_{\min}^2 = \left( \int g_1(\mathbf{u}) d\mathbf{u} \right)^2 - I^2 = \left( \int \left( \int \frac{g^2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})} \right)^{1/2} d\mathbf{u} \right)^2 - I^2. \quad (3.27)$$

**Доказательство.** Выражение (3.27) получается непосредственной подстановкой соотношения (3.26) в (3.25). Далее, из формул (3.25) и (3.27) следует, что величина  $\sigma_{min}^2$  является действительно наименьшей, так как для любой плотности  $f_{\xi}(\mathbf{u})$  величина

$$\sigma^2 - \sigma_{min}^2 = \int \frac{g_1^2(\mathbf{u})}{f_{\xi}(\mathbf{u})} d\mathbf{u} - \left( \int g_1(\mathbf{u}) d\mathbf{u} \right)^2$$

является дисперсией (то есть величиной неотрицательной) случайной величины  $g_1(\xi)/f_{\xi}(\xi)$ , где вектор  $\xi$  имеет плотность распределения  $f_{\xi}(\mathbf{u})$ .  $\square$

Учитывая то обстоятельство, что выполнено равенство

$$\int g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} = \mathbf{E} \left( \frac{g(\mathbf{u}, \eta)}{f_{\eta}(\eta|\mathbf{u})} \right),$$

можно сделать вывод о том, что утверждение 3.4 показывает, что оптимальный выбор значения случайной величины  $\xi$  осуществляется из распределения с плотностью (3.26), пропорциональной корню квадратному из среднего квадрата соответствующего "вклада" в оценку интеграла (3.1).

## 3.4. МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОЖИДАНИЙ

**3.4.1. Понижение порядка интегрирования.** Рассмотрим еще одну возможность использования представления (3.23) для уменьшения множителя  $\mathbf{D}\zeta$  из (3.6). Предположим, что величина условного математического ожидания

$$q_1(\mathbf{u}) = \mathbf{E}_{\eta}(q(\gamma)|\mathbf{u}) = \int q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f_{\eta}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) d\mathbf{v} \quad (3.28)$$

легко вычисляется аналитически для каждого  $\mathbf{u}$ . Из соотношения (3.23) имеем

$$I = \int q_1(\mathbf{u}) f_{\xi}(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \mathbf{E}\zeta^{(1)}, \quad \text{где } \zeta^{(1)} = q_1(\xi). \quad (3.29)$$

**Алгоритм 3.3.** Вычисляем интеграл (3.29) по формуле

$$I = \mathbf{E}\zeta^{(1)} \approx \bar{\zeta}_n^{(1)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q_1(\xi_i),$$

где случайный вектор  $\xi$  и соответствующие выборочные значения  $\{\xi_i\}$  распределены согласно плотности  $f_{\xi}(\mathbf{u})$ .

Алгоритм 3.3 называют *методом математических ожиданий*. Этот алгоритм совпадает с алгоритмом 3.1 для интеграла (3.29) размерности  $k_1$ , меньшей чем  $l$ . Поэтому алгоритм 3.3 часто называют *методом понижения порядка интегрирования*.

**3.4.2. Уменьшение дисперсии.** Докажем следующее

**Утверждение 3.5.** Справедливо равенство – формула полной дисперсии:

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{D}\zeta^{(1)} + \mathbf{E}_{\xi} \mathbf{D}_{\eta}(q(\gamma)|\xi), \quad (3.30)$$

т.е. полная дисперсия равна сумме дисперсии условного математического ожидания и математического ожидания условной дисперсии.

**Доказательство.** Используя соотношения (3.4), (3.23), (3.24), имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\zeta - \mathbf{D}\zeta^{(1)} &= \int \int q^2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{u} d\mathbf{v} - \int q_1^2(\mathbf{u}) f_{\xi}(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \\ &= \int \left[ \int q^2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f_{\eta}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) d\mathbf{v} - \left( \int q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f_{\eta}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) d\mathbf{v} \right)^2 \right] f_{\xi}(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \mathbf{E}_{\xi} \mathbf{D}_{\eta}(q(\gamma)|\xi). \end{aligned}$$

□

Из формулы (3.30) следует, что дисперсия условного математического ожидания  $\mathbf{D}\zeta^{(1)}$  не превосходит полной дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$ .

**3.4.3. О трудоемкости метода математических ожиданий.** Итак, нам удалось показать, что метод понижения порядка интегрирования может уменьшить дисперсию  $\mathbf{D}\zeta$ . Следует, однако, иметь в виду, что функция  $q_1(\mathbf{u})$  может быть значительно более сложной функцией, чем  $q(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ , и, следовательно, вычислительные затраты, связанные с реализацией алгоритма 3.3, могут превзойти затраты алгоритма 3.1. Окончательный выбор алгоритма делается на основании сравнения величин трудоемкостей (3.6).

**Пример 3.3.** Рассмотрим тестовую задачу вычисления интеграла

$$I = \int_X (1/v) du dv, \quad (3.31)$$

где двумерная область  $X$  представляет собой треугольник, ограниченный прямыми  $u = 2$ ,  $v = 1$  и  $u = v$ .

Здесь и далее *тестовой* называется задача с известным решением, на примере которой изучаются те или иные особенности алгоритмов численного интегрирования.

Интегрируя по частям, несложно подсчитать, что величина (3.31) равна

$$I = \int_1^2 du \int_1^u \frac{1}{v} dv = 2 \ln 2 - 1 \approx 0.38630.$$

Реализуем алгоритм 3.1 для вычисления интеграла (3.31). В качестве функции  $f(u, v)$  рассмотрим  $f(u, v) \equiv 2$  при  $(u, v) \in X$ ; это плотность равномерного распределения случайной точки  $\gamma = (\xi, \eta)$  в треугольнике  $X$ . Тогда  $I = \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E}q(\gamma)$ , где  $q(\gamma) = 1/(2\eta)$ . Найдем плотность  $f_{\eta}(v) = \int_v^2 f(u, v) du = 2(2-v)$ . Для реализации случайной величины  $\eta$  применяем метод обратной функции распределения:  $\eta = 2 - \sqrt{\alpha}$  и тогда

$$I \approx \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2 - \sqrt{\alpha_i}}. \quad (3.32)$$

Дисперсия случайной величины  $q(\gamma)$  равна

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{D}q(\gamma) = \int_1^2 du \int_1^u \frac{1}{(2v)^2} dv - I^2 = \frac{1}{2}(1 - \ln 2) - (2 \ln 2 - 1)^2 \approx 0.0043.$$

Теперь реализуем алгоритм 3.3. Интегрируя по  $v$ , получаем, что  $f_{\xi}(u) = \int_1^u 2 dv = 2(u-1)$  и, следовательно,

$$q_1(u) = \int_1^u \frac{1}{2v} \frac{2}{2(u-1)} dv = \frac{\ln u}{2(u-1)}.$$

Функция распределения случайной величины  $\xi$  равна  $F_\xi(u) = (u-1)^2$  и моделирующая формула (с учетом того, что  $\xi \geq 1$ ) имеет вид  $\xi = 1 + \sqrt{\alpha}$ . Следовательно,

$$I \approx \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \frac{\ln(1 + \sqrt{\alpha_i})}{\sqrt{\alpha_i}}. \quad (3.33)$$

Дисперсия случайной величины  $\zeta^{(1)} = q_1(\xi)$  меньше дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$ :

$$\mathbf{D}\zeta^{(1)} = \mathbf{D}q_1(\xi) = \int_1^2 \frac{\ln^2 u}{u-1} du - I^2 \approx 0.0010.$$

Однако, сравнивая формулы (3.32), (3.33), можно убедиться, что реализация одного выборочного значения случайной величины  $\zeta_i^{(1)} = q_1(\xi_i)$  является более трудоемкой, чем реализация одного значения  $\zeta_i = q(\gamma_i)$ . Таким образом, вопрос о соотношении трудоемкостей алгоритмов 3.1 и 3.3 требует здесь отдельного численного исследования. Окончательный вывод о целесообразности использования алгоритма 3.3 вместо алгоритма 3.1 зависит, в частности, от того, как реализовано в данном языке программирования вычисление элементарных функций – логарифма и корня квадратного – из формул (3.32), (3.33).

## 3.5. МЕТОД РАСЩЕПЛЕНИЯ

**3.5.1. Использование дополнительных выборочных значений случайного вектора  $\boldsymbol{\eta}$ .** Следующая возможность использования представления (3.23) для уменьшения дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$  связана с реализацией дополнительных выборочных значений  $\{\boldsymbol{\eta}_k\}$  для приближенного вычисления функции  $q_1(\mathbf{u}) = \mathbf{E}\boldsymbol{\eta}(q(\boldsymbol{\gamma})|\mathbf{u})$  из (3.28) методом Монте-Карло.

**Алгоритм 3.4.** Реализуем  $n$  независимых выборочных значений  $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$  случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$  согласно плотности  $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u})$ . Для каждого  $\boldsymbol{\xi}_i$  получаем  $K(\boldsymbol{\xi}_i)$  независимых реализаций  $\boldsymbol{\eta}_{i,k}$  случайного вектора  $\boldsymbol{\eta}$  согласно плотности  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\boldsymbol{\xi}_i)$ . Приблизненно вычисляем интеграл (3.2) по формуле

$$I = \mathbf{E}\zeta^{(K)} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{K(\boldsymbol{\xi}_i)} \sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\xi}_i)} q(\boldsymbol{\xi}_i, \boldsymbol{\eta}_{i,k}), \quad \text{где } \zeta^{(K)} = \frac{1}{K(\boldsymbol{\xi})} \sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\xi})} q(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_k) \quad (3.34)$$

и  $\boldsymbol{\eta}_k$  – независимые одинаково распределенные (как  $\boldsymbol{\eta}$ ) случайные векторы.

Алгоритм 3.4 называется *методом расщепления*. Заметим, что если  $K(\boldsymbol{\xi}) \equiv 1$  (то есть "расщепления" как такового не происходит), то алгоритм 3.4 превращается в алгоритм 3.1 (то есть  $\zeta^{(K)} = \zeta$ ), при этом значения  $\boldsymbol{\gamma}_i = (\boldsymbol{\xi}_i, \boldsymbol{\eta}_i)$  реализуются согласно утверждению 1.11 (см. разд. 1.5): значение  $\boldsymbol{\xi}_i$  моделируется согласно плотности  $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u})$ , а  $\boldsymbol{\eta}_i$  – согласно условной плотности  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{v}|\boldsymbol{\xi}_i)$ .

Равенство  $I = \mathbf{E}\zeta^{(K)}$  из соотношения (3.34) можно обосновать следующим образом. Рассмотрим вектор  $\vec{\boldsymbol{\eta}} = (\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_{K(\boldsymbol{\xi})})$ . Применяя формулу полного математического ожидания, получаем

$$\mathbf{E}\zeta^{(K)} = \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{E}_{\vec{\boldsymbol{\eta}}}(\zeta^{(K)}|\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left( \frac{\mathbf{E}_{\vec{\boldsymbol{\eta}}} \left( \sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\xi})} q(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_k) \right) |\boldsymbol{\xi}}{K(\boldsymbol{\xi})} \right) =$$

$$= \mathbf{E}_{\xi} \left( \frac{\mathbf{E}_{\eta}(q(\xi, \eta)|\xi) K(\xi)}{K(\xi)} \right) = \mathbf{E}_{\xi} \mathbf{E}_{\eta}(q(\xi, \eta)|\xi) = \mathbf{E}q(\gamma) = I.$$

**3.5.2. Выбор параметров однократного расщепления.** Исследуем дисперсию случайной величины  $\zeta^{(K)}$ . Согласно утверждению 3.5, имеем

$$\mathbf{D}\zeta^{(K)} = \mathbf{D}_{\xi} \mathbf{E}_{\vec{\eta}}(\zeta^{(K)}|\xi) + \mathbf{E}_{\xi} \mathbf{D}_{\vec{\eta}}(\zeta^{(K)}|\xi).$$

Далее, используя независимость компонент вектора  $\vec{\eta}$ , имеем

$$\mathbf{D}\zeta^{(K)} = \mathbf{D}_{\xi} \mathbf{E}_{\eta}(q(\gamma)|\xi) + \mathbf{E}_{\xi} \left( \frac{\mathbf{D}_{\eta}(q(\gamma)|\xi)}{K(\xi)} \right).$$

Пусть  $t_0$  – среднее время для получения одного выборочного значения  $\xi$ , а  $t_1(\xi)$  – среднее время для получения одного выборочного значения  $\eta$  при фиксированном  $\xi$ . Тогда среднее время расчета одного выборочного значения  $\zeta_i^{(K)}$  случайной величины  $\zeta^{(K)}$  равно

$$t^{(K)} = t_0 + \mathbf{E}_{\xi}(K(\xi)t_1(\xi)).$$

Оптимальный вариант метода расщепления определяется функцией  $K(\xi)$ , минимизирующей величину

$$S^{(K)} = t^{(K)} \mathbf{D}\zeta^{(K)}. \quad (3.35)$$

Для упрощения выкладок найдем оптимальное  $K$  в более простом варианте метода расщепления, предположив, что  $K(\xi) \equiv K = \text{const}$ . В этом случае

$$t^{(K)} = t_0 + Kt_1, \quad \mathbf{D}\zeta^{(K)} = A_0 + A_1/K,$$

где

$$t_1 = \mathbf{E}_{\xi} t_1(\xi), \quad A_0 = \mathbf{D}_{\xi} \mathbf{E}_{\eta}(q(\gamma)|\xi), \quad A_1 = \mathbf{E}_{\xi} \mathbf{D}_{\eta}(q(\gamma)|\xi).$$

Исследуем на минимум функцию  $S(r) = (t_0 + t_1 r)(A_0 + A_1/r)$  при  $r > 0$ . Вычисляя производную

$$S'(r) = \frac{A_0 t_1}{r^2} \left( r^2 - \frac{A_1 t_0}{A_0 t_1} \right)$$

и учитывая положительность величин  $A_0, A_1, t_0, t_1$  и переменной  $r$ , получаем, что  $r_{min} = \sqrt{\frac{A_1 t_0}{A_0 t_1}}$ . Таким образом, в методе расщепления в качестве оптимального  $K$  следует выбирать целое положительное число, наиболее близкое к  $r_{min}$ :

$$K_{opt} \approx \sqrt{\frac{A_1 t_0}{A_0 t_1}}.$$

Величины  $t_0, t_1, A_0$  и  $A_1$  можно приближенно оценивать по результатам специальных предварительных расчетов. В частности, можно получить статистические оценки дисперсий  $\mathbf{D}\zeta^{(K_1)}, \mathbf{D}\zeta^{(K_2)}$  и времени  $t^{(K_1)}, t^{(K_2)}$  для двух значений параметра  $K_1, K_2$  и решить соответствующие системы линейных уравнений, т.е. воспользоваться равенствами

$$t_0 = \frac{K_2 t^{(K_1)} - K_1 t^{(K_2)}}{K_2 - K_1}; \quad t_1 = \frac{t^{(K_1)} - t^{(K_2)}}{K_2 - K_1};$$

$$A_0 = \frac{1}{K_2 - K_1} (K_2 \mathbf{D}\zeta^{(K_2)} - K_1 \mathbf{D}\zeta^{(K_1)}); \quad A_1 = \frac{K_1 K_2}{K_2 - K_1} (\mathbf{D}\zeta^{(K_1)} - \mathbf{D}\zeta^{(K_2)}).$$



При этом полезно коррелировать выборки для значений  $\zeta^{(K_1)}, \zeta^{(K_2)}$ .

**3.5.3. Выбор параметров многократного расщепления.** Алгоритм 3.4 можно распространить на случай разбиения переменных на  $(M + 1)$  групп. Расщепление производится последовательно с ростом номера группы. При этом получают выражения для времени реализации и дисперсии соответствующей оценки:

$$t^{(\mathbf{K})} = t_0 + K_1 t_1 + K_1 K_2 t_2 + \dots + K_1 K_2 \dots K_M t_M; \quad \mathbf{K} = (K_1, \dots, K_M);$$

$$\mathbf{D}\zeta^{(\mathbf{K})} = A_0 + \frac{A_1}{K_1} + \dots + \frac{A_M}{K_1 K_2 \dots K_M}.$$

Здесь  $t_m$  – среднее время реализации одного эксперимента в пределах от  $m$ -го до  $(m+1)$ -го расщепления, а  $A_m$  – среднее значение условной дисперсии, соответствующей  $m$ -му расщеплению, причем  $K_m^{opt} \approx \sqrt{(A_m t_{m-1}) / (A_{m-1} t_m)}$ .

Моделирование целесообразно конструировать так, чтобы цепочка расщеплений была по возможности однородной и выполнялись равенства  $A_{m-1}/A_m = a$ ,  $t_{m-1}/t_m = b$ , где  $m = 1, \dots, M$ . При этом оптимальные значения  $K_m$  одинаковы и равны  $K_1 = \dots = K_M = k = (b/a)^{1/2}$ . Вычислив величины  $\mathbf{D}\zeta^{(\mathbf{K}_1)}, \mathbf{D}\zeta^{(\mathbf{K}_2)}$  и  $t^{(\mathbf{K}_1)}, t^{(\mathbf{K}_2)}$ , где  $\mathbf{K}_1 = (k_1, \dots, k_1)$  и  $\mathbf{K}_2 = (k_2, \dots, k_2)$ , получаем уравнения относительно  $a$  и  $b$ :

$$\frac{t^{(\mathbf{K}_1)}}{t^{(\mathbf{K}_2)}} = \left(1 + \sum_{m=1}^M k_1^m b^m\right) \left(1 + \sum_{m=1}^M k_2^m b^m\right)^{-1}; \quad \frac{\mathbf{D}\zeta^{(\mathbf{K}_1)}}{\mathbf{D}\zeta^{(\mathbf{K}_2)}} = \left(1 + \sum_{m=1}^M \frac{a^m}{k_1^m}\right) \left(1 + \sum_{m=1}^M \frac{a^m}{k_2^m}\right)^{-1}.$$

Эти уравнения допускают достаточно простое численное решение. Справедливости ради отметим, что многократное расщепление относительно редко используется на практике, так как для этого метода экономия времени вычисления не всегда окупает значительное усложнение расчетных программ и трудности в определении параметров.

**3.5.4. Расщепление случайных траекторий частиц.** Метод расщепления применим также в случае, когда  $\xi$  и  $\eta$  (а значит, и  $q(\gamma)$ ) имеют дискретное распределение, при этом соответствующие интегралы превращаются в суммы.

Пусть требуется оценить вероятность успеха  $p$  для бернуллиевской случайной величины  $\varphi$ :  $\mathbf{P}(\varphi = 1) = p$ ,  $\mathbf{P}(\varphi = 0) = 1 - p$ , при условии, что имеется алгоритм, позволяющий получать реализации  $\{\varphi_i\}$  этой случайной величины. Учитывая, что  $\mathbf{E}\varphi = p$ , можно оценивать искомую вероятность по формуле типа (3.3):

$$p \approx \frac{\varphi_1 + \dots + \varphi_n}{n}. \quad (3.36)$$

Пусть также имеются алгоритмы реализации зависимых бернуллиевских случайных величин  $\xi$  и  $\eta$  таких, что

$$\mathbf{P}(\xi = 1) = p_0, \quad \mathbf{P}(\xi = 0) = 1 - p_0, \quad \mathbf{P}(\eta = 1|\xi = 0) = 0,$$

$$\mathbf{P}(\eta = 0|\xi = 0) = 1, \quad \mathbf{P}(\eta = 1|\xi = 1) = p_1, \quad \mathbf{P}(\eta = 0|\xi = 1) = 1 - p_1, \quad (3.37)$$

причем известно, что  $p_0 p_1 = p$ . Рассмотрим функцию

$$q(u, v) = \begin{cases} 0 & \text{при } v = 0, \\ 1 & \text{при } v = 1. \end{cases}$$

Несложно понять, что  $p = p_0 p_1 = \mathbf{E}q(\xi, \eta)$ , и для вычисления этого математического ожидания можно применить метод расщепления (3.34). Описанный прием используется при решении следующей задачи теории переноса излучения.

**Пример 3.4.** Пусть требуется оценить вероятность  $p$  прохождения частицы через слой вещества  $\{x, y, z : 0 \leq z \leq H\}$ . Реализуем  $n$  траекторий блуждания частиц в слое, полагая, что каждая частица движется в веществе прямолинейными "пробегами" случайной длины; в конце каждого пробега с некоторой вероятностью она может поглотиться или рассеяться по случайному закону. Источник частиц расположен на плоскости  $z = 0$ . В качестве  $\varphi$  рассмотрим бернуллиевскую случайную величину, которая равна единице, если частица вылетает из слоя через плоскость  $z = H$ , и нулю, если частица поглощается или вылетает из слоя через плоскость  $z = 0$ . Стандартный алгоритм описывается формулой (3.36).

Модификация стандартного алгоритма (метод расщепления) состоит в том, что фиксируется точка первого пересечения частицей плоскости  $z = z_0$  (которая называется *плоскостью расщепления*); из этой точки "испускается"  $K$  "новых" независимых частиц, для которых результат прохождения слоя учитывается с "весом"  $1/K$  (здесь, как и ранее, мы полагаем  $K(\xi) \equiv K = \text{const}$ ). В качестве  $\xi$  тогда можно рассматривать случайную величину, которая равна единице, если частица пересекла плоскость расщепления (вероятность этого события обозначим  $p_0$ ), и нулю иначе. Соответственно  $\eta$  – случайная величина, которая равна единице, если "новая" частица, выпущенная из точки расщепления, достигает плоскости  $z = H$  (вероятность этого события обозначим  $p_1$ ), и нулю иначе. Несложно понять, что для введенных таким образом случайных величин  $\xi$  и  $\eta$  выполняются соотношения (3.37).

Исследуем вопрос о выборе оптимальных параметров  $z_0$  и  $K$ , используя построенную выше теорию оптимизации метода расщепления. Заметим, что

$$\begin{aligned} A_0 &= \mathbf{D}_\xi \mathbf{E}_\eta (q(\gamma) | \xi) = p_1^2 p_0 (1 - p_0) = p p_1 (1 - p_0), \\ A_1 &= \mathbf{E}_\xi \mathbf{D}_\eta (q(\gamma) | \xi) = p_1 (1 - p_1) p_0 = p (1 - p_1); \end{aligned}$$

здесь  $\gamma = (\xi, \eta)$ .

Предположим теперь, что  $t_1 = t_0 p_0$ , то есть среднее время моделирования одной траектории "новой" частицы равно среднему времени блуждания до расщепления. В этом случае величина  $S^{(K)}$  из (3.35) равна

$$S^{(K)} = t_0 (1 + K p_0) p \left( p_1 (1 - p_0) + \frac{1 - p_1}{K} \right).$$

Оптимальное значение равно  $K_{opt} \approx \sqrt{(1 - p_1)/(p(1 - p_0))}$  (здесь, как и ранее, знак " $\approx$ " означает, что берется ближайшее к этому значению натуральное число). Подставляя полученное значение в  $S^{(K)}$ , получаем

$$S_0^{(K)} = t_0 p (\sqrt{p_1 (1 - p_0)} + \sqrt{p_0 (1 - p_1)})^2.$$

Рассмотрев  $S_0^{(K)}$  как функцию от  $p_0 > 0$  (с учетом того, что  $p_1 = p/p_0$ ), несложно получить, что минимум этой функции достигается при  $p_0 = p_1 = \sqrt{p}$ . Такой выбор  $p_0, p_1$  и соотношение  $t_1 = t_0 p_0$  определяют оптимальный параметр  $z_0$ . Таким образом, минимум трудоемкости равен

$$S_{opt}^{(K)} = 4 t_0 p \sqrt{p} (1 - \sqrt{p}).$$

Максимальный выигрыш от введения расщепления равен

$$\frac{S^{(1)}}{S_{opt}^{(K)}} = \frac{t_0 (1 + \sqrt{p}) p (1 - p)}{4 t_0 p \sqrt{p} (1 - \sqrt{p})} = \frac{(1 + \sqrt{p})^2}{4 \sqrt{p}}.$$

Если вероятность  $p$  мала, то  $K \approx 1/\sqrt{p}$  и  $S^{(1)}/S_{opt}^{(K)} = 1/(4\sqrt{p})$ .

### 3.6. ВЫДЕЛЕНИЕ ГЛАВНОЙ ЧАСТИ

**3.6.1. Введение вспомогательного интеграла.** Следующие соображения дают один из самых эффективных способов уменьшения дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$ .

Допустим, что известна близкая к  $g(\mathbf{x})$  функция  $g_0(\mathbf{x})$ , для которой легко вычисляется интеграл  $I_0 = \int g_0(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  (аналитически или численно с малыми затратами и высокой точностью). Тогда для увеличения эффективности расчетов по методу Монте-Карло можно использовать стандартный прием *выделения главной части*, который основан на соотношении

$$I = I_0 + \int (g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x})) d\mathbf{x}.$$

Для оценки второго слагаемого в последней сумме применяем алгоритм 3.1 и, следовательно,

$$I = \mathbf{E}\zeta^{(0)}, \quad \text{где } \zeta^{(0)} = I_0 + q(\boldsymbol{\xi}) - q_0(\boldsymbol{\xi}), \quad q_0(\boldsymbol{\xi}) = \frac{g_0(\boldsymbol{\xi})}{f(\boldsymbol{\xi})},$$

а случайный вектор  $\boldsymbol{\xi}$  распределен согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ .

Дисперсия  $\mathbf{D}\zeta^{(0)}$  равна  $\mathbf{D}(q(\boldsymbol{\xi}) - q_0(\boldsymbol{\xi}))$  и может быть малой, если  $g_0(\mathbf{x})$  хорошо аппроксимирует функцию  $g(\mathbf{x})$ .

**3.6.2. Пример уменьшения дисперсии.** Рассмотрим следующую тестовую задачу.

**Пример 3.5.** Исследуем основной метод Монте-Карло и его модификацию (выделение главной части) на примере вычисления интеграла

$$I = \int_0^1 \dots \int_0^1 (e^{x_1 \dots x_{20}} - 1) dx_1 \dots dx_{20} \approx 9,54 \cdot 10^{-7}.$$

Возьмем в качестве  $f(\mathbf{x})$  плотность равномерного распределения в двадцатимерном единичном кубе  $G_{20}$ :  $f(\mathbf{x}) \equiv 1$ ,  $\mathbf{x} \in G_{20}$ . Тогда, согласно формуле (3.2) имеем

$$I = \mathbf{E}\zeta, \quad \zeta = e^{\alpha_1 \dots \alpha_{20}} - 1.$$

Несложно подсчитать, что  $\mathbf{D}\zeta \approx 3 \cdot 10^{-10}$ . Учитывая вид разложения экспоненты в ряд Тейлора, целесообразно выделить главную часть  $g_0(x_1, \dots, x_{20}) = x_1 \times \dots \times x_{20}$ , при этом

$$I_0 = 2^{-20} \quad \text{и} \quad \zeta^{(0)} = 2^{-20} + e^{\alpha_1 \dots \alpha_{20}} - 1 - \alpha_1 \times \dots \times \alpha_{20}.$$

Заметим, что

$$\mathbf{D}\zeta^{(0)} \approx \frac{1}{4} \int_0^1 \dots \int_0^1 (x_1 \times \dots \times x_{20})^4 dx_1 \dots dx_{20} = \frac{5^{-20}}{4} \approx 2,5 \cdot 10^{-15},$$

то есть дисперсия уменьшается на пять порядков.

**3.6.3. Построение функции  $g_0(\mathbf{x})$ .** При построении интегрируемой функции  $g_0(\mathbf{x})$  можно использовать классические (чаще всего – кусочно-полиномиальные) приближения подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  (в этом случае метод выделения главной части можно причислить к *дискретно-стохастическим алгоритмам численного интегрирования* – см. далее разд. 5.3). Здесь, в отличие от подходов, связанных с выборкой по важности (см. подразд. 3.2.4), не нужны дополнительные требования "моделируемости" (т.е. функция  $g_0(\mathbf{x})$  не должна быть пропорциональной плотности распределения

случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$ , для которого имеются эффективные алгоритмы численного моделирования). Если разность  $(g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x}))$  равномерно мала, то в качестве  $f(\mathbf{x})$  можно выбрать плотность равномерного распределения в ограниченной области интегрирования  $X$ .

Весьма часто на практике бывает известно приближение  $g_0(\mathbf{x})$  к подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  с точностью до постоянного множителя  $c$ . Нетрудно заметить, что выборка по важности от такого множителя не зависит. Рассмотрим задачу о нахождении оптимального значения множителя  $c$  при выделении главной части. Перепишем оценку  $\zeta^{(0)}$  следующим образом:

$$\zeta^{(0)} = q(\boldsymbol{\xi}) + c(I_0 - q_0(\boldsymbol{\xi})) = \zeta + c\eta, \quad \text{где } \eta = I_0 - q_0(\boldsymbol{\xi}).$$

Минимум дисперсии

$$\mathbf{D}\zeta^{(0)} = \mathbf{D}\zeta + c^2\mathbf{D}\eta + 2c\mathbf{E}[(\zeta - I)\eta]$$

достигается при  $c_{min} = -\mathbf{E}[(\zeta - I)\eta]/\mathbf{D}\eta$  и равен

$$(\mathbf{D}\zeta^{(0)})_{min} = \mathbf{D}\zeta - \frac{(\mathbf{E}[(\zeta - I)\eta])^2}{\mathbf{D}\eta} = \mathbf{D}\zeta(1 - r^2),$$

где  $r$  – коэффициент корреляции между  $\zeta$  и  $\eta$ .

Входящую в выражение для  $c_{min}$  величину корреляционного момента  $\mathbf{E}[(\zeta - I)\eta]$  можно приближенно заменить соответствующей статистической оценкой. В результате получается смещенная (хотя и состоятельная) оценка интеграла  $I$ . Можно, однако, построить и несмещенную оценку рассматриваемого типа. Пусть  $\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_n$  – выборочные значения случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$ . Рассмотрим оценку

$$I \approx \tilde{\zeta}_n^{(0)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{g(\boldsymbol{\xi}_i)}{f(\boldsymbol{\xi}_i)} + c_i \left( I_0 - \frac{g_0(\boldsymbol{\xi}_i)}{f(\boldsymbol{\xi}_i)} \right) \right),$$

где

$$c_i = -\frac{1}{(n-1)\mathbf{D}\eta} \times \sum_{j=1, \dots, n; j \neq i} \left( \left( \frac{g(\boldsymbol{\xi}_j)}{f(\boldsymbol{\xi}_j)} - I \right) \left( I_0 - \frac{g_0(\boldsymbol{\xi}_j)}{f(\boldsymbol{\xi}_j)} \right) \right).$$

Величина  $c_i$  представляет собой статистическую оценку оптимального значения  $c_{min}$  по всем наблюдениям, кроме  $i$ -го. Следовательно, величины  $c_i$  и  $I_0 - g_0(\boldsymbol{\xi}_i)/f(\boldsymbol{\xi}_i)$  независимы. Отсюда очевидным образом следует несмещенность оценки  $\tilde{\zeta}_n^{(0)}$ . Можно также показать, что

$$\mathbf{D}\tilde{\zeta}_n^{(0)} = \frac{\mathbf{D}\zeta}{n}(1 - r^2) + O\left(\frac{1}{n^2}\right),$$

т.е. при больших  $n$  оценка  $\tilde{\zeta}_n^{(0)}$  по своей эффективности практически не уступает оптимальной.

## 3.7. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО ЧАСТИ ОБЛАСТИ

**3.7.1. Разделение области интегрирования.** Рассмотрим следующий аналог алгоритма выделения главной части. Допустим, что интеграл  $I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  представлен в виде (3.2) и удастся вычислить (аналитически или численно с малыми затратами и высокой точностью) интегралы по некоторой части  $X_2$  области интегрирования  $X \subseteq R^l$ :

$$\int_{X_2} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = I_2 \quad \text{и} \quad \int_{X_2} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = i_2,$$

где  $0 < i_2 < 1$ . Здесь мы полагаем, что  $f(\mathbf{x}) = 0$  при  $\mathbf{x} \notin X$ .

Как правило, выгодно представить интеграл (3.2) в виде суммы

$$I = I_2 + \int_{X_1} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = I_2 + \int_{X_1} i_1 q(\mathbf{x})f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta^{(1)}, \quad (3.38)$$

где  $X_1 = X \setminus X_2$ ,  $i_1 = 1 - i_2$ ,  $\zeta^{(1)} = I_2 + i_1 q(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$ , а  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$  – случайный вектор, распределенный в  $X_1$  согласно усеченной плотности  $f_1(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})/i_1$ . Замена алгоритма 3.1 на аналогичный алгоритм, соответствующий представлению (3.38), называется *интегрированием по части области*. Если область  $X_2$  близка к  $X$ , то можно считать, что мы выделяем главную часть (см. разд. 3.6). Однако описанный прием выгоден и тогда, когда область  $X_2$  заметно меньше области  $X$ , правда, и понижение дисперсии в этом случае относительно невелико (см. далее утверждение 3.6).

**3.7.2. Уменьшение дисперсии.** Целесообразность применения методики интегрирования по части области обосновывает

**Утверждение 3.6.** *Справедливо соотношение  $\mathbf{D}\zeta^{(1)} \leq i_1\sigma^2$ .*

**Доказательство.** Согласно формуле (3.4) и определению дисперсии имеем

$$i_1\sigma^2 = i_1 \left( \int_X q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 \right) = i_1 \int_{X_1} q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + i_1 \int_{X_2} q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - i_1 I^2,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\zeta^{(1)} &= i_1^2 \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = i_1^2 \int_{X_1} q^2(\mathbf{x})f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left( i_1 \int_{X_1} q(\mathbf{x})f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = \\ &= i_1 \int_{X_1} q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left( \int_{X_1} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2. \end{aligned}$$

Рассмотрим разность

$$i_1\sigma^2 - \mathbf{D}\zeta^{(1)} = i_1 \int_{X_2} q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - i_1 I^2 + \left( \int_{X_1} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2.$$

Заметим, что

$$\left( \int_{X_1} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = (I - I_2)^2 \quad \text{и} \quad \int_{X_2} q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \Delta + I_2^2/i_2,$$

где  $\Delta = \int_{X_2} (q(\mathbf{x}) - I_2/i_2)^2 f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \geq 0$ . Следовательно,

$$\begin{aligned} i_1\sigma^2 - \mathbf{D}\zeta^{(1)} &= i_1(\Delta + I_2^2/i_2) - i_1 I^2 + (I - I_2)^2 = i_1\Delta + \\ &+ I_2^2/i_2 + i_2 I^2 - 2II_2 = i_1\Delta + (I_2/\sqrt{i_2} - \sqrt{i_2}I)^2 \geq 0, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.  $\square$

**3.7.3. О применении метода исключения для моделирования усеченного распределения.** Если имеется алгоритм реализации случайного вектора  $\boldsymbol{\xi} \in X$  согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ , то для случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}^{(1)} \in X_1 \subset X$  можно использовать алгоритм метода исключения для моделирования усеченного распределения (см. алгоритм 1.27 из подразд. 1.7.5). При этом метод интегрирования по части области практически не дает выигрыша, т.к. уменьшение дисперсии вида  $i_1\sigma^2$  сочетается с необходимостью моделирования в среднем  $\mathbf{P}(\boldsymbol{\xi} \in X)/\mathbf{P}(\boldsymbol{\xi} \in X_1) = 1/i_1$  выборочных значений вектора  $\boldsymbol{\xi}$ .

Более предпочтительным является розыгрыш случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$  непосредственно в области  $X_1$  согласно плотности  $f_1(\mathbf{x})$ .

**Пример 3.6.** Пусть требуется вычислить объем  $\bar{D}$  трехмерной фигуры  $D$ , ограниченной поверхностью (в сферических координатах  $(r, \theta, \phi)$ )

$$r = a + ht(\theta, \phi), \quad \text{где } -1 \leq t(\theta, \phi) \leq 1 \quad \text{и} \quad a - h > 0.$$

Обозначим через  $X_2$  и  $X$  вписанный в  $D$  и описанный около  $D$  шары, радиусы и объемы которых равны соответственно  $a - h$ ,  $a + h$  и  $\bar{X}_2, \bar{X}$ . Заметим, что искомая величина равна интегралу

$$\bar{D} = \int_X \chi_D(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3,$$

где  $\chi_D(x_1, x_2, x_3)$  – индикатор множества  $D$ . Рассмотрим сначала алгоритм 3.1 со случайным вектором  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ , имеющим плотность равномерного распределения в  $X$ :

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{\bar{X}} = \frac{3}{4\pi(a+h)^3}, \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in X.$$

Этот алгоритм дает приближение

$$\bar{D} = \bar{X} \mathbf{E} \chi_D(\boldsymbol{\xi}) \approx \frac{\bar{X}}{n} \sum_{i=1}^n \chi_D(\boldsymbol{\xi}_i). \quad (3.39)$$

Моделирующие формулы для выборочных значений компонент случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$  выводятся по аналогии с рассуждениями из подразд. 1.10.3:

$$\xi_1 = \hat{r} \sin \hat{\theta} \cos \hat{\phi}, \quad \xi_2 = \hat{r} \sin \hat{\theta} \sin \hat{\phi}, \quad \xi_3 = \hat{r} \cos \hat{\theta}; \quad (3.40)$$

$$\hat{r} = (a+h) \alpha_1^{1/3}, \quad \cos \hat{\theta} = 1 - 2\alpha_2, \quad \hat{\phi} = 2\pi\alpha_3. \quad (3.41)$$

Заметим, что при получении значений  $\chi_D(\boldsymbol{\xi})$  вычисления (3.40) можно не осуществлять, а лишь проверять условие

$$\hat{r} \leq a + ht(\hat{\theta}, \hat{\phi}), \quad (3.42)$$

при выполнении которого  $\chi_D(\boldsymbol{\xi}) = 1$  (иначе  $\chi_D(\boldsymbol{\xi}) = 0$ ).

Выделим теперь объем  $\bar{X}_2 = (4/3)\pi(a-h)^3$  шара  $X_2$ :

$$\bar{D} = \bar{X}_2 + \int_{X_1} \chi_D(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \text{где } X_1 = X \setminus X_2 = \{(x_1, x_2, x_3) : (a-h)^2 < x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 < (a+h)^2\}.$$

Рассмотрим соответствующую модификацию интегрирования по части области:

$$\bar{D} = \mathbf{E} \left( \bar{X}_2 + \bar{X}_1 \chi_D(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \right) \approx \bar{X}_2 + \frac{\bar{X}_1}{n} \sum_{i=1}^n \chi_D(\boldsymbol{\xi}_i^{(1)}), \quad (3.43)$$

где случайная точка  $\boldsymbol{\xi}^{(1)} = (\xi_1^{(1)}, \xi_2^{(1)}, \xi_3^{(1)})$  распределена равномерно в  $X_1$  согласно плотности

$$f_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{\bar{X}_1} = \frac{3}{4\pi((a+h)^3 - (a-h)^3)}, \quad \mathbf{x} \in X_1.$$

По аналогии с реализацией равномерно распределенной случайной точки в шаре с помощью перехода к сферическим координатам можно получить формулы для реализации случайной точки  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$ , равномерно распределенной в шаровом слое  $X_1$ . Эти формулы совпадают с соотношениями (3.40) и (3.41) для  $\xi_i = \xi_i^{(1)}$ ;  $i = 1, 2, 3$  с той лишь разницей, что по-другому вычисляется компонента  $\hat{r}$ :

$$\hat{r}^{(1)} = \sqrt[3]{\alpha_1^{(1)}(a+h)^3 + (1 - \alpha_1^{(1)})(a-h)^3}. \quad (3.44)$$

При подсчете  $\chi_D(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$  из (3.43) можно не производить вычисления (3.40), а лишь проверить условие (3.42) для  $\hat{r} = \hat{r}^{(1)}$ .

Из формул (3.39) – (3.44) следует, что вычислительные затраты на реализацию оценок (3.39) и (3.43) практически одинаковы, в то время как

$$\mathbf{D}(\bar{X}\chi_D(\boldsymbol{\xi})) > \mathbf{D}(\bar{X}_2 + \bar{X}_1\chi_D(\boldsymbol{\xi}^{(1)})),$$

так как

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\bar{X}\chi_D(\boldsymbol{\xi})) &= \bar{X}\bar{D} - \bar{D}^2 = \bar{D}(\bar{X} - \bar{D}), \\ \mathbf{D}(\bar{X}_2 + \bar{X}_1\chi_D(\boldsymbol{\xi}^{(1)})) &= \bar{X}_1(\bar{D} - \bar{X}_2) - (\bar{D} - \bar{X}_2)^2 = (\bar{D} - \bar{X}_2)(\bar{X} - \bar{D}); \end{aligned}$$

здесь использовано равенство  $\bar{X}_1 + \bar{X}_2 = \bar{X}$ . Таким образом,

$$\frac{\mathbf{D}(\bar{X}_2 + \bar{X}_1\chi_D(\boldsymbol{\xi}^{(1)}))}{\mathbf{D}(\bar{X}\chi_D(\boldsymbol{\xi}))} = \frac{\bar{D} - \bar{X}_2}{\bar{D}} \leq \frac{\bar{X} - \bar{X}_2}{\bar{X}_2} = \frac{(4\pi/3)((a+h)^3 - (a-h)^3)}{(4\pi/3)(a-h)^3} \leq \frac{6h(a+h)^2}{(a-h)^3}.$$

Последняя величина имеет асимптотику  $6h/a$  при  $h \rightarrow 0$ .

## 3.8. МЕТОД ПРОТИВОПОЛОЖНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

**3.8.1. Простая симметризация. Уменьшение трудоемкости.** Пусть требуется вычислить однократный интеграл  $I_0 = \int_a^b g(x) dx$  по конечному интервалу  $a < x < b$ . Если взять  $f(x) \equiv 1/(b-a)$  при  $x \in (a, b)$ , то согласно формуле (3.2) получаем  $I_0 = \mathbf{E}\zeta^{(0)}$ , где  $\zeta^{(0)} = (b-a)g(a + (b-a)\alpha)$  и  $\alpha$  – стандартное случайное число. Рассмотрим теперь симметризованную функцию  $g^{(1)}(x) = (g(x) + g(a+b-x))/2$  и заметим, что

$$I_0 = \int_a^b g^{(1)}(x) dx = \mathbf{E}\zeta^{(1)}, \quad \text{где} \quad \zeta^{(1)} = (b-a)g^{(1)}(a + (b-a)\alpha).$$

Алгоритм 3.1 с оценкой  $\zeta^{(1)}$  (вместо  $\zeta^{(0)}$ ) называется *методом противоположной переменной* или *методом симметризации подынтегральной функции* (в англоязычной литературе для этого приема используется термин '*antithetic variates*'). Заметим, что  $\mathbf{D}\zeta^{(1)} \leq \mathbf{D}\zeta^{(0)}$ , так как

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\zeta^{(0)} - \mathbf{D}\zeta^{(1)} &= (b-a) \int_a^b g^2(x) dx - \frac{b-a}{4} \int_a^b (g^2(x) + 2g(x)g(a+b-x) + g^2(a+b-x)) dx = \\ &= \frac{b-a}{4} \int_a^b (g^2(x) - 2g(x)g(a+b-x) + g^2(a+b-x)) dx = \frac{b-a}{4} \int_a^b (g(x) - g(a+b-x))^2 dx \geq 0, \end{aligned}$$

здесь использовано очевидное равенство  $\int_a^b g^2(x) dx = \int_a^b g^2(a+b-x) dx$ . Однако для расчета одного значения  $\zeta^{(1)}$  надо вычислить два значения функции  $g(x)$ . Поэтому трудоемкость алгоритма 3.1 с оценкой  $\zeta^{(1)}$  будет меньше трудоемкости метода противоположной переменной с оценкой  $\zeta^{(0)}$  только тогда, когда величина  $\mathbf{D}\zeta^{(1)}$  по крайней мере вдвое меньше, чем  $\mathbf{D}\zeta^{(0)}$ . Оказывается, для монотонных функций  $g(x)$  это всегда выполнено.

**Утверждение 3.7.** *Если дифференцируемая на  $(a, b)$  функция  $g(x)$  монотонна, то  $\mathbf{D}\zeta^{(1)} \leq (1/2)\mathbf{D}\zeta^{(0)}$ .*

**Доказательство.** Сразу заметим, что условие дифференцируемости функции  $g(x)$  является избыточным. Достаточно потребовать кусочной непрерывности (и монотонности)  $g(x)$ , правда, при этом придется несколько видоизменить нижеследующее доказательство, вводя интегралы Стильтеса вместо интегралов Римана.

Из выражений для дисперсий

$$\mathbf{D}\zeta^{(0)} = (b-a) \int_a^b g^2(x) dx - I_0^2 \quad \text{и}$$

$$2\mathbf{D}\zeta^{(1)} = (b-a) \int_a^b g^2(x) dx + (b-a) \int_a^b g(x)g(a+b-x) dx - 2I_0^2$$

вытекает, что достаточно доказать неравенство

$$(b-a) \int_a^b g(x)g(a+b-x) dx \leq I_0^2. \quad (3.45)$$

Предположим для определенности, что  $g(x)$  не убывает и  $g(b) > g(a)$ . Введем вспомогательную функцию

$$G(x) = (b-a) \int_a^x g(a+b-v) dv - (x-a)I_0,$$

которая обращается в нуль на концах отрезка  $a \leq x \leq b$ . Производная этой функции  $G'(x) = (b-a)g(a+b-x) - I_0$  монотонно убывает, причем  $G'(a) > 0$  и  $G'(b) < 0$ . Значит, функция  $G(x)$  сначала возрастает, а затем убывает на отрезке  $[a, b]$ , и, следовательно,  $G(x) \geq 0$  при  $a \leq x \leq b$ . Тогда интеграл  $\int_a^b G(x)g'(x) dx$  неотрицателен. Проинтегрировав по частям, получим

$$\int_a^b G(x)g'(x) dx = G(x)g(x) \Big|_a^b - \int_a^b g(x)G'(x) dx \geq 0 \quad \text{или} \quad \int_a^b g(x)G'(x) dx \leq 0.$$

Подставив в последнее неравенство выражение для  $G'(x)$ , получим соотношение (3.45).  
Случай невозрастания  $g(x)$  рассматривается точно так же, так как при этом  $G(x) \leq 0$  и  $g'(x) \leq 0$ .  $\square$

**3.8.2. Сложная симметризация.** Для уменьшения дисперсии расчетов можно также использовать *сложную симметризацию*, при которой интервал  $(a, b)$  разбивается на конечное число частей и для каждой из них используется метод противоположной переменной.

Пусть  $(a, b)$  разбивается на две равные части. Обозначим  $c = (a+b)/2$ . Тогда

$$I_0 = \int_a^c g(x) dx + \int_c^b g(x) dx = \frac{1}{2} \int_a^c (g(x) + g(a+c-x)) dx + \frac{1}{2} \int_c^b (g(x) + g(c+b-x)) dx.$$

В первом из этих интегралов сделаем замену переменных  $y = 2x - a$ , которая преобразует интервал  $(a, c)$  в  $(a, b)$ , а во втором – замену  $y = 2x - b$ , которая преобразует интервал  $(c, b)$  в  $(a, b)$ . При этом получаем соотношение

$$I_0 = \int_a^b g^{(2)}(y) dy = \mathbf{E}\zeta^{(2)}, \quad \text{где} \quad \zeta^{(2)} = (b-a)g^{(2)}(a+(b-a)\alpha),$$

$$g^{(2)}(y) = \frac{1}{4} \left[ g\left(\frac{a+y}{2}\right) + g\left(\frac{2a+b-y}{2}\right) + g\left(\frac{b+y}{2}\right) + g\left(\frac{2b+a-y}{2}\right) \right].$$

**Пример 3.7.** Рассмотрим тестовую задачу вычисления интеграла

$$I_0 = \int_0^1 (2 - 3x - x^2) dx = \frac{1}{6},$$



то есть здесь  $a = 0$ ,  $b = 1$  и  $g(x) = 2 - 3x - x^2$ . Несложно получить выражения для оценок

$$\zeta^{(0)} = 2 - 3\alpha - \alpha^2, \quad \zeta^{(1)} = \alpha - \alpha^2, \quad \zeta^{(2)} = (1/8)(1 + 2\alpha - 2\alpha^2).$$

Затраты на получение одного значения  $\zeta^{(0)}$ ,  $\zeta^{(1)}$  или  $\zeta^{(2)}$  приблизительно одинаковы в то время, как

$$\mathbf{D}\zeta^{(0)} = \int_0^1 (2 - 3x - x^2)^2 dx - \frac{1}{36} = \frac{41}{30} - \frac{1}{36} = \frac{241}{180},$$

$$\mathbf{D}\zeta^{(1)} = \int_0^1 (x - x^2)^2 dx - \frac{1}{36} = \frac{1}{30} - \frac{1}{36} = \frac{1}{180},$$

$$\mathbf{D}\zeta^{(2)} = \frac{1}{64} \int_0^1 (1 + 2x - 2x^2)^2 dx - \frac{1}{36} = \frac{9}{320} - \frac{1}{36} = \frac{1}{2880} = \frac{1}{16} \times \frac{1}{180}.$$

**3.8.3. Использование метода противоположной переменной в многомерном случае.** К сожалению, различные варианты метода противоположной переменной, весьма наглядные и эффективные в одномерном случае, становятся громоздкими при переходе к функциям многих переменных. Поэтому при вычислении многократных интегралов методом Монте-Карло симметризация производится, как правило, только вдоль выбранного направления. Например, в теории переноса излучения для более равномерного расположения траекторий частиц в пространстве наряду с траекторией, имеющей случайное начальное направления движения частицы  $\omega_0$ , реализуется траектория с начальным направлением  $-\omega_0$ . В ряде случаев это приводит к уменьшению трудоемкости расчетов.

Известны также примеры эффективного использования локальной симметризации в малых подмножествах области интегрирования вдоль случайно выбранного направления при использовании расслоенной выборки на классах гладких подынтегральных функций (см. далее подразд. 3.9.5).

## 3.9. МЕТОД РАССЛОЕННОЙ ВЫБОРКИ

**3.9.1. Выборка по группам.** Рассмотрим представление (3.2) интеграла  $I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ . Запишем величину  $I$  в виде

$$I = \sum_{m=1}^M \int_{X_m} q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

где  $X_m$  – подобласти  $X$ , имеющие попарные пересечения меры нуль, причем  $X = X_1 \cup \dots \cup X_M$ . Введем обозначения

$$p_m = \int_{X_m} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad I_m = \int_{X_m} q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad f_m(\mathbf{x}) = \frac{f(\mathbf{x})}{p_m}$$

при  $\mathbf{x} \in X_m$ . Предположим, что  $f(\mathbf{x}) = 0$  при  $\mathbf{x} \notin X$ . Тогда  $p_1 + \dots + p_M = 1$ . Кроме того,  $I_1 + \dots + I_M = I$  и  $I_m = \mathbf{E}(p_m q(\boldsymbol{\xi}^{(m)}))$ , где случайный вектор  $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$  распределен в  $X_m$  согласно плотности  $f_m(\mathbf{x})$ .

**Алгоритм 3.5.** Приблизительно вычислением значения  $I_m$  согласно стандартному алгоритму 3.1 с числом испытаний  $n_m$

$$I_m \approx \frac{p_m}{n_m} \sum_{i_m=1}^{n_m} q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}) \quad \text{и полагаем} \quad I \approx \bar{\zeta}_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \frac{p_m}{n_m} \sum_{i_m=1}^{n_m} q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}), \quad (3.46)$$

здесь  $n = n_1 + \dots + n_M$ .

Алгоритм 3.5 определяет *метод расслоенной выборки* или *выборку по группам*. Этот алгоритм отличается при  $M = 2$  от метода интегрирования по части области из разд. 3.7, так как последний предполагает, что интеграл  $I_2$  известен (в то время как в алгоритме 3.5 этот интеграл вычисляется приближенно по выборке  $\{\xi_{i_2}^{(2)}\}$ ).

**3.9.2. Минимизация дисперсии метода расслоенной выборки.** Сравним дисперсию  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n = \mathbf{D}\zeta/n$  стандартного метода 3.1 вычисления интеграла  $I$  (здесь случайные точки  $\xi$  выбираются во всей области интегрирования  $X$ ) и дисперсию  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)}$  метода расслоенной выборки при условии, что фиксированы число испытаний (для выборки по группам – суммарное число испытаний)  $n$  и разбиение области интегрирования  $X = X_1 \cup \dots \cup X_M$ . По аналогии с формулой (3.4) имеем

$$\mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \left( \frac{p_m}{n_m} \right)^2 \sum_{i_m=1}^{n_m} \mathbf{D}q(\xi_{i_m}^{(m)}) = \sum_{m=1}^M \frac{p_m^2 \mathbf{D}q(\xi^{(m)})}{n_m}, \quad (3.47)$$

где

$$\mathbf{D}q(\xi^{(m)}) = \frac{1}{p_m} \int_{X_m} q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left( \frac{I_m}{p_m} \right)^2; \quad (3.48)$$

здесь использована независимость случайных точек  $\{\xi_{i_m}^{(m)}\}$ .

**Утверждение 3.8.** *Минимум величины  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)}$  равен*

$$d_n^2 = \frac{1}{n} \left( \sum_{m=1}^M p_m \sqrt{\mathbf{D}q(\xi^{(m)})} \right)^2. \quad (3.49)$$

Эта величина не превосходит  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n$  и реализуется при

$$n_m = n p_m \sqrt{\mathbf{D}q(\xi^{(m)})} / \sum_{m=1}^M p_m \sqrt{\mathbf{D}q(\xi^{(m)})}. \quad (3.50)$$

**Доказательство.** Величина  $d_n^2$  из (3.49) представима в виде

$$d_n^2 = \left( \sum_{m=1}^M p_m \sqrt{\frac{\mathbf{D}q(\xi^{(m)})}{n_m}} \times \sqrt{\frac{n_m}{n}} \right)^2.$$

Используя неравенство Коши–Буняковского, получаем

$$d_n^2 \leq \sum_{m=1}^M \frac{p_m^2 \mathbf{D}q(\xi^{(m)})}{n_m} \times \sum_{m=1}^M \frac{n_m}{n} = \sum_{m=1}^M \frac{p_m^2 \mathbf{D}q(\xi^{(m)})}{n_m},$$

где справа стоит выражение (3.47). Несложно проверить, что при подстановке равенства (3.50) в формулу (3.47) получается соотношение (3.49).

Далее, умножая (3.48) на  $p_m$  и суммируя полученные результаты по  $m$ , имеем

$$\sum_{m=1}^M p_m \mathbf{D}q(\xi^{(m)}) = \int_X q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \sum_{m=1}^M \frac{I_m^2}{p_m}.$$

Еще раз применяя неравенство Коши–Буняковского, получаем

$$I^2 = \left( \sum_{m=1}^M I_m \right)^2 = \left( \sum_{m=1}^M \left( \frac{I_m}{\sqrt{p_m}} \times \sqrt{p_m} \right) \right)^2 \leq \sum_{m=1}^M \frac{I_m^2}{p_m} \times \sum_{m=1}^M p_m = \sum_{m=1}^M \frac{I_m^2}{p_m}.$$

Отсюда следует, что

$$\mathbf{D}\bar{\zeta}_n = \frac{1}{n} \left( \int_X q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 \right) \geq \frac{1}{n} \left( \sum_{m=1}^M p_m \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) \right).$$

Последнее выражение равно величине  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)}$  при условии

$$n_m = n p_m. \quad (3.51)$$

Таким образом,  $d_n^2 \leq \mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)}|_{n_m=n p_m} \leq \mathbf{D}\bar{\zeta}_n$ .  $\square$

В реальных задачах дисперсии  $\{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})\}$ , как правило, неизвестны и выбор  $\{n_m\}$  по формуле (3.50) невозможен. Однако в процессе доказательства утверждения 3.8 мы показали, что метод расслоенной выборки дает уменьшение дисперсии по сравнению со стандартным алгоритмом 3.1 уже при выполнении условия (3.51). На практике вероятности  $\{p_m\}$ , как правило, известны, и выбор чисел испытаний  $\{n_m\}$  при применении расслоенной выборки происходит по формуле (3.51). В математической статистике такая выборка называется *типической*.

В действительности выбирать  $\{n_m\}$  по формулам (3.50) или (3.51) нельзя, так как  $\{n_m\}$  обязаны быть целыми. Обычно выбирают ближайшие к значениям (3.50) и (3.51) целые числа, удовлетворяющие соотношению  $n = n_1 + \dots + n_M$ .

Утверждение 3.8 показывает, что расслоенная выборка по идее близка к выборке по важности: здесь также предлагается выбирать больше точек в более "важных" областях, однако выбор регулируется не специальной плотностью, а указанием количества точек в различных областях.

**3.9.3. Примеры удачного и неудачного выбора чисел  $\{n_m\}$ .** Метод расслоенной выборки не всегда дает уменьшение дисперсии. Неудачный выбор  $\{n_m\}$  может привести и к увеличению дисперсии по сравнению со стандартным алгоритмом 3.1.

**Пример 3.8.** Рассмотрим тестовую задачу вычисления интеграла  $I = \int_0^1 e^x dx$ . Сначала оценим величину  $I$  с использованием  $n = 10$  точек, равномерно распределенных в интервале  $(0, 1)$ :  $\bar{\zeta}_{10} = (e^{\alpha_1} + \dots + e^{\alpha_{10}}) / 10$ . Дисперсия этой оценки равна

$$\mathbf{D}\bar{\zeta}_{10} = \frac{1}{10} \left( \int_0^1 e^{2x} dx - \left( \int_0^1 e^x dx \right)^2 \right) = \frac{1}{10} \left( \frac{e^2}{2} - \frac{1}{2} - (e - 1)^2 \right) \approx 0.02421.$$

Теперь разобьем  $(0, 1)$  на два интервала  $(0, 1/2)$  и  $(1/2; 1)$  (то есть здесь  $M = 2$ ) и будем выбирать в них равномерно распределенные точки по формулам  $\xi^{(1)} = 0.5\alpha'$  и  $\xi^{(2)} = 0.5(1 + \alpha'')$ . Тогда  $p_1 = p_2 = 1/2$  и

$$\bar{\zeta}_{10}^{(M)} = \frac{1}{2n_1} \sum_{i_1=1}^{n_1} \exp \xi_{i_1}^{(1)} + \frac{1}{2n_2} \sum_{i_2=1}^{n_2} \exp \xi_{i_2}^{(2)},$$

причем  $n_1 + n_2 = 10$ . Согласно формуле (3.47), дисперсия этой оценки равна

$$\mathbf{D}\bar{\zeta}_{10}^{(M)} = \frac{\mathbf{D} \exp \xi^{(1)}}{4n_1} + \frac{\mathbf{D} \exp \xi^{(2)}}{4n_2},$$

где

$$\mathbf{D} \exp \xi^{(1)} = 2 \int_0^{1/2} e^{2x} dx - \left( 2 \int_0^{1/2} e^x dx \right)^2 = e - 1 - 4(\sqrt{e} - 1)^2 \approx 0.03492,$$

$$\mathbf{D} \exp \xi^{(2)} = 2 \int_{1/2}^1 e^{2x} dx - \left( 2 \int_{1/2}^1 e^x dx \right)^2 = e^2 - e - 4(e - \sqrt{e})^2 \approx 0.09493.$$

Согласно соотношению (3.50), число  $n_1$  следует выбирать близким к

$$5\sqrt{\mathbf{D} \exp \xi^{(1)}} / \left( \frac{1}{2} \sqrt{\mathbf{D} \exp \xi^{(1)}} + \frac{1}{2} \sqrt{\mathbf{D} \exp \xi^{(2)}} \right) \approx 3.775.$$

Возьмем  $n_1 = 4$  и  $n_2 = 6$ . Тогда

$$\mathbf{D} \bar{\zeta}_{10}^{(M)} = \frac{1}{16} \mathbf{D} \exp \xi^{(1)} + \frac{1}{24} \mathbf{D} \exp \xi^{(2)} \approx 0.006138,$$

что заметно меньше, чем  $\mathbf{D} \bar{\zeta}_{10}$ . Если же воспользоваться формулами (3.51) и взять  $n_1 = n_2 = 5$ , то

$$\mathbf{D} \bar{\zeta}_{10}^{(M)} = \frac{1}{20} (\mathbf{D} \exp \xi^{(1)} + \mathbf{D} \exp \xi^{(2)}) \approx 0.006493,$$

что также меньше, чем  $\mathbf{D} \bar{\zeta}_{10}$ . В качестве примера неудачного выбора  $n_1$  и  $n_2$  можно рассмотреть  $n_1 = 9$  и  $n_2 = 1$ . Здесь

$$\mathbf{D} \bar{\zeta}_{10}^{(M)} = \frac{1}{36} \mathbf{D} \exp \xi^{(1)} + \frac{1}{4} \mathbf{D} \exp \xi^{(2)} \approx 0.02470,$$

что уже больше, чем  $\mathbf{D} \bar{\zeta}_{10}$ .

#### 3.9.4. Оценки с оптимальной скоростью сходимости для $g(\mathbf{x}) \in C_{(1,\dots,1)}(A, \dots, A; Q_l)$ .

Весьма интересным является предельный случай расслоенной выборки  $\bar{\zeta}_n^{(M)}$ , для которого  $M = n$  и  $n_1 = \dots = n_M = 1$ . Здесь на классах гладких подынтегральных функций удается получить оптимальные (по порядку  $t$  вероятностной погрешности  $\delta_n^{(M)} \sim n^{-t}$  из (3.5) при  $n \rightarrow \infty$ ) алгоритмы численного интегрирования [3]. Приведем соответствующие рассуждения в случае вычисления интеграла по единичному  $l$ -мерному кубу

$$I = \int_{Q_l} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_0^1 \dots \int_0^1 g(x_1, \dots, x_l) dx_1 \dots dx_l. \quad (3.52)$$

Выберем в качестве функции  $f(\mathbf{x})$  плотность равномерного распределения в  $Q_l$ , т.е.  $f(\mathbf{x}) \equiv 1$  при  $\mathbf{x} \in Q_l$ ; при этом функции  $g(\mathbf{x})$  и  $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})/f(\mathbf{x})$  совпадают.

Положим  $n = M = K^l$  и разобьем исходную область интегрирования на равные кубы

$$X_m = \left\{ (x_1, \dots, x_l) : \frac{k_1^{(m)} - 1}{K} \leq x_1 \leq \frac{k_1^{(m)}}{K}, \dots, \frac{k_l^{(m)} - 1}{K} \leq x_l \leq \frac{k_l^{(m)}}{K} \right\}, \quad (3.53)$$

здесь  $k_i^{(m)} = 1, \dots, K$ ;  $i = 1, \dots, l$ . В этом случае все вероятности  $p_m$  одинаковы и равны  $1/K^l = 1/n$ , а плотности  $f_m(\mathbf{x}) \equiv K^l$  являются плотностями равномерного распределения в  $X_m$ .

**Алгоритм 3.6.** Реализуем по одной случайной точке  $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$  в каждом кубе  $X_m$  вида (3.53) и вычисляем интеграл (3.52) согласно формуле

$$I \approx \bar{\theta}_n^{(M)} = \frac{1}{K^l} \sum_{k_1^{(m)}, \dots, k_l^{(m)}=1}^K g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^M g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}). \quad (3.54)$$

Для оценки (3.54) выполнено соотношение (3.51) и, согласно рассуждениям из доказательства утверждения 3.8, выполнено  $\mathbf{D}\bar{\theta}_n^{(M)} \leq \mathbf{D}\bar{\zeta}_n$ .

Уточним оценку дисперсии в предположении, что подинтегральная функция  $g(\mathbf{x})$  принадлежит классу  $C_{(1,\dots,1)}(A, \dots, A; Q_l)$ . Это частный случай множества

$$C_r(\mathbf{A}; Q_l) = C_{(r_1, \dots, r_l)}(A_1, \dots, A_l; Q_l)$$

функций  $l$  переменных, у которых  $(r_s - 1)$ -е производные по  $s$ -ой координате непрерывны, а  $r_s$ -е производные кусочно-непрерывны и ограничены по модулю константой  $A_s$  в кубе  $Q_l$  для  $s = 1, \dots, l$ . Функция  $g(\mathbf{x}) \in C_{(1,\dots,1)}(A, \dots, A)$ , в частности, удовлетворяет условию Липшица с константой  $A$  по каждой из переменных.

Из соотношений (3.47) и (3.54) следует равенство

$$\mathbf{D}\bar{\theta}_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \frac{\mathbf{D}(g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}))}{n^2} = \sum_{m=1}^M \frac{\mathbf{E}(g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - g_m)^2}{n^2}, \quad (3.55)$$

где  $g_m = \mathbf{E}g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) = K^l \int_{X_m} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ . Из теоремы о среднем следует, что для каждого  $m$  найдется точка  $\mathbf{x}_m \in X_m$ , такая, что  $\int_{X_m} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = g(\mathbf{x}_m)/K^l$ . Следовательно,  $g_m = g(\mathbf{x}_m)$ .

В то же время для приращений  $\Delta_i$ ,  $i = 1, \dots, l$  имеем

$$\begin{aligned} g(x_1 + \Delta_1, \dots, x_l + \Delta_l) - g(x_1, \dots, x_l) &= (g(x_1 + \Delta_1, \dots, x_l + \Delta_l) - \\ &- g(x_1 + \Delta_1, \dots, x_l)) + (g(x_1 + \Delta_1, \dots, x_{l-1} + \Delta_{l-1}, x_l) - g(x_1 + \Delta_1, \dots, x_{l-1}, x_l)) + \dots \\ &\dots + (g(x_1 + \Delta_1, x_2, \dots, x_l) - g(x_1, \dots, x_l)). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что для  $g(\mathbf{x}) \in C_{(1,\dots,1)}(A, \dots, A; Q_l)$  выполнено

$$|g(x_1 + \Delta_1, \dots, x_l + \Delta_l) - g(x_1, \dots, x_l)| \leq A(|\Delta_1| + \dots + |\Delta_l|).$$

Так как точка  $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$  принадлежит  $X_m$ , то каждая из ее координат отличается от соответствующей координаты точки  $\mathbf{x}_m$  не более чем на  $K^{-1}$ . Поэтому из последнего неравенства, с учетом соотношения  $\Delta_i < K^{-1}$ , имеем

$$|g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - g(\mathbf{x}_m)| \leq AlK^{-1} \quad \text{или} \quad |g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - g_m| \leq AlK^{-1}. \quad (3.56)$$

Учитывая, что для любой случайной величины  $\eta$  выполнено неравенство  $|\mathbf{E}\eta| \leq \sup |\eta|$ , из соотношений (3.55), (3.56) получаем

$$\mathbf{D}\bar{\theta}_n^{(M)} \leq \sum_{m=1}^M \frac{\sup_{\boldsymbol{\xi}^{(m)} \in X_m} (g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - g_m)^2}{n^2} \leq \sum_{m=1}^M \frac{(AlK^{-1})^2}{n^2} = n n^{-2} A^2 l^2 n^{-2/l} = \frac{A^2 l^2}{n^{1+2/l}}.$$

По аналогии с рассуждениями раздела 3.1, имеем

$$\mathbf{P} \left( \tilde{\delta}_n^{(M)} \leq \beta_\varepsilon \frac{\tilde{\sigma}^{(M)}}{\sqrt{n}} \leq \beta_\varepsilon \frac{Al}{n^{1/2+1/l}} \right) \geq 1 - \varepsilon.$$

Здесь  $\tilde{\sigma}^{(M)} = \sqrt{n \mathbf{D}\bar{\theta}_n^{(M)}}$ , причем справедливо неравенство  $\tilde{\sigma}^{(M)} \leq Al/n^{1/l}$ . Полученный порядок  $t = 1/2 + 1/l$  является для погрешности  $\tilde{\delta}_n^{(M)} \sim n^{-t}$  наилучшим. Это дает следующее

**Утверждение 3.9.** *Существуют положительные константы  $H(\mathbf{r}, \mathbf{A})$  и  $P$ , удовлетворяющие следующему соотношению. Для любого натурального  $M$  и любой расслоенной выборки  $\bar{\zeta}_n^{(M)}$  вида (3.46) из алгоритма 3.5 найдется функция  $g(\mathbf{x}) \in C_{\mathbf{r}}(\mathbf{A}; Q_l)$ , для которой*

$$\delta_n^{(M)}(\mathbf{r}, \mathbf{A}) = |\bar{\zeta}_n^{(M)} - I| > \frac{H(\mathbf{r}, \mathbf{A})}{n^{r+1/2}} \quad (3.57)$$

с вероятностью  $P$ ; здесь  $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_l)$ ,  $\mathbf{A} = (A_1, \dots, A_l)$ ,  $1/r = 1/r_1 + \dots + 1/r_l$ .

Для рассматриваемого множества функций имеем  $\mathbf{r} = (1, \dots, 1)$ ,  $\mathbf{A} = (A, \dots, A)$  и  $r = 1/l$ . Следовательно, согласно соотношению (3.57), для класса  $C_{(1, \dots, 1)}(A, \dots, A; Q_l)$  получаем  $\tilde{\delta}_n^{(1)} > H/n^{1/2+1/l}$ . Таким образом, для оценки (3.54) нашлись константы  $H_1(P)$  и  $H_2(P)$ , для которых с заданной вероятностью  $P$  выполнено двойное неравенство

$$\frac{H_1(P)}{n^{1/2+1/l}} < \tilde{\delta}_n^{(M)} \leq \frac{H_2(P)}{n^{1/2+1/l}},$$

что означает оптимальность алгоритма 3.6 по порядку  $t$  вероятностной погрешности  $\tilde{\delta}_n^{(M)} \sim n^{-t}$ .

**3.9.5. Оценки с оптимальной скоростью сходимости для  $g(\mathbf{x}) \in C_{(2, \dots, 2)}(A, \dots, A; Q_l)$ .** Случай  $\mathbf{r} = (2, \dots, 2)$ ,  $\mathbf{A} = (A, \dots, A)$  интересен тем, что в соответствующем оптимальном алгоритме используется метод противоположной переменной по случайному направлению [3].

**Алгоритм 3.7.** *Реализуем по одной случайной точке  $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$  в каждом кубе  $X_m$  вида (3.53). Строим точку  $\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}$ , симметричную  $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$  относительно центра куба  $X_m$ . Вычисляем интеграл (3.52) согласно формуле*

$$I \approx \bar{\Theta}_n^{(M)} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left( \frac{g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)})}{2} \right) = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^M \left( g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}) \right); \quad (3.58)$$

здесь  $n = 2M = 2K^l$ .

Точки  $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$  и  $\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}$  распределены равномерно в  $X_m$ , поэтому

$$\mathbf{E} \left( \frac{g(\boldsymbol{\xi}^{(m)})}{K^l} \right) = \mathbf{E} \left( \frac{g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)})}{K^l} \right) = \mathbf{E} \left( \frac{g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)})}{n} \right) = \int_{X_m} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

и, следовательно,  $\mathbf{E} \bar{\Theta}_n^{(M)} = I$ . В силу того, что пары  $(\boldsymbol{\xi}^{(m)}, \boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)})$  независимы для разных  $m$ , имеем

$$\mathbf{D} \bar{\Theta}_n^{(M)} = \frac{1}{n^2} \sum_{m=1}^M \mathbf{D} \left( g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}) \right). \quad (3.59)$$

Обозначим через  $\mathbf{x}_m$  центр куба  $X_m$ . Вычитая постоянную под знаком дисперсии, получаем равенство

$$\mathbf{D} \left( g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}) \right) = \mathbf{D} \left( g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}) \right). \quad (3.60)$$

При фиксированной точке  $\boldsymbol{\xi}^{(m)} = (\xi_1^{(m)}, \dots, \xi_l^{(m)})$  введем в рассмотрение функцию

$$h(t) = g \left( \frac{k_1^{(m)} - 1/2}{K} + \frac{\xi_1^{(m)} - (k_1^{(m)} - 1/2)}{K} t, \dots, \frac{k_l^{(m)} - 1/2}{K} + \frac{\xi_l^{(m)} - (k_l^{(m)} - 1/2)}{K} t \right).$$

Очевидно, что  $h(1) = g(\boldsymbol{\xi}^{(m)})$ ,  $h(0) = g(\mathbf{x}_m)$ ,  $h(-1) = g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)})$ . В теории численного дифференцирования хорошо известно представление

$$g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}) = h(1) - 2h(0) + h(-1) = h''(\theta), \quad |\theta| \leq 1.$$

Непосредственным дифференцированием получаем

$$h''(t) = \sum_{i,j=1}^l g_{x_i x_j} \left( \frac{k_1^{(m)} - 1/2}{K} + \frac{\xi_1^{(m)} - (k_1^{(m)} - 1/2)}{K} t, \dots, \frac{k_l^{(m)} - 1/2}{K} + \frac{\xi_l^{(m)} - (k_l^{(m)} - 1/2)}{K} t \right) \times \\ \times \left( \xi_i^{(m)} - \frac{k_i^{(m)} - 1/2}{K} \right) \times \left( \xi_j^{(m)} - \frac{k_j^{(m)} - 1/2}{K} \right).$$

Так как  $(\xi_1^{(m)}, \dots, \xi_l^{(m)}) \in X_m$ , то  $|\xi_i^{(m)} - (k_i^{(m)} - 1/2)/K| \leq 1/(2K)$ . Поэтому

$$|h''(t)| \leq \frac{Al^2}{4K^2} \text{ при } |t| \leq 1 \text{ и } |g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)})| \leq \frac{Al^2}{4K^2}.$$

Из соотношения (3.60) имеем

$$\mathbf{D} \left( g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}) \right) \leq \mathbf{E} \left( g(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\boldsymbol{\xi}_{sim}^{(m)}) \right)^2 \leq \left( \frac{Al^2}{4K^2} \right)^2.$$

Подставив эту оценку в соотношение (3.59) и вспоминая, что  $n = 2M = 2K^l$ , получаем

$$\mathbf{D}\bar{\Theta}_n^{(M)} \leq \frac{1}{n^2} \times M \times \left( \frac{Al^2}{4K^2} \right)^2 = \frac{(Al^2)^2 2^{4/l}}{32n^{1+4/l}}.$$

По аналогии с рассуждениями раздела 3.1, имеем

$$\mathbf{P} \left( \hat{\delta}_n^{(M)} \leq \beta_\varepsilon \frac{\hat{\sigma}^{(M)}}{\sqrt{n/2}} \leq \beta_\varepsilon \frac{Al^2 2^{1/2+2/l}}{8n^{1/2+2/l}} \right) \geq 1 - \varepsilon.$$

Здесь  $\hat{\sigma}^{(M)} = \sqrt{(n/2) \mathbf{D}\bar{\Theta}_n^{(M)}}$ , причем справедливо неравенство  $\hat{\sigma}^{(M)} \leq Al^2 2^{2/l} / (8n^{2/l})$ . Из утверждения 3.9 следует, что полученный порядок  $t = 1/2 + 2/l$  является для погрешности  $\hat{\delta}_n^{(M)} \sim n^{-t}$  наилучшим (ведь в соотношении (3.57) для случая  $\mathbf{r} = (2, \dots, 2)$  число  $r$  равно  $r = 2/l$ ).

Заметим, что алгоритмы 3.6 и 3.7 допускают несколько названий. Во-первых, это частные случаи *алгоритма расслоенной выборки* (см. алгоритм 3.5) для  $n = M$  и  $n = 2M$  соответственно. Во-вторых, в связи с наличием дискретизации области интегрирования  $X$ , определяемой разбиением  $X$  на малые кубы  $X_m$  вида (3.53), и с выбором одной или двух случайных точек в каждом малом кубе можно отнести алгоритмы 3.6 и 3.7 к *дискретно-стохастическим алгоритмам численного интегрирования* (см. далее раздел 5.3). В-третьих, алгоритмы 3.6 и 3.7 являются частными случаями *случайных кубатурных формул* (см. далее подразд. 3.10.2).

Отметим, что результаты, представленные в подразд. 3.9.4 и 3.9.5 и полученные в начале шестидесятых годов 20-го века Н.С.Бахваловым, вызвали большой научный резонанс и привели к бурному развитию (главным образом, в западноевропейских научных школах) *теории сложности численных алгоритмов* [6]. Классической задачей в этой теории является следующая: *при фиксированном числе операций  $n$  определить*

максимальный порядок  $t$  погрешности  $\delta_n \sim n^{-t}$  (в обычном или вероятностном смысле) заданного класса вычислительных алгоритмов. Алгоритмы численного интегрирования являются наиболее удачными иллюстрациями конструкций и методик теории сложности.

### 3.10. СЛУЧАЙНЫЕ КУБАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ

**3.10.1. Основы теории кубатурных формул.** Алгоритмы метода Монте-Карло можно рассматривать с позиций общей теории кубатурных формул [3, 7, 8], в которой для приближенного вычисления интеграла

$$I = \int_X q(\mathbf{x}) \tilde{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad X \subseteq R^l, \quad (3.61)$$

используется выражение вида

$$I \approx \sum_{i=1}^n C_i q(\mathbf{x}_i). \quad (3.62)$$

Здесь коэффициенты  $\{C_i\}$  называются *весами*, а точки  $\{\mathbf{x}_i \in X\}$  – *узлами кубатурной формулы* (3.62). Фиксированная *весовая функция*  $\tilde{f}(\mathbf{x})$  из (3.61) в общем случае произвольна. Хорошо изучены случаи  $\tilde{f}(\mathbf{x}) \equiv 1$  и  $\tilde{f}(\mathbf{x}) \geq 0$ ,  $\int_X \tilde{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1$  (при выполнении последних двух соотношений весовую функцию можно трактовать как вероятностную плотность).

Имеется большое количество подходов, связанных с построением и оптимизацией кубатурных формул. В частности, при построении *кубатурных формул Ньютона–Котеса* подынтегральная функция  $q(\mathbf{x})$  заменяется на интерполяционный многочлен. При построении *кубатурных формул Гаусса* требуется так подобрать веса  $\{C_i\}$  и узлы  $\{\mathbf{x}_i\}$ , чтобы формула (3.62) была точна на множестве многочленов  $\{P_m(\mathbf{x})\}$  наиболее высокой степени  $m$  (точность означает здесь замену приближенного равенства (3.62) на точное при  $q(\mathbf{x}) = P_m(\mathbf{x})$ ). В *кубатурных формулах Чебышева* фиксируются и полагаются равными веса  $\{C_i\}$  (к слову, стандартный метод Монте-Карло – алгоритм 3.1 – дает кубатурную формулу (3.3) чебышевского типа). Для ряда подходов, напротив, фиксируется один или несколько узлов  $\mathbf{x}_i$  (*формулы Лобатто*, *формулы Маркова*). При построении *формул Эйлера* и *формул Грегори* используются значения производных подынтегральной функции  $q(\mathbf{x})$  в узлах  $\{\mathbf{x}_i\}$ .

В разделе 3.1 было отмечено, что для малых размерностей  $l$  задач вычисления интеграла (3.61) и для гладких подынтегральных функций  $q(\mathbf{x})$  уже простейшие кубатурные формулы (3.62) имеют более высокую скорость сходимости погрешности  $\delta_n = |I - \sum_{i=1}^n C_i q(\mathbf{x}_i)|$  к нулю при  $n \rightarrow \infty$ .

Продемонстрируем это для случая  $l = 1$  (в этом случае формулы (3.62) называются *квадратурными*),  $X = Q_1 = [0, 1]$  и  $\tilde{f}(\mathbf{x}) \equiv 1$ . Рассмотрим простейшую *формулу прямоугольников*

$$\int_0^1 q(x) dx \approx \sum_{i=1}^n h q(x_i), \quad h = 1/n, \quad x_i = \frac{i-1/2}{n}. \quad (3.63)$$

Интересно отметить, что эта формула является оптимальной и как формула Ньютона–Котеса, и как формула Гаусса, и как формула Чебышева.

**Утверждение 3.10.** Если  $q(x) \in C_{(2)}(A; Q_1)$ , то погрешность  $\delta_n$  квадратурной формулы (3.63) оценивается сверху величиной  $A/(24n^2)$ .



Напомним, что класс  $C_{(2)}(A; Q_1)$  является частным случаем введенного в подразд. 3.9.4 множества  $C_r(\mathbf{A}; Q_l)$ . Это означает, в частности, что вторая производная функции  $q(x)$  кусочно-непрерывна и ограничена по модулю константой  $A$  на  $[0, 1]$ .

Однако с ростом размерности  $l$  и для классов негладких функций  $q(\mathbf{x})$  преимущество "детерминированных" кубатурных формул (3.62) перед стохастическими исчезает. Покажем это на примере функций из  $C_r(\mathbf{A}; Q_l)$ . Имеет место следующее

**Утверждение 3.11.** *При условии отделенности весовой функции от нуля:  $\tilde{f}(x) \geq \gamma > 0$ , справедливо соотношение*

$$\inf_{C_i, \mathbf{x}_i} \sup_{q \in C_r(\mathbf{A}; Q_l)} \delta_n \geq d(\mathbf{r}, \mathbf{A}; Q_l) \gamma n^{-r},$$

где  $d(\mathbf{r}, \mathbf{A}; Q_l) > 0$ .

Например, для  $q(x) \in C_{(1, \dots, 1)}(A, \dots, A)$  выполнено  $\delta_n > Hn^{-1/l}$  и уже для  $l \geq 2$  метод Монте-Карло (алгоритм 3.1) сравним с "детерминированной" кубатурной формулой (3.62).

**3.10.2. Рандомизация кубатурных формул.** Рассуждения из раздела 3.9 показали, что рассмотрение кубатурных формул со случайными узлами позволяет получить повышенные порядки  $t$  вероятностной погрешности  $\delta_n \sim n^{-t}$  при  $n \rightarrow \infty$ . Алгоритмы 3.5–3.7 из этих подразделов, как и сам стандартный алгоритм 3.1, являются вариантами *случайной кубатурной формулы*

$$I \approx \sum_{i=1}^N \kappa_i q(\boldsymbol{\xi}_i). \quad (3.64)$$

Здесь  $\{\kappa_i\}$ ,  $N$  – скалярные, а  $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$  – векторные случайные величины. В алгоритмах 3.1, 3.5–3.7 случайными являются узлы  $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$ , а коэффициенты  $\{\kappa_i\}$  и число слагаемых  $N$  детерминированы.

В известной мере противоположная ситуация получается в случае, когда узлы и коэффициенты детерминированы и известна их зависимость от числа  $N$ , которое выбирается случайно. Например, для интегрирования на отрезке  $[0, 1]$  можно построить по заданному  $N = n$  формулу прямоугольников (3.63) с  $n$  узлами, либо более сложные формулы такого типа (формулы трапеций, Симпсона и т.п). Выбирая в соответствии с некоторым заданным распределением  $M$  значений числа  $N$ , равных  $N_1, \dots, N_M$ , оцениваем интеграл  $I$  с помощью среднего арифметического

$$I \approx \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{1}{N_m} \sum_{i=1}^{N_m} q(\mathbf{x}_i^{(m)}).$$

Этот же прием можно использовать при приближенном вычислении интеграла (3.52) по  $l$ -мерному кубу  $Q_l$ . Если построению соответствующего алгоритма реализуется разбиение (3.53) куба  $Q_l$  на малые кубы  $\{X_m\}$  с последующим выбором одного или нескольких узлов в каждом  $X_m$ , то для больших  $l$  получаемая кубатурная формула имеет очень большое число узлов. Значение получающейся кубатурной суммы можно оценить методом Монте-Карло, выбирая случайно некоторое число слагаемых  $N$  и подсчитывая их среднее арифметическое. Выборочные суммы, которые служат для оценки исходной суммы  $\sum_{i=1}^n C_i q(\mathbf{x}_i)$ , также можно рассматривать как случайные кубатурные формулы (3.64) вида  $\sum_{j=1}^N \tilde{C}_j q(\tilde{\mathbf{x}}_j)$ .

Примерами одновременного использования случайных весов  $\{\kappa_i\}$  и случайных узлов  $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$  могут служить методика, представленная далее в подразд. 3.10.3.



Несложно показать, что нормирующая константа  $H$  равна  $1/n!$ , и, кроме того, выполнено равенство (формула Ермакова–Золотухина)

$$I = \mathbf{E}\tilde{\zeta}_n, \quad \tilde{\zeta}_n = \frac{\Delta(\tilde{q}, \tilde{Q})}{\Delta(\tilde{Q})}.$$

Случайная величина  $\tilde{\zeta}_n$  представляет собой случайную кубатурную формулу (3.64) со случайными узлами и случайными коэффициентами. Преимущество этой формулы состоит в возможности уточнения формулы (3.67) путем осреднения нескольких реализаций величины  $\tilde{\zeta}_n$ . Дисперсия величины  $\tilde{\zeta}_n$  оценивается сверху величиной

$$\mathbf{D}\tilde{\zeta}_n \leq \int_X \left( q(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n (q, \varphi_i) \varphi_i(\mathbf{x}) \right)^2 f(\mathbf{x}) dx.$$

## ГЛАВА 4. РЕШЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

### 4.1. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим интегральное уравнение второго рода

$$\varphi(x) = \int_X k(x', x) \varphi(x') dx' + f(x) \quad \text{или} \quad \varphi = K\varphi + f, \quad (4.1)$$

где  $X$  –  $l$ -мерное евклидово пространство;  $f, \varphi \in L$ ;  $L$  – банахово пространство интегрируемых функций. Особо отметим, что для описания векторных величин  $x, x'$  здесь и далее используются упрощенные обозначения – нежирные буквы.

Для ряда приложений (например, в теории переноса) полагаем  $L = L_1$ , т. е.

$$\|f\| = \int_X |f(x)| dx, \quad \|K\| \leq \text{vrai sup}_{x \in X} \int_X |k(x, x')| dx'.$$

Рассматриваемые далее алгоритмы метода Монте-Карло основаны на представлении решения уравнения (4.1) рядом Неймана

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} K^n f, \quad \text{где} \quad [K^n f](x) = \overbrace{\int \dots \int}^n f(x_0) k(x_0, x_1) \dots k(x_{n-1}, x) dx_0 \dots dx_{n-1}. \quad (4.2)$$

Легко показать, что ряд (4.2) сходится (по норме) и решение уравнения (4.1) существует, если  $\|K\| < 1$ . Однако для сходимости ряда Неймана и существования решения достаточно более слабое условие:  $\|K^{n_0}\| < 1$  при некотором  $n_0 \geq 1$ . Это следует из соотношения  $\varphi = K^{n_0}\varphi + K^{n_0-1}f + \dots + Kf + f$ , которое эквивалентно (4.1). Рассмотрим также уравнение

$$\varphi^* = K^* \varphi^* + h, \quad (4.3)$$

сопряженное к (4.1), где  $\varphi^*, h \in L^*$ ,  $K^* \in [L^* \rightarrow L^*]$ ,  $L^*$  – пространство, сопряженное к  $L$ ,  $K^*$  – оператор, сопряженный к  $K$ .

Заметим, что условие  $\|K^{n_0}\| < 1$ , для некоторых  $n_0 \geq 1$ , эквивалентно неравенству  $\rho(K) < 1$ , где спектральный радиус  $\rho(K)$  определяется соотношением

$$\rho(K) = \rho(K^*) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|K^n\|^{1/n} = \inf_n \|K^n\|^{1/n}.$$

Напомним, что  $|(f, h)| \leq \|f\|_L \cdot \|h\|_{L^*}$ , где  $(f, h) = \int_X f(x)h(x) dx$ ,

$$\|K\| = \|K^*\|, \quad (Kf, h) = (f, K^*h), \quad [K^*h](x) = \int_X k(x, x')h(x') dx'.$$

По определению  $L_\infty$  – пространство, сопряженное к  $L_1$ , т. е. пространство ограниченных (почти везде) функций с нормой

$$\|h\|_{L_\infty} = \text{vrai sup}_{x \in X} |h(x)|.$$

В настоящей главе будут рассмотрены алгоритмы метода Монте-Карло для оценки функционалов вида

$$I_h = (\varphi, h) = \sum_{n=0}^{\infty} (K^n f, h) = (f, \varphi^*). \quad (4.4)$$

Сходимость ряда в (4.4) вытекает из сходимости (по норме) ряда Неймана для решения.

Для вывода равенства  $(\varphi, h) = (f, \varphi^*)$ , где  $\varphi^* = K^*\varphi^* + h$ , умножим (4.1) на  $\varphi^*$  и (4.3) на  $\varphi$  и затем сравним полученные выражения, имея в виду, что  $(K\varphi, \varphi^*) = (\varphi, K^*\varphi^*)$ . Таким образом, оператор  $K$  связан с ядром  $k(x', x)$ , а сопряженный оператор  $K^*$  – с транспонированным ядром  $k(x, x')$ . Однако для простоты изложения операторы с ядрами транспонированного типа иногда будут обозначаться символами без звездочек, если только операторы такого типа будут использоваться.

## 4.2. ЦЕПИ МАРКОВА

Однородная цепь Маркова определяется как последовательность случайных точек (состояний)  $x_0, x_1, \dots, x_n, \dots$  такая, что распределение  $x_n$  вполне определяется заданием  $x_{n-1}$ , или формально (в терминах плотностей распределения)

$$p_n(x_n | x_{n-1} = x', \dots, x_2 = s_2, x_1 = s_1) = p_n(x_n | x_{n-1} = x') = r(x', x);$$

см. также определения 2.10 и 2.11 из подразд. 2.2.3. Функция  $r(x', x)$  называется плотностью вероятностей перехода и иногда обозначается через  $r(x' \rightarrow x)$ . Распределение начального состояния определяется начальной плотностью  $\pi(x)$ . Это определение можно расширить, введя вероятность обрыва  $p(x')$  в точке  $x'$  (или на переходе  $x' \rightarrow x$ ). Случайный номер последнего состояния обозначается через  $N$ . В методе Монте-Карло используются цепи Маркова, имеющие конечное число состояний с вероятностью единица. Более того, обычно предполагается, что средняя величина  $\mathbf{E}N$  конечна. Далее будет дано достаточное условие для этого. Отметим снова, что цепь Маркова полностью определяется начальной плотностью  $\pi(x)$ , плотностью вероятностей перехода  $r(x', x)$  и вероятностью обрыва  $p(x')$ .

Далее будет использоваться также переходная плотность

$$p(x', x) = r(x', x)[1 - p(x')],$$

которая однозначно определяет функции  $r(x', x)$  и  $p(x')$ , так как  $\int_X p(x', x) dx = 1 - p(x')$ . Обозначим:  $B_p \in [L_1 \rightarrow L_1]$  – оператор с ядром  $p(x', x)$ .

Вычислим вероятность события  $\{N = n\}$ :

$$P(N = n) = \mathbf{E}[P(N = n | x_0, \dots, x_n)] = \mathbf{E} \left[ p(x_n) \times \prod_{k=0}^{n-1} (1 - p(x_k)) \right] =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_X \dots \int_X^{\overbrace{\quad}^{n+1}} \pi(x_0)p(x_n) \left[ \prod_{k=0}^{n-1} (1-p(x_k)) \times r(x_k, x_{k+1}) \right] dx_0 \dots dx_n = \\
&= \int_X \dots \int_X^{\overbrace{\quad}^{n+1}} \pi(x_0)p(x_n) \left[ \prod_{k=0}^{n-1} p(x_k, x_{k+1}) \right] dx_0 \dots dx_n = (B_p^n \pi, p).
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Чтобы получить  $P(N \geq n)$ , мы должны заменить в (4.5)  $p(x)$  на  $\delta(x) \equiv 1$ ; следовательно,  $P(N \geq n) = (B_p^n \pi, \delta)$ . Далее,  $\{N = \infty\} \subset \{N \geq n\}$ , поэтому  $P(N = \infty) \leq P(N \geq n)$ . Полученные соотношения показывают, что  $P(N > n) \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$  и, следовательно,  $P(N = \infty) = 0$  при условии, что ряд Неймана для  $f = B_p f + \pi$  сходится. Как было замечено выше, для этого достаточно потребовать, чтобы

$$\|B_p^{n_0}\| < 1 \quad \text{для некоторого } n_0 \quad \text{или} \quad \rho(B_p) < 1. \tag{4.6}$$

Таким образом, если (4.6) выполнено, то цепь Маркова обрывается после конечного числа переходов с вероятностью единица. Легко показать, что (4.6) есть достаточное условие для конечности  $\mathbf{E} N$ . Действительно,

$$\mathbf{E} N = \sum_{n=0}^{\infty} n(B_p^n \pi, p) = \left( \sum_{n=0}^{\infty} n B_p^n \pi, p \right) = \left( \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=n}^{\infty} B_p^k \pi, p \right) = \left( \sum_{n=1}^{\infty} B_p^n f, p \right) = (f_p, p) < +\infty,$$

где  $f = B_p f + \pi$ ,  $f_p = B_p f_p + B_p f$ . Из (4.6) имеем  $f, f_p \in L_1$ ,  $(f_p, p) < +\infty$ . В частности,  $\mathbf{E} N < +\infty$ , если  $p(x) \geq \varepsilon > 0$ , так как

$$\|B_p\| \leq \sup_{x \in X} \int_X r(x, x') [1 - p(x)] dx' \leq (1 - \varepsilon) \times \sup_{x \in X} \int_X r(x, x') dx' = 1 - \varepsilon < 1.$$

Таким образом,  $\mathbf{E} N < +\infty$  и, следовательно,  $P(N = +\infty) = 0$ , если (4.6) выполняется. В разд. 4.3 получим это утверждение непосредственно из теоремы о несмещенности основной оценки метода Монте-Карло для функционала  $(\varphi, h)$ .

### 4.3. ВЕСОВЫЕ ОЦЕНКИ

#### 4.3.1. Основная оценка. Пусть

$$I_h = (\varphi, h) = \int_X \varphi(x) h(x) dx$$

представляет собой вычисляемую величину, где  $\varphi = K\varphi + h$ , и  $\|K^{n_0}\| < 1$ . Рассмотрим цепь Маркова с начальной плотностью  $\pi(x)$  и переходной плотностью  $p(x', x)$ , для которой  $N$  является случайным номером последнего состояния. Введем вспомогательные случайные веса по формулам

$$Q_0 = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}$$

и рассмотрим случайную величину

$$\xi = \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n). \tag{4.7}$$

Покажем, что при некоторых ограничениях на функции  $\pi(x)$  и  $p(x', x)$  выполняется соотношение  $\mathbf{E}\xi = I_h$ . Смысл этих ограничений ясен: траектории цепи должны иметь возможность начаться в тех точках  $x$ , где  $f(x) \neq 0$ , и осуществлять переходы  $x' \rightarrow x$ , если  $k(x', x) \neq 0$ . Таким образом, необходимо потребовать, чтобы

$$\pi(x) \neq 0, \quad \text{если } f(x) \neq 0 \text{ и } p(x', x) \neq 0, \quad \text{если } k(x', x) \neq 0. \quad (4.8)$$

Случайная величина (4.7) обычно используется и наиболее удобна как оценка функционала  $I_h = (\varphi, h)$ ; поэтому назовем ее *основной оценкой* величины  $(\varphi, h)$ . Пусть  $K_1$  – оператор с ядром  $k_1(x', x) = |k(x', x)|$ .

**Теорема 4.1.** *При выполнении условий (4.8) и  $\rho(K_1) < 1$ ,  $f \in L_1$ ,  $h \in L_\infty$ , имеет место соотношение*

$$\mathbf{E}\xi = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n) = I_h = (\varphi, h).$$

**Доказательство.** Для почленного осреднения суммы вернемся к бесконечной цепи Маркова, введя новую координату состояния

$$\Delta_n = \begin{cases} 1 & \text{до первого обрыва,} \\ 0 & \text{после первого обрыва.} \end{cases}$$

Справедливо представление

$$\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n Q_n h(x_n).$$

Временно предположим, что функции  $k(x', x)$ ,  $f(x)$ ,  $h(x)$  неотрицательны. Тогда

$$\mathbf{E}\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{E} [\Delta_n Q_n h(x_n)]. \quad (4.9)$$

Далее имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[\Delta_n Q_n h(x_n)] &= \mathbf{E} \mathbf{E}[\Delta_n Q_n h(x_n) | x_0, \dots, x_n] = \mathbf{E}[Q_n h(x_n) \mathbf{E}(\Delta_n | x_0, \dots, x_n)] = \\ &= \mathbf{E} \left[ Q_n h(x_n) \prod_{k=0}^{n-1} (1 - p(x_k)) \right] = \overbrace{\int_X \dots \int_X}^{n+1} h(x_n) \pi(x_0) \left[ \prod_{k=0}^{n-1} r(x_k, x_{k+1}) \right] \times \\ &\times \left[ \prod_{k=0}^{n-1} \frac{k(x_k, x_{k+1})}{r(x_k, x_{k+1}) [1 - p(x_k)]} \right] \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)} \times \left[ \prod_{k=0}^{n-1} [1 - p(x_k)] \right] dx_0 \dots dx_n = \\ &= \overbrace{\int_X \dots \int_X}^{n+1} f(x_0) h(x_n) \left[ \prod_{k=0}^{n-1} k(x_k, x_{k+1}) \right] dx_0 \dots dx_n = (K^n f, h), \end{aligned}$$

так как

$$\mathbf{E}[\Delta_n | x_0, \dots, x_n] = P(\Delta_n = 1 | x_0, \dots, x_n) = \prod_{k=0}^{n-1} [1 - p(x_k)].$$

Таким образом, для неотрицательных  $k(x', x)$ ,  $h(x)$ ,  $f(x)$  с использованием представления (4.9) теорема доказана.

Вернемся теперь к общему случаю знакопеременных  $k(x', x)$ ,  $f(x)$ ,  $h(x)$ . Пусть  $Q_n^{(1)}$  – веса, соответствующие уравнению (4.1) с  $k_1(x', x) = |k(x', x)|$ ,  $f_1(x) = |f(x)|$  и  $h_1(x) = |h(x)|$ . Справедливо неравенство

$$|\xi| = \left| \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n Q_n h(x_n) \right| \leq \sum_{n=0}^{\infty} |\Delta_n Q_n h(x_n)| = \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n Q_n^{(1)} h_1(x_n) = \xi_1.$$

При сделанных предложениях величина  $\mathbf{E}\xi_1 = (\varphi_1, h_1)$  конечна; здесь  $\varphi_1 = K_1\varphi_1 + f_1$ . Вследствие теоремы Лебега о мажорируемой сходимости равенство (4.9) выполнено.  $\square$

**4.3.2. Метод сопряженных блужданий и локальная оценка.** Заметим, что формальная подстановка  $f(x') = \delta(x' - x)$ ,  $\pi(x') = \delta(x' - x)$ ,  $x_0 = x$  в соотношение

$$\mathbf{E}\xi = \mathbf{E} \left[ \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n) \right] = (\varphi, h) = (f, \varphi^*)$$

при  $Q_0 = 1$  дает

$$\varphi^*(x) = \mathbf{E} \left[ h(x) + \sum_{n=1}^N Q_n h(x_n) \right] = \mathbf{E}\xi_x. \quad (4.10)$$

Следовательно, можно применять (4.10) для оценки решения сопряженного уравнения в данной точке. Можно доказать равенство (4.10) так же, как теорему 4.1, используя разложение  $\varphi^* = \sum_{n=0}^{\infty} K^{*n} h$ . Выражение (4.10) широко используется в методе Монте-Карло для вычисления дисперсий оценок и построения оценок билинейных функционалов вида  $(\varphi, \varphi^* \chi)$  и, в частности, функционалов теории возмущений.

Решение уравнения (4.1) в данной точке можно оценить на основе выражения

$$\varphi(x) = \mathbf{E}\xi_x^* = \mathbf{E} \left[ f(x) + \sum_{n=0}^N Q_n^* f(x_n) \right], \quad Q_n^* = Q_{n-1}^* \frac{k(x_n, x_{n-1})}{p(x_{n-1}, x_n)}, \quad (4.11)$$

рассматривая исходное уравнение как сопряженное к  $\varphi^* = K^* \varphi^* + h$ . Использование соотношения (4.11) называется *методом сопряженных блужданий* для оценки функции  $\varphi$  в точке  $x$ .

Для реализации соотношения (4.11) иногда практически невозможно подобрать подходящую цепь Маркова (см. далее разд. 4.4), кроме того, выражение (4.11) дает оценку  $\varphi(x)$  только в одной точке  $x$ . Для построения практически эффективной *локальной оценки* можно представить интегральное уравнение (4.1) в виде  $\varphi(x) = (\varphi, h_x) + f(x)$ , где  $h_x(x') = k(x', x)$ . Отсюда

$$\varphi(x) = \mathbf{E} \left[ \sum_{n=0}^N Q_n k(x_n, x) \right] + f(x). \quad (4.12)$$

Последнее выражение позволяет оценить  $\varphi(x)$  в нескольких точках одновременно. Заметим, что для обоснованного применения (4.12) в качестве функциональной оценки требуется выполнение условий гладкости функции  $k(x', x)$  по переменной  $x$  (см. далее разд. 5.2). К сожалению, последнее требование на практике выполняется редко.

**4.3.3. Прямое моделирование.** Рассмотрим теперь случай *прямого моделирования*, когда  $Q_n \equiv 1$ . Если

$$f(x) \geq 0 \quad \text{и} \quad \int_X f(x) dx = 1, \quad k(x', x) \geq 0 \quad \text{и} \quad q(x') = \int_X k(x', x) dx \leq 1,$$

то, полагая  $\pi(x) = f(x)$ ,  $p(x', x) \equiv k(x', x)$ , получаем

$$Q_n = 1, \quad n = 0, 1, \dots, \quad \text{и} \quad \xi = \sum_{n=0}^N h(x_n).$$

Ядра такого типа, называемые *субстохастическими*, соответствуют математическим моделям в виде цепей Маркова, например, цепи “столкновений” фотона в веществе. Если дополнительно  $h(x) \equiv 1$ , то  $\xi = N$  и  $\mathbf{E}N < +\infty$  при условии, что  $\rho(K) < 1$ . Здесь  $K = B_p$ , т.е. можно рассматривать результат разд. 4.2 как следствие теоремы 4.1. Далее, в конце раздела 4.4, будет показано, что для прямого моделирования  $\mathbf{D}\xi < +\infty$ , если  $\rho(K) < 1$  и  $h \in L_\infty$ .

**4.3.4. Оценка по поглощениям.** Случайная величина (4.7) обычно называется “оценкой по столкновениям”. Другой стандартной оценкой для функционала  $I_h = (\varphi, h)$  является случайная величина

$$\eta = \frac{Q_N h(x_N)}{p(x_N)},$$

которая называется “оценкой по поглощениям”.

**Теорема 4.2.** Если условия теоремы 4.1 и соотношение  $p(x) \neq 0$ ,  $x \in \text{supp } h$  выполнены, то  $\mathbf{E}\eta = I_h$ .

**Доказательство.** Ясно, что

$$\eta = \sum_{n=0}^{\infty} (\Delta_n - \Delta_{n+1}) Q_n h(x_n) / p(x_n).$$

На основе этого равенства доказательство осуществляется так же, как в теореме 4.1.  $\square$

Интересно, что прямую оценку среднего числа “физических поглощений” проще представить как оценку по столкновениям, введя номер типа столкновения в число координат фазового пространства  $X$ .

**4.3.5. Обобщенные ядра.** Заметим, что обычно метод Монте-Карло используется для решения интегральных уравнений, связанных с обобщенными ядрами  $k(x', x)$ . Такие ядра включают множители типа “дельта-функций”. Это означает, что размерность области интегрирования меньше, чем размерность пространства  $X$ , и  $K \in [L_1^{(1)} \rightarrow L_1^{(1)}]$  или  $K^* \in [L_\infty^{(1)} \rightarrow L_\infty^{(1)}]$ , где  $L^{(1)}$  – достаточно регулярное подпространство (например, включающие непрерывные или кусочно-непрерывные функции). При этом следует включить те же множители в переходную плотность  $p(x', x)$  и опустить их при построении весов  $Q_n$ . Теоремы 4.1 и 4.2 легко распространяются на этот случай.

**4.3.6. Решение систем алгебраических уравнений.** Все предыдущие и следующие утверждения переносятся на системы алгебраических уравнений

$$x = Ax + b,$$

при условии  $\rho(A) < 1$ , путем следующих подстановок:

$$k(x', x) \rightarrow a_{i,j}, \quad r(x', x) \rightarrow r_{i,j} = P(j \rightarrow i), \quad f(x) \rightarrow b_i, \quad \pi(x) \rightarrow \pi_i,$$

$$p(x') \rightarrow p_j, \quad h(x) \rightarrow h_i, \quad \varphi = K\varphi + f \rightarrow x_i = \sum_{j=1}^m a_{i,j} x_j + b_i,$$

$$(\varphi, h) = \int_X \varphi(x) h(x) dx \rightarrow (x, h) = \sum_{j=1}^m x_j h_j.$$



Здесь моделируется цепь Маркова  $i_0, i_1, \dots, i_N$ , соответствующая конечному фазовому пространству  $(1, \dots, m)$ . Она определяется вероятностями перехода  $r_{i,j}$ , начальными вероятностями  $\pi_i = P(i_0 = i)$  и вероятностями  $p_j$  обрыва в состоянии  $j$  (или на переходе  $j \rightarrow i$ ). Оценка по столкновениям равна

$$\xi = \sum_{n=0}^N Q_n h_{i_n}, \quad Q_n = \frac{b_{i_0}}{\pi_{i_0}} \prod_{k=1}^n \frac{a_{i_k, i_{k-1}}}{p_{i_k, i_{k-1}}}.$$

В условиях, аналогичных (4.8), имеем  $\mathbf{E}\xi = (x, h)$ . Для оценки  $x_i$  достаточно положить  $h = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ , где единица занимает  $i$ -е место. Например, такие алгоритмы используются для решения конечно-разностных краевых задач.

#### 4.4. ДИСПЕРСИИ ОЦЕНОК

**Лемма 4.1.** *В условиях теоремы 4.1 для случая неотрицательных функций  $f(x)$ ,  $h(x)$ ,  $k(x', x)$  дисперсия оценки по столкновениям  $\xi$  дается выражением*

$$\mathbf{D}\xi = (\chi, h[2\varphi^* - h]) - I^2, \quad (4.13)$$

где  $\chi$  – ряд Неймана для уравнения

$$\chi = K_p \chi + f^2/\pi, \quad (4.14)$$

здесь  $K_p$  – интегральный оператор с ядром  $k^2(x', x)/p(x', x)$ .

**Доказательство.** Заметим, что величины

$$Q_0^2 = \frac{f^2(x_0)/\pi(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n^2 = Q_{n-1}^2 \frac{k^2(x_{n-1}, x_n)/p(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}$$

могут быть рассмотрены как стандартные веса для уравнения (4.14). Мы используем также равенство

$$\mathbf{E} \left[ \sum_{m=n+1}^{\infty} \Delta_m \frac{Q_m}{Q_n} h(x_m) \middle| x_0, \dots, x_n; \Delta_n \right] = \Delta_n [\varphi^*(x_n) - h(x_n)],$$

которое следует из (4.11). На этой основе имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\xi^2 &= \mathbf{E} \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n Q_n^2 h^2(x_n) + 2\mathbf{E} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=n+1}^{\infty} \Delta_n \Delta_m Q_n Q_m h(x_n) h(x_m) = \\ &= (\chi, h^2) + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{E} \Delta_n Q_n^2 h(x_n) \mathbf{E} \left[ \sum_{m=n+1}^{\infty} \Delta_m \frac{Q_m}{Q_n} h(x_m) \middle| x_0, \dots, x_n; \Delta_n \right] = (\chi, h^2) + \\ &+ 2\mathbf{E} \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n Q_n^2 h(x_n) [\varphi^*(x_n) - h(x_n)] = (\chi, h^2) + 2(\chi, h[\varphi^* - h]) = (\chi, h[2\varphi^* - h]). \end{aligned}$$

□

Следующее утверждение относится к случаю знакопеременных функций.

**Теорема 4.3.** *Если условия теоремы 4.1 и соотношения  $\rho(K_p) < 1$ ,  $f^2/\pi \in L_1$  выполнены, то конечная величина  $\mathbf{D}\xi$  определяется выражениями (4.13) и (4.14).*

Однако практически наиболее важна простая.

**Теорема 4.3а.** В условиях теоремы 4.3 имеем  $\mathbf{E}\xi^2 < +\infty$ .

**Доказательство.** Ясно, что в условиях теоремы 4.3 выполнено  $\mathbf{E}\xi_1^2 < +\infty$ , где  $\xi_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n |Q_n| |h(x_n)| \geq |\xi|$ .  $\square$

Заметим, что  $\rho(K_p) < 1$  включает  $\rho(K_1) < 1$ , так как  $\|K_1^n\|^2 \leq \|K_p^n\|$ .

**Теорема 4.4.** В условиях теоремы 4.3 имеем

$$\mathbf{E}\xi_x^2 = h(x)[2\varphi^*(x) - h(x)] + \int_X \frac{k^2(x, x')}{p(x, x')} \mathbf{E}\xi_{x'}^2 dx, \quad (4.15)$$

$$\mathbf{E}\xi^2 = \int_X \frac{f^2(x) \mathbf{E}\xi_x^2}{\pi(x)} dx. \quad (4.16)$$

**Доказательство.** Уравнение (4.15) получается так же, как выражение для  $\mathbf{E}\xi^2$ , а (4.16) представляет собой прямое следствие формулы полного математического ожидания.  $\square$

Следующие утверждения о дисперсии оценки по поглощениям доказываются аналогично лемме 4.1 и теореме 4.3.

**Лемма 4.2.** В условиях теоремы 4.2 для случая неотрицательных функций  $f(x)$ ,  $h(x)$ ,  $k(x', x)$  дисперсия оценки по поглощениям дается выражением

$$\mathbf{D}\eta = \left( \chi, \frac{h^2}{p} \right) - I^2, \quad (4.17)$$

где  $\chi$  – ряд Неймана для уравнения (4.14).

**Теорема 4.5.** Если условия теоремы 4.2 и соотношения  $\rho(K_p) < 1$ ,  $f^2/\pi \in L_1$ ,  $h^2/p \in L_\infty$  выполнены, то конечная величина  $\mathbf{D}\eta$  определяется соотношениями (4.17) и (4.14). Если  $x_0 \equiv x$ , то  $\eta \equiv \eta_x$  и

$$\mathbf{E}\eta_x^2 = h^2(x)/p(x) + \int \frac{k^2(x, x')}{p(x, x')} \mathbf{E}\eta_{x'}^2 dx', \quad (4.18)$$

$$\mathbf{E}\eta^2 = \int_X \frac{f^2(x) \mathbf{E}\eta_x^2}{\pi(x)} dx. \quad (4.19)$$

Заметим, что соотношения (4.15), (4.16), (4.18), (4.19) (впервые указанные в [1]) легко получаются из (4.13), (4.14) и (4.17) (которые впервые указаны в [2]) на основе двойственного представления (4.4) линейного функционала  $(\chi, H)$ ,  $H \in L_\infty$ . Теоремы 4.4 и 4.5 упрощаются по аналогии с теоремой 4.3.

Выражения (4.16) и (4.19) для  $\mathbf{E}\xi^2$  и  $\mathbf{E}\eta^2$  показывают, что однородная (по отношению к  $x = x_0$ ) минимизация функций  $\mathbf{E}\xi_x^2$  и  $\mathbf{E}\eta_x^2$  обеспечивает также решение задачи минимизации  $\mathbf{D}\xi$  и  $\mathbf{D}\eta$  для функции  $f(x)$  на основе следующего выражения:

$$\pi(x) = c|f(x)|(\mathbf{E}\xi_x^2)^{1/2}, \quad \pi(x) = c|f(x)|(\mathbf{E}\eta_x^2)^{1/2}.$$

Заметим, что в случае прямого моделирования, когда  $p(x', x) = k(x', x)$ ,  $\pi(x) = f(x)$ ,  $\rho(K) < 1$  и  $0 \leq h \in L_\infty$ , дисперсия  $\mathbf{D}\xi$  конечна, так как  $\chi \equiv \varphi$  и

$$\mathbf{E}\xi^2 = (\varphi, h[2\varphi^* - h]) \leq \|\varphi h\|_{L_1} \|2\varphi^* - h\|_{L_\infty} \leq \|\varphi\|_{L_1} \|h\|_{L_\infty} \|2\varphi^* - h\|_{L_\infty} < +\infty.$$

Простейшая весовая модификация прямого моделирования связана с использованием следующей плотности перехода:

$$p(x', x) = \frac{k(x', x)}{q(x')} q_0(x'), \quad q_0(x') \geq q(x'), \quad \text{то есть} \quad p_0(x') \leq p(x).$$

Для такой модификации выполняются соотношения

$$\frac{k(x', x)}{p(x', x)} = \frac{q(x')}{q_0(x')} \leq 1, \quad Q_n \leq 1.$$

Следовательно для соответствующей весовой оценки  $\xi_0 = \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n)$  имеем  $\mathbf{D}\xi_0 \leq \mathbf{D}\xi$ . Примером простейшей весовой модификации является моделирование процесса переноса частиц “без вылета” (см. далее раздел 6.3).

Рассмотрим теперь дисперсию  $\mathbf{D}\xi_x^*$  оценки  $\xi_x^*$  для метода сопряженных блужданий (4.11). Она определяется соотношением

$$\mathbf{E}\xi_x^{*2} = f(x) [2\varphi(x) - f(x)] + [K_p^{(1)*} \mathbf{E}\xi^{*2}](x),$$

где  $K_p^{(1)}$  – интегральный оператор с ядром  $k^2(x, x')/p(x', x)$  вследствие использования транспонированного ядра при построении веса  $Q_n^*$ . Легко заметить, что  $K_p^{(1)*}$  не совпадает с  $K_p^*$ , то есть с оператором из соотношения (4.15). Это обстоятельство затрудняет практическое использование сопряженных блужданий, например, для решения задач переноса излучения в многоскоростном случае. Такое затруднение заведомо не возникает, если  $p(x', x) \equiv p(x, x')$ . Последнее тождество, например, выполняется для субстохастических ядер, связанных с односкоростным процессом переноса излучения вследствие известной “теоремы оптической взаимности”.

## 4.5. УМЕНЬШЕНИЕ ДИСПЕРСИИ

**4.5.1. Оценки с нулевой дисперсией.** В этом разделе все функции предполагаются неотрицательными. Для построения оценки по столкновениям  $\xi$  и оценки по поглощениям  $\eta$  обычно используются переходные плотности

$$p_\xi(x', x) = \frac{k(x', x)g(x)}{[K^*g](x')}, \quad p_\eta(x', x) = \frac{k(x', x)g(x)}{g(x')}. \quad (4.20)$$

Очевидно, что  $\int p_\xi(x', x) dx \equiv 1$ ; следовательно, при использовании  $p_\xi(x', x)$  необходимо дополнительно ввести слабое поглощение. Далее, если используется  $p_\eta(x', x)$ , то необходимо предположить, что  $K^*g \leq g$ , так как

$$\int_X p_\eta(x', x) dx = 1 - p_\eta(x') = \frac{[K^*g](x')}{g(x')}.$$

Заметим, что равенство  $K^*g = g$  может быть выполнено только в точках, для которых  $h(x) = 0$ . Начальная плотность выбирается так:

$$\pi_g(x) = \frac{f(x)g(x)}{(f, g)}. \quad (4.21)$$

Для простоты изложения предположим, что  $[K^*\varphi^*](x) = \varphi^*(x) - h(x) > 0$  для любого  $x \in X$ .

**Теорема 4.6.** *Если  $p(x', x) \equiv p_\xi(x', x)$  и  $\pi(x) \equiv \pi_g(x)$  для  $g(x) \equiv \varphi^*(x)$ , то  $\mathbf{E}\xi = I_h$  и  $\mathbf{D}\xi = 0$ .*

**Доказательство.** Ясно, что здесь  $\Delta_n \equiv 1$  и  $N = +\infty$ . Обозначим

$$\eta_0 = Q_0\varphi^*(x_0), \quad \eta_m = \sum_{n=0}^{m-1} Q_n h(x_n) + Q_m\varphi^*(x_m), \quad m = 1, 2, \dots$$

Нетрудно показать, что  $\eta_m \equiv I_h$  при  $m = 0, 1, 2, \dots$ . Действительно,

$$\begin{aligned} \eta_0 &= [f(x_0)/\pi_{\varphi^*}(x_0)]\varphi^*(x_0) \equiv I_h, \quad \eta_{m+1} - \eta_m = Q_m h(x_m) + \\ &+ Q_m \left[ \frac{\varphi^*(x_m) - h(x_m)}{\varphi^*(x_{m+1})} \varphi^*(x_{m+1}) - \varphi^*(x_m) \right] \equiv 0 \end{aligned}$$

для  $m = 0, 1, \dots$ . Далее имеем  $\lim \eta_m = I_h = \xi + \zeta$  и  $\zeta = \lim[Q_m \varphi^*(x_m)] \geq 0$ . Ясно, что последний предел существует. Следовательно,  $I_h = \mathbf{E}\xi + \mathbf{E}\zeta = I_h + \mathbf{E}\zeta$  и  $\mathbf{E}\zeta = 0$ . Поэтому  $\zeta = 0$  и  $\xi = I_h$  с вероятностью единица.  $\square$

**Теорема 4.7.** Если  $p(x', x) \equiv p_\eta(x', x)$  и  $\pi(x) \equiv \pi_g(x)$  для  $g(x) \equiv \varphi^*(x)$ , то  $\mathbf{E}\eta = I_h$  и  $\mathbf{D}\eta = 0$ .

**Доказательство.** Заметим, что

$$\frac{f(x_0)}{\pi_{\varphi^*}(x_0)} = \frac{I_h}{\varphi^*(x_0)}, \quad \frac{h(x_N)}{p(x_N)} = \varphi^*(x_N), \quad \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)} = \frac{\varphi^*(x_{n-1})}{\varphi^*(x_n)}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Прямая подстановка этих выражений в равенство  $\eta = Q_N h(x_N)/p(x_N)$  дает  $\eta \equiv I_h$ .  $\square$

Для цепи Маркова (4.20) при  $g \equiv \varphi^*$  выполняется соотношение  $r(x', x) = 0$ , если  $\varphi^*(x) = 0$ . Это соотношение не смещает оценку так как в силу (4.10) траектории, начинающиеся в точках  $\{x : \varphi^*(x) = 0\}$ , дают нулевой вклад.

Дж. Холтон получил такой результат, используя ограничение  $(\varphi^* - h)/\varphi^* \leq c < 1$  [3]. Данное ограничение упрощает доказательство. Действительно, ясно, что

$$\xi_m = \sum_{n=0}^m Q_n h(x_n) = I_h \left[ 1 - \prod_{k=0}^m \frac{\varphi^*(x_k) - h(x_k)}{\varphi^*(x_k)} \right].$$

Следовательно, при указанном условии имеем  $\xi = \lim_{m \rightarrow \infty} \xi_m = I_h$  с вероятностью единица. Такой метод доказательства неприменим, когда  $h$  может быть нулевым для  $\varphi^* \neq 0$  (или когда  $h/\varphi^*$  не отделена от нуля). Большинство приложений в теории переноса излучения связаны с таким общим случаем.

Назовем  $\varphi^*(x)$  *функцией ценности* (точки  $x$  по отношению к функционалу  $I_h$ ), а метод Монте-Карло, аналогичный идеальному, – *выборкой по важности*.

Практически используется приближенная выборка по важности с заменой  $\varphi^*$  на  $g \approx \varphi^*$ . Замечательным свойством соответствующего алгоритма является его независимость от постоянного множителя функции  $g$ . Дополнительно вводится поглощение, начиная с  $m$ -го состояния, обеспечивающее конечность среднего числа переходов. В [4] показано, что если  $g(x) = \text{const}(1 + \varepsilon(x))\varphi^*(x)$ ,  $|\varepsilon(x)| \leq \delta < 1$ ,  $p(x) \equiv 0$  при  $n \leq m$  и  $p(x) \equiv \delta_p$  при  $n > m$  и

$$q' = \rho(K) \times \frac{1 + \delta}{(1 - \delta)(1 - \delta_p)} < 1, \quad \text{то} \quad \mathbf{D}\xi \leq c_1 \delta^2 + c_2 \delta_p \left[ \rho(K) \frac{1 + \delta}{1 - \delta} \right]^m.$$

Трудоёмкость алгоритма определяется величиной  $S = t \times \mathbf{D}\xi$ , где  $t$  – среднее число операций для получения выборочного значения  $\xi$ . Приведенная оценка показывает, что для подходящего  $m$ , например, если  $m \sim |\ln \delta|$ , имеем  $S \rightarrow 0$  при  $\delta \rightarrow 0$ .

Иногда целесообразно оптимизировать лишь часть перехода, например, распределение длины свободного пробега при моделировании траекторий частиц. Цепь Маркова, обеспечивающая минимум дисперсии оценки по столкновениям, строится здесь через решение специального нелинейного уравнения (см. далее подразд. 4.11.3). На этой основе построена асимптотическая оптимизация моделирования длины свободного пробега (см. далее раздел 6.7).

Нелинейная теория оптимизации дает интересный результат относительно полного перехода  $x' \rightarrow x$ : если поглощение моделируется с вероятностью  $p(x') \neq 0$ , то оптимальная модификация перехода  $x' \rightarrow x$  определяется уравнением (4.3) с ядром  $k_1(x', x) = k(x', x)[1 - p(x')]^{-1/2}$ . Полная оптимизация оценки по столкновениям в случае знакопеременных функций определяется также специальным нелинейным уравнением [4].

В заключение сделаем еще несколько замечаний практического характера. Весьма полезным свойством является независимость от постоянного множителя в выражении  $g = \text{const}(1 + \epsilon)\varphi^*$ , так как обычно имеется информация лишь о функции, пропорциональной  $\varphi^*$ . Приведенные соотношения показывают, что рассматриваемые алгоритмы метода Монте-Карло можно улучшить, используя априорную (даже не очень точную) информацию о  $\varphi^*$ . При этом большие  $m$  целесообразно выбирать в тех случаях, когда используется “хорошая” аппроксимация для  $\varphi^*$ .

Наиболее важной областью применения рассматриваемого метода являются задачи теории переноса частиц. В этих задачах пространство  $X$  является фазовым пространством координат и скоростей, и величина  $K^*g$  для реальных систем практически невычислима. Однако ядро интегрального уравнения переноса естественным образом распадается на произведение плотностей условных распределений элементарных случайных величин: углов рассеяния, длины свободного пробега и др. Это дает возможность использовать приближения к функции ценности на каждом элементарном этапе моделирования; в частности, можно сформулировать и доказать соответствующую теорему о нулевой дисперсии (см. далее раздел 4.11). Вычисляемые на каждом этапе весовые множители выражаются значительно проще, чем  $K^*g$ . С помощью аналогичных оценок и рассуждений разработано и обосновано применение асимптотических решений проблемы Милна для улучшения расчетов прохождения частиц через толстые слои вещества, о чем будет рассказано далее в разделе 6.7.

Заметим, что имеются другие способы использования функции ценности для улучшения методов Монте-Карло, например, непосредственная реализация выборки по важности для оценки бесконечнократного интеграла, выражающего  $I_h = \mathbf{E}\xi$ . Сравнительно с моделированием по ценности эти алгоритмы неудобны или даже практически неприменимы потому, что они, как правило, зависят от постоянного множителя приближенной функции ценности или требуют вычисления величины  $K^*g$ , или же их реализация связана с выполнением жесткого условия:  $K^*g/g \leq 1$ . Примером простого (по форме) способа использования приближенной функции ценности является несмещенная оценка

$$\zeta = (\varphi, g) + \sum_{n=0}^N Q_n [h(x_n) + [K^*g](x_n) - g(x_n)],$$

которая, как легко заметить, аналогична выделению главной части при вычислении интеграла. Эта оценка привлекательна тем, что можно одновременно использовать различные  $g(x)$ , если вычисляется много функционалов типа  $I_h$ . Однако по причинам, указанным выше, нельзя серьезно говорить о реализации оценки  $\zeta$  в сложных расчетах.

**4.5.2. Моделирование “по ценности” в задаче об оценке многих функционалов.** Пусть функция  $h(x)$  зависит еще от некоторого параметра  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, M$ ), и требования к точности оценки величин  $I_i = (\varphi, h_i)$  определяются весами  $a_i \geq 0$ , причем  $\sum_{i=1}^M a_i = 1$ . Введем обозначение:

$$\xi^{(i)} = \sum_{n=0}^N Q_n h_i(x_n).$$

Наилучшей будем считать такую функцию  $g(x)$ , которая минимизирует среднюю дисперсию  $D_M = \sum_{i=1}^M a_i \mathbf{D}\xi^{(i)}$  (см. также формулу (5.3) из подразд. 5.1.1). Определим функции  $h_0$  и  $\varphi_0^*$  соотношениями:

$$h_0(x) = \left( \sum_{t=1}^s a_t h_t^2(x) \right)^{1/2}, \quad \varphi_0^* = K^* \varphi_0^* + h_0,$$

и пусть  $I_0 = (\varphi, h_0)$ . Используя неравенство Буняковского и теорему Фубини, получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M a_i \mathbf{E}(\xi^{(i)})^2 &= \sum_{i=1}^M a_i \mathbf{E} \left[ \sum_{n=0}^N Q_n h_i(x_n) \right]^2 = \mathbf{E} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N Q_n Q_m \times \right. \\ &\times \left. \sum_{i=1}^M a_i h_i(x_n) h_i(x_m) \right] \leq \mathbf{E} \left[ \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N Q_n Q_m h_0(x_n) h_0(x_m) \right] = \mathbf{E} \xi_0^2. \end{aligned}$$

По теореме предыдущего параграфа при  $g = \varphi_0^*$  величина  $\mathbf{E} \xi_0^2$  минимальна и равна  $I_0^2$ , и, следовательно,  $D_M \leq I_0^2 - \sum_{i=1}^M a_i I_i^2(t) = D^*$ . Это неравенство дает основание для использования приближенной информации о  $\varphi_0^*$  в расчетах величин  $I_i$  методом Монте-Карло.

Нетрудно показать, что при использовании оценки “по поглощениям” величина  $D^*$  является точной нижней границей средней дисперсии. Действительно,

$$\sum_{i=1}^M \mathbf{E} a_i (\eta^{(i)})^2 = \mathbf{E} \sum_{i=1}^M a_i \frac{h_i^2(x_N)}{p^2(x_N)} = \mathbf{E} \frac{h_0^2(x_N)}{p^2(x_N)} = \mathbf{E} \eta_0^2.$$

Величина  $\mathbf{E} \eta_0^2$  минимальна и равна  $I_0^2$  при

$$\pi(x) = \frac{f(x) \varphi_0^*(x)}{(f, \varphi_0^*)} \quad \text{и} \quad p(x', x) = \frac{k(x', x) \varphi_0^*(x)}{\varphi_0^*(x')},$$

так как для такой цепи Маркова выполнено  $\mathbf{D}\eta_0 = 0$  (см. подразд. 4.5.1). В процессе решения практических задач теории переноса излучения было обнаружено, что реальные значения  $D_M$  существенно меньше величины  $D^*$  даже при использовании весьма грубых приближений к  $\varphi_0^*(x)$ . Докажем теперь следующее

**Утверждение 4.1.** *Величину  $D_M$  минимизирует функция  $g$ , удовлетворяющая нелинейному уравнению*

$$g = \sqrt{(K^* g)^2 + g_1^2}, \quad \text{где} \quad g_1^2 = \sum_{i=1}^M a_i h_i (2\varphi_i^* - h_i); \quad \varphi_i^2 = K^* \varphi_i^* + h_i.$$

*Решение этого уравнения существует, единственно и удовлетворяет неравенству  $0 \leq g \leq \varphi_0^*$ . Соответствующее значение  $D_M = (f, g) - \sum_{i=1}^M a_i I_i^2$ .*

**Доказательство.** Из (4.13) получаем

$$\sum_{i=1}^M \mathbf{E} a_i (\xi^{(i)})^2 = (\chi, g_1^2), \quad \text{где} \quad g_1^2 = \sum_{i=1}^M a_i h_i (2\varphi_i^* - h_i),$$

Отсюда ясно, что если удастся подобрать функции  $h \geq 0$  и  $\varphi^* \geq 0$ , удовлетворяющие соотношениям  $h(2\varphi^* - h) = g_1^2$  и  $\varphi^* = K^* \varphi^* + h$ , то по теореме предыдущего раздела при

$g = \varphi^*$  величина  $D_M$  минимальна и равна  $(f, g)^2 = \sum_{i=1}^M a_i I_i^2$ . Из равенства  $h(2\varphi^* - h) = g_1^2$  получаем  $h = \varphi^* - (\varphi^{*2} - g_1^2)^{1/2}$ . Знак “минус” объясняется неравенством  $h \leq \varphi^*$ . Проводя подстановку и несложные операции, получаем уравнение

$$\varphi^* = [(K^* \varphi^*)^2 + g_1^2]^{1/2} \quad \text{или} \quad \varphi^* + G\varphi^*.$$

Нелинейный оператор  $G$  является оператором сжатия, так как

$$|[(K^* \tilde{h}_1)^2 + g_1^2]^{1/2} - [(K^* \tilde{h}_2)^2 + g_1^2]^{1/2}| \leq |K^* \tilde{h}_1 - K^* \tilde{h}_2| = |K^*(\tilde{h}_1 - \tilde{h}_2)|$$

и  $\|G\tilde{h}_1 - G\tilde{h}_2\| \leq q\|\tilde{h}_1 - \tilde{h}_2\|$ , где  $q = \|K^*\| < 1$ . Поэтому, по теореме Банаха, решение уравнения  $\varphi^* = G\varphi^*$  существует и единственно в  $L^*$ . Очевидно, что  $\varphi^* \geq g_1$ . Дальше будет показано, что  $\varphi^* \leq \varphi_0^*$ . Для этого потребуется неравенство  $\sum_{i=1}^M a_i \varphi_i^{*2} \leq \varphi_0^{*2}$ , которое нетрудно доказать, используя представления

$$\varphi_i^* = [I - K^*]^{-1} h_i, \quad \varphi_0^* = [I - K^*]^{-1} h_0$$

и известное неравенство вида

$$\sum_{i=1}^M a_i \left[ \int_X l_i(x) dx \right]^2 \leq \left[ \int_X \left( \sum_{i=1}^M a_i l_i^2(x) \right) dx \right]^2.$$

Далее имеем  $G\varphi_0^* = [(\varphi_0^* - h_0)^2 + g_1^2]^{1/2} = [(\varphi_0^*)^2 + 2 \left( \sum_{i=1}^M a_i h_i \varphi_i^* - h_0 \varphi_0^* \right)]^{1/2}$ . Используя неравенство Буняковского, получаем

$$\sum_{i=1}^M a_i h_i \varphi_i^* \leq h_0 \left( \sum_{i=1}^M a_i (\varphi_i^*)^2 \right)^{1/2} \leq h_0 \varphi_0^*.$$

Следовательно,  $G\varphi_0^* \leq \varphi_0^*$ . Отсюда непосредственно вытекает, что  $\varphi^* \leq \varphi_0^*$ .  $\square$

## 4.6. РЕКУРРЕНТНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ОЦЕНОК

**4.6.1. Рандомизация интегрального уравнения.** Рассмотрим следующий аналог интегрального уравнения (4.3):

$$\varphi(x) = \int_X k(x, x') \varphi(x') dx' + h(x) \quad \text{или} \quad \varphi = K\varphi + h, \quad (4.22)$$

где  $X \in R^l$  – компакт,  $h \in L_\infty(X)$ ,  $K \in [L_\infty \rightarrow L_\infty]$ . Заметим, что допускаются обобщенные множители типа “дельта-функций” в ядре  $k(x, x')$ ; при этом необходимо наличие таких же множителей в рассматриваемой далее переходной плотности цепи Маркова, а в соответствующем случайном весе они не участвуют, т. е. весовые множители строятся как отношения измеримых множителей ядра и переходной плотности.

В качестве основного здесь будет обсуждаться случай неотрицательных  $k(x, x')$ ,  $h(x)$  и  $\varphi(x)$ , так как переход к знакопеременному случаю осуществляется стандартным способом на основе подходящего мажорирования. Далее будет показано также, что все полученные результаты можно использовать для построения оценок функционалов  $(f, \varphi)$ , где  $f \in L_1(X)$ .

Будем предполагать, что спектральный радиус  $\rho(K)$  меньше единицы. При этом решение уравнения (4.22) выражается рядом Неймана, однако здесь будет построена

и исследована основная рекуррентная оценка метода Монте-Карло фактически путем прямой вероятностной аппроксимации уравнения (4.22). Далее будет показано, что такой подход особенно эффективен при использовании ветвящихся цепей Маркова, когда полная запись оценки является по необходимости громоздкой. Кроме того, рекуррентные представления оценок и моментов второго порядка дают возможность использовать для их оптимизации принцип Беллмана; при этом разъясняются, уточняются и обобщаются соответствующие известные результаты теории таких оценок.

Важную роль здесь будет играть подходящая параметризация исходной задачи, которая для уравнения (4.22) означает переход к уравнению

$$\varphi_\lambda = \lambda K \varphi_\lambda + h, \quad 0 < \lambda < 1/\rho(K). \quad (4.23)$$

Ясно, что решение такого уравнения  $\varphi_\lambda \equiv \varphi(x, \lambda)$  зависит от  $\lambda$  монотонно и даже, за исключением тривиальных вырожденных случаев, строго монотонно.

Для построения оценки метода Монте-Карло введем обрывающуюся цепь Маркова  $\{x_n\}$  ( $n = 0, 1, \dots, N$ ) с плотностью перехода  $p(x, x')$ , причем величина

$$p(x) = 1 - \int_X p(x, x') dx' \geq 0$$

рассматривается как вероятность обрыва траектории при переходе из  $x$  в  $x'$ ;  $N$  – случайный номер последнего состояния цепи. Цепь Маркова связывается с уравнением (4.22) с помощью весового множителя  $q(x, x')$ , который для перехода из  $x$  в  $x'$  вычисляется по формуле  $q(x, x') = k(x, x')/p(x, x')$  и  $q(x, x') = 0$  при обрыве на этом переходе. Для упрощения выкладок можно формально полагать, что после обрыва цепь попадает в специальную поглощающую точку и в ней остается. В частности, должно выполняться следующее известное “условие несмещенности”:

$$p(x, x') \neq 0 \quad \text{при} \quad k(x, x') \neq 0; \quad (4.24)$$

это аналог условия (4.8) для сопряженного к (4.22) уравнения (4.1).

Для цепи, начинающейся в точке  $x$ , необходимо построить функционал  $\xi$  такой, что  $\mathbf{E}\xi = \varphi(x)$ , т. е. несмещенную оценку решения. Такая оценка, очевидно, допускает следующую рандомизацию уравнения (4.22):

$$\xi_0 = h_0 + q(x_0, x_1)\xi_1, \quad (4.25)$$

где  $h_0 = h(x_0)$  и  $\xi_i = \xi$  для  $x = x_i$ . Нетрудно видеть, что

$$\mathbf{E}[q(x_0, x_1)\xi_1] = \mathbf{E}\mathbf{E}[q(x_0, x_1)\xi_1|x_1] = \mathbf{E}[q(x_0, x_1)\psi(x_1)] = [K\psi](x_0), \quad \psi \equiv \mathbf{E}\xi,$$

т. е. соотношение (4.25) представляет собой вероятностную аппроксимацию уравнения (4.22) в том смысле, что (4.25) в среднем совпадает с (4.22). Однако на этой основе можно получить несмещенность рекуррентной оценки (4.25) лишь при выполнении дополнительного условия

$$\mathbf{E}\xi < C < +\infty \quad \text{для всех} \quad x \in X, \quad (4.26)$$

т. к. решение уравнения (4.22) единственно в  $L_\infty$ . Интересно отметить, что здесь, таким образом, имеет место утверждение типа известной теоремы Лакса, а именно, из вероятностной аппроксимации и устойчивости (4.26) следует сходимость (в смысле выполнения закона больших чисел).



Для непосредственного вывода несмещенности  $\xi$  из (4.25) заметим, что продолжая рекурсию (4.25) до конца траектории  $\{x_n\}$ , получаем известное представление соответствующей оценки по столкновениям (4.9), которое для параметризованного уравнения (4.23) имеет вид

$$\xi_0(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \Delta_n Q_n h(x_n), \quad (4.27)$$

где  $Q_0 \equiv 1$ ,  $Q_n = Q_{n-1} q(x_{n-1}, x_n)$ . Отметим довольно ясные свойства функции  $\mathbf{E}\xi(\lambda)$ . Как функция  $\lambda$  (при любом фиксированном  $x = x_0$ ) она непрерывна вплоть до  $\psi = \infty$ , являясь математическим ожиданием, т. е. интегралом по вероятностной мере, от монотонной по  $\lambda$  и неотрицательной функции траектории. Интеграл  $\mathbf{E}\xi(\lambda)$  допускает дифференцирование под знаком математического ожидания, т. к. в результате получается интеграл от неотрицательной функции. Поэтому  $\mathbf{E}\xi(\lambda)$  – выпуклая функция от  $\lambda$ , и  $\|\xi(\lambda)\|$  – также выпуклая функция  $\lambda$ . Далее, поскольку  $X$  – компакт, то из непрерывности  $\mathbf{E}\xi(\lambda)$  до  $+\infty$  при любом  $x$  следует это же свойство супремума функции  $\|\xi(\lambda)\|$ , т. е. существует такая последовательность  $\{\lambda_k\}$ , что  $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\xi(\lambda_k)\| = +\infty$  и  $\|\xi(\lambda_k)\| < +\infty$ . Следовательно, существуют такие значения  $\lambda_k$ , что величина  $\|\xi(\lambda_k)\|$  сколь угодно велика, но конечна; при этом  $\|\xi(\lambda)\|$  как выпуклая функция непрерывна при  $\lambda < \lambda_k$ .

Опыт решения различных задач методом Монте-Карло показывает, что всегда можно подобрать  $p(x, x')$  таким образом, чтобы выполнялось условие

$$|q(x, x')| < C < +\infty, \quad (4.28)$$

которое представляется весьма целесообразным.

**Теорема 4.8.** Если  $\rho(K) < 1$ ,  $k(x, x') \geq 0$ ,  $h(x) \geq 0$  и выполняются условия (4.24), (4.28), то рекурсия (4.25) определяет несмещенную оценку  $\xi$ .

**Доказательство.** Функция  $\|\mathbf{E}\xi(\lambda)\|$  монотонна и непрерывна по  $\lambda$  вплоть до  $+\infty$  и в силу условия (4.28)  $\|\mathbf{E}\xi(\lambda)\| < +\infty$  для достаточно малых  $\lambda > 0$ . Поэтому, если  $\|\mathbf{E}\xi\| = +\infty$ , то найдется такое  $\lambda < 1$ , что  $\|\varphi\| < \|\mathbf{E}\xi(\lambda)\| < +\infty$ . Однако при этом  $\mathbf{E}\xi(\lambda) = \varphi_\lambda$ , а  $\|\varphi_\lambda\| \leq \|\varphi\|$  вследствие монотонной зависимости  $\varphi_\lambda$  от  $\lambda$ . Полученное противоречие доказывает теорему 4.8.  $\square$

Данная теорема представляет собой хорошо известный факт, но интересна тем, что в ней по существу используется лишь рекуррентный характер оценки и не проводятся громоздкие выкладки, связанные с детализацией ряда Неймана и предварительным осреднением полного выражения  $\xi$  по “поглощению-выживанию” (см. раздел 4.3).

Теорема 4.8 очевидным образом обобщается на знакопеременный случай, если выполняется условие  $\rho(K_1) < 1$ , где  $K_1$  – интегральный оператор с ядром  $|k(x, x')|$ , так как в этом случае имеем  $|\xi_0| \leq \xi_0^{(1)} = |h_0| + |q(x_0, x_1)| \xi_1^{(1)}$ , т. е.  $|\mathbf{E}\xi| < C < +\infty$ , и прямое осреднение соотношения (4.25) дает несмещенность  $\xi$ .

Дисперсия  $\mathbf{D}\xi = \mathbf{E}\xi^2 - \varphi^2$  определяется величиной  $\mathbf{E}\xi^2$ , которая существенно зависит от выбора переходной плотности  $p(x, x')$ . Рассмотрим соотношение

$$\xi_0^2 = h_0^2 + 2h_0q(x_0, x_1)\xi_1 + q^2(x_0, x_1)\xi_1^2. \quad (4.29)$$

Из (4.29) можно получить более простую рекурсию, если слагаемое  $2h_0q(x_0, x_1)\xi_1$  заменить на соответствующее математическое ожидание

$$\mathbf{E}[2h_0q(x_0, x_1)\xi_1] = 2h_0[K\varphi]_0 = 2h_0(\varphi_0 - h_0).$$

Покажем, что такая замена не изменяет величину среднего квадрата. Рассматривая (4.29) как рекурсию для  $\xi^2$  и продлевая ее до конца траектории, получаем выражение

$$\xi_0^2 = \sum_{n=0}^{\infty} Q_n^2 [h_n^2 + 2h_n q(x_n, x_{n+1}) \xi_{n+1}],$$

при осреднении которого, очевидно, можно выражение в квадратных скобках заменить на его условное математическое ожидание при фиксированном значении  $x_n$ , т. е. на величину  $h_n(2\varphi_n - h_n)$ . Таким образом, действительно,  $\mathbf{E}\xi^2 = \mathbf{E}\zeta^2$ , причем

$$\zeta_0^2 = h_0(2\varphi_0 - h_0) + q^2(x_0, x_1)\zeta_1^2. \quad (4.30)$$

Следовательно, если выполняются условия теоремы 4.8 и  $\rho(K_p) < 1$  (здесь  $K_p$  – интегральный оператор с ядром  $k^2(x, x')/p(x, x')$ ), то функция  $\psi \equiv \mathbf{E}\xi^2$  определяется уравнением

$$\psi = h(2\varphi - h) + K_p\psi, \quad (4.31)$$

которое впервые было получено американским математиком Кертиссом при построении методов Монте–Карло для решения систем алгебраических уравнений. Нетрудно показать, что  $\|K_1\|^2 < \|K_p\|$ , поэтому (4.31) справедливо при указанных условиях и в знакопеременном случае. Для знакопостоянного случая наиболее общий результат состоит в том, что для несмещенной оценки  $\xi$  безотносительно условия  $\rho(K_p) < 1$  величина  $\mathbf{E}\xi^2$  определяется рядом Неймана для уравнения (4.31) (см. раздел 4.4).

В заключение заметим, что для решения ряда прикладных задач, например теории переноса излучения, необходимо оценивать линейные функционалы вида  $(f, \varphi) = (\varphi^*, h) = \int_X \varphi^*(x)h(x) dx$  (это аналог соотношения (4.4)). Здесь  $f \in L_1$ , а  $\varphi^*$  – решение сопряженного уравнения  $\varphi^* = K^*\varphi^* + f$ ; в теории переноса излучения (и в разделах 4.1–4.3) это уравнение рассматривается как основное (см. соотношение (4.1)). Пусть плотность вероятности  $\pi(x)$  такова, что  $\pi(x) \neq 0$  при  $f(x)\varphi(x) \neq 0$ , и точка  $x$  распределена с плотностью  $\pi(x)$ . Тогда

$$(f, \varphi) = \mathbf{E}\zeta, \quad \zeta = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)} \xi_0 = \sum_{m=0}^N Q_m h(x_m), \quad \text{где } Q_0 = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}.$$

Таким образом, что выражение для  $\zeta$  совпадает с выражением стандартной оценки по столкновениям (4.7) для величины  $(\varphi^*, h)$ . Минимизация дисперсии такой оценки согласно принципа Беллмана осуществляется следующим образом: определяются (как указано выше) оптимальный вариант переходной плотности  $p(x, x')$  и соответствующая функция  $\psi \equiv \mathbf{E}\xi^2$ ; оптимальная плотность  $\pi(x)$  затем находится по формуле  $\pi(x) = |f(x)|\psi^{1/2}(x) / \int_X f(x)\psi^{1/2}(x) dx$ .

**4.6.2. Использование ветвящихся цепей.** В некоторых случаях для построения основной несмещенной оценки  $\xi$  при решении интегральных уравнений целесообразно использовать цепи Маркова с ветвлением. Это прежде всего относится к интегральным уравнениям, описывающим перенос частиц с размножением. Кроме того, “расщепление” траекторий можно использовать для уменьшения дисперсии и трудоемкости оценки по столкновениям.

Представим ядро интегрального уравнения (4.22) и переходную плотность  $p(x, x')$  следующим образом:

$$k(x, x') = \sum_{i=0}^m p_i(x)k_i(x, x')\nu_i(x'), \quad p(x, x') = \sum_{i=0}^m p_i(x)p_i(x, x'), \quad p_i(x) \geq 0, \quad \sum_{i=0}^m p_i(x) \equiv 1,$$

где  $p_i(x, x')$  – переходные плотности. Здесь  $\nu_i(x')$  – целочисленная функция, для которой допускается и нулевое значение, означающее обрыв траектории в точке  $x'$ . Моделирование перехода с ветвлением осуществляется следующим образом. Соответственно вероятностям  $\{p_i(x)\}$  выбирается случайный номер  $i$  переходной плотности  $p_i(x, x')$ , моделируется переход  $x \rightarrow x'$ , вес домножается на величину  $q_i(x, x') = k_i(x, x')/p_i(x, x')$  и далее строятся  $\nu_i(x')$  независимых траекторий из точки  $x'$  с полученным начальным весом. Соответствующее рекуррентное представление для  $\xi$  имеет вид

$$\xi_0 = h_0 + q_i(x, x') \sum_{k=1}^{\nu_i(x')} \xi_1^{(k)}.$$

В данном случае приведенное в подразд. 4.6.1 обоснование несмещенности (т.е. соотношение  $\mathbf{E}\xi \equiv \varphi$ ) представляется особенно целесообразным, так как полная запись и прямое осреднение оценки  $\xi$  еще более громоздки, чем в случае без ветвления. Путем осреднения рекуррентного представления для  $\xi^2$  по аналогии с подразд. 4.6.1 для функции  $\psi \equiv \mathbf{E}\xi^2$  получаем

$$\begin{aligned} \psi(x) = & h(x)[2\varphi(x) - h(x)] + \int \sum_{i=1}^m p_i(x) \frac{k_i^2(x, x')\nu_i(x')[\nu_i(x') - 1]}{p_i(x, x')} \varphi^2(x') dx' + \\ & + \int \sum_{i=1}^m \frac{p_i(x)k_i^2(x, x')\nu_i(x')}{p_i(x, x')} \psi(x') dx. \end{aligned}$$

Как в подразд. 4.6.1, кроме условия  $\rho(K_1) < 1$  здесь дополнительно требуется выполнение условия  $\rho(K_p) < 1$ , где  $K_p$  – оператор с ядром

$$\sum_{i=1}^m \frac{k_i^2(x, x')\nu_i(x')}{p_i(x, x')}. \quad (4.32)$$

Выражение (4.32) показывает, что для задачи с неотрицательными функциональными элементами при  $p_i(x, x') \equiv k_i(x, x')$  оператор  $K_p$  совпадает с  $K$ . Следовательно, если  $\rho(K) < 1$ , то дисперсия прямого моделирования (т.е. оценки с  $Q_n \equiv 1$ ) конечна. Отметим, что для физического процесса переноса частиц с ветвлением соотношение  $\rho(K) < 1$  означает *подкритичность* системы. Для подкритичной системы, в частности, является конечным среднее число частиц, которое определяется решением уравнения (4.22), если в качестве  $h(x)$  рассматривать вероятность гибели частицы в точке  $x$ .

**4.6.3. Весовые оценки для нелинейного уравнения.** Рассмотрим теперь нелинейное интегральное уравнение вида

$$\varphi(x) = \int_X k(x, x')\varphi^n(x') dx' + h(x) \quad \text{или} \quad \varphi = K\varphi^n + h. \quad (4.33)$$

Это уравнение будем рассматривать в  $L_\infty(X)$ . Рассмотрим также параметризованное уравнение

$$\varphi_\lambda = \lambda K\varphi_\lambda^n + h, \quad \lambda \geq 0. \quad (4.34)$$

Вначале все элементы задачи будем полагать неотрицательными. Предположим, что выполняется условие

$$q_n = n\lambda\|K\| < 1, \quad (4.35)$$

и для  $\lambda = \lambda_0$  существует решение  $\varphi_{\lambda_0}$  такое, что  $\|\varphi_{\lambda_0}\| < 1$ . При этом для  $\lambda \leq \lambda_0$  решение уравнения (4.33), удовлетворяющее дополнительному условию  $\|\varphi_\lambda\| < 1$ , единственно. Действительно, допустим что существуют два таких решения:  $\varphi_\lambda^{(1)}$  и  $\varphi_\lambda^{(2)}$ . Тогда выполняется соотношение

$$\varphi_\lambda^{(1)} - \varphi_\lambda^{(2)} = \lambda K \left[ \left( \varphi_\lambda^{(1)} - \varphi_\lambda^{(2)} \right) \sum_{k=0}^{n-1} \left( \varphi_\lambda^{(1)} \right)^k \left( \varphi_\lambda^{(2)} \right)^{(n-1-k)} \right] = K_\varphi \left[ \varphi_\lambda^{(1)} - \varphi_\lambda^{(2)} \right].$$

Очевидно, что при условии (4.35) имеем  $\|K_\varphi\| < 1$ , и, следовательно, должно быть  $\varphi_\lambda^{(1)} \equiv \varphi_\lambda^{(2)}$ . Нетрудно показать, что решение  $\varphi_\lambda$  существует и монотонно растет по  $\lambda$  при  $\lambda \leq \lambda_0$ . Действительно, если  $\lambda_1 < \lambda \leq \lambda_0$ , то  $\lambda_1 K \varphi_{\lambda_2}^n + h \leq \varphi_{\lambda_2}$ . Таким образом, начинающиеся с  $\varphi_0 \equiv \varphi_{\lambda_2}$  итерации уравнения (4.33), монотонно убывая, сходятся к решению для  $\lambda = \lambda_1$  и  $\varphi_{\lambda_1} \leq \varphi_{\lambda_2}$ .

Отметим, что впервые алгоритмы метода Монте-Карло для решения (4.33) в несколько более общем виде были построены С.М. Ермаковым [5] на основе связи между интегральными уравнениями со степенной нелинейностью и ветвящимися цепями. Эти цепи строятся так же, как в подразд. 4.6.1 (т. е. при  $n = 1$ ), с тем отличием, что после очередного перехода  $x \rightarrow x'$  из точки  $x'$  строятся  $n$  независимых траекторий с весом, предварительно домноженным на весовой множитель, который здесь также будем предполагать ограниченным:

$$q(x, x') = \frac{k(x, x')}{p(x, x')} \leq c < +\infty. \quad (4.36)$$

Основную оценку здесь можно определить следующей рекуррентной формулой:

$$\xi_0 = h_0 + q(x_0, x_1) \prod_{k=1}^n \xi_1^{(k)}, \quad (4.37)$$

где  $\{\xi_1^{(k)}\}$  – независимые в совокупности значения оценки, соответствующие указанным выше траекториям, начинающимся в точке  $x'$ . Согласно сказанному в конце подразд. 4.6.3 условие (4.35) обеспечивает обрыв ветвящейся траектории с вероятностью единица (и даже конечность среднего числа ветвей, что необходимо для конечности трудоемкости) и тем самым возможность продления рекурсии (4.37) до конца траектории. Кроме того, для малых значений  $\lambda$  величина  $\|\mathbf{E}\xi\|$  также мала, ввиду того, что при выполнении неравенства  $n\lambda < 1$ , очевидно, имеет место соотношение  $\xi_\lambda \leq \|h\|/(1 - n\lambda)$ .

**Теорема 4.9.** *Если  $k(x, x') \geq 0$ ,  $h(x) \geq 0$ ,  $\lambda_0 \geq 1$  и выполняются условия (4.24), (4.35), (4.36), то рекурсия (4.37) определяет оценку  $\xi$  такую, что  $\mathbf{E}\xi \equiv \varphi$  и  $\|\varphi\| < 1$ .*

**Доказательство.** Как и для  $n = 1$  прямое осреднение соотношения (4.37) при  $n > 1$  дает уравнение (4.33). Поэтому при выполнении неравенства  $\|\mathbf{E}\xi\| < 1$  утверждение теоремы выполняется. Предположим теперь, что  $\|\mathbf{E}\xi\| \geq 1$ . Отмеченные в подразд. 4.6.1 свойства функции  $\|\mathbf{E}\xi(\lambda)\|$ , очевидно, имеют место и при  $n > 1$ . Поэтому найдется такое  $\lambda < 1$ , что выполняется неравенство  $\|\varphi\| < \|\mathbf{E}\xi(\lambda)\| \leq 1$ . При этом должно быть  $\mathbf{E}\xi(\lambda) \equiv \varphi_\lambda$  и  $\|\varphi_\lambda\| \leq \|\varphi\|$ , поскольку  $\lambda < 1$ . Полученное противоречие доказывает теорему.  $\square$

С.М. Ермаковым [5] несмещенность рассматриваемой оценки показана при более общем предположении о сходимости итераций для уравнения (4.33), т. е. рассматривается оценка итерационного решения. При этом было использовано громоздкое представление оценки в целом и, фактически, выражение ряда Неймана для уравнения (4.33). Заметим, что оценку  $\xi$  здесь можно реализовать численно, например, с помощью хорошо известной лексикографической схемы.

Прямое осреднение (по аналогии со случаем  $n = 1$ ) рекуррентного представления величины  $\xi^2$  из (4.37) дает здесь следующее уравнение для  $\psi \equiv \mathbf{E}\xi^2$ :

$$\psi = h(2\varphi - h) + K_p\psi^n, \quad (4.38)$$

где, как и в подразд. 4.6.2,  $K_p$  – интегральный оператор с ядром  $k^2(x, x')/p(x, x')$ . Очевидно, что относительно функции  $\mathbf{E}\xi^2$  можно получить утверждение, аналогичное теореме 4.9, если дополнительно потребовать выполнения условия (4.35) с заменой  $K \rightarrow K_p$ ,  $\varphi \rightarrow \psi$  и все рассуждения связать с уравнением (4.38).

Переход к знакопеременному случаю, по аналогии с вариантом  $n = 1$  (см. подразд. 4.6.2), осуществляется следующим образом. Все рассуждения проводятся предварительно для варианта с ядром  $|k(x, x')|$  и свободным элементом  $|h(x)|$ . Это дает мажоранту для  $\xi$ , с использованием которой осуществляется осреднение рекурсии (4.37). В результате получается функция  $\mathbf{E}\xi$ , удовлетворяющая уравнению (4.33), такая, что  $\|\mathbf{E}\xi\| < 1$ , т. е. требуемое решение. Аналогично проводятся рассуждения для  $\mathbf{E}\xi^2$ .

## 4.7. РАНДОМИЗАЦИЯ

**4.7.1. Метод “двойной рандомизации”.** Далее рассматриваются рандомизированные оценки вероятностных моментов решений задач со случайными параметрами. Пусть уравнение  $L\phi = f$  решается методом Монте-Карло на основе моделирования некоторого случайного процесса с траекториями  $\omega$ . Это означает, что случайные величины  $\xi_k(\omega)$  строятся так, что  $\mathbf{E}_\omega \xi_k(\omega) = J_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, m$ , где  $J_k$  – оцениваемые функционалы от  $\phi$ .

Пусть оператор  $L$  и функция  $f$  зависят от случайного поля  $\sigma$  (например, случайная среда в теории переноса, случайная сила в теории упругости и т. д.). Тогда

$$\xi_k = \xi_k(\omega, \sigma), \quad J_k = J_k(\sigma), \quad \mathbf{E}_\omega[\xi_k(\omega, \sigma)|\sigma] = J_k(\sigma),$$

где траектории  $\omega$  и  $\sigma$ , вообще говоря, зависимы. Рассмотрим задачу оценки величин

$$J_k = \mathbf{E}_\sigma J_k(\sigma), \quad R_{kj} = \mathbf{E}_\sigma[J_k(\sigma)J_j(\sigma)], \quad k, j = 1, \dots, m.$$

Для решения этой задачи целесообразно использовать метод “двойной рандомизации”, который строится на основе следующих представлений:

$$\mathbf{E}_\sigma J_k(\sigma) = \mathbf{E}_\sigma \mathbf{E}_\omega \xi_k(\omega, \sigma) = \mathbf{E}_{(\omega, \sigma)} \xi_k(\omega, \sigma), \quad \mathbf{E}_\sigma [J_k(\sigma)J_j(\sigma)] = \mathbf{E}_{(\omega_1, \omega_2, \sigma)} [\xi_k(\omega_1, \sigma)\xi_j(\omega_2, \sigma)], \quad (4.39)$$

где  $\omega_1$  и  $\omega_2$  – условно-независимые траектории, моделируемые для одной реализации  $\sigma$ , а индекс математического ожидания означает соответствующее распределение. Ясно, что надо предположить существование полного математического ожидания, представленного в (4.39), т. е.  $\mathbf{E}_{(\omega, \sigma)} |\xi_k(\omega, \sigma)| < +\infty$  и  $\mathbf{E}_{(\omega_1, \omega_2, \sigma)} [|\xi_k(\omega_1, \sigma)\xi_j(\omega_2, \sigma)|] < +\infty$ . Соотношения (4.39) показывают, что для оценки  $J_k$  достаточно строить только одну траекторию для фиксированного  $\sigma$ , а оценка величины  $R_{kj}$  требует построения двух условно-независимых траекторий. Для оптимизации такого алгоритма естественно использовать метод расщепления (см. раздел 3.5).

**4.7.2. Рандомизация оценки по столкновениям.** В качестве частного случая использования формулы (4.39), можно рассмотреть рандомизацию оценки по столкновениям (4.7). Пусть  $\tilde{k}(x_{n-1}, x_n)$ ,  $\tilde{f}_0$ ,  $\tilde{h}_n$  – независимые несмещенные оценки соответствующих величин  $k(x_{n-1}, x_n)$ ,  $f(x_0)$ ,  $h(x_n)$  (например случайные оценки интегралов, выражающих эти величины),  $\tilde{Q}_n$  – несмещенные оценки весов  $Q_n$ ,  $K'_1$  – интегральный

оператор с ядром  $\mathbf{E}_\sigma |k(x', x)|$ . Если  $\rho(K'_1) < 1$ ,  $\mathbf{E}_\sigma \tilde{h} \in L_\infty$ ,  $\mathbf{E}_\sigma \tilde{f} \in L_1$ , то (см. подразд. 4.3.1)

$$I_h = (\varphi, h) = \mathbf{E}_\omega \tilde{\xi}, \quad \text{где} \quad \tilde{\xi} = \sum_{n=0}^N \tilde{Q}_n \tilde{h}_n.$$

Кроме того,  $\mathbf{E}_\sigma \tilde{\xi}^2 = (\chi, h[2\varphi^* - h]) + (\chi, \mathbf{D}\tilde{h})$ , где  $\mathbf{D}\tilde{h} = \mathbf{D}_{(\omega, \sigma)} \tilde{h}(\omega, \sigma)$  и  $\chi$  – ряд Неймана для уравнения

$$\chi'(x) = \int_X \frac{\mathbf{E}_\sigma \tilde{k}^2(x', x)}{p(x', x)} \chi'(x') dx' + \frac{\mathbf{E}_\sigma \tilde{f}^2(x)}{\pi(x)} \quad \text{или} \quad \chi' = K'_p \chi' + \mathbf{E}_\sigma (\tilde{f}^2/\pi),$$

если  $\rho(K'_p) < 1$ ,  $\mathbf{E}_\sigma \tilde{f}^2/\pi \in L_1$ . Если рандомизируется лишь  $h(x)$ , то  $\mathbf{D}\tilde{\xi} = \mathbf{D}_\omega \xi + (\chi, \mathbf{D}\tilde{h})$ , где  $\chi$  определяется так же, как в подразд. 4.4. Можно показать, что из соотношения  $\rho(K'_p) < 1$  следует соотношение  $\rho(K'_1) < 1$ .

#### 4.8. ВЕКТОРНЫЕ ОЦЕНКИ

Рассмотрим в  $L_\infty$  систему вида

$$\varphi_i = h_i + \sum_{j=1}^i K_{ij} \varphi_j, \quad i = 1, \dots, m, \quad (4.40)$$

где  $K_{ij}$  – интегральный оператор с ядром  $k_{ij}(x, x')$ :  $[K_{ij}\varphi](x) = \int_X k_{ij}(x, x')\varphi(x') dx'$ . В операторной форме система (4.40) есть  $\Phi = H + \mathbf{K}\Phi$ . Здесь  $\|\Phi\|_{L_\infty} = \text{vrai sup}_{i,x} |\varphi_i(x)|$ .

**Теорема 4.10.** *Если  $K_{ij}$  – ограниченные операторы, то  $\rho(\mathbf{K}) \leq \max_i \rho(K_{ii}) = \rho_0$ . Если же  $k_{ij}(x, x') \geq 0$ , то  $\rho(\mathbf{K}) = \rho_0$ .*

**Доказательство.** Рассмотрим систему

$$\varphi_i = h_i + \lambda \sum_{j=1}^i K_{ij} \varphi_j, \quad i = 1, \dots, m.$$

Эта система однозначно разрешима, если  $0 < \lambda < \rho_0^{-1}$ . Следовательно,  $\rho(\mathbf{K}) < \rho_0$ . Если  $k_{ij}(x, x') \geq 0$ , то  $\sup \|K_{ii}^n\| < \|\mathbf{K}^n\|$  и  $\rho_0 \leq \rho(\mathbf{K})$ .  $\square$

Заметим, что первое утверждение теоремы 4.10 выполняется для произвольного линейного оператора.

Для построения векторной оценки решения системы интегральных уравнений  $\Phi = \mathbf{K}\Phi + H$  определяется обрывающаяся цепь Маркова  $x = x_0, x_1, \dots, x_N$  с переходной плотностью  $p(x, x')$ , отличной от нуля на носителе матричного ядра  $K(x, x')$ , т. е. на объединении носителей ядер  $k_{ij}(x, x')$ .

Вводится также случайный матричные веса

$$\tilde{Q}_0 = \{\delta_{ij}\}, \quad \tilde{Q}_n = \tilde{Q}_{n-1} K(x_{n-1}, x_n)/p(x_{n-1}, x_n), \quad n = 1, 2, \dots,$$

где  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера. При дополнительном условии  $\rho(\mathbf{K}_1) < 1$  (где  $\mathbf{K}_1$  – оператор, получаемый из  $\mathbf{K}$  заменой ядер  $k_{ij}$  на их модули) имеем

$$\mathbf{E}\xi_x = \Phi(x), \quad \xi_x = \sum_{n=0}^N \tilde{Q}_n H(x_n).$$

Для ковариационной матрицы  $\Psi(x) = \mathbf{E}[\xi_x, \xi_x^T]$  (здесь  $T$  – знак транспонирования) справедливо матрично-интегральное уравнение

$$\Psi(x) = [H\Psi^T + \Psi H^T - HH^T]_x + \int \frac{K(x, x')\Psi(x')K^T(x, x')}{p(x, x')} dx' \quad \text{или} \quad \Psi = \mu + \mathbf{K}_p\Psi, \quad (4.41)$$

которое нетрудно получить при условии, что сходится ряд Неймана для уравнения  $\Psi = \mu_1 + \mathbf{K}_{p,1}\Psi$ , где матрично-интегральный оператор  $\mathbf{K}_{p,1}$  и функция  $\mu_1$  соответствует задаче с модулями функциональных характеристик. Обозначим через  $K_{p,ij}$  интегральный оператор с ядром  $k_{ij}^2(x, x')/p(x, x')$ .

**Теорема 4.11.** *Если  $K_{p,ii}$  – ограниченные операторы, то для системы (4.40)*

$$\rho(\mathbf{K}_p) \leq \max_i \rho(K_{p,ii}) = \rho_0^{(p)}.$$

Если дополнительно  $k_{ij} \geq 0$ , то  $\rho(\mathbf{K}_p) = \rho_0^{(p)}$ .

**Доказательство.** Путем перенумерации элементов матрицы  $\Psi(x)$  можно представить (4.41) как треугольную систему с операторами  $K_{p,ii}$  на диагонали. Кроме того, неравенство  $\|K_{p,ij}\|^2 \leq \|K_{p,ii}\| \|K_{p,jj}\|$  имеет место.  $\square$

Метод Монте-Карло обычно используется для оценки функционалов вида

$$I = (F, \Phi) = \int F^T(x)\Phi(x) dx, \quad \text{где} \quad F^T(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x)),$$

причем  $\|F\|_{L_1} = \sum_j \int |f_j(x)| dx < +\infty$ . Пусть точка  $x_0$  распределена с плотностью  $\pi(x)$  такой, что  $\pi(x) \neq 0$ , если  $F^T(x)\Phi(x) \neq 0$ . Тогда, очевидно,

$$I = \mathbf{E} \left[ \frac{F^T(x_0)}{\pi(x_0)} \xi_{x_0} \right] = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N \frac{F^T(x_0)}{\pi(x_0)} \tilde{Q}_n H(x_n) = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N H^T(x_n) \tilde{Q}_n' \frac{F(x_0)}{\pi(x_0)}.$$

Случайный векторный вес  $Q_n^{(v)} = \tilde{Q}_n' F(x_0)/\pi(x_0)$  вычисляется на основе формулы  $Q_n^{(v)} = [K^T(x_{n-1}, x_n)/p(x_{n-1}, x_n)] Q_{n-1}^{(v)}$ . Полагая  $\zeta = F^T(x_0)\xi_{x_0}/\pi(x_0)$ , имеем

$$\mathbf{E} \zeta^2 = \mathbf{E} [F^T(x_0)\xi_{x_0}\xi_{x_0}^T F(x_0)/\pi^2(x_0)].$$

Следовательно, дисперсия  $\zeta$  определяется матричной функцией  $\Psi(x) = \mathbf{E}[\xi_x \xi_x^T]$ , о которой речь шла выше. Вследствие соотношения

$$\mathbf{E} [F^T(x_0)\Psi(x_0)F(x_0)/\pi^2(x_0)] \leq \|\Psi\|_{L_\infty} \int_X \left[ \left( \sum_{i=1}^m |f_i(x)| \right)^2 / \pi(x) \right] dx$$

для конечности  $\mathbf{E}\zeta^2$ , в дополнение к условию теоремы 4.11, необходимо предположить, что

$$\int_X \left[ \left( \sum_{i=1}^m |f_i(x)| \right)^2 / \pi(x) \right] dx < +\infty.$$

## 4.9. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ

**4.9.1. Дифференцирование уравнений и оценок.** Рассмотрим в  $L_\infty(X)$  интегральное уравнение с ядром, зависящим от параметра  $\lambda$ :

$$\varphi(x, \lambda) = \int_X k(x, x', \lambda) \varphi(x', \lambda) dx' + h(x, \lambda) \quad \text{или} \quad \varphi = K\varphi + h. \quad (4.42)$$

Хотя интегральный оператор в (4.42) имеет сопряженный вид, он обозначается символом  $K$  (для простоты). В уравнении (4.42)  $X$  –  $l$ -мерное евклидово пространство. Рассмотрим задачу вычисления производных

$$\varphi^{(n)}(x, \lambda) = \frac{\partial^n \varphi(x, \lambda)}{\partial \lambda^n}, \quad n = 0, 1, \dots, m.$$

Введем следующее обозначение:  $K^{(n)}$  – интегральный оператор с ядром  $k^{(n)}(x, x', \lambda)$ ;  $\rho(K)$  – спектральный радиус оператора  $K$ . Предполагается, что функции  $k^{(n)}$  и  $h^{(n)}$  измеримы по  $x$ . Путем формального дифференцирования уравнения (4.42)  $n$  раз по  $\lambda$  получаем треугольную систему интегральных уравнений

$$\varphi^{(n)} = \sum_{i=0}^n C_n^i K^{(n-i)} \varphi^{(i)} + h^{(n)}, \quad n = 0, 1, \dots, m, \quad (4.43)$$

или, в операторной форме,  $\Phi = \mathbf{K}\Phi + H$ . Далее дается обоснование использования (4.43) для вычисления производных  $\varphi^{(n)}$ .

Введем обозначения:  $F_m(f)$  – вектор-столбец, состоящий из производных функций  $f(\lambda)$  по  $\lambda$ , т. е.  $F_m(f) = (f, f^{(1)}, \dots, f^{(m)})^T$ ;  $D_m(f) = d_{ni}$  – нижняя треугольная  $(m+1)$ -мерная матрица с элементами  $d_{ni} = C_n^{n-i} f^{(n-i)}$ , где  $i = 0, 1, \dots, n$  и  $n = 0, \dots, m$ . Используя формулу Лейбница для  $m$ -кратной производной от произведения двух функций, получаем утверждение

**Лемма 4.4.** *Справедливо следующее соотношение:*

$$F_m \left( \prod_{i=0}^k f_i \right) = D_m(f_k) \times \dots \times D_m(f_1) F_m(f_0).$$

**Теорема 4.12.** *Предположим, что неравенства*

$$|k^{(n)}(x, x'; \lambda')| \leq k_n(x, x'), \quad |h^{(n)}(x, \lambda)| \leq h_0(x), \quad h_0 \in L_\infty \quad (4.44)$$

*выполняются при  $\lambda - \varepsilon \leq \lambda' \leq \lambda + \varepsilon$  для некоторого  $\varepsilon > 0$ , интегральные операторы  $K_n$  с ядрами  $k_n(x, x')$  ограничены,  $n = 0, \dots, m$ , и  $\rho(K_0) < 1$ . Тогда  $\rho(\mathbf{K}) < 1$  и функции  $\varphi^{(n)}$ ,  $n = 0, 1, \dots, m$ , удовлетворяют системе (4.43).*

**Доказательство.** Вследствие теоремы 4.10 соотношение  $\rho(\mathbf{K}) \leq \rho(K_0) = \rho_0 < 1$  выполняется в интервале  $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ . По лемме 4.4 ряд Неймана, соответствующий системе уравнений (4.43), совпадает с рядом, получаемым формальным дифференцированием ряда Неймана для уравнения (4.42). Вследствие соотношения (4.44) этот ряд равномерно мажорируется в  $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ , причем мажорирующий ряд конечен.  $\square$

Лемма 4.4 и теорема 4.12 очевидным образом распространяются на случай векторного параметра  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ .

Рассмотрим теперь методы Монте–Карло для решения построенных треугольных систем интегральных уравнений и для непосредственного вычисления производных. Теорема 4.11 показывает, что дисперсии векторных алгоритмов конечны, если спектральный радиус оператора с ядром  $k^2(x, x', \lambda)/p(x, x')$  меньше единицы ( $n = 1, \dots, m$ ),



т. е. если выполняется стандартное условие конечности скалярных оценок метода Монте-Карло для уравнения (4.42). Пусть  $\xi_x(\lambda)$  – стандартная оценка по столкновениям (см. соотношение (4.11)) для уравнения (4.42).

**Теорема 4.13.** *В условиях теоремы 4.12 и при выполнении соотношения (4.7) справедливы следующие утверждения:*

1)  $\mathbf{E}\xi_x^{(m)}(\lambda) = \mathbf{E}\sum_{n=0}^N[Q_n(\lambda)h(x_n, \lambda)]^{(m)} = \varphi^{(m)}(x, \lambda);$

2) *если все функции в (4.42) и их необходимые производные неотрицательны, то можно использовать  $\varepsilon = 0$  в условиях теоремы 4.12;*

3) *если  $\rho(K_p) < 1$ , то  $\mathbf{D}\xi^{(m)} < +\infty$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$*

**Доказательство.** Согласно лемме 4.4 ряд, получаемый дифференцированием оценки  $\xi_x(\lambda)$ , численно совпадает со стандартной векторной оценкой для системы (4.43). Поэтому утверждения 1 и 3 следуют из теорем 4.11 и 4.12. При дополнительном условии из утверждения 2 перестановка дифференцирования и осреднения заведомо допустима, а утверждение 1 имеет место для  $\varepsilon = 0$ .  $\square$

Теорема 4.13 легко распространяется на функционалы вида

$$(f, \varphi_\lambda) = \mathbf{E}[(f(x_0)/\pi(x_0))\xi_{x_0}(\lambda)], \quad \text{где } \varphi_\lambda \equiv \varphi(x, \lambda).$$

В частности, если  $\rho(K_p) < 1$  и  $f^2/\pi \in L_1$ , то  $\mathbf{D}[(f(x_0)/\pi(x_0))\xi_{x_0}^{(m)}(x)] < +\infty$ . Равенство  $\mathbf{E}[(f(x_0)/\pi(x_0))\xi_{x_0}(\lambda)] = (f, \mathbf{E}\xi^{(m)}(\lambda)) = (f, \varphi_\lambda^{(m)})$  является следствием теоремы Фубини, так как  $f \in L_1$ ,  $\varphi^{(m)} \in L_\infty$ , а равенство  $(f, \varphi_\lambda)^{(m)} = (f, \varphi_\lambda^{(m)})$  выполняется вследствие соотношения  $\|\varphi_{\lambda'}^{(m)}\| < c < +\infty$  для  $\lambda' \in [\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon]$ . В условиях утверждения 2 из теоремы 4.13 значение  $\varepsilon = 0$  допустимо и здесь.

**4.9.2. Итерации резольвенты и оценки собственных чисел.** Теперь применим рассматриваемую методику для оценки итераций резольвенты. С этой целью в  $L_\infty(X)$  рассмотрим уравнение (4.42) вида

$$\varphi(x, \lambda) = \lambda^{-1} \int_X k(x, x')\varphi(x, \lambda) dx' + \lambda^{-1}h(x)$$

при  $|\lambda| > \rho(K)$ . Имеем, с одной стороны,

$$\varphi_\lambda = [\lambda - K]^{-1}h, \quad \varphi_\lambda^{(m)} = \frac{d^m \varphi_\lambda}{d\lambda^m} = (-1)^m m! [\lambda - K]^{-(m+1)}h.$$

С другой стороны,

$$\varphi_\lambda^{(m)} = \mathbf{E}\zeta_x^{(m)}, \quad \zeta_x^{(m)} = \sum_{n=0}^N (-1)^m \frac{(n+m)!}{n!} \lambda^{-(n+1+m)} Q_n h(x_n).$$

Несмещенность оценки  $\zeta_x^{(m)}$  и соотношение  $\mathbf{D}\zeta_x^{(m)} < +\infty$  очевидным образом следуют из теоремы 4.13. Окончательно получаем

$$[\lambda - K]^{-(m+1)}h = (-1)^m \varphi_\lambda^{(m)} / m! = \mathbf{E}\xi_x^{(m)}, \quad \xi_x^{(m)} = \sum_{n=0}^N C_{n+m}^m Q_n h(x_n) \lambda^{-(n+1+m)}.$$

При достаточно общих условиях имеем

$$\frac{([\lambda - K]^{-(m+1)}h, f)}{([\lambda - K]^{-m}h, f)} \rightarrow \frac{1}{\lambda - \lambda^*},$$

где  $\lambda^*$  – собственное число оператора  $K$ , ближайшее к  $\lambda$ . Если  $f(x)$  – плотность вероятностей, то  $([\lambda - K]^{-(m+1)}h, f) = \mathbf{E}\xi_x^{(m)}$  и  $x$  – случайная точка, распределенная с плотностью  $f$ . Отметим, что метод Монте-Карло для оценки первого собственного числа на основе итерации оператора  $K$  был разработан В.С.Владимировым [6].

Теперь рассмотрим задачу оценки главного собственного числа оператора  $K_p$  с ядром  $k^2(x, x')/p(x, x')$ , который определяет значения  $\mathbf{E}\xi_x^2$  (см. раздел 4.4). Ясно, что рассмотренные соотношения позволяют решить эту задачу после подстановки  $Q_n^2 h^2(x_n)$  вместо  $Q_n h(x_n)$ . Здесь требуется дополнительное условие  $\rho(K_{p,2}) < 1$ , где  $K_{p,2}$  – оператор с ядром  $\lambda^{-4}k^4(x, x')/p^3(x, x')$ .

Для оценки главного собственного значения матрично-интегрального оператора  $\mathbf{K}$  (см. раздел 4.8) можно использовать соотношение

$$(F^T, [\lambda - \mathbf{K}]^{-(m-1)}H) = \sum_{n=0}^N C_{n+m}^m \lambda^{-(n+1+m)} R_n, \quad \text{где } R_n = F^T(x_0) \tilde{Q}_n H(x_n) / \pi(x_0).$$

Интересно, что это же соотношение после подстановки  $R_n^2$  вместо  $R_n$  можно использовать в случае оператора  $\mathbf{K}_p$  (см. раздел 4.8) вследствие равенства

$$\mathbf{E} \sum_{n=0}^N C_{n+m}^m \lambda^{-(n+1+m)} R_n^2 = \left( \frac{F^T}{\pi} [\lambda - \mathbf{K}_p]^{-(m-1)} (H H^T) F \right),$$

поскольку

$$R_n^2 = \frac{F^T(x_0)}{\pi(x_0)} \tilde{Q}_n H(x_n) H^T(x_n) \tilde{Q}_n' \frac{F(x_0)}{\pi(x_0)}.$$

Для улучшения сходимости итераций вместо матрицы  $H H^T$  можно использовать матрицу вида  $S S^T$ , где  $S$  – некоторая подходящая матрица. При этом  $R_n^2$  заменяется на величину  $P_n^T P_n$ , где вектор  $P_n$  определяется формулой  $P_n = S^T(x_n) \tilde{Q}_n' F(x_0) / \pi(x_0)$ .

## 4.10. ТЕСТОВАЯ ЗАДАЧА

**4.10.1. Формулы для дисперсии.** Рассмотрим следующую математическую модель переноса частиц с анизотропным рассеянием. Частицы двигаются из точки  $x = 0$  вдоль оси  $x$  случайными пробегами, распределенными с плотностью  $e^{-x}$ ,  $x > 0$ . В конце пробега происходит столкновение, после которого может произойти “рассеяние” (с вероятностью  $q$ ). Здесь “рассеяние” означает движение вперед, т.е. “ $\delta$ -рассеяние”. В точке  $x = H$  происходит вылет и траектория обрывается. Необходимо оценить вероятность  $P$  вылета частицы.

Начальная и переходная плотности для цепи столкновений определяются здесь выражениями

$$f(x) = \exp(-x), \quad 0 \leq x \leq H \quad \text{и} \quad k(x', x) = q \exp(-(x - x')), \quad x' \leq x \leq H.$$

Следовательно, плотность столкновений  $\varphi(x)$  удовлетворяет уравнению (см. раздел 4.6).

$$\varphi(x) = q \int_0^x e^{-(x-x')} \varphi(x') dx' + e^{-x}. \quad (4.45)$$

Ясно, что здесь  $\|K\| < q$  и  $P = \varphi(H)$ . Итак, необходимо оценить решение уравнения (4.45) только в одной точке. Для этого можно использовать локальную оценку (4.12),

которая в случае прямого моделирования имеет вид

$$\xi = \sum_{n=0}^N qe^{-(H-x_n)}, \quad \text{причем} \quad \mathbf{E}\xi = P - e^{-H}.$$

Путем подстановки в (4.45) можно проверить выражения  $\varphi(x) = e^{-(1-q)x}$ ,  $P = e^{-(1-q)H}$ , где  $0 \leq x \leq H$ . Решением сопряженного уравнения

$$\varphi^*(x) = q \int_x^H e^{-(x'-x)} \varphi^*(x') dx' + qe^{-(H-x)} \quad \text{является} \quad \varphi^*(x) = qe^{-(1-q)(H-x)}.$$

Далее имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\xi^2 &= (\varphi, h[2\varphi^* - h]) = q^2 \left[ \frac{1+2q}{1+q} e^{-(1-q)H} - \right. \\ &\quad \left. - 2e^{-(2-q)H} + \frac{e^{-2H}}{1+q} \right] = q^2 \left[ \frac{1+2q}{1+q} P - 2e^{-H}P + \frac{e^{-2H}}{1+q} \right]. \end{aligned}$$

Для простейшей “физической” оценки  $\eta$  имеем  $P(\eta = 1) = P$ ,  $P(\eta = 0) = 1 - P$ , т.е.  $\mathbf{E}\eta^2 = P$  и  $\mathbf{E}(\eta - e^{-H})^2 = P - 2e^{-H}P + e^{-2H}$ . Итак, простейшая оценка лучше локальной для достаточно больших  $H$  и  $q$ , если необходимо оценить вероятность  $P$ .

**4.10.2. Частичное ценностное моделирование.** Далее мы рассмотрим эффективность “частичного ценностного моделирования” по сравнению с прямым на примере использования функции ценности для модификации только распределения длины пробега в данной задаче.

Заново рассмотрим модель, описанную в подразд. 4.10.1, полагая, что в конце пробега частица может поглотиться с вероятностью  $g(x') = 1 - q(x')$ , причем  $q(x') = q$  для  $x < H$  и  $q(x') = 0$  для  $x' > H$ . В этом случае уравнение (4.3) имеет вид

$$\varphi^*(x) = \begin{cases} q \int_x^\infty e^{-(x'-x)} \varphi^*(x') dx' & \text{при } 0 \leq x \leq H, \\ h(x) \equiv 1 & \text{при } x > H, \end{cases} \quad (4.46)$$

причем легко проверить, что сохраняется равенство

$$\varphi^*(x) = qe^{-(1-q)(H-x)}, \quad 0 < x < H.$$

Величина  $\varphi^*(x)$  при  $x < H$  имеет смысл вероятности вылета частицы за границу  $x = H$  при условии, что цепь начинается в точке  $x$ . Учитывая (4.46), нетрудно заметить, что для  $\varphi^*(x)$  оценка по столкновениям имеет вид

$$\xi_x = h(x) + \sum_{n=1}^N Q_n h(x_n) = Q_n h(x_n), \quad 0 < x < H, \quad (4.47)$$

причем  $h(x_n) = 1$ , если  $x_n > H$ , и  $h(x_n) = 0$ , если  $x_n \leq H$ . При этом, если поглощение моделировать физически, а длину пробега с использованием функции ценности, то  $Q_n = Q_n^* = e^{-(1-q)(x_n - x_{n-1})} Q_{n-1}^*$ . Пусть  $\mathbf{E}$  – математическое ожидание при прямом моделировании, то есть для  $Q_n \equiv 1$ , а  $\mathbf{E}_*$  – математическое ожидание при ценностном моделировании длины пробега вдоль траектории.

**Лемма 4.5.** Если для оценки (4.47) поглощение моделируется физически, то  $\mathbf{E}_* \xi_x^2 = \mathbf{E} \xi_x^2 = qe^{-(1-q)(H-x)}$ .

**Доказательство.** При прямом моделировании длины пробега, уравнение (4.15) для  $\mathbf{E}\xi_x^2$  совпадают с уравнением (4.46), поэтому  $\mathbf{E}\xi_x^2 = \varphi^*(x) = qe^{-(1-q)(H-x)}$ . Для ценностного моделирования длины пробега, подставив в (4.15) выражение

$$p(x, x') = p^*(x, x') = \frac{e^{-(x'-x)}\varphi^*(x')}{[K^*\varphi^*](x)}, \quad 0 < x < H,$$

получаем, что функция  $\mathbf{E}_*\xi_x^2$  удовлетворяет уравнению

$$s(x) = \int_x^H e^{-(2-q)(x'-x)}s(x') dx' + qe^{-(2-q)(H-x)}, \quad x < H,$$

единственным решением которого является функция  $\varphi^*(x) = qe^{-(1-q)(H-x)}$ .  $\square$

Из леммы 4.5 непосредственно вытекает следующее утверждение.

**Теорема 4.14.** *Для ценностного и прямого моделирования длины пробега дисперсии оценок вероятности прохождения одинаковы, то есть  $\mathbf{E}_*\xi^2 = \mathbf{E}\xi^2$ .*

Согласно сказанному в подразд. 4.5.1, оптимальная плотность распределения длины пробега получается здесь из (4.46) заменой  $q$  на  $\sqrt{q}$ .

## 4.11. МОДИФИКАЦИИ ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА И ВЕСОВЫХ ОЦЕНОК

**4.11.1. Цепи Маркова и интегральные уравнения.** Математическая модель ряда прикладных задач строится на основе рассмотрения некоторого скачкообразного, обрывающегося с вероятностью единица однородного марковского процесса. При этом траектория процесса вполне определяется ее состояниями в моменты скачков, т.е. фактически можно рассматривать обрывающуюся однородную цепь Маркова с заданной переходной функцией  $P(x, S)$ , где  $x \in X$ ,  $X$  –  $l$ -мерное евклидово пространство,  $S \subset X$  – измеримое по Лебегу множество. Для построения весовых алгоритмов моделирования целесообразно рассматривать соответствующую условной мере  $P(x', S)$  обобщенную субстохастическую плотность перехода  $k(x', x)$ . Обобщенная плотность распределения  $k(x', x)$  определяется для произвольного  $x' \in X$  равенством

$$\int_X h(x)P(x', dx) = \int_X k(x', x)h(x) dx \quad \forall h \in C_0(X),$$

где  $C_0(X)$  – множество неотрицательных непрерывных ограниченных функций. Последний интеграл строится формально, по аналогии с интегралом от “дельта-функций” Дирака (см. подразд. 4.3.5). Отметим, что здесь и далее рассматриваются и ненормированные (то есть не обязательно вероятностные) распределения.

В частности, в теории переноса частиц, кроме измеримых плотностей, соответствующих абсолютно непрерывным распределениям, используются также “дельта-функции”, означающие интегрирование по некоторым гиперповерхностям, меньшей, сравнительно с  $m$ , размерности. Использовать обобщенные плотности (вместо интегрирования по соответствующим мерам) в теории статистического моделирования предложил Н.Н. Ченцов в связи с тем, что такой подход упрощает построение и реализацию модификаций моделирования. Это важно и для целей настоящего раздела, т.к. в нем рассматриваются дополнительные фазовые переменные, причем базовые переменные – координаты и скорости – связаны с дополнительными функционально, то есть их условные распределения определяются соответствующими “дельта-функциями”.

Предполагается, что  $\int k(x', x) dx = q(x') \leq 1 - \delta < 1$ . Величина  $q(x')$  имеет смысл вероятности необрыва траектории в заданной точке  $x'$ . Вследствии последнего неравенства цепь обрывается с вероятностью единица, и среднее число состояний конечно.

Итак, рассматривается однородная обрывающаяся цепь Маркова  $x_0, x_1, \dots, x_N$ , определяемая плотностью  $f(x)$  распределения начального состояния  $x_0$  и субстохастической обобщенной плотностью перехода  $k(x', x)$ . Здесь  $N$  - номер состояния, в котором реализуется обрыв траектории (иначе *момент остановки*). Ясно, что обобщенная плотность распределения состояний, непосредственно следующих за начальным, выражается равенством

$$\varphi_1(x) = \int_X f(x')k(x', x) dx' = [Kf](x).$$

Следовательно обобщенная плотность распределения фазовых состояний цепи

$$\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x),$$

где  $\varphi_n(x)$  - плотность распределения состояний номера  $n$ , представляет собой ряд Неймана (4.2) для интегрального уравнения второго рода (4.1). Это уравнение можно рассматривать в пространстве  $N_1(X)$  обобщенных плотностей мер ограниченной вариации, т. к. ряд  $\sum_{n=0}^{\infty} (K^n f, h)$ , в силу условия  $q(x') \leq 1 - \delta$ , сходится  $\forall h \in C_0(X)$ .

Методы Монте-Карло обычно используются для оценки линейных функционалов  $I_h = (\varphi, h)$  (см. соотношение (4.4)); здесь  $h \in C_0(X)$ . Если реализуется прямое моделирование исходной цепи Маркова, то для оценки величины  $I_h$  используется соотношение  $I_h = \mathbf{E} \left[ \sum_{n=0}^N h(x_n) \right]$ . Однако можно моделировать и другую, вспомогательную, цепь Маркова с плотностью перехода  $p(x', x)$  и начальной плотностью  $\pi(x)$ , для которых выполнены условия (4.8), и строить весовую оценку по столкновениям (4.7):  $I_h = \mathbf{E}\xi$ ,  $\xi = \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n)$ .

**4.11.2. Модификации фазового пространства.** Как правило, переход  $x' \rightarrow x$  осуществляется в результате выбора совокупности значений вспомогательных случайных величин (может быть, векторных):  $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_m) \in T$ , т.е. справедливо представление:

$$k(x', x) = \int_{\tau} k_1(x', t_1)k_2((x', t_1), t_2) \dots k_m((x', t_1, \dots, t_{m-1}), t_m) \delta(x - x(x', \mathbf{t})) dt.$$

Здесь  $x(x', \mathbf{t})$  - функция, определяющая новое значение стандартных евклидовых координат через  $x'$  и значения вспомогательных переменных  $\mathbf{t}$ .

Как правило, построение весов  $\{Q_n\}$  непосредственно по формулам

$$Q_0 = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}$$

для решения достаточно сложных задач оказывается практически невозможным. Для преодоления этого затруднения целесообразно перейти к модифицированному фазовому пространству  $T \times X$ , точками которого являются совокупности  $(\mathbf{t}, x)$ . Соответствующее субстохастическое ядро имеет вид:

$$\mathbf{k}((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x)) = \delta(x - x(x', \mathbf{t})) \prod_{i=1}^m k_i((x', t_1, \dots, t_{i-1}), t_i), \quad (4.48)$$

причем  $(x', t_1, t_0)$  следует рассматривать как  $x'$ . Введем обозначения:  $\mathbf{K}$  – интегральный оператор с ядром (4.48);  $\mathbf{f}(\mathbf{t}, x) = f_0(\mathbf{t}) \times f(x)$ , где  $f_0(\mathbf{t})$  – некоторая плотность вероятностей в  $T$ ;  $\varphi_t = \mathbf{K}\varphi_t + \mathbf{f}$ ;  $\mathbf{I}_h = (\varphi_t, h)$ ;  $\varphi_t^* = \mathbf{K}^*\varphi_t^* + h$ . Справедливы следующие равенства:

$$\varphi(x) = \int_T \varphi_t(\mathbf{t}, x) d\mathbf{t}, \quad \mathbf{I}_h = I_h, \quad \varphi_t^*(\mathbf{t}, x) \equiv \varphi^*(x).$$

Первое равенство получается почленным интегрированием модифицированного интегрального уравнения по  $\mathbf{t}$ , второе – частичным интегрированием по  $\mathbf{t}$  в интеграле  $(\varphi_t, h)$ , а третье вытекает из вероятностного представления (4.10) функции ценности  $\varphi^*(x)$ .

Для построения модифицированной оценки по столкновениям  $\xi_t$  определяются вспомогательная переходная плотность  $\mathbf{p}((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x))$  вида (4.48), начальная плотность  $\pi_t(\mathbf{t}, x) = f_0(\mathbf{t})\pi(x)$  и соответствующие веса  $\{\mathbf{Q}_n\}$ , которые получают домножением на весовые множители после каждого элементарного перехода. При выполнении условий несмещенности (4.8) (для каждого элементарного перехода) имеем:

$$I_h = \mathbf{E}\xi_t, \quad \text{где} \quad \xi_t = \sum_{n=0}^N \mathbf{Q}_n h(x_n),$$

причем  $\mathbf{D}\xi_t < +\infty$ , если  $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$ , где  $\mathbf{K}_p$  – интегральный оператор с ядром

$$\mathbf{k}_p((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x)) = \frac{\mathbf{k}^2((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x))}{\mathbf{p}((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x))}.$$

Введем для  $i = 1, \dots, m$  вспомогательные функции ценности

$$\varphi_i^*(x', t_1, \dots, t_i) = \underbrace{\int \dots \int}_{m-i+1} \delta(x - x(x', \mathbf{t})) \left[ \prod_{j=i+1}^m k_j((x', t_1, \dots, t_{j-1}), t_j) \right] \varphi^*(x) dt_{i+1} \dots dt_m dx, \quad (4.49)$$

полагая  $\prod_{m+1}^m \equiv 1$ . Нетрудно заметить, что  $\varphi_i^*(x', t_1, \dots, t_{i-1}, t_i)$  представляет собой условное математическое ожидание величины  $\xi_t$  при условии, что траектория цепи начинается во вспомогательной точке  $(x', t_1, \dots, t_i)$ .

**Теорема 4.15.** Пусть  $h(x) \geq 0$ . Если для  $i = 2, \dots, m$  выполнено

$$p_i((x', t_1, \dots, t_{i-1}), t_i) = \frac{k_i((x', t_1, \dots, t_{i-1}), t_i) \varphi_i^*(x', t_1, \dots, t_{i-1}, t_i)}{\varphi_{i-1}^*(x', t_1, \dots, t_{i-2}, t_{i-1})},$$

$$p_1(x', t_1) = \frac{k_1(x', t_1) \varphi_1^*(x', t_1)}{\varphi^*(x') - h(x')} \quad \text{и} \quad \pi(x) = \frac{f(x) \varphi^*(x)}{I_h}, \quad \text{то} \quad \mathbf{D}\xi_t = 0.$$

**Доказательство.** Нормированность условных плотностей  $p_i(\cdot, \cdot)$  здесь следует непосредственно из определения функций ценности  $\varphi_i^*(\cdot)$ . Подставляя указанные плотности в выражение для  $\mathbf{p}(\cdot, \cdot)$ , убеждаемся, что теорема является частным случаем общего утверждения об оценке по столкновениям с нулевой дисперсией.  $\square$

Отметим, что меняя порядок выбора величин  $t_1, \dots, t_m$ , т.е. способ факторизации субстохастического ядра, можно строить различные интегральные уравнения и на их основе весовые оценки заданного функционала  $I_h$ . В частности, можно осуществлять сдвиг вдоль цепочки элементарных переходов, т.е. фиксировать фазовое состояние после выбора  $t_i$ ,  $i < m$ . Иногда это может упростить выражение вспомогательного веса и

параметрический анализ результатов. Как видно из подразд. 4.10.2 использование “ценностных” плотностей вида (4.48) лишь для части вспомогательных переменных может быть малоэффективным.

**4.11.3. Оптимизация моделирования по части переменных.** Здесь будут использованы две, вообще говоря, векторные вспомогательные случайные величины  $t_1, t_2$ , т. е. ядро имеет вид

$$\mathbf{k}((\mathbf{t}, x), (\mathbf{t}', x')) = \delta(x' - x'(x, \mathbf{t}'))k_1(x, t'_1)k_2((x, t'_1), t'_2).$$

Опуская вспомогательные переменные, примем более простые обозначения, принятые в теории весовых оценок:  $\xi, \xi_x, \varphi, \varphi^*$  и т.д. Выполняются соотношения

$$\mathbf{E}\xi_x = \varphi^*(x), \quad \mathbf{E}\xi^2 = \int_X \frac{f^2(x)}{\pi(x)} \mathbf{E}\xi_x^2 dx.$$

Поэтому целесообразно рассмотреть задачу равномерной относительно  $x \in X$  минимизации величины  $\mathbf{E}\xi_x^2$ . Согласно теореме 4.15, использование “ценностных” плотностей для всех элементарных переходов дает абсолютный минимум :  $\mathbf{E}\xi_x^2 = (\varphi^*(x))^2$  для всех  $x \in X$ . Практически такая глобальная оптимизация моделирования весьма затруднительна, поэтому важно рассмотреть возможность уменьшения величины  $\mathbf{E}\xi_x^2$  путем оптимального подбора плотности распределения части вспомогательных случайных величин, например,  $t_1$ . Рассмотрим цепь Маркова с субстохастической плотностью перехода

$$\mathbf{p}((\mathbf{t}, x), (\mathbf{t}', x')) = \delta(x' - x'(x, \mathbf{t}'))p_1(x, t'_1)p_2((x, t'_1), t'_2).$$

Пусть дополнительно

$$\int_{T_1} k_1(x, t'_1) dt'_1 \equiv \int_{T_1} p_1(x, t'_1) dt'_1 \equiv 1 \quad \text{и} \quad \int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} dt'_2 \leq q < 1.$$

**Теорема 4.16.** *Уравнение*

$$g(x) = h(x)[2\varphi^*(x) - h(x)] + \left[ \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left( \int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right)^{1/2} dt'_1 \right]^2$$

*имеет единственное решение и плотность*

$$p_1(x, t'_1) = k_1(x, t'_1) \left[ \int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2} \bigg/ \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[ \int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1$$

*дает равномерно наименьшее значение  $\mathbf{E}\xi_x^2 \in C_b(X)$ .*

## ГЛАВА 5. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ

### 5.1. ОЦЕНКА НЕСКОЛЬКИХ ИНТЕГРАЛОВ

**5.1.1. Выбор оптимальной плотности (метод взвешенной дисперсии).** Пусть требуется вычислить  $M$  интегралов

$$I_i = \int g_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}; \quad i = 1, \dots, M. \quad (5.1)$$

Определяется плотность  $f(\mathbf{x})$  (одна и та же для всех  $i = 1, \dots, M$ ), и приближение интегралов (5.1) осуществляется согласно стандартному алгоритму 3.1:

$$I_i = \mathbf{E}\zeta^{(i)} \approx \bar{\zeta}_n^{(i)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{g_i(\boldsymbol{\xi}_j)}{f(\boldsymbol{\xi}_j)}, \quad \text{где } \zeta^{(i)} = \frac{g_i(\boldsymbol{\xi})}{f(\boldsymbol{\xi})}. \quad (5.2)$$

Следуя [1] и подразд. 4.5.2, зададимся неотрицательными вещественными константами  $a_i$  ( $i = 1, \dots, M$ ) такими, что  $\sum_{i=1}^M a_i = 1$ , и подберем плотность  $f(\mathbf{x})$  из (5.2) так, чтобы минимизировать сумму

$$D_M(\mathbf{a}; f) = \sum_{i=1}^M a_i \mathbf{D}\zeta^{(i)}(f) = \int \left( \sum_{i=1}^M \frac{a_i g_i^2(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} \right) d\mathbf{x} - \sum_{i=1}^M a_i I_i^2; \quad (5.3)$$

здесь  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_M)$ . Минимум выражения (5.3) достигается, когда минимальна величина

$$E_M^2(\mathbf{a}; f) = \int \left( \sum_{i=1}^M \frac{a_i g_i^2(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} \right) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\eta^2, \quad \text{где } \eta = \left( \sum_{i=1}^M a_i g_i^2(\boldsymbol{\xi}) \right)^{1/2} \times \frac{1}{f(\boldsymbol{\xi})}.$$

По аналогии с доказательством утверждения 3.1 (иначе говоря, согласно принципу выборки по важности) имеем  $\mathbf{D}\eta = E_M^2(\mathbf{a}; f) - \bar{I}^2(\mathbf{a}) \geq 0$  или

$$E_M^2(\mathbf{a}; f) \geq \bar{I}^2(\mathbf{a}), \quad \text{где } \bar{I}(\mathbf{a}) = \int \left( \sum_{i=1}^M a_i g_i^2(\mathbf{x}) \right)^{1/2} d\mathbf{x}. \quad (5.4)$$

Равенство в последнем соотношении достигается при

$$f(\mathbf{x}) = f_{opt}(\mathbf{x}; \mathbf{a}) = \frac{1}{\bar{I}(\mathbf{a})} \left( \sum_{i=1}^M a_i g_i^2(\mathbf{x}) \right)^{1/2} \quad \text{и} \quad D_M(\mathbf{a}; f_{opt}) = \bar{I}^2(\mathbf{a}) - \sum_{i=1}^M a_i I_i^2. \quad (5.5)$$

Как и для случая выборки по важности для одного интеграла, использование плотности (5.5) затруднительно. Возможно кусочно-полиномиальное приближение функции  $f_{opt}(\mathbf{x})$  с последующим использованием алгоритмов метода суперпозиции (см. разделы 5.3 и 1.6).

**5.1.2. Минимаксный подход.** Помимо минимизации взвешенной дисперсии (5.3) можно рассмотреть задачу из [2] о выборе плотности  $f(\mathbf{x}) = f^*(\mathbf{x})$  из (5.2), при которой достигается минимум величины  $\max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\zeta^{(i)}(f)$ . Справедливо следующее

**Утверждение 5.1** [2]. Пусть  $\xi_i(F)$  – случайные величины, связанные с вероятностной моделью  $F$  из некоторого класса допустимых моделей, и  $F_{\mathbf{a}}$  – модель, на которой достигается

$$\min_F \sum_{i=1}^M a_i \mathbf{D}\xi_i(F) = \tilde{G}_M(\mathbf{a}), \quad 0 \leq a_i < \infty, \quad \mathbf{a} = (a_1, \dots, a_M), \quad (5.6)$$

причем функции  $\mathbf{D}\xi_i(F_{\mathbf{a}})$  дифференцируемы по  $a_j$  ( $i, j = 1, \dots, M$ ) и  $\tilde{G}_M(\mathbf{a}) < \infty$  для любых  $\mathbf{a}$ . Тогда  $\min_F \max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\xi_i(F)$  достигается на  $F_{\mathbf{a}_0}$ , где  $\mathbf{a}_0$  – решение задачи

$$\max_{\mathbf{a}} \left( \sum_{i=1}^M a_i \mathbf{D}\xi_i(F) \mid \sum_{i=1}^M a_i = 1 \right).$$



Применим сформулированное утверждение для задачи выбора оптимальной минимаксной плотности  $f^*(\mathbf{x})$ . По аналогии с (5.6) введем обозначение

$$G_M(\mathbf{a}) = \min_f D_M(\mathbf{a}; f) = D_M(\mathbf{a}; f_{opt}) = \left( \int \left( \sum_{i=1}^M a_i g_i^2(\mathbf{x}) \right)^{1/2} d\mathbf{x} \right)^2 - \sum_{i=1}^M a_i I_i^2,$$

см. соотношения (5.3) – (5.5).

**Утверждение 5.2.** Пусть  $P_0 = \int \sup_{i=1, \dots, M} |g_i(\mathbf{x})| d\mathbf{x} < \infty$ . Тогда оптимальная плотность определяется равенством  $f^*(\mathbf{x}) = f_{opt}(\mathbf{x}; \mathbf{a}^*)$  (см. соотношение (5.5)), где  $\mathbf{a}^*$  – точка максимума функции  $G_M(\mathbf{a})$ .

**Доказательство.** Функция  $G_M(\mathbf{a})$  конечна для всех  $\mathbf{a}$ , т.к.  $G_M(\mathbf{a}) \leq 2P_0^2$ . Теперь убедимся в дифференцируемости по  $a_j$  функций

$$\mathbf{D}\zeta^{(i)}(f_{opt}(\mathbf{x}; \mathbf{a})) = \bar{I}(\mathbf{a})R_i(\mathbf{a}) - I_i^2, \quad \text{где} \quad R_i(\mathbf{a}) = \int g_i^2(\mathbf{x}) \left( \sum_{i=1}^M a_i g_i^2(\mathbf{x}) \right)^{-1/2} d\mathbf{x},$$

см. соотношения (5.4), (5.5). Взяв производную по  $a_j$  от подынтегральной функции в  $\bar{I}(\mathbf{a})$ , получим

$$\bar{I}^{(j)}(\mathbf{a}) = \frac{1}{2} \int g_j^2(\mathbf{x}) \left( \sum_{i=1}^M a_i g_i^2(\mathbf{x}) \right)^{-1/2} d\mathbf{x} = \frac{R_j(\mathbf{a})}{2}.$$

Подынтегральная функция в  $\bar{I}^{(j)}(\mathbf{a})$  монотонна по  $a_j$  при  $a_j \geq 0$ , поэтому проведенное дифференцирование под знаком интеграла допустимо, т.е.  $[\bar{I}(\mathbf{a})]_{a_j}' = \bar{I}^{(j)}(\mathbf{a})$ . Аналогично обосновывается дифференцируемость функции  $R_i(\mathbf{a})$ . Таким образом, все условия утверждения 5.1 выполнены и, следовательно,  $f^*(\mathbf{x}) = f_{opt}(\mathbf{x}; \mathbf{a}^*)$ .  $\square$

При вычислении двух интегралов  $I_1$  и  $I_2$  от неотрицательных функций  $g_1(\mathbf{x})$  и  $g_2(\mathbf{x})$  целесообразно рассмотреть плотность  $f_0(\mathbf{x}) = (g_1(\mathbf{x}) + g_2(\mathbf{x})) / (I_1 + I_2)$ . Поскольку  $\zeta^{(2)} = (\zeta^{(1)} + \zeta^{(2)}) - \zeta^{(1)}$  и  $\mathbf{D}(\zeta^{(1)}(f_0) + \zeta^{(2)}(f_0)) = 0$ , то  $\mathbf{D}\zeta^{(1)}(f_0) = \mathbf{D}\zeta^{(2)}(f_0)$ . Следовательно, если  $g_1(\mathbf{x})g_2(\mathbf{x}) = 0$ , то  $f^*(\mathbf{x}) = f_0(\mathbf{x})$ , так как в этом случае  $g_1^2(\mathbf{x}) + g_2^2(\mathbf{x}) = (g_1(\mathbf{x}) + g_2(\mathbf{x}))^2$ . С другой стороны,  $f_0(\mathbf{x})$  оптимальна, если  $g_1(\mathbf{x}) \equiv g_2(\mathbf{x})$ . Поэтому можно ожидать, что плотность  $f_0(\mathbf{x})$  дает хороший результат в широком классе случаев.

### 5.1.3. Общая погрешность при использовании независимых испытаний.

Теперь рассмотрим ситуацию, когда для приближения каждого из интегралов  $I_i$  используется своя плотность  $f_i(\mathbf{x})$  и соответствующий алгоритм 3.1:

$$I_i = \mathbf{E}\beta^{(i)} \approx \bar{\beta}_{n_i}^{(i)} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \beta_j^{(i)} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{g_i(\boldsymbol{\xi}_j^{(i)})}{f_i(\boldsymbol{\xi}_j^{(i)})}, \quad \text{где} \quad \beta^{(i)} = \frac{g_i(\boldsymbol{\xi}^{(i)})}{f_i(\boldsymbol{\xi}^{(i)})}; \quad (5.7)$$

здесь каждый из векторов  $\boldsymbol{\xi}^{(i)}$  распределен согласно своей плотности  $f_i(\mathbf{x})$ ;  $i = 1, \dots, M$ .

Преимуществом использования независимых оценок  $\{\beta^{(i)}\}$  из (5.7) является то, что за счет специального выбора плотностей  $\{f_i(\mathbf{x})\}$  имеется возможность понизить трудоемкость оценок. В частности, можно уменьшать дисперсии  $\{\mathbf{D}\beta^{(i)}\}$  согласно принципу выборки по важности (годятся и другие приемы уменьшения трудоемкости из главы 3). В зависимости от величин дисперсий  $\{\mathbf{D}\beta^{(i)}\}$  можно также варьировать числа испытаний  $\{n_i\}$  (там, где дисперсия невелика, можно брать меньше испытаний). В качестве основного недостатка независимых оценок  $\{\beta^{(i)}\}$  можно отметить необходимость моделирования своей отдельной выборки  $\beta_1^{(i)}, \dots, \beta_{n_i}^{(i)}$  для каждого  $i$  (этот недостаток может

превратиться в достоинство, если в вычислениях использовать параллельные компьютерные системы).

В теории дискретно-стохастических численных методов (см. далее разд. 5.3, а также [3]) важным является вопрос о том, как изменяется максимальная вероятностная погрешность

$$\Delta_M = \max_{i=1,\dots,M} \delta_{n_i}^{(i)} = \max_{i=1,\dots,M} |\bar{\beta}_{n_i}^{(i)} - I_i| \quad (5.8)$$

с ростом  $M$  (здесь плотности  $\{f_i(\mathbf{x})\}$  фиксированы). По аналогии с выкладками из подразд. 3.1.2 имеем

$$\Delta_M = \max_{i=1,\dots,M} \left| \frac{S_{n_i}^{(i)} - n_i I_i}{n_i} \right| \leq \frac{\bar{\sigma}}{\sqrt{\bar{n}}} \max_{i=1,\dots,M} \left| \frac{S_{n_i}^{(i)} - n_i \mathbf{E}\beta^{(i)}}{\sigma_i \sqrt{n_i}} \right|,$$

где

$$S_{n_i}^{(i)} = \beta_1^{(i)} + \dots + \beta_{n_i}^{(i)}; \quad \bar{n} = \min_{i=1,\dots,M} n_i; \quad \bar{\sigma} = \max_{i=1,\dots,M} \sigma_i, \quad \sigma_i = \sqrt{\mathbf{D}\beta^{(i)}}.$$

Из центральной предельной теоремы следует, что при достаточно большом  $\bar{n}$  случайные величины  $(S_{n_i}^{(i)} - n_i \mathbf{E}\beta^{(i)}) / (\sigma_i \sqrt{n_i})$  близки по распределению к стандартным нормальным случайным величинам  $w_i \in N(0, 1)$ . Поэтому для малого  $\varepsilon > 0$  найдется величина  $A(M, \varepsilon)$ , для которой выполнено соотношение

$$\mathbf{P} \left( \Delta_M \leq A(M, \varepsilon) \frac{\bar{\sigma}}{\sqrt{\bar{n}}} \right) \approx \mathbf{P} \left\{ \max_{i=1,\dots,M} |w_i| \leq A(M, \varepsilon) \right\} \geq 1 - \varepsilon.$$

Теперь исследуем вопрос о том, как зависит величина  $A(M, \varepsilon)$  от  $M$ .

Изучим сначала распределение величины  $w_M^{(M)} = \max_{i=1,\dots,M} w_i$ . Это  $M$ -я порядковая статистика из набора  $w_1, \dots, w_M$  независимых стандартных нормальных случайных величин. В теории порядковых статистик для такого максимума справедливо следующее

**Утверждение 5.3** [4]. *Асимптотическое при  $M \rightarrow \infty$  распределение максимума  $w_M^{(M)}$  таково, что*

$$\mathbf{P} \left( a_M \left( w_M^{(M)} - b_M \right) \leq y \right) \rightarrow \exp(-\exp(-y)),$$

где  $a_M = (2 \ln M)^{1/2}$ ,  $b_M = (2 \ln M)^{1/2} - \frac{1}{2}(2 \ln M)^{-1/2}(\ln \ln M + \ln 4\pi)$ .

Далее имеем  $\min(w_1, \dots, w_M) = -\max(-w_1, \dots, -w_M)$  и

$$\max_{i=1,\dots,M} |w_i| = \max \left( \max_{i=1,\dots,M} w_i, -\min_{i=1,\dots,M} w_i \right).$$

Учитывая симметрию распределения стандартных нормальных случайных величин  $\{w_i\}$  относительно нуля, можно утверждать, что для достаточно больших  $M$  выполнено

$$\mathbf{P} \left( a_M \left( \max_{i=1,\dots,M} |w_i| - b_M \right) \leq y \right) \approx \exp(-2 \exp(-y)).$$

Выберем число  $y_0(\varepsilon)$ , для которого выполнено равенство  $\exp(-2 \exp(-y_0(\varepsilon))) = 1 - \varepsilon$  и рассмотрим неравенство

$$a_M \left( \max_{i=1,\dots,M} |w_i| - b_M \right) \leq y_0(\varepsilon),$$

которое равносильно  $\max_{i=1, \dots, M} |w_i| \leq y_0(\varepsilon)/a_M + b_M$  или

$$\max_{i=1, \dots, M} |w_i| \leq (2 \ln M)^{1/2} + (2 \ln M)^{-1/2} \left( y_0(\varepsilon) - \frac{\ln 4\pi}{2} - \frac{\ln \ln M}{2} \right).$$

Таким образом, для больших  $\bar{n}$  и  $M$  выполнено

$$A(M, \varepsilon) \approx (2 \ln M)^{1/2} + (2 \ln M)^{-1/2} \left( H(\varepsilon) - \frac{\ln \ln M}{2} \right), \quad \text{где } H(\varepsilon) = y_0(\varepsilon) - \frac{\ln 4\pi}{2}.$$

Более точно окончательный вывод можно сформулировать следующим образом.

**Утверждение 5.4.** *Для любого  $\varepsilon > 0$  существуют натуральное  $M_0$  и действительная константа  $H(\varepsilon)$  такие, что для всякого  $M > M_0$  найдется натуральное число  $n_0(M)$  такое, что для всех  $\bar{n} > n_0(M)$  выполнено*

$$\mathbf{P} \left( \Delta_M \leq \sqrt{\frac{\bar{\sigma}}{\bar{n}}} \left( (2 \ln M)^{1/2} + \left( (2 \ln M)^{-1/2} \left( H(\varepsilon) - \frac{\ln \ln M}{2} \right) \right) \right) \right) > 1 - \varepsilon. \quad (5.9)$$

Таким образом, максимальная вероятностная погрешность  $\Delta_M$  из (5.8) растет при увеличении числа интегралов  $M$ , однако скорость этого роста относительно невелика: ее порядок  $(\ln M)^{1/2}$ .

## 5.2. МЕТОД ЗАВИСИМЫХ ИСПЫТАНИЙ

**5.2.1. Приближение интегралов, зависящих от параметра.** Рассмотрим задачу глобального приближения функции, представляющей собой интеграл, зависящий от параметра

$$\varphi_1(\mathbf{x}) = \int g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad \mathbf{x} \in X \subset R^s, \quad \mathbf{x}' \in R^l. \quad (5.10)$$

В дальнейшем будем полагать, что  $X$  – выпуклая ограниченная область с границей в  $R^s$ . Выберем плотность  $f(\mathbf{x}')$  в  $R^l$  такую, что

$$f(\mathbf{x}') \geq 0, \quad \int f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1; \quad f(\mathbf{x}') \neq 0 \quad \text{при } g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \neq 0$$

для всех  $\mathbf{x} \in X$ .

**Алгоритм 5.1.** *Строим приближение функции  $\varphi_1(\mathbf{x})$  из (5.10) по формуле*

$$\varphi_1(\mathbf{x}) = \mathbf{E}\zeta(\mathbf{x}) \approx Z_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_j)}{f(\boldsymbol{\xi}_j)}, \quad \text{где } \zeta(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})}{f(\boldsymbol{\xi})}, \quad (5.11)$$

для всех  $\mathbf{x} \in X$ . Здесь  $\{\boldsymbol{\xi}_j\}$  – выборочные значения случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$ , распределенного согласно плотности  $f(\mathbf{x}')$ .

Алгоритм 5.1 называется *методом зависимых испытаний для приближения интеграла, зависящего от параметра*. Впервые этот метод был предложен в работе [5]. Заметим, что процедура (5.2) вычисления нескольких интегралов (5.1), рассмотренная в подразд. 5.1.1, является "дискретным" аналогом алгоритма 5.1, в котором параметр  $\mathbf{x} = i$  принимает конечное число значений  $1, \dots, M$ .

Алгоритм 5.1 достаточно часто используется как один из этапов *дискретно-стохастической численной процедуры* приближения функции  $\varphi_1(\mathbf{x})$ , которая строится следующим образом (см. [3], а также алгоритм 5.3 из подразд. 5.3.5).

Вводится сетка  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$  в  $X$  и приближенно вычисляются значения  $\{\varphi_1(\mathbf{x}_1), \dots, \varphi_1(\mathbf{x}_M)\}$  методом Монте-Карло. Здесь могут быть использованы различные – зависимые, независимые, слабо зависимые и др. – оценки. В частности, годится формула (5.11):  $\varphi_1(\mathbf{x}_i) \approx \bar{\zeta}_n(\mathbf{x}_i)$ , а также соотношение (5.7) из разд. 5.1. Затем происходит восполнение функции  $\varphi_1(\mathbf{x})$  по полученным приближенным значениям в узлах сетки.

Проблемы, возникающие при построении таких алгоритмов (подбор восполнения, исследование погрешности, согласованный выбор параметров и т.п.), подробно исследуются далее в подразд. 5.3.5–5.3.8.

**5.2.2. Приближение решения интегрального уравнения второго рода.** В качестве второго важного примера использования метода зависимых испытаний рассмотрим задачу приближения решения  $\varphi_2(x)$  интегрального уравнения Фредгольма второго рода на некотором ограниченном подмножестве  $X \subset R^l$

$$\varphi_2(x) = \int k(x', x)\varphi_2(x') dx' + f(x) \quad \text{или} \quad \varphi_2 = K\varphi_2 + f \quad (5.12)$$

(см. соотношение (4.1)). Здесь  $x, x' \in R^l$  могут быть как скалярными (для  $l = 1$ ), так и векторными (при  $l > 1$ ); однако для простоты мы используем "скалярные" обозначения (нежирные буквы). Заметим, что при фиксированном  $x$  слагаемое  $\int k(x', x)\varphi_2(x') dx'$  в правой части уравнения (5.12) имеет вид линейного функционала  $I_h(x) = (\varphi_2, h_x) = \int \varphi_2(x')h_x(x') dx'$  (см. формулу (4.3)), где  $h_x(x') = k(x', x)$ . Следовательно, используя алгоритм приближения функционалов  $I_h$ , связанный с конструированием стандартной оценки по столкновениям (см. соотношения (4.7) и (4.12)), можно построить следующий

**Алгоритм 5.2.** *Строим приближение решения  $\varphi_2(x)$  уравнения (5.12) по формуле*

$$\varphi_2(x) = \mathbf{E}\xi(x) \approx \tilde{Z}_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_m^{(j)} k(x_m^{(j)}, x) + f(x), \quad \text{где} \quad \xi(x) = \sum_{m=0}^N Q_m k(x_m, x) + f(x). \quad (5.13)$$

Здесь  $\{x_0^{(j)}, x_1^{(j)}, \dots, x_{N_j}^{(j)}\}$  –  $j$ -я реализация траектории однородной цепи Маркова  $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ , имеющей плотность начального распределения  $\pi(x)$ , переходную плотность  $p(x', x)$  и случайный номер обрыва траектории  $N$ . Веса  $Q_m^{(j)}$  вычисляются рекуррентно:

$$Q_0^{(j)} = \frac{f(x_0^{(j)})}{\pi(x_0^{(j)})}; \quad Q_m^{(j)} = Q_{m-1}^{(j)} \frac{k(x_{m-1}^{(j)}, x_m^{(j)})}{p(x_{m-1}^{(j)}, x_m^{(j)})}.$$

Алгоритм 5.2 можно назвать *методом зависимых испытаний для приближения решения интегрального уравнения второго рода* [3]. При фиксированном  $x$  случайная величина  $\xi(x)$  носит название *локальной оценки* (см. [1] и подразд. 4.3.2). Алгоритм 5.2 позволяет получать *глобальное* приближение функции  $\varphi_2(x)$  во всей области  $X$ . Однако для большинства важных приложений ядра  $k(x', x)$  операторов  $K$  соответствующих уравнений вида (5.12) имеют особенности (выражаемые чаще всего в терминах дельта-функций) по аргументу  $x$ , что не позволяет подсчитывать значения функции  $\xi_n(x)$  для всех  $x \in X$ . Это обуславливает относительно редкое применение "глобального" алгоритма 5.2. Приближение (5.13) используется, как правило, только в малой окрестности  $\Delta_{\tilde{x}}$  выбранной точки  $\tilde{x} \in X$  (отсюда и термин *локальная оценка*), при этом используется некоторое продолжение функции  $k(\cdot, x)$ , содержащей особенности, на всю подобласть  $\Delta_{\tilde{x}}$ .

Как и в случае приближения интеграла, зависящего от параметра, алгоритм 5.2 может быть включен в соответствующую дискретно-стохастическую процедуру (алгоритм 5.3) выполнения функции  $\varphi_2(x)$  по приближенным значениям этой функции в узлах сетки (см. [3] и подразд. 5.2.1, 5.3.5). Для таких процедур в узлах сетки можно применять отличные от (5.13) стохастические оценки: метод сопряженных блужданий (4.11), метод полигона частот (см. далее подразд. 5.3.8) и др.

Сразу отметим, что в данной главе теорию метода зависимых испытаний и соответствующих ему дискретно-стохастических численных процедур мы будем более подробно рассматривать на примере функции  $\varphi_1(\mathbf{x})$  из (5.10) (т.е. для интеграла, зависящего от параметра), а случай приближения решения  $\varphi_2(x)$  интегрального уравнения (5.12), по существу аналогичный, но содержащий больше технических деталей, будет рассматриваться схематически, без подробных обоснований.

**5.2.3. Сходимость метода зависимых испытаний.** Рассмотрим случайное поле  $\zeta(\mathbf{x})$  из (5.11), а также случайную функцию  $\tilde{\zeta}(\mathbf{x}) = \zeta(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in X$ .

Предполагая, что  $\{\xi_j\}$  – независимые, распределенные согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ , случайные векторы, получаем, что  $Z_n(\mathbf{x}) = (1/n) \sum_{j=1}^n \zeta_j(\mathbf{x})$ , где  $\zeta_j(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}, \xi_j)/f(\xi_j)$  – независимые, распределенные как  $\zeta(\mathbf{x})$ , случайные функции. Кроме того, заметим, что

$$Z_n(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\zeta_j(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x})) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \tilde{\zeta}_j(\mathbf{x}). \quad (5.14)$$

Рассмотрим последовательность

$$\Xi_n(\mathbf{x}) = \sqrt{n} (Z_n(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x})) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n \tilde{\zeta}_j(\mathbf{x}).$$

**Утверждение 5.5.** Пусть траектории случайной функции  $\tilde{\zeta}(\mathbf{x})$  с вероятностью единица непрерывны на  $X$ , существует положительная константа  $H_1$  такая, что

$$\mathbf{D}\zeta(\mathbf{x}) < H_1 \quad \text{для всех } \mathbf{x} \in X, \quad (5.15)$$

и, кроме того, выполнено **условие (5.16):**

для любого  $k : 1 \leq k \leq s$  существуют производные

$$\frac{\partial^k \tilde{\zeta}(x_1, \dots, x_s)}{\partial x_1^{m_1} \dots \partial x_l^{m_l}}, \quad m_i = 0 \text{ или } m_i = 1, \quad m_1 + \dots + m_l = k$$

(смешанные производные порядка  $k$ , по каждой координате не более первого порядка) в средней степени  $p$  ( $p > 1$ ), ограниченные на  $X$  константой  $H_2$ .

Тогда найдется положительная константа  $H_3$  такая, что для любого  $\varepsilon > 0$  существует натуральное число  $N(\varepsilon)$  такое, что при  $n > N(\varepsilon)$  выполнено

$$\mathbf{P} \left( \sup_{\mathbf{x} \in X} |Z_n(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x})| \leq \frac{H_3}{\sqrt{n}} \right) > 1 - \varepsilon, \quad (5.17)$$

то есть метод зависимых испытаний имеет погрешность порядка  $n^{-1/2}$  (по вероятности).

**Доказательство.** Покажем, что требования (5.15), (5.16) являются достаточными условиями слабой сходимости последовательности  $\{\Xi_n(\mathbf{x})\}$  в  $C(X)$  к непрерывной по вероятности гауссовской случайной функции  $\Xi(\mathbf{x})$  с нулевым средним и ковариациями

$\mathbf{E}\Xi(\mathbf{x}_1)\Xi(\mathbf{x}_2) = \mathbf{E}\tilde{\zeta}(\mathbf{x}_1)\tilde{\zeta}(\mathbf{x}_2)$ , где  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in X$ . При этом будем проверять условия утверждения 2.4 из раздела 2.3. Из условия (5.15) получаем, что функция  $\mathbf{D}\tilde{\zeta}(\mathbf{x})$  ограничена на  $X$ . Тогда сходимость конечномерных распределений последовательности  $\{\Xi_n(\mathbf{x})\}$  к гауссовским распределениям следует из центральной предельной теоремы для одинаково распределенных случайных векторов [6]. Далее, из условия (5.16) следует, что для случайных функций  $\{\Xi_n(\mathbf{x})\}$  выполнены дифференциальные условия слабой сходимости. Таким образом, условия утверждения 2.4 выполнены и последовательность  $\{\Xi_n(\mathbf{x})\}$  к непрерывной гауссовской случайной функции  $\Xi(\mathbf{x})$ . Согласно утверждению 2.8 из разд. 2.3 и соотношению

$$\sup_{\mathbf{x} \in X} |z(\mathbf{x})| = \max \left( \sup_{\mathbf{x} \in X} z(\mathbf{x}), \sup_{\mathbf{x} \in X} (-z(\mathbf{x})) \right)$$

получаем, что функционал  $F(z) = \sup_{\mathbf{x} \in X} |z(\mathbf{x})|$  непрерывен в метрике  $\rho_C$ . Тогда из слабой сходимости последовательности  $\{\Xi_n(\mathbf{x})\}$  к  $\Xi(\mathbf{x})$  следует, что

$$\mathbf{P} \left( \sup_{\mathbf{x} \in X} |Z_n(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x})| \leq \frac{H_3}{\sqrt{n}} \right) = \mathbf{P} \left( \sup_{\mathbf{x} \in X} |\Xi_n(\mathbf{x})| \leq H_3 \right) \rightarrow \mathbf{P} \left( \sup_{\mathbf{x} \in X} |\Xi(\mathbf{x})| \leq H_3 \right)$$

при  $n \rightarrow \infty$ . Из последнего соотношения следует (5.17), так как непрерывная (с вероятностью 1) функция  $\Xi(\mathbf{x})$  ограничена (с вероятностью 1) на  $X$  некоторой константой, которую следует взять в качестве  $H_3$ .  $\square$

Проверка условий (5.15) и (5.16) достаточно проста для случая, когда интегрирование по  $\mathbf{x}'$  происходит по ограниченной области  $X' \in R^l$ : достаточно требовать непрерывности функции  $g(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  по параметру  $\mathbf{x}$  и отделенности плотности  $f(\mathbf{x})$  от нуля.

Аналог утверждения 5.5 можно получить и для алгоритма 5.2: вместо  $\zeta(\mathbf{x})$  нужно взять  $\xi(x)$  из (5.13), вместо  $\tilde{\zeta}(\mathbf{x})$  – случайную функцию  $\tilde{\xi}(x) = \xi(x) - \varphi_2(x)$  и т.д. Несколько сложнее выражаются условия утверждения 5.5 в терминах ядра  $k(x', x)$  и свободного члена  $f(x)$  уравнения (5.12).

Отметим также, что дифференциальное условие (5.16) можно ослабить. Например, используя то обстоятельство, что предельная функция  $\Xi(\mathbf{x})$  гауссовская, с помощью достаточно тонких предельных теорем для последовательностей случайных функций (в частности, теоремы Джейна–Маркуса) можно получить следующее (по-видимому, наиболее слабое) условие функциональной сходимости  $\{\Xi_n(\mathbf{x})\}$  к  $\Xi(\mathbf{x})$  в  $C(X)$ : *найдется  $a > 0$  и случайная величина  $\kappa > 0$  с конечным вторым моментом такие, что соотношение  $|\zeta(\mathbf{x}_1) - \zeta(\mathbf{x}_2)| < \kappa \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_s^a$  выполнено для всех  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in X$  [7].*

Кроме того, соотношения вида (5.17)  $\mathbf{P} (\|Z_n(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x})\|_B \leq H_4 n^{-1/2}) > 1 - \varepsilon$  можно получать для других (отличных от  $C(X)$ ) нормированных функциональных пространств  $B$ , при этом несколько изменятся условия слабой сходимости  $\{\Xi_n(\mathbf{x})\}$  к  $\Xi(\mathbf{x})$ , а утверждение о непрерывности функционала  $F(z) = \|z\|_B$  в пространстве  $B$  доказывается аналогично утверждению 2.8 из разд. 2.3. Чаще всего рассматривается пространство  $B = C^r(X)$  (и его обобщенный аналог – пространства С.Л.Соболева  $W_2^r(X)$ ), так как метод зависимых испытаний весьма эффективен при приближении производных функции  $\varphi_1(\mathbf{x})$  по параметру  $\mathbf{x}$  или его компонентам [7].

**5.2.4. Выбор оптимальной плотности (континуальный аналог метода взвешенной дисперсии).** Имеется определенная трудность определения того, что следует считать критерием (т.е. какую величину следует минимизировать) при определении оптимальной плотности  $f(\mathbf{x})$ . Можно действовать по аналогии с дискретным случаем – см. соотношение (5.2). Если положить  $a_i = \text{mes } X_i$ , где  $X_1 \cup \dots \cup X_M = X$  – разбиение области  $X$  на простые подобласти и  $g_i(\mathbf{x}') = g(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}')$  для  $\mathbf{x}_i \in X_i$ , то величина  $D_M(\mathbf{a}, f)$

представляет собой кубатурную формулу

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M a_i \mathbf{D}\zeta(\mathbf{x}_i) &\approx \int_X \mathbf{D}\zeta(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_X \mathbf{E}(\zeta(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} = \\ &= \mathbf{E} \int_X (\zeta(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} = \mathbf{E} \|\zeta(\mathbf{x}) - \varphi_1(\mathbf{x})\|_{L_2(X)}^2; \end{aligned} \quad (5.18)$$

здесь использован вероятностный вариант теоремы Фубини о перестановке операций интегрирования и взятия математического ожидания. По этой же аналогии (см. соотношение (5.5))

$$f_{opt}(\mathbf{x}') = \frac{\|g(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\|_{L_2(X)}}{\int \|g(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\|_{L_2(X)} d\mathbf{x}'} \quad (5.19)$$

Точно такой же вид оптимальной плотности (с точностью до замены  $L_2(X)$  на  $W_2^r(X)$ ) получается для соболевских пространств  $W_2^r(X)$ . Приведем также выражения для оптимальных начальной и переходной плотностей, аналогичных (5.19), для случая решения задачи (5.12):

$$\pi_{opt}(x) = \frac{f(x)\tau(x)}{\int f(y)\tau(y) dy}; \quad p_{opt}(x', x) = \frac{k(x', x)\tau(x)}{\int k(x', y)\tau(y) dy},$$

где функция  $\tau(x)$  является решением уравнения

$$\tau^2(x) = \left( \int k(x, y)\tau(y) dy \right)^2 + \int k(y, x)(2\varphi_{2,x}^*(y) - k(y, x)) dy,$$

а функция  $\varphi_{2,x}^*(y)$  является решением сопряженного для (5.12) уравнения

$$\varphi_{2,x}^*(y) = \int k(y, z)\varphi_{2,x}^*(z) dz + k(y, x).$$

Заметим, что приведенные выражения являются континуальными аналогами соотношений из подразд. 4.5.2. Прямое использование оптимальных плотностей затруднительно. Возможно кусочно-полиномиальное приближение функций  $\pi_{opt}(x)$  и  $p_{opt}(x', x)$  с последующим использованием алгоритмов метода суперпозиции (см. разделы 5.3 и 1.6).

**5.2.5. Минимаксный подход.** По аналогии с рассуждениями подразд. 5.1.2 можно рассмотреть задачу выбора плотности  $f(\mathbf{x}') = f^*(\mathbf{x}')$  из (5.11), при которой достигается минимум величины  $\sup_{\mathbf{x} \in X} \mathbf{D}\zeta(\mathbf{x}; f)$ . Для простоты полагаем, что  $\mathbf{x} = x \in [A, B] \subset R$ . Обозначим

$$P_0 = \int \left( \sup_{x \in [A, B]} |g(x, \mathbf{x}')| \right) d\mathbf{x}'; \quad \Phi^2(\mathbf{x}') = \inf_M \sum_{i=1}^{M+1} a_i^* g^2(x_i, \mathbf{x}'),$$

где  $\{x_i = A + (i-1)h; h = (B-A)/M\}$  – равномерная сетка на  $[A, B]$ , а  $\mathbf{a}^* = (a_1^*, \dots, a_M^*, a_{M+1}^*)$  – точка максимума функции

$$G_{M+1}(\mathbf{a}) = \left( \int \left( \sum_{i=1}^{M+1} a_i g^2(x_i, \mathbf{x}') \right)^{1/2} d\mathbf{x}' \right)^2 - \sum_{i=1}^{M+1} a_i \left( \int g(x_i, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \right)^2; \quad a_i \geq 0; \quad \sum_{i=1}^{M+1} a_i = 1.$$

Справедлив следующий аналог утверждения 5.2.

**Утверждение 5.6** [2]. Если  $P_0 < \infty$ ,  $|g(x, \mathbf{x}')g'_x(x, \mathbf{x}')| \leq h(\mathbf{x}')$  и интегралы

$$\int \frac{g^2(x, \mathbf{x}')}{\Phi(\mathbf{x}')} d\mathbf{x}', \quad \int \frac{h(\mathbf{x}')}{\Phi(\mathbf{x}')} d\mathbf{x}' \quad \text{конечны, то}$$

$$f^*(\mathbf{x}') = f(\mathbf{x}'; \Lambda^*) = \frac{\left( \int_A^B g^2(x, \mathbf{x}') \Lambda^*(dx) \right)^{1/2}}{\int \left( \int_A^B g^2(x, \mathbf{x}') \Lambda^*(dx) \right)^{1/2} d\mathbf{x}'};$$

здесь  $\Lambda^*$  – точка максимума функции  $G(\Lambda)$ , определяемой аналогично  $G_{M+1}(\mathbf{a})$  с заменой сумм на интегралы по мере  $\Lambda(dx)$ :

$$G(\Lambda) = \left( \int \left( \int_A^B g^2(x, \mathbf{x}') \Lambda(dx) \right)^{1/2} d\mathbf{x}' \right)^2 - \int_A^B \varphi_1^2(x) \Lambda(dx).$$

На практике используют плотность из утверждения 5.2:

$$f(\mathbf{x}') = \frac{1}{\bar{I}(\mathbf{a}^*)} \left( \sum_{i=1}^{M+1} a_i^* g^2(x_i, \mathbf{x}') \right)^{1/2}$$

для достаточно большого числа  $(M + 1)$  узлов равномерной сетки на  $[A, B]$ . Изучение ряда примеров показало, что иногда целесообразно использовать в качестве плотности  $f(\mathbf{x}')$  функцию  $f_0(\mathbf{x}') = (\sup_{x \in [A, B]} |g(x, \mathbf{x}')|) / P_0$ , при этом справедлива оценка

$$\mathbf{D}\zeta(x; f_0) \leq \tilde{\varphi}_1(x) \left( P_0 - \frac{\varphi_1^2(x)}{\tilde{\varphi}_1(x)} \right), \quad \text{где} \quad \tilde{\varphi}_1(x) = \int |g(x, \mathbf{x}')| d\mathbf{x}'.$$

### 5.3. ДИСКРЕТНО-СТОХАСТИЧЕСКИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

**5.3.1. Комбинированные численные методы.** Традиционно методы Монте-Карло рассматриваются в качестве альтернативных "детерминированным" численным методам (в частности, конечно-разностным и конечно-элементным схемам). Однако во многих случаях эффективными оказываются смешанные алгоритмы, содержащие в себе элементы детерминированных и стохастических численных схем. Такие комбинированные алгоритмы можно назвать *дискретно-стохастическими численными методами* [3].

**5.3.2. Смешанные методы моделирования случайных величин.** Целесообразность применения комбинированных алгоритмов обнаруживается уже на уровне моделирования случайных величин. При получении выборочных значений непрерывных случайных величин (в частности, при использовании гистограмм, полигонов частот и других приближений плотностей, а также при построении методов исключения, в том числе, двусторонних – см. разд. 1.7, 1.8) требуется моделировать случайные векторы  $\boldsymbol{\xi}$  согласно плотности распределения вида

$$f(\mathbf{x}) = HL_M g(\mathbf{x}) = H \sum_{m=1}^M w_m(\mathbf{g}) \chi_m(\mathbf{x}), \quad (5.20)$$

на компактном множестве  $X \subseteq R^l$ ; здесь  $H$  – нормирующая константа. В формуле (5.20)  $L_M g(\mathbf{x})$  обозначает аппроксимацию (или интерполяцию) неотрицательной функции  $g(\mathbf{x})$  на сетке  $X^{(M)} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$ . Базисные функции  $\Xi^{(M)} = \{\chi_1(\mathbf{x}), \dots, \chi_M(\mathbf{x})\}$



и коэффициенты  $W^{(M)} = \{w_1(\mathbf{g}), \dots, w_M(\mathbf{g})\}$  являются комбинациями значений  $\mathbf{g} = (g(\mathbf{x}_1), \dots, g(\mathbf{x}_M))$ . Базис  $\Xi^{(M)}$  и коэффициенты выбираются таким образом, что функция  $f(\mathbf{x})$  близка к функции  $Hg(\mathbf{x})$  в некоторой функциональной норме и аппроксимация (5.20) устойчива. Дополнительным требованием является наличие эффективного алгоритма реализации выборочных значений вектора  $\xi$  согласно распределению (5.20) (в этом случае мы будем называть базис  $\Xi^{(M)}$  "моделируемым").

Пусть

$$\chi_m(\mathbf{x}) \geq 0 \text{ для } \mathbf{x} \in R^l \text{ и } w_m(\mathbf{g}) \geq 0, \quad m = 1, \dots, M. \quad (5.21)$$

Тогда можно записать плотность (5.20) в виде

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M p_m f_m(\mathbf{x}); \quad f_m(\mathbf{x}) = \frac{\chi_m(\mathbf{x})}{Y_m}, \quad Y_m = \int \chi_m(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad p_m = H w_m(\mathbf{g}) Y_m. \quad (5.22)$$

Это позволяет применить алгоритм метода суперпозиции (см. алгоритм 1.20 из разд. 1.6): выбираем номер  $i$  согласно вероятностям  $\{p_m\}$  и реализуем выборочное значение вектора получения выборочного значения вектора  $\xi$  согласно плотности  $f_i(\mathbf{x})$ . Таким образом, помимо (5.21) следует требовать, чтобы для плотностей  $\{f_m(\mathbf{x})\}$  из (5.22) имелись алгоритмы численного статистического моделирования.

**5.3.3. Аппроксимация Стренга-Фикса и ее свойства.** Если провести сравнение различных аппроксимационных базисов  $\Xi^{(M)}$  с точки зрения сформулированных требований, то наилучшей оказывается конечно-элементная *аппроксимация Стренга-Фикса*, которая строится следующим образом [8, 9]. Для простоты возьмем в качестве  $X$  прямоугольный параллелепипед

$$X = \{\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(l)} \in R^l \mid a_k \leq x^{(k)} \leq b_k, \quad k = 1, \dots, l\}.$$

Предположим, что в  $R^l$  задана равномерная прямоугольная сетка, и каждому узлу  $\mathbf{x}_i$  из  $X^{(M)}$  можно сопоставить мультииндекс  $\bar{j}_{(i)} = (j_{(i)}^{(1)}, \dots, j_{(i)}^{(l)})$  так, что  $\mathbf{x}_i = (j_{(i)}^{(1)}h, \dots, j_{(i)}^{(l)}h)$ , где  $h$  – шаг сетки. Заметим, что величина  $h$  пропорциональна  $1/M^{1/l}$ . Аппроксимация Стренга-Фикса определяется базисом

$$\chi_i(\mathbf{x}) = \chi_{(j_{(i)}^{(1)} \dots j_{(i)}^{(l)})}(x^{(1)}, \dots, x^{(l)}) = \chi_{j_{(i)}^{(1)}}(x^{(1)}) \times \dots \times \chi_{j_{(i)}^{(l)}}(x^{(l)}), \quad (5.23)$$

где  $\chi_{j_{(i)}^{(m)}}(x^{(m)}) = \chi(x^{(m)}/h - j_{(i)}^{(m)})$ , а  $\chi(x)$  – финитная, одинаковая для всех координат, *производящая функция*. Как правило, в качестве производящей функции выбирают  $B$ -сплайн  $\beta^{(r)}(x)$  порядка  $r$  (см. определение 1.5 из разд. 1.8). Здесь уместно заметить, что использование  $B$ -сплайнов имеет большое преимущество с точки зрения эффективной "моделируемости" случайных векторов с плотностью (5.20) в силу утверждения 1.17 из разд. 1.8.

Как правило, в качестве производящей функции используются сплайны первого порядка (или "функции-крышки"), в этом случае приближение  $L_M g(\mathbf{x})$  из (5.20) называется *мультилинейной аппроксимацией* функции  $g(\mathbf{x})$ . Следующее утверждение отражает аппроксимационные свойства приближения (5.20) с базисом (5.23).

**Утверждение 5.7** [9]. Пусть  $g(\mathbf{x}) \in C^{p+1}(X)$  и  $\chi(x) \in C^p(R)$ , тогда найдутся такие коэффициенты  $w_m(\mathbf{g})$  в (5.20), что справедлива оценка

$$\rho_{C^s(X)}(g, L_M g) \leq H_s h^{p+1-s} \|g\|_{C^{p+1}(X)}, \quad 0 \leq s \leq p,$$

где константы  $H_s$  не зависят от  $g(\mathbf{x})$  и  $h$ .

Из этого утверждения можно сделать вывод, что для получения более высокого порядка по  $h$  оценки погрешности аппроксимации Стрэнга–Фикса следует выбирать более гладкие производящие функции. Для мультилинейной аппроксимации оптимальный порядок сходимости в утверждении 5.7 дают коэффициенты  $w_m(\mathbf{g}) = g(\mathbf{x}_m)$ , и тогда  $L_M g(\mathbf{x}_m) = g(\mathbf{x}_m)$ . При этом  $\chi(x) = \beta^{(1)}(x) \in C^0(R)$  и для  $g(\mathbf{x}) \in C^1(X)$  получаем  $\rho_{C^0(X)}(g, L_M g) \leq H_0 h \|g\|_{C^1(X)}$ . Можно показать, что при  $g(\mathbf{x}) \in C^2(X)$  погрешность мультилинейной аппроксимации  $\rho_{C^0(X)}(g, L_M g)$  пропорциональна  $h^2$  [9]. В случае  $r > 1$  выбор подходящих коэффициентов  $\{w_m(\mathbf{g})\}$  в (5.20) более сложен. Существуют алгоритмы построения интерполирующей сплайн-функции, то есть сплайна, проходящего через значения функции в узлах. Однако в многомерном случае не удается получить, как в случае мультилинейной аппроксимации, явных формул для вычисления коэффициентов интерполирующей сплайн-функции. Это затрудняет реализацию таких алгоритмов на ЭВМ и, кроме того, усложняет рассмотрение устойчивости погрешности аппроксимации к возможной ошибке задания значений функции в узлах сетки.

Теперь сформулируем свойство "сноса погрешности в узлы" для мультилинейной аппроксимации, которое обосновывает устойчивость мультилинейной аппроксимации к погрешности задания значений функции в узлах.

**Утверждение 5.8.** Пусть заданы две функции  $g(\mathbf{x}), \tilde{g}(\mathbf{x}) \in C^0(X)$ , тогда для мультилинейной аппроксимации имеет место неравенство

$$\sup_{\mathbf{x} \in X} \rho_{C^0(X)}(L_M g, L_M \tilde{g}) \leq \max_{m=1, \dots, M} |g(\mathbf{x}_m) - \tilde{g}(\mathbf{x}_m)|.$$

В одномерном случае при  $X = [0, 1] \subset R$  неплохими свойствами аппроксимации и "моделируемости" обладает аппроксимация Бернштейна с базисными функциями

$$\chi_m(x) = C_n^m x^m (1-x)^{n-m}, \quad m = 0, 1, \dots, M; \quad 0 \leq x \leq 1.$$

**5.3.4. Дискретно-стохастические схемы численного интегрирования.** Укажем несколько модификаций (связанных с уменьшением трудоемкости  $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ ) стандартного алгоритма метода Монте-Карло для вычисления интеграла

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta; \quad \zeta = \frac{g(\boldsymbol{\xi})}{f(\boldsymbol{\xi})}; \quad \boldsymbol{\xi} \sim f(\mathbf{x})$$

(см. алгоритм 3.1 из разд. 3.1), в которых эффективно используются приближения вида  $L_M g(\mathbf{x})$  из (5.20). Одним из основных способов уменьшения дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$  является выборка по важности (см. разд. 3.2). Здесь плотность  $f(\mathbf{x})$  выбирается близкой к модулю подинтегральной функции  $|g(\mathbf{x})|$ . В частности, при  $g(\mathbf{x}) \geq 0$  можно выбрать приближение вида (5.20) с базисом (5.23) (см. также формулу (3.18) из разд. 3.2), что обеспечивает стремление к нулю дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$  при  $h \downarrow 0$ . С помощью утверждений 5.7, 5.8 получаем оценку сверху вида

$$\mathbf{D}\zeta \leq \frac{\tilde{H}}{Q} h^4 \|g\|_{W_2^2(X)}. \quad (5.24)$$

Величина  $Q = \min_m g(\mathbf{x}_m)$  должна быть отделена от нуля.

Другой способ применения приближения (5.20) для уменьшения дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$  связан с алгоритмом выделения главной части (см. разд. 3.6), в котором интеграл представляется в виде

$$I = I_1 + I_2; \quad I_1 = \int_X (g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x})) d\mathbf{x}; \quad I_2 = \int_X L_M g(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

причем интеграл  $I_2$  вычисляется аналитически, а для приближения величины  $I_1$  используется стандартный алгоритм 3.1. При применении приближения  $L_M g(\mathbf{x})$  из (5.20) с мультилинейным базисом (5.23) алгоритм выделения главной части дает тот же порядок уменьшения дисперсии по шагу  $h$  сетки  $X^{(M)}$ , что и алгоритм выборки по важности (см. соотношение (5.24)). При вычислении величины  $I_2$  можно использовать более простые плотности (например, плотность равномерного распределения в  $X$ ) и соответствующие им алгоритмы моделирования, также более простые по сравнению с алгоритмом выборки по важности.

Комбинацию детерминированных и стохастических кубатурных формул представляют собой алгоритмы Н.С.Бахвалова из разд. 3.9 и некоторые случайные кубатурные формулы – см. разд. 3.10. Элементы приближения подынтегральной функции вида (5.20) используются при построении двустороннего геометрического метода из разд. 3.11.

**5.3.5. Функциональные оценки метода Монте-Карло.** Приближения функций вида  $L_{(M)}g(\mathbf{x})$  из (5.20) используются также при реализации дискретно-стохастических численных процедур приближения функций  $\varphi(\mathbf{x})$ , заданных в интегральной форме: интеграла  $\varphi_1(\mathbf{x})$ , зависящего от параметра (см. соотношение (5.10)), и решения  $\varphi_2(x)$  интегрального уравнения второго рода (5.12) [3].

Рассмотрим аппроксимацию функции  $\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_1(\mathbf{x}) \vee \varphi_2(x)$  вида (5.20):

$$\varphi(\mathbf{x}) \approx L_M \varphi(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M w_m(\varphi) \chi_m(\mathbf{x}). \quad (5.25)$$

Для простоты рассмотрим случай  $w_m(\varphi) = \varphi(\mathbf{x}_m)$ .

**Алгоритм 5.3.** *Приближенно вычисляем значения  $\{\varphi(\mathbf{x}_m)\}$ , используя алгоритмы метода Монте-Карло с числами реализаций  $\{n_m\}$ :*

$$\varphi(\mathbf{x}_m) \approx Z_{n_m}(\mathbf{x}_m) = \frac{1}{n_m} \sum_{j=1}^{n_m} \zeta_j^{(m)}.$$

*Строим приближение функции  $\varphi(\mathbf{x})$ :*

$$\varphi(\mathbf{x}) \approx L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M Z_{n_m}(\mathbf{x}_m) \chi_m(\mathbf{x}). \quad (5.26)$$

В алгоритме 5.3 в качестве приближения  $L_M \varphi(\mathbf{x})$  целесообразно использовать аппроксимацию Стренга–Фикса с базисом (5.23) (особенно важным здесь является свойство устойчивости этого приближения – см. утверждение 5.8). В том случае, когда оценка (5.26) получается согласно методу зависимых испытаний (т.е. в узлах сетки используются одни и те же плотности распределения и одни и те же выборочные значения, полученные согласно этим плотностям), алгоритм 5.3 можно назвать "практической" версией алгоритмов 5.1 и 5.2. Для сходимости метода зависимых испытаний требуется определенная гладкость функции  $\varphi(\mathbf{x})$  (см. утверждение 5.5). На практике это условие часто не выполнено, и поэтому в качестве оценок  $\{\zeta^{(m)}\}$  выбирают независимые, слабо зависимые оценки и т.п. (см. подразд. 5.1.3, 5.3.7, а также [3]).

**5.3.6. Вероятностные подходы к оценке погрешностей дискретно-стохастических методов.** При изучении погрешности  $\delta^{(B)} = \rho_B(\varphi, L_M \tilde{\varphi})$  алгоритма 5.3 возникают проблемы выбора соответствующего нормированного функционального пространства  $B$ , а также вероятностного смысла стремления случайной величины  $\delta^{(B)}$  к нулю

с ростом параметров  $M$  и  $\bar{n} = \min(n_1, \dots, n_M)$ . Достаточно подробно разработаны  $L_2$ -подход, в котором строятся верхние границы величины

$$(\mathbf{E}\delta^{(L_2)})^2 = \left( \mathbf{E} \left( \int_X (\varphi(\mathbf{x}) - L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2} \right)^2,$$

и  $C$ -подход, в котором величина  $\delta^{(C)} = \sup_{\mathbf{x} \in X} |\varphi(\mathbf{x}) - L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x})|$  ограничивается сверху по вероятности. В каждом из этих подходов удается разбить погрешность на два слагаемых – *детерминированную* и *стохастическую компоненты*. Для  $L_2$ -подхода, в силу неравенства Коши-Буняковского и теоремы Фубини (о перестановке операций интегрирования и взятия математического ожидания), имеем

$$(\mathbf{E}\delta^{(L_2)})^2 \leq \mathbf{E} \left( \int_X (\varphi(\mathbf{x}) - L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \right) \times \mathbf{E}1^2 = \int_X \mathbf{E}(\varphi(\mathbf{x}) - L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}.$$

Далее заметим, что  $\mathbf{E}L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = L_M \varphi(\mathbf{x})$  (см. соотношение (5.25)). Поэтому

$$\mathbf{E}(\varphi(\mathbf{x}) - L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}))^2 = (\varphi(\mathbf{x}) - L_M \varphi(\mathbf{x}))^2 + \mathbf{D}L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}) \quad \text{и} \quad (\mathbf{E}\delta^{(L_2)})^2 \leq \left( \delta_1^{(L_2)} \right)^2 + \delta_2^{(L_2)};$$

$$\delta_1^{(L_2)} = \left( \int_X (\varphi(\mathbf{x}) - L_M \varphi(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2}, \quad \delta_2^{(L_2)} = \int_X \mathbf{D}L_M \tilde{\varphi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (5.27)$$

Для  $C$ -подхода, согласно неравенству треугольника, имеем

$$\delta^{(C)} \leq \rho_C(\varphi, L_M \varphi) + \rho_C(L_M \varphi, L_M \tilde{\varphi}) = \delta_1^{(C)} + \delta_2^{(C)}. \quad (5.28)$$

Первые слагаемые  $\delta_1^{(L_2)}$  и  $\delta_1^{(C)}$  из соотношений (5.27), (5.28) являются неслучайными (детерминированными) и оцениваются сверху на основании аппроксимационных свойств базиса  $\Xi^{(M)}$ . В частности, при использовании аппроксимации Стренга–Фикса с базисом (5.23) следует использовать утверждение 5.7 и его обобщенный аналог для пространств С.Л.Соболева  $W_2^r(X)$ .

Вторые (стохастические) слагаемые  $\delta_2^{(L_2)}$  и  $\delta_2^{(C)}$  из соотношений (5.27), (5.28) оцениваются сверху на основании свойств устойчивости базиса  $\Xi^{(M)}$  (для аппроксимации Стренга–Фикса это свойство отражает утверждение 5.8) и соответствующих предельных теорем теории вероятностей. Здесь важным является то, какие оценки  $\{\zeta^{(m)}\}$  в узлах  $\{\mathbf{x}_m\}$  используются. В частности, если в узлах сетки используются оценки метода зависимых испытаний, то при построении верхних границ для  $\delta_2^{(L_2)}$  и  $\delta_2^{(C)}$  можно использовать утверждение 5.5, так как

$$\mathbf{P} \left( \max_{m=1, \dots, M} |Z_{\bar{n}}(\mathbf{x}_m) - \varphi(\mathbf{x}_m)| \leq \frac{H}{\sqrt{\bar{n}}} \right) \geq \mathbf{P} \left( \sup_{\mathbf{x} \in X} |Z_{\bar{n}}(\mathbf{x}) - \varphi(\mathbf{x})| \leq \frac{H}{\sqrt{\bar{n}}} \right).$$

Для независимых оценок в узлах  $\{\zeta^{(m)}\}$  следует использовать рассуждения из подразд. 5.1.3, основанные на теории порядковых статистик. Если предположить наличие обобщенных производных функции  $\varphi(\mathbf{x})$ , то оценки сверху для  $\delta_2^{(C)}$  можно получать с помощью теорем вложения [10].

**5.3.7. Условная оптимизация дискретно-стохастических алгоритмов.** Важной также является проблема оптимального (согласованного) выбора параметров алгоритма 5.3: числа узлов  $M$  сетки  $X^{(M)}$  и числа  $\bar{n}$  испытаний  $\zeta_j^{(m)}$  в узлах сетки. Ставится следующая *задача условной оптимизации* [3, 10]: найти минимум трудоемкости

$\min_{M, \bar{n}} S(M, \bar{n})$  при  $T^{(B)}(M, \bar{n}) = \gamma$ , где  $\gamma$  – фиксированное положительное число, а  $T^{(B)}$  – верхняя границ погрешности в норме функционального пространства  $B$ . Общая схема решения этой задачи такова: из соотношения для  $T^{(B)}(M, \bar{n})$  один из параметров (например,  $\bar{n}$ ) выражается через другой ( $M$ ) и соответствующее выражение подставляется в выражение для  $S$ , при этом получается функция одного переменного ( $M$ ), которая и исследуется на минимум.

Приведем соответствующие рассуждения для простейшего метода зависимых испытаний. Полагаем, что трудоемкость имеет вид произведения  $S(M, n) = H_1 M n$  (здесь  $\bar{n} = n$ ), детерминированная компонента погрешности имеет порядок  $h^2$  (см. утверждение 5.7) или  $\delta_1^{(C)} = H_2/M^{2/l}$ , а стохастическая погрешность имеет вид  $\delta_2^{(C)} = H_3/\sqrt{n}$ . Имеем уравнение

$$T^{(C)}(M, \bar{n}) = \frac{H_2}{M^{2/l}} + \frac{H_3}{\sqrt{n}} = \gamma. \quad (5.29)$$

Тогда  $n = H_3^2/(\gamma - H_2/M^{2/l})^2$  и требуется найти минимум функции

$$\tilde{S}(M) = \frac{H_1 H_3^2 M}{(\gamma - H_2/M^{2/l})^2}.$$

Приравнивая нулю производную

$$\frac{\tilde{S}(M)}{dM} = \frac{H_1 H_3^2}{(\gamma - H_2/M^{2/l})^3} \left( \gamma - \frac{H_2}{M^{2/l}} \left( \frac{l+4}{l} \right) \right),$$

получаем выражения для условно-оптимальных параметров

$$M_{opt} = \left( \frac{H_2(l+4)}{l} \right)^{l/2} \gamma^{-l/2}; \quad n_{opt} = \frac{(H_3(l+4))^2}{16} \gamma^{-2};$$

$$\tilde{S}_{opt} = \frac{H_1 H_2^{l/2} H_3^2 (l+4)^{2+l/2}}{16l^{l/2}} \gamma^{-2-l/2}.$$

Заметим, что если нас интересует только порядок по  $\gamma$  оптимальных параметров  $M_{opt}$  и  $n_{opt}$ , т.е. соотношения вида

$$M_{opt} \asymp \gamma^{-l/2}, \quad n_{opt} \asymp \gamma^{-2}, \quad \tilde{S}_{opt} \asymp \gamma^{-2-l/2}, \quad (5.30)$$

и трудоемкость  $S$  пропорциональна произведению  $Mn$ , то достаточно приравнять детерминированную и стохастическую компоненты погрешности и получить требуемый порядок из соотношения (5.29).

**5.3.8. Особенности построения дискретно-стохастических алгоритмов глобального решения интегральных уравнений второго рода.** Как отмечено выше (см. подразд. 5.2.2), локальная оценка (5.13) (см. также соотношение (4.12)) может быть обоснована (и эффективна) в случае, когда свободный член  $f(x)$  и ядро  $k(x', x)$  интегрального уравнения (5.12) (см. также соотношение (4.1)) являются гладкими по  $x$ . Последнее требование относительно редко выполнено на практике, что существенно ограничивает возможности применения локальной оценки. В связи с этим в качестве  $\{\zeta^{(m)}\}$  в алгоритме 5.3 можно выбрать оценки по методу сопряженных блужданий (4.11) (это аналог независимых оценок (5.7)):

$$\varphi(\mathbf{x}_m) = \mathbf{E}\zeta^{(m)*}; \quad \zeta^{(m)*} = \sum_{i=0}^{N^*} Q_i^{(m)*} f(x_i^{(m)*}) = f(\mathbf{x}_m) + \sum_{i=1}^{N^*} Q_i^{(m)*} f(x_i^{(m)*}),$$

где  $\{x_i^{(m)*}\}$  – однородная цепь Маркова с начальным состоянием  $\mathbf{x}_m$  и плотностью перехода  $p^*(x', x)$ , а веса  $\{Q_i^{(m)*}\}$  рекуррентно:

$$Q_0^{(m)*} \equiv 1; \quad Q_i^{(m)*} = Q_{i-1}^{(m)*} \frac{k(x_i^{(m)*}, x_{i-1}^{(m)*})}{p^*(x_{i-1}^{(m)*}, x_i^{(m)*})}.$$

Еще один метод, позволяющий получить оценку значения  $\varphi(\mathbf{x}_m)$ , состоит в следующем. Для простоты полагаем, что  $\{\mathbf{x}_m\}$  является равномерной с шагом  $H$  по каждой координате. Рассмотрим  $l$ -мерный куб с центром  $\mathbf{x}_m$  и ребром  $H$  и функцию  $h_m(x)$ , равную  $1/H^l$  при  $x \in \Delta_m$  и нулю иначе. Согласно теореме о среднем и соотношению (4.7), для достаточно малого  $H$  имеем

$$\varphi(\mathbf{x}_m) \approx (\varphi, h_m) = \int_{\Delta_m} \frac{\varphi(x') dx'}{H^l} = \mathbf{E} \tilde{\zeta}^{(m)}; \quad \tilde{\zeta}^{(m)} = \sum_{i=0}^N Q_i h_m(x_i). \quad (5.31)$$

В зависимости от восполнения  $L_M \tilde{\varphi}(x)$  решения  $\varphi(x)$  описанная вычислительная схема имеет разные названия: если используется кусочно-постоянное приближение по полученным значениям  $\{\tilde{\varphi}(u_j)\}$  (т.е.  $\varphi(x) \equiv \tilde{\varphi}(u_j)$  при  $x \in \Delta_{u_j}$ ), то получается *метод гистограмм*; если  $l = 1$  и используется кусочно-линейное приближение, то имеем *метод полигона частот*; если  $l > 1$  и используется аппроксимация Стренга–Фикса, то возникает *многомерный аналог метода полигона частот*.

Отметим, что оценка  $\tilde{\zeta}(\mathbf{x}_m)$  величины  $\varphi(\mathbf{x}_m)$  получается смещенной на величину  $d_m = |\varphi(\mathbf{x}_m) - (\varphi, h_m)|$ . В силу определения функции  $h_m(x)$ , смещение равно

$$d_m = \left| H^l \varphi(\mathbf{x}_m) - \int_{\Delta_m} \varphi(y) dy \right| / H^l.$$

Для достаточно гладкой функции  $\varphi(x)$  эта величина имеет второй порядок по  $H$ . Из утверждения 5.7 следует, что при использовании многомерного аналога метода полигона частот не имеет смысла выбирать производящую функцию  $\chi(x) = \beta^{(r)}(x)$  из (5.23) для больших  $r$  (т.е. лучше всего взять  $r = 1$  – мультилинейное восполнение).

Определенной трудностью при изучении метода полигона частот явилось то обстоятельство, что оценки (5.31) являются зависимыми: с одной траектории цепи Маркова происходят вклады в оценки приближенного значения решения во многих узлах. Здесь следует учитывать, что с ростом  $M$  коэффициенты корреляции между оценками (5.31) убывают, т.е. величины  $\{\zeta^{(m)*}\}$  являются *слабо зависимыми*. Приведем соотношения вида (5.30) для оптимальных параметров алгоритма 5.3 (для  $C$ -подхода) с оценками (5.31) в узлах сетки [3]:

$$M_{opt} \asymp \gamma^{-l/2}, \quad n_{opt} \asymp \gamma^{-2-l/2} \ln \gamma^{-l/2}, \quad \tilde{S}_{opt} \asymp \gamma^{-2-l/2} \ln \gamma^{-l/2}.$$

В заключение отметим, что метод полигона частот оказался весьма эффективным (а иногда – единственно возможным) способом решения ряда сложных стохастических задач математической физики.

## ГЛАВА 6. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ЧАСТИЦ

### 6.1. ВВОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Традиционной математической моделью стационарного процесса переноса излучения является интегро-дифференциальное уравнение переноса

$$\begin{aligned} \omega \nabla \Phi + \sigma \Phi = & \int_V \sigma_s(\mathbf{r}, v') w_s(\mathbf{v}, \mathbf{v}'; \mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}') d\mathbf{v}' + \\ & + \int_V \nu(\mathbf{r}, v') \sigma_f(\mathbf{r}, v') w_f(\mathbf{v}, \mathbf{v}'; \mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}') d\mathbf{v}' + f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad \mathbf{r} \in D \subset R_3. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Здесь  $\Phi = \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  – интенсивность излучения или плотность потока соответствующих частиц;  $V$  – пространство скоростей  $\mathbf{v} = v \cdot \omega$ ;  $v = |\mathbf{v}|$ ;  $\sigma = \sigma(\mathbf{r}, v)$  – полное сечение,  $\sigma_s(\mathbf{r}, v)$  – сечение рассеяния,  $\sigma_f(\mathbf{r}, v)$  – сечение деления (размножения),

$$\sigma = \sigma_s + \sigma_f + \sigma_c,$$

где  $\sigma_c$  – сечение поглощения (гибели частицы);  $w_s(\mathbf{v}, \mathbf{v}'; \mathbf{r})$  – индикатриса рассеяния,  $w_f(\mathbf{v}, \mathbf{v}'; \mathbf{r})$  – индикатриса деления;  $\nu(\mathbf{r}, v')$  – среднее число вторичных частиц на одно деление, вызванное частицей со скоростью  $v'$  в точке  $\mathbf{r}$ ;  $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  – плотность распределения источника частиц.

Если предположить, что среда ограничена выпуклой поверхностью, вне которой  $\sigma = \sigma_c \neq 0$ , то уравнение (6.1) может быть распространено на все пространство [1]. Отметим, что (6.1) выражает локальный баланс интенсивности излучения, который вытекает из рассматриваемой далее вероятностно-физической модели переноса.

Процесс переноса можно рассматривать как однородную цепь Маркова столкновений частиц с элементами вещества. В результате столкновения может произойти поглощение, рассеяние или деление с вероятностями  $\sigma_c/\sigma$ ,  $\sigma_s/\sigma$  и  $\sigma_f/\sigma$  соответственно. Траектория заканчивается после поглощения или вылета частицы из среды. При наличии размножения цепь является ветвящейся. Свободный пробег  $l$  частицы между двумя последовательными столкновениями распределен с плотностью

$$f_l(t) = \sigma(\mathbf{r}(t), v) \exp \left\{ - \int_0^l \sigma(\mathbf{r}(t_1), v) dt_1 \right\},$$

где  $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + t\omega$ ,  $\mathbf{r}_0$  – исходная точка,  $\omega$  – направление пробега. Эта плотность нормирована при условии, что уравнение (6.1) распространено на все пространство, как указано выше. Плотность столкновений  $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  связана с интенсивностью соотношением

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \sigma(\mathbf{r}, v) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (6.2)$$

Метод Монте-Карло, т. е. численное моделирование траекторий частиц, может быть использован, например, для оценки следующих функционалов. Интеграл

$$\int_{D_i} \int_V \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} \quad (6.3)$$

есть среднее число столкновений в области  $D_i$  и оценивается соответствующим средним выборочным значением. Если столкновения учитывать с весом  $1/\sigma(\mathbf{r}, v)$ , то, вследствие (6.2), при этом получается оценка интеграла

$$J_i = J_{D_i} = \int_{D_i} \int_V \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}. \quad (6.4)$$

Известно также, что интеграл (6.4) равен средней длине  $L_i$  пути частицы в области  $D_i$ , т. е.  $J_i = \mathbf{E}(L_i)$ . Соответствующая оценка метода Монте-Карло называется “оценкой по пробегу” (см. далее раздел 6.6).

Плотность столкновений  $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  удовлетворяет (см., например, [1]) интегральному уравнению переноса

$$\varphi(x) = \int_x k(x', x) \varphi(x') dx' + f(x),$$

где  $x = (\mathbf{r}, \mathbf{v}) \in R^3 \times V$ ,  $f$  – плотность распределения начального столкновения,  $k(x', x)$  – плотность распределения среднего числа вторичных столкновений от одного столкновения частицы со скоростью  $\mathbf{v}'$  в точке  $\mathbf{r}'$ ,  $x' = (\mathbf{r}', \mathbf{v}')$ . Нетрудно [1] вывести соотношение

$$k(x', x) \equiv k_0(x', x) = \left[ \frac{\sigma_s(\mathbf{r}', v')}{\sigma(\mathbf{r}', v')} w_s(\mathbf{v}, \mathbf{v}'; \mathbf{r}') + \nu(\mathbf{r}', v') \frac{\sigma_f(\mathbf{r}', v')}{\sigma(\mathbf{r}', v')} w_f(\mathbf{v}, \mathbf{v}'; \mathbf{r}') \right] \times \\ \times \frac{\sigma(\mathbf{r}, v) \exp\{-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}; v)\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \delta \left( \omega - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right), \text{ где } \tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}; v) = \int_0^{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \sigma(\mathbf{r}' + t\omega) dt. \quad (6.5)$$

Для этого сначала определяется плотность распределения точки  $x$  в системе координат  $(l = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \mathbf{v})$  путем перемножения вероятности выживания  $\sigma_s(\mathbf{r}', \mathbf{v}')/\sigma(\mathbf{r}', \mathbf{v})$  и соответствующих условных плотностей. Затем осуществляется переход в декартову систему  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , что дает множитель  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-2}$ ; “дельта-функция” в (6.5) эквивалентна равенству  $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + l\omega$ .

Выражение (6.5) уже связано с весовой модификацией процесса, в которой одна вторичная частица с весом  $\nu(\mathbf{r}', v')$  рассматривается в случае деления. В более общем весовом алгоритме траектории моделируются соответственно заданной переходной плотности  $p(x', x)$  с вспомогательным весом  $Q$ , умножаемым на весовой множитель  $k(x', x)/p(x', x)$  после перехода  $x' \rightarrow x$ . Однако в многоскоростной теории переноса прямая реализация такого алгоритма невозможна из-за наличия сингулярностей различного типа в индикатрисах рассеяния, связанных с тем, что энергия частицы после рассеяния определяется направлением соответственно типу рассеяния. Следовательно, для построения общего весового алгоритма необходимо расслоить распределение столкновений по их типу путем введения номера  $k$  типа столкновения в последовательность координат фазового пространства, полагая  $x = (\mathbf{r}, \mathbf{v}, k)$  и  $dx = d\mathbf{r} d\mathbf{v} dP(k)$ . При этом новое значение  $x$  определяется после выбора типа столкновения соответственно вероятностям  $\sigma_k/\sigma$ , т. е. моделирование перехода  $x' \rightarrow x$  осуществляется путем определения новых координат в следующем порядке:  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{r}$ ,  $k$ . Другие модификации фазового пространства рассмотрены в разделе 6.3.

Модифицированное ядро здесь имеет вид

$$k(x', x) = w_{k'}(\mathbf{v}, \mathbf{v}'; \mathbf{r}') \frac{\sigma(\mathbf{r}, v) \exp\{-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}; v)\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \frac{\sigma_k(\mathbf{r}, v)}{\sigma(\mathbf{r}, v)} \delta \left( \omega - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right). \quad (6.6)$$

Здесь можно положить  $\sigma_1 \equiv \sigma_f$  и  $w_1 \equiv \nu \cdot w_f$ , а также учесть различные типы рассеяния, включая фиктивное дельта-рассеяние без изменения скорости (см. далее подразд. 6.2.2).

Заметим, что такая модификация позволяет представить источник частиц как искусственный источник столкновений. Действительно, начало траектории можно рассмотреть как начальное столкновение с  $k = 0$ , приводящее к рассеянию с соответствующей индикатрисой (например  $\delta$ -рассеянию).

## 6.2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИИ

**6.2.1. Стандартная схема.** При решении задач теории переноса частиц переход  $x' \rightarrow x$  осуществляется следующим образом:



1) реализуется поглощение с вероятностью  $\sigma_c(x)/\sigma(x)$  или номер  $\nu$  типа рассеяния, причем  $P(\nu = i) = \sigma_s^{(i)}(x)/\sigma(x)$ ;

2) выбирается новая скорость  $\mathbf{v}$  соответственно индикатрисе  $w_i$ ;

3) определяется длина  $\chi$  свободного пробега в направлении  $\omega = \mathbf{v}/v$  соответственно субстохастической плотности

$$p_\chi(l; \mathbf{r}', \mathbf{v}) = \sigma(\mathbf{r}' + \omega l, v) \exp(-\tau_{op}(l; \mathbf{r}', \mathbf{v})), \quad l \leq l^*(\mathbf{r}', \omega),$$

где  $\tau_{op}(l; \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \int_0^l \sigma(\mathbf{r}' + s\omega, v) ds$  – оптическая длина отрезка  $[\mathbf{r}', \mathbf{r}' + l\omega]$ ,  $l^*(\mathbf{r}', \omega)$  – расстояние от точки  $\mathbf{r}'$  вдоль направления  $\omega$  до границы среды, которую можно считать выпуклой; здесь возможен обрыв траектории вследствие вылета частицы из среды;

4) определяется новая точка столкновения по формуле  $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \chi\omega$ .

Пересчет координат направления пробега осуществляется по формулам:

$$a = a'\mu - (b' \sin \varphi + a'c' \cos \varphi) \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{1 - c'^2}},$$

$$b = b'\mu + (a' \sin \varphi - b'c' \cos \varphi) \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{1 - c'^2}},$$

$$c = c'\mu + (1 - c'^2) \cos \varphi \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{1 - c'^2}}.$$

Здесь  $\mu = (\omega, \omega')$ ,  $\varphi$  – азимутальный угол рассеяния, который в данном случае отсчитывается от плоскости, проходящей через  $\omega'$  и  $Oz$  (т.е.  $\varphi$  – угол между плоскостями  $(\omega'; Oz)$  и  $(\omega'; \omega)$ ). Угол  $\varphi$  является изотропным и его можно моделировать по формуле  $\varphi = 2\pi\alpha$ . Однако, экономичнее моделировать непосредственно  $\cos \varphi$  и  $\sin \varphi$  методом исключения, как координаты единичного изотропного вектора на плоскости по следующей схеме:

1) реализуем  $w_1 = 1 - 2\alpha_1$ ,  $w_2 = 1 - 2\alpha_2$  и вычисляем  $d = w_1^2 + w_2^2$ ;

2) если  $d > 1$ , то повторяем пункт 1 и т.д., иначе полагаем  $\cos \varphi = w_1/\sqrt{d}$  и  $\sin \varphi = w_2/\sqrt{d}$ .

В рассмотренной схеме наиболее сложным является алгоритм моделирования длины свободного пробега, если  $\sigma$  не является постоянным для данной среды. Интегрированием получаем функцию распределения для  $\chi$ :  $F_\chi(l) = 1 - \exp(-\tau(l))$ ,  $l > 0$ . Таким образом,  $\chi$  можно определять из уравнения

$$\tau(\chi) = \int_0^\chi \sigma(\mathbf{r}(l)) dl = -\ln \alpha.$$

Последнее уравнение легко решается, если  $\sigma(\mathbf{r}(l))$  – кусочно-постоянная функция. Алгоритм решения в данном случае такой же, как для уравнения  $F(\xi) = \alpha$  при моделировании случайной величины с кусочно-постоянной плотностью (см. подразд. 1.8.1). Поэтому для решения задач теории переноса методом Монте-Карло обычно среду разбивают на достаточно малые области с постоянным  $\sigma$ . Некоторые алгоритмы для определения расстояний  $\{t_i\}$  до границ указанных областей и моделирования  $\chi$  приведены, например, в [1]. Далее изложен другой способ, допускающий произвольный вид  $\sigma(\mathbf{r})$  и эффективный, если  $\sigma(\mathbf{r})$  не слишком сильно меняется (для простоты здесь и далее в  $\sigma(\mathbf{r}, v)$  опускаем  $v$ ).

**6.2.2. “Метод максимального сечения” для моделирования длины свободного пробега частицы.** Очень удобен следующий “метод максимального сечения”

для моделирования  $\chi$  (в предположении  $\sigma(\mathbf{r}) \leq \sigma_m$ ). Конструируются две последовательности независимых выборочных значений:  $\xi_1, \dots, \xi_n$  – с плотностью распределения  $\sigma_m \exp(-\sigma_m t)$ ;  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$  – для распределения, равномерного в  $(0, 1)$ ;  $\zeta_n = \sum_{k=1}^n \xi_k$ . Пусть

$$N = \min\{n : \alpha_n \leq \sigma(\mathbf{r} + \zeta_n \boldsymbol{\omega}) / \sigma_m\}.$$

Тогда  $\chi = \zeta_n$ . Очевидно, что этот способ позволяет радикально упростить расчеты по методу Монте-Карло для многих сложных систем.

Приведем обоснование этого метода. Пусть  $w(\mathbf{v}, \mathbf{v}', \mathbf{r})$  – плотность распределения скорости  $\mathbf{v}$  после рассеяния в точке  $\mathbf{r}$  при условии, что  $\mathbf{v}$  – скорость до рассеяния. Поток частиц  $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  удовлетворяет следующему интегро-дифференциальному уравнению переноса:

$$(\boldsymbol{\omega}, \text{grad } \Phi) + \sigma(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \int \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}')\sigma_s(\mathbf{r})w(\mathbf{v}, \mathbf{v}', \mathbf{r}) d\mathbf{v}' + \Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}),$$

где  $\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  – плотность распределения частиц источника. К обеим частям этого уравнения прибавим соответствующие части равенства:

$$[\sigma_m - \sigma(\mathbf{r})]\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \int \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}')[\sigma_m - \sigma(\mathbf{r})]\delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v}) d\mathbf{v}'$$

и объединим стоящие справа интегралы. Полученное уравнение, очевидно, можно рассматривать как уравнение переноса в фиктивной среде, для которой  $\sigma_m$  – полное сечение,  $\sigma(\mathbf{r})$  – сечение физического рассеяния с индикатрисой  $w(\mathbf{v}, \mathbf{v}', \mathbf{r})$  и  $[\sigma_m - \sigma(\mathbf{r})]$  – сечение рассеяния без изменения  $\mathbf{v}$  (“дельта-рассеяния”). Нетрудно заметить, что прямое моделирование описанного таким образом процесса переноса приводит к рассмотренной выше процедуре моделирования длины  $\chi$  пробега между физическими столкновениями.

Приведенное обоснование показывает, как применять этот способ только в пределах некоторых зон системы, причем  $\sigma_m$  может зависеть от номера зоны и вообще от точки пространства. Становится очевидным также, как сочетать такое моделирование  $\chi$  с весовыми методами расчета, требующими, как правило, вычисления оптической длины пробега (см. раздел 6.3).

Известно, что среднее число физических столкновений равно

$$(\sigma, \Phi) = \int \int \sigma(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}.$$

Следовательно, среднее число столкновений при моделировании преобразованного уравнения равно  $(\sigma_m, \Phi)$ . Эти рассуждения могут помочь при выборе способа моделирования длины пробега частицы для конкретной системы.

**6.2.3. Многоскоростные и нестационарные задачи.** В многоскоростном случае скорость частицы  $\mathbf{v}$  обычно определяется единичным вектором  $\boldsymbol{\omega}$  и энергией  $E$ , которая пропорциональна  $v^2$ . Распределение новой энергии  $E$  после рассеяния в точке  $\mathbf{r}$  задают условной плотностью  $p(e) = p(e, E', \mu, \mathbf{r})$ ,  $e \geq 0$ , где  $E'$  – энергия частицы до рассеяния, а  $\mu = \cos v$  – косинус угла рассеяния. Эта плотность входит дополнительным множителем в ядро интегрального уравнения переноса. Иногда, например, в случае упругого рассеяния нейтронов, величина  $E$  вполне определяется значениями  $E'$  и  $\mu$ , т.е.  $p(e) = \delta(e - E(E', \mu))$ .

Далее рассмотрены формулы для моделирования процесса рассеяния нейтронов и гамма-квантов. При упругом рассеянии нейтрона новая энергия и косинус угла рассеяния вычисляются по формулам

$$E = \frac{1 + A^2 + 2A\mu_0}{(1 + A)^2} E', \quad \mu = \frac{1 + A\mu_0}{\sqrt{1 + A^2 + 2A\mu_0}},$$

где  $\mu_0$  – косинус угла рассеяния в системе центра масс. Величины  $E$  и  $\mu$  связывает соотношение

$$\frac{E}{E'} = \left( \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + A^2 - 1}}{A + 1} \right)^2.$$

Если рассеяние в системе центра масс изотропно (это выполняется, например, для ядер водорода), то можно положить  $\mu_0 = 2\alpha - 1$ . При этом для упругого рассеяния на водороде получаем особенно простые формулы:  $E = \alpha E'$ ,  $\mu = \sqrt{\alpha}$ .

Если энергия нейтрона и масса ядра достаточно велики, то рассеяние в системе центра масс анизотропно. Обычно задают соответствующие индикатрисы  $g_0(x, E_i)$  для набора значений  $E' = E_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$ . Если  $E_{i-1} \leq E' \leq E_i$ , то целесообразно моделировать  $E$  из распределения с плотностью

$$g_0(x, E') = \frac{E' - E_{i-1}}{E_i - E_{i-1}} g_0(x, E_i) + \frac{E_i - E'}{E_i - E_{i-1}} g_0(x, E_{i-1}), \quad -1 \leq x \leq +1.$$

Удобен следующий алгоритм метода суперпозиции для такой плотности: *выбирается значение  $\alpha$ ; если  $\alpha < (E' - E_{i-1})/(E_i - E_{i-1})$ , то  $\mu_0$  моделируется соответственно плотности  $g_0(x, E_i)$  в противном случае – соответственно  $g_0(x, E_{i-1})$ .*

Теперь рассмотрим неупругое рассеяние нейтронов. Наиболее часто используется испарительный спектр неупругого рассеяния, для которого

$$p_E(e, E') = ce \exp(-e/T), \quad 0 \leq e \leq E'.$$

После замены переменной по формуле:  $x = e/T$ , здесь получаем плотность усеченного гамма-распределения с параметром 2. Следовательно, испарительный спектр можно моделировать следующим образом:

- 1) реализуем  $E_0 = -T \ln(\alpha_1 \alpha_2)$ ;
- 2) если  $E_0 > E'$ , то снова выполняется пункт 1 и т. д., иначе  $E = E_0$ .

Неупругое рассеяние обычно считают изотропным в системе центра масс. Эффективные сечения различных типов рассеяния, поглощения и деления зависят от энергии нейтрона и обычно определяются на основе экспериментальных данных.

Перейдем к рассмотрению рассеяния гамма-квантов. Если гамма-квант с безразмерной энергией  $E'$  рассеивается в результате комптон-эффекта, то  $p(e, E')$  пропорциональна функции

$$f(e, E') = \frac{e}{E'} + \frac{E'}{e} + \left( \frac{1}{E'} - \frac{1}{e} \right) \left( 2 + \frac{1}{E'} - \frac{1}{e} \right), \quad E'(1 + 2E')^{-1} < e < E'.$$

Это выражение непосредственно следует из формулы Клейна-Нишины для дифференциального сечения комптоновского рассеяния. Случайную величину  $E$  здесь можно моделировать с помощью простого варианта метода исключения:

- 1) реализуем  $E_0 = E'(1 + 2E'\alpha_1)(1 + 2E')^{-1}$ ;
- 2) если  $\alpha_2[1 + 2E' + (1 + 2E')^{-1}] > f(E_0, E')$ , то снова выполняется пункт 1 и т. д., иначе  $E = E_0$ .

Этот алгоритм вытекает из неравенства  $f(e, E') \leq 1 + 2E' + (1 + 2E')^{-1}$ . Величина косинуса угла рассеяния в данном случае определяется формулой  $\mu = 1 - 1/e + 1/E'$ .

Сечение комптоновского рассеяния равно

$$\sigma_{(E)} = 2\pi r_e^2 \left\{ \frac{1 + E}{E^3} \left[ \frac{2E(1 + E)}{1 + 2E} - \ln(1 + 2E) \right] + \frac{1}{2E} \ln(1 + 2E) - \frac{1 + 3E}{(1 + 2E)^2} \right\},$$

где  $r_e$  – классический радиус электрона. Функцию  $\sigma(E)$  обычно табулируют. Как уже было указано выше, здесь  $E$  – безразмерная энергия гамма-кванта, т. е. энергия в электронвольтах, поделенная на  $m_e c^2$ , где  $m_e$  – масса покоя электрона, а  $c^2$  – скорость света.

Для оценки временной зависимости потока частиц достаточно рассчитывать время “жизни” частиц по очевидным простым формулам. При введении временной координаты  $t$  уравнения переноса меняются следующим образом: в левую часть интегродифференциального уравнения добавляется член  $\partial\Phi/\partial t$ , а ядро интегрального уравнения домножается на  $\delta(t - [t' + l/v])$ , где  $v$  – скорость частицы. При использовании локальной оценки (см. далее раздел 6.10) вклад от столкновения в точке  $(x, t)$  относится ко времени  $t + |\mathbf{r} - \mathbf{r}^*|/v$ . Если источник частиц распределен по времени с плотностью  $p(t)$ , то оценку временной зависимости  $I(t)$  можно улучшить, пользуясь формулой свертки  $I(t) = \int_0^t p(t - t')I_0(t') dt'$ , где  $I_0(t)$  – зависимость, соответствующая начальной плотности  $p_0(t) = \delta(t)$  (см. далее раздел 6.10).

### 6.3. ВЕСОВЫЕ МОДИФИКАЦИИ

Весовые алгоритмы строятся на основе представления решения уравнения переноса рядом Неймана (см. раздел 4.3). Существование  $n_0$ , такого, что  $\|K^{n_0}\| < 1$ , достаточно для сходимости ряда. Норма оператора легко оценивается здесь, если его рассматривать действующим из  $L_1$  в  $L_1$ . Норма в  $L_1$  строится с учетом дискретности координаты  $k$ . В данном случае

$$\|K\| \leq \sup \left( \frac{\sigma_s}{\sigma} + \nu \frac{\sigma_f}{\sigma} \right) = q.$$

Следовательно, если моделирование осуществляется без ветвления, то достаточным условием сходимости ряда Неймана является условие  $q < 1$ .

Метод Монте-Карло обычно используется для оценки функционалов вида (4.3):

$$J_h = (\varphi, h) = \int_X \varphi(x)h(x) dx.$$

Например, для оценки интеграла (6.3)  $h(x) = 1$ , а для оценки интеграла (6.4)  $h(x) = 1/\sigma(\mathbf{r}, v)$  при  $\mathbf{r} \in D_i$  и  $h(x) = 0$  при  $\mathbf{r} \notin D_i$ . Если  $\{x_n\}$  – физическая цепь столкновений (это возможно в рамках рассмотренной модели при  $\nu \equiv 1$ ), то  $J_h = \mathbf{E}\xi$ , где  $\xi = \sum_{n=0}^N h(x_n)$ . Если нефизическая цепь столкновений моделируется соответственно начальной плотности  $\pi(x)$  и переходной плотности  $p(x', x)$ , оценка по столкновениям  $\xi$  имеет вид (4.7):

$$\xi = \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n); \quad Q_0 = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}. \quad (6.7)$$

Переходная плотность  $p(x', x)$  должна включать обобщенные функции, связанные с сингулярностями индикатрис рассеяния; эти функции можно сокращать в отношении  $k(x', x)/p(x', x)$ , причем соотношение  $\mathbf{E}\xi = J_h$  обосновывается обычным способом (см. раздел 4.3). Конструкции весов будут рассмотрены далее в разделе 6.4 с целью построения оценок параметрических производных от функционалов  $J_h$ .

Согласно разделу 4.4, для дисперсии случайной величины  $\xi$  имеем

$$\mathbf{D}\xi = (\chi, h[2\varphi^* - h]) - (f, \varphi^*)^2,$$

где  $\varphi^*$  – решение сопряженного уравнения  $\varphi^* = K^*\varphi^* + h$ ,  $\chi$  – ряд Неймана для уравнения

$$\chi(x) = \int_X \frac{k^2(x', x)}{p(x', x)} \chi(x') dx' + \frac{f^2(x)}{\pi(x)}. \quad (6.8)$$

Простейшей модификацией физического ветвящегося процесса является цепь Маркова, для которой плотность  $p_0(x', x)$  получается из (6.6) заменой  $\nu \rightarrow 1$ . При этом  $Q_n$  есть произведение величин  $\nu$  для делений, предшествующих  $x_n$ , а ядро уравнения (6.8) получается из (6.6) заменой  $\nu \rightarrow \nu^2$ . Следовательно, дисперсия такого весового алгоритма конечна, если выполняется соотношение

$$\sup \left( \frac{\sigma_s}{\sigma} + \nu^2 \frac{\sigma_f}{\sigma} \right) = q_1 < 1. \quad (6.9)$$

Заметим, что выражение для дисперсии оценки по столкновениям на ветвящейся цепи Маркова получено в разделе 4.6. Из этого выражения следует, что в случае прямого моделирования физического ветвящегося процесса дисперсия конечна, если  $J_h$  конечно, т. е. для подкритической системы.

В заключение отметим, что ограничение (6.9) может быть ослаблено, если увеличить  $\sigma_f$  на величину  $\sigma_c = \sigma - \sigma_f - \sigma_s$  и пересчитать значение  $\nu$  по формуле

$$\nu' = \frac{\nu\sigma_f}{\sigma_f + \sigma_c} = \frac{\nu\sigma_f}{\sigma_a} \leq \nu. \quad (6.10)$$

При этом ядро (6.6) и функция  $\varphi$  остаются неизменными, а траектории для ограниченной системы обрываются с вероятностью единица вследствие вылета частиц.

Согласно сказанному в конце раздела 4.4, дисперсии оценок уменьшаются, если не моделировать поглощение, но вес умножать на вероятность “выживания” или не моделировать вылет, а вес умножать на вероятность невылета  $1 - \exp(-\tau^*)$ .

#### 6.4. ВЕСОВЫЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ

Рассмотрим сечения  $\sigma_k$ ,  $\sigma$  в некоторой подобласти в качестве параметра  $\lambda$ . Как было замечено в разделе 6.1, соотношение  $\rho(K) < 1$  выполняется, если  $q < 1$  или среда ограничена так, что частица вылетает из нее с вероятностью единица. При этих условиях, интегральные операторы с ядрами вида  $k^{(n)}(x, y, \lambda)$  (см. раздел 4.9) ограничены и  $\rho(K) < q_0 < 1$ , если  $\sigma_k \leq C < +\infty$ ,  $\sigma_0 = \sigma$ . Более того, для любых  $\sigma'_k$ , принадлежащих интервалам  $\sigma_k \pm \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  – достаточно малое положительное число, выполняется соотношение

$$k(x, x') \leq (1 + C_0\varepsilon)k_\varepsilon(x, x'), \quad (6.11)$$

где  $k_\varepsilon(x, x')$  – ядро уравнения переноса, соответствующего  $\sigma_k - \varepsilon$ ,  $k = 0, 1, \dots$ . Следовательно, по теореме 4.13 для построения оценок производных  $\partial^m I_h / \partial(\sigma_k)^m$  можно использовать дифференцирование оценки  $\xi$ . Дисперсии получаемых оценок конечны, например, для простейшей модификации прямого моделирования при условии (6.9).

Далее построим скалярные оценки производных от функционалов вида (6.3), (6.4) по  $\sigma$ ,  $\sigma_k$  и  $\sigma_c$ .

Сначала рассмотрим производные по полному сечению. Предполагая  $\sigma_k$  постоянными, мы, по существу, оцениваем производные по масштабному множителю  $\rho$ , который вводится в заданной области  $D_j$  заменой  $\sigma$  на  $\rho\sigma$  и  $\sigma_k$  на  $\rho\sigma_k$ . Траектории строятся для  $\rho = \rho_0$ . Здесь весовой множитель, соответственно (6.6), имеет вид

$$\frac{k(x', x)}{p_0(x', x)} = \nu_{k'} \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\delta_j(r)} \exp\{-(\rho - \rho_0)\tau_j(\mathbf{r}', \mathbf{r}; v)\}, \quad (6.12)$$

где  $\nu_1 \equiv \nu$  и  $\nu_k \equiv 1$  для  $k \neq 1$ ;  $\delta_j(r)$  – индикатор области  $D_j$ ;  $\tau_j(\mathbf{r}', \mathbf{r}, v)$  – оптическая длина пути в  $D_j$  от  $\mathbf{r}'$  до  $\mathbf{r}$  при  $\rho = 1$ . Для определенности рассмотрим производные от функционала (6.4) при  $h(x) \equiv \delta_i(r)$ . Из сказанного выше следует, что оценку  $\xi$  можно дифференцировать почленно, т. е. построение оценки для величины  $J_j^{(m)}$  сводится к нахождению выражений для  $Q^{(m)}$ , где  $Q \equiv Q_n$  – текущий вес. На основе выражения  $Q' = Q(\ln Q)'$  получаем

$$Q^{(m)} = \sum_{k=1}^m u_k Q^{(m-k)} \frac{(m-1)!}{(k-1)(m-k)!}. \quad (6.13)$$

Ясно, что

$$u_1 = (\ln Q)' = \frac{m_j}{\rho} - T_j, \quad u_k = (\ln Q)^{(k)} = \frac{(-1)^{k-1}}{\rho^k} m_j (k-1)!. \quad (6.14)$$

Здесь  $m_j$  – полное число предшествующих столкновений (включая текущее) в  $D_j$ , и  $T_j$  – аналогичная оптическая длина в  $D_j$  для  $\rho = 1$ .

Теперь рассмотрим производные по сечению  $\sigma_k$  некоторого типа рассеяния (или деления с фиксированным  $\nu$ ), предполагая, что эта величина постоянна в  $D_j$ . Поскольку величина  $\sigma(\mathbf{r}, v)$  сокращается в (6.6), то значения  $u_k$  определяются формулой (6.14) со следующими подстановками:  $\rho \rightarrow \sigma_k$ ,  $\rho_0 \rightarrow \sigma_k^{(0)}$ ,  $T_j = L_j$ , где  $L_j$  – полная длина предшествующего пути частицы в  $D_j$ ,  $m_j$  – полное число рассеяний типа  $k$  в  $D_j$ .

Займемся теперь оценкой производных по  $\rho$  в случае, когда используется фиктивное дельта-рассеяние (см. подразд. 6.2.2). Предположим, что  $\rho\sigma \leq \sigma_m$ ; соответствующий весовой множитель имеет вид

$$\frac{k(x', x)}{p_0(x', x)} = \nu_k \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\delta_j(\mathbf{r})}$$

для физического столкновения и

$$\frac{k(x', x)}{p_0(x', x)} = \nu_{k'} \left[ \frac{\sigma_m}{\sigma_m - \sigma\rho_0} \left( 1 - \frac{\sigma}{\sigma_m} \rho \right) \right]^{\delta_j(\mathbf{r})}$$

для дельта-рассеяния. Формула (6.13) здесь также применима; однако при  $\sigma/\sigma_m = const$  в  $D_j$  можно вычислять  $Q^{(m)}$  прямым дифференцированием произведения

$$\rho^{m_j} \left( 1 - \frac{\sigma}{\sigma_m} \rho \right)^{n_j}, \quad (6.15)$$

где  $m_j$  – полное число физических столкновений, а  $n_j$  – полное число дельта-рассеяний в области  $D_j$ .

При вычислении производных по  $\sigma_k$  используется тот же весовой множитель с заменами  $\sigma\rho \rightarrow \sigma_k$ ,  $\sigma\rho_0 \rightarrow \sigma_k^{(0)}$ , и если  $\sigma_k/\sigma_m = const$  в  $D_j$ , то величина  $Q^{(m)}$  может быть вычислена дифференцированием произведения  $\sigma_k^{m_j} (1 - \rho\sigma/\sigma_m)^{n_j}$ , где  $m_j$  – теперь полное число рассеяний  $k$ -го типа в  $D_j$ .

Предположим теперь, что константа  $s$  прибавляется к полному сечению (и, значит, к сечению поглощения  $\sigma_c = \sigma - \sum_k \sigma_k$ ) в области  $D_j$ . Из (6.6) получаем

$$\frac{k(x', x)}{p_0(x', x)} = \nu_{k'} \exp\{-l_j s\},$$

где  $l_j$  – длина пути в  $D_j$  для соответствующего пробега. Пусть  $\tilde{\nu}$  обозначает произведение предыдущих значений  $\nu_k$ . Тогда  $Q = \tilde{\nu} \exp\{-L_j s\}$ , где  $L_j$  – полная длина предыдущего пути в  $D_j$ . Следовательно,  $Q^{(m)}|_{s=0} = \tilde{\nu}(-L_j)^m$ .

## 6.5. МОДИФИКАЦИЯ ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА

Заметим, что обобщенная субстохастическая плотность вероятностей номера  $\nu$  типа рассеяния выражается формулой:

$$p_\nu(z; x) = \sum_i \delta(z - i) \sigma_s^{(i)}(x) / \sigma(x).$$

В данном случае можно полагать (см. подразд. 4.11.2)  $\mathbf{t} = (i, l)$  и

$$\mathbf{k}((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x)) = p_\nu(i, x') w_i(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{r}') p_\chi(l; \mathbf{r}', \mathbf{v}) \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}' + l\omega)). \quad (6.16)$$

Это новый вид ядра интегрального уравнения переноса, соответствующий обычному, указанному выше, способу построения перехода от столкновения к столкновению. Соотношение  $q(x') \leq 1 - \delta$  здесь выполняется и при  $\sigma_c \equiv 0$  вследствие ограниченности среды. Если необходимо учесть зависимость от времени  $\tau$ , то ядро (6.16) домножается на  $\delta(\tau - \tau' - l/v)$ .

Если заменить интегрирование по значениям  $\nu$  соответствующим суммированием, то в выражении (6.16)  $p_\nu(i, x)$  заменяется на  $\sigma_s^{(i)}(x) / \sigma(x)$ . Заметим, что обычно используется ядро интегрального уравнения в виде (6.5), т. е.  $k_0(x', x)$ . Введем обозначение:  $k_1(x', x) = \int_T \mathbf{k}((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x)) dt$ .

**Теорема 6.1.** *Определяемая соотношением (6.16) обобщенная функция  $k_1(x', x)$  совпадает с  $k_0(x', x)$ .*

**Доказательство.** Утверждение теоремы следует из того, что, как нетрудно показать, справедливо равенство

$$\int_X k_1(x', x) h(x) dx = \int_X k_0(x', x) h(x) dx \quad \forall x' \in X, \quad h \in C_1(X).$$

□

Для построения весовой оценки вводится вспомогательная переходная плотность типа (6.16) таким образом, что выполняются условия несмещенности (4.8) и весовые множители имеют смысл для каждого элементарного перехода. Особенно важно, что в число координат включается номер типа рассеяния, т. к. во многих задачах теории переноса индикатрисы для разных типов рассеяния содержат сингулярности разных типов. Именно с помощью такого включения далее в подразд. 6.15.2 построены весовые алгоритмы статистического моделирования эволюции ансамблей взаимодействующих частиц для приближенного решения нелинейного уравнения Больцмана. Точнее говоря, предложено включить в число координат фазового пространства ансамбля частиц номер пары частиц, взаимодействующих в очередной, случайно выбранный момент времени. Отметим, что для построения таких алгоритмов в пространственно-неоднородном случае целесообразно использовать субстохастическое ядро вида (6.16), рассматривая в качестве  $X$  фазовое пространство координат и скоростей всех взаимодействующих частиц.

Полезность возможности сдвига фиксирования фазовой точки вдоль цепочки элементарных переходов показывает следующий пример. Пусть вспомогательная, т. е. моделируемая цепь Маркова получается из исходной занулением коэффициента  $\sigma_c$ , т. е.

$\sigma(\cdot)$  заменяется на  $\sigma_s(\cdot)$ . Нетрудно показать, что при этом

$$\mathbf{Q}_n = \exp(-\tau_c^{(n)})\sigma(\mathbf{r}_n, v_n)/\sigma_s(\mathbf{r}_n, v_n),$$

где  $\tau_c^{(n)}$  – оптическая, относительно  $\sigma_c(\cdot)$ , длина пробега частицы от  $\mathbf{r}_0$  до  $\mathbf{r}_n$ :

$$\tau_c^{(n)} = \sum_{k=1}^n \int_0^{\chi_k} \sigma_c(\mathbf{r}_{n-1} + s\omega_n, v) ds.$$

Если же фиксировать фазовую точку после выбора номера типа рассеяния, то, очевидно,  $\mathbf{Q}_n = \exp(-\tau_c^{(n)})$ . Такой вес позволяет легко вычислять производные  $\partial^m \xi_t / \partial \sigma_c^m$  при  $\sigma_c(\cdot) \equiv \sigma_c$ , т. е. когда  $\tau_c^{(n)} = \sigma_c L_n$ , где  $L_n$  – длина пробега от  $\mathbf{r}_0$  до  $\mathbf{r}_n$ . Если  $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$ , то случайные величины  $\partial^m \xi_t / \partial \sigma_c^m$  являются несмещенными оценками величин  $\partial^m J_h / \partial \sigma_c^m$  с конечными дисперсиями (см. раздел 6.4).

Рассматриваемый сдвиг может быть полезным также для повышения эффективности оценки некоторых функционалов от интенсивности излучения (потока частиц)  $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , которая связана с плотностью столкновений соотношением (6.2). В частности, среднее число частиц, пересекающих некоторую поверхность  $S$ , равно следующему поверхностному интегралу

$$\int_S ds \int_V \Phi(\mathbf{r}(s), \mathbf{v}) |(\omega, \mathbf{n}_s)| d\mathbf{v}, \quad (6.17)$$

где  $\mathbf{n}_s$  – орт нормали к поверхности  $S$  в точке  $\mathbf{r}(s)$ . Согласно “методу условных математических ожиданий” несмещенную оценку интеграла (6.17) можно получить, суммируя вычисляемую после каждого “физического” рассеяния величину

$$h_S(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = \exp(-\tau_{op}(l'_S, \mathbf{r}', \mathbf{v})) \Delta_S(\mathbf{r}', \omega),$$

которая равна вероятности того, что рассеянная частица пересекает поверхность  $S$ . Здесь  $\Delta_S(\mathbf{r}', \omega)$  – индикатор пересечения поверхности  $S$  лучом  $\mathbf{r}(l) = \mathbf{r}' + l\omega$ , а  $l'_S$  – расстояние вдоль этого луча до точки пересечения. Ясно, что построение и исследование соответствующей весовой оценки упрощается, если фазовое состояние фиксировать сразу после выбора значения  $\mathbf{v}$ , т. е. использовать схему моделирования “по рассеяниям”. Отметим, что связь между функциями ценности рассеяний и столкновений дает соотношение (4.51).

## 6.6. ВЕСОВАЯ ОЦЕНКА ПО ПРОБЕГУ

Хорошо известно, что выполняется равенство

$$\int_{D_i} \int_V \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} = I_{D_i} = \mathbf{E}(L_i), \quad (6.18)$$

где  $L_i$  – длина той части траектории, которая лежит в области  $D_i$ . Весовая модификация “оценки по пробегу” при использовании дополнительных фазовых координат является вариантом стандартной оценки по столкновениям (4.7):

$$\xi_t^{(i)} = \sum_{n=0}^N \mathbf{Q}_n \chi_n^{(i)}, \quad (6.19)$$

где  $\chi_n^{(i)}$  – длина той части отрезка  $[\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_n]$ , которая лежит в  $D_i$ . Отметим, что значение  $\chi_n$  вполне определяется точкой  $(\mathbf{t}_n, x_n)$ . Заметим также, что с целью обоснования соотношения (6.18) нетрудно проверить, что величина  $\mathbf{E}(\chi_n | x_{n-1})$  равна соответствующему значению интеграла из (6.18).



При общих условиях несмещенности (4.8) выполняется равенство  $\mathbf{E}\xi_t^{(i)} = I_{D_i}$ . Если область  $D_i$  ограничена, то  $\mathbf{D}\xi_t^{(i)} < +\infty$  при  $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$ , т. е., в частности, при использовании прямого моделирования, для которого  $\mathbf{K}_p \equiv \mathbf{K}$ .

Покажем, что последнее утверждение выполняется для неограниченной области  $D_i$  и для вероятности выживания частицы при столкновении  $q(\cdot)$ , не превосходящей  $1 - \delta$ . Для источника частиц, сосредоточенного в точке  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , имеем

$$I_{D_i} \equiv I_{D_i}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) < +\infty \quad \forall \mathbf{r}, \mathbf{v} \in R \times V.$$

Введем обозначение:  $\varphi_i^*(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = I_{D_i}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = I_{D_i}(x)$ .

Перейдем далее к схеме моделирования "по рассеяниям", в которой вспомогательные случайные величины выбираются в следующем порядке:  $\chi, \nu, \mathbf{v}$ , т. е.  $(\mathbf{t}, x) = (l, i, x)$ , причем  $x_0$  выбирается из источника частиц. Кроме того, будем полагать, что свободная часть пространства, вне некоторой выпуклой оболочки среды, заполнена фиктивной средой с  $\sigma(\cdot) \equiv \sigma_c(\cdot)$ . Ясно, что в результате весовая оценка по пробегу принимает вид

$$\xi_t^{(i)} = \sum_{n=1}^N \mathbf{Q}_n \mathbf{h}_i(\mathbf{t}_n, x_n),$$

где  $\mathbf{h}_i(\mathbf{t}_n, x_n) \equiv \chi_n^{(i)}$ , причем  $\chi_0^{(i)} \equiv 0$ . По определению  $\varphi_i^*(x) = \mathbf{E}\xi_t^{(i)}(x) < C < +\infty \quad \forall x \in R \times V$ , где  $\xi_t^{(i)}(x) \equiv \xi_t^{(i)}$  при условии, что источник частиц сосредоточен в точке  $x = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$ .

**Теорема 6.2.** *Если выполняются общие условия несмещенности (4.8),  $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$ , а также  $\mathbf{K}^* \mathbf{h}_i^2 \in C_1$ ,  $\mathbf{f}^2/\pi \in N_1$ , то  $\mathbf{D}\xi_t^{(i)} < +\infty$ .*

**Доказательство.** Возведя сумму, выражающую величину  $\xi_t^{(i)}(x)$ , в квадрат и проведя стандартное частичное осреднение суммы произведений неодинаковых слагаемых (см. раздел 4.5), получаем равенство

$$\mathbf{E} \left[ \xi_t^{(i)}(x) \right]^2 = \mathbf{E} \sum_{n=1}^N \mathbf{Q}_n^2 \left[ \mathbf{h}_i^2(\mathbf{t}_n, x_n) + 2\mathbf{h}_i(\mathbf{t}_n, x_n) \varphi_i^*(x_n) \right].$$

Вес  $\mathbf{Q}_n^2$  соответствует оператору  $\mathbf{K}_p$  (см. раздел 4.5). Следовательно,

$$H(x) = \mathbf{E} \left[ \xi_t^{(i)}(x) \right]^2 < C_0 \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \mathbf{K}_p^{*n} \mathbf{h}_i^2 \right] (x) < C < +\infty \quad \forall x \in R \times V.$$

Окончательно имеем  $\mathbf{E} \left[ \xi_t^{(i)} \right]^2 = (H, \mathbf{f}^2/\pi) < +\infty$ . □

Соотношение  $\mathbf{K}^* \mathbf{h}_i^2 \in C_1$  имеет место, например, для прямого моделирования вследствие экспоненциальности распределения длины свободного пробега.

Полученные в этом разделе результаты автоматически обобщаются на случай, когда вместо интеграла из (6.18) необходимо оценивать интеграл  $\int g(x) \Phi(x) dx$ , где  $g(x)$  – ограниченная, кусочно-постоянная неотрицательная функция. При этом вместо  $\chi_n^{(i)}$  в (6.19) рассматривается величина  $\int_0^{X_n} g(\mathbf{r}_{n-1} + l\omega_{n-1}, \mathbf{v}_{n-1}) dl$ . Отметим, что при  $h(x) = \Delta_{D_i}(\mathbf{r})/v$  модифицированное соответствующим образом выражение (6.19) определяет весовую "оценку по времени", среднее значение которой равно интегралу от концентрации траекторий процесса переноса частиц по области  $D_i$ . Интересно отметить, что оценки такого типа построены также для диффузионных и, вообще говоря, непрерывных процессов (см. далее раздел 7.4).

## 6.7. ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ

**6.7.1. Одномерный вариант.** В этом разделе описана модификация метода Монте-Карло, связанная с экспоненциальным преобразованием функции, описывающей поток частиц.

В ряде случаев, например, при прохождении через толстый однородный слой вещества  $0 \leq z \leq H$  поток частиц убывает приблизительно как  $\exp(-cz)$ . Отсюда возникает мысль о переходе к уравнению переноса для

$$\Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = e^{cz} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}).$$

После подстановки этого выражения в (6.1) и сокращения на  $\exp(-cz)$  получаем

$$(\omega, \text{grad } \Phi_1) + (\sigma - c \cos v) \Phi_1 = \int \Phi_1 \sigma_s w(\mathbf{v}, \mathbf{v}', \mathbf{r}) d\mathbf{v}' + e^{cz} \Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}),$$

где  $v$  – угол между  $\omega$  и осью  $z$ . Это уравнение соответствует задаче, для которой  $\sigma_1 = \sigma - c \cos v = \sigma - c\mu$ , а в каждом столкновении образуется  $W = \sigma_s / (\sigma - c \cos v)$  рассеянных частиц.

Величину  $W$  можно назвать *коэффициентом выживания*. Если  $W \leq 1$ , то его можно рассматривать как вероятность рассеяния. Величина  $1 - W$  будет, соответственно, вероятностью поглощения. Если  $W > 1$ , то после столкновения можно испускать  $W$  рассеянных частиц или испускать одну частицу, но вес ее дополнительно умножать на  $W$ . Последний способ упрощает расчетную программу, но увеличивает дисперсию результата, которая может быть даже бесконечной, если возможны значения весового множителя, превосходящие единицу.

Далее рассматривается односкоростной случай:  $\mathbf{v} \equiv \omega$ . В этом случае можно компенсировать флуктуации весов с помощью специальной модификации рассеяния  $w_1(\omega', \omega) = w(\omega', \omega) a(\mu)$ , где  $a(\mu)$  – пока неизвестная функция. После моделирования (без поглощения) такого рассеяния вес преобразуется по формуле

$$Q = Q' q \int_{-1}^{+1} w(\omega', \omega) a(\mu) d\omega \Big/ \left[ \left( 1 - \frac{c \cos v'}{\sigma} \right) a(\mu) \right].$$

Отсюда видно, что если выполняется соотношение

$$\left( 1 - \frac{c\mu}{\sigma} \right) a(\mu) = q \int_{-1}^{+1} w(\omega, \omega') a(\mu') d\omega', \quad (6.20)$$

то происходит последовательное сокращение весов; это существенно улучшает алгоритм. Последнее уравнение известно в теории переноса под названием *характеристического уравнения проблемы Милна*. Ему удовлетворяет значение  $c = 1/L$ , где  $L > 1/\sigma$  – так называемая *диффузионная длина*. Функция  $a(\mu)$  и величина  $c$  для изотропного рассеяния (т. е. при  $w = 1/4\pi$ ) определяется формулами:

$$a(\mu) = \frac{1}{1 - \mu/(\sigma L)}, \quad \frac{q}{2} \frac{\sigma}{c} \ln \frac{\sigma/c + 1}{\sigma/c - 1} = 1.$$

В общем случае иногда оценку величины  $c$  можно получить с помощью транспортного приближения (см. далее подразд. 6.7.3). Можно показать, что модифицированное таким образом экспоненциальное преобразование представляет собой вариант моделирования по ценности (см. разд. 4.5), в котором в качестве приближения к функции ценности

используется асимптотическое решение проблемы Милна  $\exp(z/L)a(\mu)$ ; параметр  $c$  при этом определяется однозначно. Конструкции и обоснование эффективности алгоритмов такого рода подробно изложены в [2]. Показано, что относительная погрешность оценки вероятности прохождения здесь растет пропорционально толщине слоя, а не экспоненциально, как при прямом моделировании.

**6.7.2. Исследование дисперсии.** Изучим вопрос об эффективности частичного ценностного моделирования, когда с использованием функции ценности модифицируется только распределение длины пробега.

Рассмотрим практически значимую задачу об оценке вероятности  $P$  вылета частицы из полупространства  $-\infty < z \leq H$ . Будем считать, что вне этого полупространства находится абсолютный поглотитель ( $\sigma = \sigma_c$ ), причем средний свободный пробег  $\sigma^{-1} = 1$  во всем пространстве. Рассеяние частицы в точке столкновения описывается симметричной нормированной плотностью  $w(\mu, \mu')$ , где  $\mu$  - косинус угла между направлением пробега и осью  $z$ . Плотность распределения длины свободного пробега частицы вдоль заданного направления рассеяния после столкновения равна  $e^{-l}$ ,  $l \geq 0$ . Вероятность выживания при столкновении в точке  $z < H$  равна  $q < 1$ . Сопряженное уравнение (4.3) для описанной модели, с учетом вспомогательной переменной  $l$ , можно записать в виде

$$\varphi^*(z, \mu) = q \int_0^A e^{-l} \int_{-1}^1 w(\mu, \mu') \varphi^*(z', \mu') d\mu' dl + h(z, \mu), \quad z < H, \quad (6.21)$$

где  $A = +\infty$  при  $\mu < 0$  и  $A = (H - z)/\mu$  при  $\mu > 0$ , причем  $z' = z + \mu l$ .

В схеме “по рассеяниям” (см. раздел 6.5) вероятность вылета частицы, стартовавшей в точке  $x = (z, \mu)$ , определяется величиной  $\mathbf{E}\xi_x$  (см. далее раздел 6.9) при

$$h(z, \mu) = \begin{cases} \exp\{-(H - z)/\mu\} & \text{при } z < H \text{ и } \mu > 0, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases} \quad (6.22)$$

Рассмотрим дополнительно уравнение (6.21) со свободным элементом

$$h_a(z, \mu) = \begin{cases} a(\mu) \exp\{-(H - z)/\mu\} & \text{при } z < H \text{ и } \mu > 0, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases} \quad (6.23)$$

Здесь  $a(\mu)$  совместно с длиной диффузии  $1/L$  удовлетворяют характеристическому уравнению (6.20) при  $\sigma = 1$ . Для реальной индикатрисы рассеяния имеем:  $a(\mu) \geq \epsilon > 0$  при  $\mu > 0$ . В случае (6.23) подстановкой нетрудно проверить (см. раздел 4.4), что соответствующая функция ценности равна

$$\varphi^*(z, \mu) = \mathbf{E}\xi_x = a(\mu) \exp\{-(H - z)/L\}. \quad (6.24)$$

Моделирование длины пробега согласно плотности  $e^{-l}e^{c\mu l}$  приводит к экспоненциальному преобразованию, для которого  $\sigma' = 1 - c\mu$ . При этом, если обрыв траектории моделируется физически и  $c = 1/L$ , то экспоненциальное преобразование эквивалентно “ценностному” моделированию длины пробега с использованием (6.24), для которого  $Q_n = Q_{n-1}e^{-lc\mu}/(1 - c\mu)$ . Отметим, что, если  $\sigma \neq 1$ , то ценностное весовое моделирование строится для  $\sigma' = \sigma(1 - \mu/L)$ .

В случае изотропного рассеяния было получено [2], что для соответствующего оператора  $K_p^*$  уравнения (4.15) спектральный радиус  $\rho(K_p^*) = 1$ . Таким образом, при ценностном моделировании длины пробега для оценки по столкновениям в случае изотропного рассеяния не выполняется стандартный критерий конечности дисперсии. Однако дисперсия все таки оказывается конечной даже для произвольной индикатрисы рассеяния.

**Теорема 6.3.** *Дисперсия оценки по столкновениям  $\xi_x$  при ценностном (соответственно (6.24)) моделировании длины пробега конечна.*

**Доказательство.** Ввиду неотрицательности всех функций, при использовании (6.24) справедливо представление (см. раздел 4.4):

$$E\xi_x^2 = \sum_{n=0}^{\infty} K_p^{*n} \left( h_a [2\varphi^* - h_a] \right) (x). \quad (6.25)$$

Прямой подстановкой, с учетом (6.23) и (6.24), можно проверить равенство:  $\varphi^* = K_p^* \varphi^* + \varphi^* h$ . Подставив в это равенство под знак оператора  $K_p^*$  вместо  $\varphi^*$  равную ей функцию  $K_p^* \varphi^* + \varphi^* h$ , получаем равенство  $\varphi^* = K_p^{*2} \varphi^* + K_p^* (\varphi^* h) + \varphi^* h$ . Далее сделаем такую же подстановку в последнем равенстве под знак оператора  $K_p^{*2}$ , и так далее. В результате, учитывая неотрицательность всех функций, получаем

$$\varphi^* = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ K_p^{*n} \varphi^* + \sum_{k=0}^{n-1} K_p^{*k} (\varphi^* h) \right].$$

Следовательно, ряд  $\sum_k K_p^{*k} (\varphi^* h)$  сходится. Поскольку  $h_a (2\varphi^* - h_a) \leq Ch\varphi^*$ , то сходится и ряд (6.25). Аналогичный ряд сходится и при использовании (6.22) вследствие неравенства  $a(\mu) \geq \epsilon > 0$  при  $\mu > 0$ .  $\square$

Отметим, что теорема 6.3 дает обоснование классического экспоненциального преобразования с параметром  $c = 1/L$  в односкоростном случае: она позволяет корректно оценивать вероятностную погрешность соответствующих статистических оценок. Также отметим, что теорема 6.3 справедлива и для *модифицированной “бернуллиевой” оценки*, которая “подсчитывает” веса  $Q_N$  вылетающих частиц, т.к. эта оценка получается путем стандартной рандомизации рассмотренной оценки по столкновениям (см. раздел 4.7). Дополнительные исследования показали, что эти выводы справедливы и для значений  $c \in (0, 1/L)$ .

В случае изотропного рассеяния, расчеты с использованием оценки по столкновениям и модифицированной “бернуллиевой” оценки для оценивания решения уравнения (6.21) со свободным элементом (6.22) показали, что ценностное моделирование длины пробега при  $H - z \geq 10$  существенно уменьшает дисперсию по сравнению с прямым моделированием, не значительно проигрывая асимптотически оптимальному, для которого  $c = \sqrt{1 - q}$  (см. далее подразд. 6.7.3). Экспериментально было также установлено, что, например, в случае  $H - z = 2$  ценностное моделирование длины пробега увеличивает дисперсию. Для подобной задачи с  $w(\mu, \mu') = \delta(\mu' - \mu)$ ,  $\mu > 0$ , дисперсии “бернуллиевой” оценки вероятности вылета при прямом и ценностном моделировании длины пробега совпадают для всех  $z < H$  [2].

Особо отметим, что теоретически важным является установление факта существования задач, для которых частичное ценностное моделирование увеличивает дисперсию по сравнению с прямым моделированием.

**6.7.3. Асимптотически оптимальное значение  $c$ .** Нелинейная теория оптимизации (см. подразд. 4.11.3) при  $H \rightarrow \infty$  дает вместо (6.20) следующее уравнение [2]:

$$a(\mu) = \frac{q}{(1 - c\mu)^2} \int_{-1}^1 w(\mu, \mu') a(\mu') d\mu'. \quad (6.26)$$

Для его решения используем *транспортное приближение* [1]

$$w(\mu, \mu') = \mu_0 \delta(\mu' - \mu) + (1 - \mu_0)/2,$$

где  $\mu_0$  – средний косинус угла рассеяния. В силу однородности (6.26) можно предположить, что  $\int_{-1}^1 a(\mu) d\mu = 1$ . Подставив в (6.26) транспортное приближение для  $w(\mu, \mu')$ , получим

$$a(\mu) = \frac{q}{2}(1 - \mu_0) / [(1 - c\mu)^2 - q\mu_0].$$

Справедливо следующее уравнение для критического значения  $c^*$ :

$$\ln \frac{1 - (c - (q\mu_0)^{1/2})^2}{1 - (c + (q\mu_0)^{1/2})^2} = c \frac{4}{1 - \mu_0} \left( \frac{\mu_0}{q} \right)^2.$$

В случае изотропного рассеяния из (6.26) имеем  $c = (1 - q)^{1/2}$ . Если  $\sigma \neq 1$ , то в рассматриваемом алгоритме модифицированное сечение равно  $\sigma(1 - c\mu)$ , если значение  $c$  определяется из (6.26).

**6.7.4. Сферический вариант.** Иногда бывает необходимо рассчитывать прохождение частиц через оптически толстую среду в окрестность некоторой точки, например,  $r = 0$ . В этом случае целесообразно использовать такое преобразование:

$$\Phi_1(\mathbf{r}, \omega) = e^{-cr} \Phi(\mathbf{r}, \omega).$$

Подстановка в (6.1) приводит здесь к аналогичной модификации процесса с тем отличием, что  $\sigma_1 = \sigma + c \cos v(t)$ , где  $v(t)$  – угол между  $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + t\omega$  и  $\omega$ , т. е.  $\sigma_1$  меняется вдоль пробега частиц. Следовательно, для определения длины пробега необходимо решать уравнение

$$\int_0^l [\sigma + c \cos v(t)] dt = -\ln \alpha.$$

Если  $\sigma$  постоянно, то это уравнение легко решается, так как

$$\cos v(t) = \frac{\partial r(t)}{\partial t}, \quad \int_0^l \cos v(t) dt = r(l) - r_0, \quad r(l) = \sqrt{r_0^2 + l^2 + 2l \cos v(0)}.$$

Выборочное значение  $l$  определяется формулой:  $l = (B - \sqrt{B^2 - AC})/A$ , где

$$A = \sigma^2 - c^2, \quad B = \sigma(-\ln \alpha + cr_0) + c^2 r_0 \cos v(0), \quad C = (-\ln \alpha + cr_0)^2 - c^2 r_0^2.$$

В схеме "по столкновениям" это соответствует использованию вспомогательной функции ценности  $g(\mathbf{r}, \omega) = [1 + c\mu(\mathbf{r}, \omega)]e^{-cr}$ . Здесь  $\|K_p\| < 1$ , если  $|c| < \sqrt{1 - q}$ .

## 6.8. СОПРЯЖЕННОЕ УРАВНЕНИЕ ПЕРЕНОСА. ТЕОРЕМА ОПТИЧЕСКОЙ ВЗАИМНОСТИ

В этом разделе рассматривается односкоростной случай. Пусть необходимо оценить функционал  $I_p = (\Phi, p)$ , где  $p$  – некоторая неотрицательная функция. Известно, что  $I_p = (\Phi, p) = (\Phi^*, \Phi_0)$  (см. соотношение (4.4)). Здесь  $\Phi^*$  – решение сопряженного уравнения переноса

$$-(\omega, \text{grad } \Phi^*) + \sigma \Phi^* = \int w(\omega', \omega, \mathbf{r}) \sigma_s(\mathbf{r}) \Phi^*(\mathbf{r}, \omega') d\omega' + p$$

с граничным условием  $\Phi^*(\mathbf{r}, \omega) = 0$ , если  $\mathbf{r} \in \Gamma$  и  $(\omega, \mathbf{n}_r) < 0$ . Изменив знаки у  $\omega$  и  $\omega'$ , получаем для  $\Phi_1^*(\mathbf{r}, \omega) = \Phi^*(\mathbf{r}, -\omega)$  следующее уравнение:

$$(\omega, \text{grad } \Phi_1^*) + \sigma \Phi_1^* = \int w(\omega', \omega, \mathbf{r}) \sigma_s(\mathbf{r}) \Phi_1^*(\mathbf{r}, \omega') d\omega' + p(\mathbf{r}, -\omega)$$

с граничным условием  $\Phi_1^*(\mathbf{r}, \omega) = 0$ , если  $\mathbf{r} \in \Gamma$  и  $(\omega, \mathbf{r}_r) > 0$ . Это интегро-дифференциальное уравнение переноса с плотностью источника  $p_1(\mathbf{r}, \omega) = p(\mathbf{r}, -\omega)$ . Далее имеем

$$I_p = (\Phi^*, \Phi_0) = \int_R \int_{\Omega} \Phi^* \Phi_0 d\mathbf{r} d\omega = \int_R \int_{\Omega} \Phi_1^*(\mathbf{r}, \omega) \Phi_0(\mathbf{r}, -\omega) d\mathbf{r} d\omega.$$

Приведенные соотношения показывают, что для оценки величины  $I_p$  можно моделировать процесс переноса из источника с плотностью  $p(\mathbf{r}, -\omega)$  и вычислять показания приемника с весовой функцией  $\Phi_0(\mathbf{r}, -\omega)$ . Это утверждение выражает хорошо известную *теорему оптической взаимности*. Для практического использования этой теоремы остается лишь представить  $I_p$  в виде функционала от плотности столкновений, т. е. записать следующим образом:

$$I_p = \int_R \int_{\Omega} \varphi_1^*(\mathbf{r}, \omega) \frac{\Phi_0(\mathbf{r}, -\omega)}{\sigma(\mathbf{r})} d\mathbf{r} d\omega.$$

Таким образом, в каждой точке столкновения здесь нужно вычислять величину  $\Phi_0(\mathbf{r}, -\omega)/\sigma(\mathbf{r})$ . Далее рассмотрен весьма показательный пример использования теоремы оптической взаимности, который дает тестовую задачу для исследования эффективности локальных оценок.

**Пример 6.1.** Рассматривается следующая задача теории переноса. Неоднородная сферически-симметричная чисто рассеивающая среда освещена мононаправленным потоком излучения. Необходимо определить интеграл  $I_0$  по направлениям от интенсивности в центре сферы. Пусть  $R$  – радиус сферы  $S$ , которая ограничивает среду. Для определенности будем считать интенсивность потока равной  $1/(\pi R^2)$ ; это соответствует единичному источнику на поверхности сферы. Плотность поверхностного источника равна (см., например, [1]) интенсивности падающего потока, помноженной на косинус угла между направлением частицы и внутренней нормалью к поверхности в точке падения. Следовательно, в данном случае имеем

$$\Phi_0(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{\pi R^2} \Delta_s(\mathbf{r}) \delta(\omega - \omega_0) \frac{|\langle \mathbf{r}, \omega \rangle|}{R},$$

где  $\Delta_s(\mathbf{r})$  – обобщенная функция, соответствующая интегрированию по поверхности сферы  $S$ . Искомый функционал  $I_0$  выражается формулой

$$I_0 = \int_{\Omega} \Phi(0, \omega) d\omega = (\Phi, p),$$

где  $p(\mathbf{r}, \omega) = \delta(\mathbf{r})$ . Отсюда по теореме оптической взаимности

$$I_0 = (\Phi^*, \Phi_0) = \frac{1}{\pi R^2} \int_S \Phi^*(\mathbf{r}(s), \omega_0) \frac{|\langle \mathbf{r}(s), \omega_0 \rangle|}{R} ds.$$

Здесь  $\Phi^*$  – решение уравнения переноса для изотропного источника частиц с плотностью  $p(\mathbf{r}, \omega) = \delta(\mathbf{r})$ . Функция

$$Q(\omega_0) = \int_S \Phi^*(\mathbf{r}(s), \omega_0) \frac{|\langle \mathbf{r}(s), \omega_0 \rangle|}{R} ds$$

представляет собой соответствующую этому источнику интегральную угловую плотность числа частиц, вылетающих из среды. Очевидно, что здесь

$$Q(\omega_0) \equiv Q = const \quad \text{и} \quad \int_{\Omega} Q d\omega = 4\pi Q = \int_R \int_{\Omega} p(\mathbf{r}, \omega) d\mathbf{r} d\omega = 4\pi.$$

Следовательно,  $Q = 1$ . Отсюда получаем окончательный результат:  $I_0 = 1/(\pi R^2)$ . Для пустой сферы (т. е. когда коэффициент рассеяния равен нулю) этот результат очевиден. Довольно интересно, что он меняется при введении произвольного чисто рассеивающего вещества. Для интегрального потока  $I_s(0)$  рассеянных хотя бы раз частиц очевидно выполняется соотношение  $I_s(0) = (1 - e^{-\tau})/(\pi R^2)$ , где  $\tau$  – оптическая длина радиуса сферы  $S$ .

Достаточно, очевидно, что теорему оптической взаимности целесообразно использовать, когда приемник излучения локализован, а источник распределен в фазовом пространстве.

## 6.9. ЛОКАЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ

**6.9.1. Стандартные оценки.** Для простоты обозначений здесь рассматривается односкоростной случай. Построенные алгоритмы автоматически применимы для оценки величины  $\int \Phi(\mathbf{r}^*, \omega^* v) dv$ .

Пусть требуется оценить поток частиц  $\Phi$  в заданной точке фазового пространства  $x^* = (\mathbf{r}^*, \omega^*)$ . Известно, что плотность столкновений  $\varphi(x)$  равна  $\sigma(\mathbf{r})\Phi(x)$ . Для простоты записи формул предположим, что  $f(x^*) = 0$  и  $\sigma = \sigma_s$ , т. е.  $\sigma_c = 0$ . Деля обе части уравнения переноса на  $\sigma(\mathbf{r})$ , получаем

$$\Phi(x^*) = \int_X \frac{k(x', x^*)}{\sigma(\mathbf{r}^*)} \varphi(\mathbf{r}') dx'. \quad (6.27)$$

Таким образом, величина  $\Phi(\mathbf{r}^*)$  формально представлена в виде линейного функционала от плотности столкновений. Однако ядро  $k(x', x^*)$  содержит дельта-функцию. Для ее устранения достаточно проинтегрировать выражение (6.27) по некоторой области направлений  $\Omega_i$ . В результате получаем

$$\int_{\Omega_i} \Phi(\mathbf{r}^*, \omega^*) d\omega^* = \int_X l_i(x', x^*) \varphi(x') dx' = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n l_i(x_n, x^*), \quad (6.28)$$

$$\text{где } l_i(x, x^*) = \frac{\exp[-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}^*)] g(\mu^*, \mathbf{r})}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}^*|^2} \Delta_i(\mathbf{s}^*).$$

Здесь  $\mathbf{s}^* = (\mathbf{r}^* - \mathbf{r})/|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}|$ ,  $\mu^* = (\omega, \mathbf{s}^*)$  и  $\Delta_i(\mathbf{s})$  – индикатор области  $\omega_i$ .

Формула (6.28) представляет собой хорошо известную локальную оценку потока частиц. Эта оценка имеет следующие недостатки: она не позволяет рассчитывать поток непосредственно в заданном направлении  $\omega^*$  в точке  $\mathbf{r}^*$ , дисперсия ее бесконечна из-за множителя  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}^*|^2$  в знаменателе.

Нетрудно заметить, что уравнение (4.1) эквивалентно уравнению  $\varphi = K^2\varphi + Kf + f$ . Соответствующая последнему уравнению локальная оценка может быть названа *двойной локальной*. Пусть  $f$  – плотность фиктивных столкновений, эквивалентных падающему на среду потоку частиц. Тогда плотность столкновений  $Kf$  соответствует нерассеянному потоку в среде. Поэтому двойная локальная оценка потока рассеянных частиц здесь определяется формулой

$$\Phi(x^*) = \int_X \frac{k_1(x', x^*)}{\sigma(\mathbf{r}^*)} \varphi(x') dx', \quad \text{где } \frac{k_1(x', x^*)}{\sigma(\mathbf{r}^*)} = \frac{1}{\sigma(\mathbf{r}^*)} \int_X k(x', x'') k(x'', x^*) dx''. \quad (6.29)$$

Нетрудно заметить, что последний интеграл берется по лучу  $\mathbf{r}''(t) = \mathbf{r}^* - \omega^* t$ ,  $t > 0$ .

Двойная локальная оценка дает возможность рассчитывать интенсивность непосредственно в заданной точке фазового пространства  $x^*$ ; дисперсия ее хотя и бесконечна, но расходится слабее, чем дисперсия локальной оценки.

Интеграл в (6.29) можно оценивать по одному случайному углу  $\rho''$ , который выбирается подходящим способом. Наиболее просто полагать:  $\rho'' = \mathbf{r}^* - \omega^* l^*$ , где  $l^*$  – случайная длина свободного пробега из  $\mathbf{r}^*$  в направлении, обратном  $\omega^*$ . Соответствующая случайная оценка величины (6.29) после перехода под знаком интеграла к полярной системе координат с центром  $\mathbf{r}^*$  принимает следующий вид:

$$h_1(\mathbf{r}', \omega', l^*) = g\left[\left(\omega' \frac{\rho'' - \mathbf{r}'}{|\rho'' - \mathbf{r}'|}\right), \mathbf{r}'\right] g\left[\left(\frac{\rho'' - \mathbf{r}'}{|\rho'' - \mathbf{r}'|} \omega^*\right), \rho''\right] e^{-\tau(\mathbf{r}', \rho'')} / (2\pi |\rho'' - \mathbf{r}'|^2).$$

Несмещенность оценки

$$\xi_1 = \sum_{n=0}^N Q_n h_1(\mathbf{r}_n, \omega_n, l_n^*) \quad (6.30)$$

легко проверяется повторным осреднением. Оценка (6.30) может давать плохие результаты для сред с сильно вытянутой индикатрисой из-за наличия двух значений этой функции в  $h_1$ . Аналогичное замечание, впрочем, можно сделать и в отношении обычной локальной оценки. При этом возможны сильно заниженные оценки результата и дисперсии для задач, в которых существенную роль играют частицы, рассеивающиеся назад и затем испытывающие одно или несколько рассеяний на пути к приемнику.

**6.9.2. Модификации локальных оценок.** Пусть необходимо оценить величину  $I(\mathbf{r}^*) = \int_{\Omega} \Phi(x^*) d\omega^*$ . Интегрируя (6.29) по  $\omega^*$ , получаем:

$$I(\mathbf{r}^*) = \frac{1}{\sigma(\mathbf{r}^*)} \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n \int_X k(x_n, x'') \int_{\Omega} k(x'', x^*) d\omega^* dx''. \quad (6.31)$$

Известно, что дисперсия вытекающей отсюда случайной оценки для  $I$  конечна. Однако двойной интеграл в (6.31) практически невычислим. Оценку этого интеграла можно рандомизовать следующим образом: соответственно заданной индикатрисе выбирается направление  $\omega$  вспомогательного пробега из точки  $\mathbf{r}$  и по нему вычисляется интеграл

$$I(\mathbf{r}_n, \omega) = \int_0^{\infty} \frac{\sigma(\mathbf{r}(t)) e^{-\tau[\mathbf{r}_n, \mathbf{r}(t)] - \tau[\mathbf{r}(t), \mathbf{r}^*]} g\left[\left(\omega, \frac{\mathbf{r}^* - \mathbf{r}(t)}{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}(t)|}\right)\right] dt}{2\pi |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}^*|^2}, \quad (6.32)$$

где  $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_n + \omega t$ . Дисперсия этой оценки расходится логарифмически, так как  $I(\mathbf{r}_n, \omega) \sim 1/\sin \theta$  при малых углах  $\theta$  между  $\omega$  и  $\mathbf{r}^* - \mathbf{r}_n$ . Если включить указанную особенность в плотность распределения  $\omega$ , то дисперсия становится конечной. Однако сделать это удовлетворительно для реальных индикатрис весьма непросто.

Американский математик Калос [3] предложил следующую модификацию локальной оценки с конечной дисперсией. Интеграл в (6.31) вычисляется по одному случайному узлу  $\mathbf{r}''$ , плотность которого равна  $c |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*| / (|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}_n|^2 |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}^*|^2)$ . Обоснование конечности дисперсии для такой модификации следует из рассмотрения интеграла, выражающего вклад от столкновения некоторой кратности. Реализация оценки Калоса [3] затруднена сложностью выбора  $\mathbf{r}''$  (один из вариантов – перейти к полярным координатам  $(\theta, t)$  и выбирать  $\theta$  равномерно, а  $t$  – согласно плотности  $c_1 / |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}^*|^2$ ). Кроме того, в случайную оценку интеграла входит два значения индикатрисы. Это весьма отрицательно влияет на качество оценки, если индикатриса сильно вытянута.



Если характеристики системы определяются только одной координатой  $z$ , то локальные оценки можно получить, исходя из уравнения переноса для плоской геометрии. Мы рассмотрим более общую задачу оценки интеграла  $I_{z_0}(\omega^*)$  от функции  $\Phi(\mathbf{r}, \omega^*)$  по плоскости  $z = z_0$  в произвольной среде. Этот интеграл определяется величиной  $(\varphi, h_{z_0}^*)$ , где  $h_{z_0}^*(x)$  – поток частиц, пришедших на плоскость  $z = z_0$  по направлению  $\omega^*$  непосредственно после столкновения в точке  $x$ . Очевидно, что

$$h_{z_0}^*(\mathbf{r}, \omega_1) = \begin{cases} (g(\mu^*) \exp(-\tau_1)) / (2\pi c^*) & \text{при } (z_0 - z)c^* \geq 0, \\ 0 & \text{при } (z_0 - z)c^* < 0. \end{cases}$$

Здесь  $\omega_1$  – направление пробега после рассеяния в точке  $\mathbf{r}$ ,  $C_1 = \omega_{1,z}$ ,  $\tau_1$  – оптическое расстояние от  $\mathbf{r}$  до плоскости  $z = z_0$  в направлении  $\omega_1$ .

Локальные оценки можно использовать для вычисления интегралов от потока частиц по некоторым областям фазового пространства. Пусть  $\Phi(x) = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n, x)$ . Тогда, на основе теоремы Фубини, имеем

$$\int_D \Phi(x) dx = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n \int_D h(x_n, x) dx.$$

Последний интеграл можно оценивать по одному случайному узлу  $y_n$ , который выбирается в области  $D$  соответственно заданной плотности  $p_1(x_n, y_n)$ . Несмещенность рандомизированной оценки

$$\xi = \sum_{n=0}^N Q_n \frac{h(x_n, y_n)}{p_1(x_n, y_n)}$$

легко проверяется повторным осреднением по  $\{y_n\}$  и  $\{x_n\}$ . В плотность  $p_1(x_n, y_n)$  по возможности следует включать особенности функции  $h(x_n, y_n)$  для уменьшения дисперсии  $\mathbf{D}\xi$ . Таким образом можно оценивать интегралы потока по поверхности детектора, по углу апертуры детектора и т. д.

## 6.10. ОЦЕНКА ВРЕМЕННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ

**6.10.1. Основные оценки.** Цепь Маркова столкновений  $x_0, x_1, \dots, x_N$  рассматривается здесь в фазовом пространстве  $X = R \times V \times T$  координат, скоростей и времени, т.е.  $x_n = (\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n, t_n)$ , где  $\mathbf{r}_n$  – точка  $n$ -го столкновения,  $\mathbf{v}_n$  – скорость, а  $t_n = t_{n-1} + |\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n|/v_{n-1}$  – время “жизни” сталкивающейся частицы. Цепь определяется плотностью  $f(x)$  распределения начального столкновения  $x_0$  и плотностью  $k(x', x)$  перехода из состояния  $x'$  в  $x$ , причем предполагается, что

$$\int_X k(x', x) dx = q(x') \leq 1 - \delta, \quad \delta > 0, \quad (6.33)$$

т.е. цепь рано или поздно обрывается с вероятностью единица и среднее число переходов конечно. Условие (6.33) выполняется, например, для ограниченной системы.

Наряду с исходным уравнением (4.1) рассматривается в  $L_\infty(X)$  сопряженное уравнение (4.3). Далее построена весовая оценка, связанная с сопряженным решением  $\varphi^*$ . Ясно, что функцию

$$J(t) = \int_R \int_V \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}, \quad h \in L_\infty(R \times V),$$

можно представить в виде

$$J(t) = \int_R \int_V \int_0^t f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau. \quad (6.34)$$

Здесь

$$F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) = \int_R \int_V \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v},$$

где  $\varphi_0(x; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$  – плотность столкновений (по аргументу  $x$ ) от одного столкновения в точке  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$ , т.е. для  $f(x) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) \delta(t)$ . Функция  $\varphi_0$  является функцией Грина для рассматриваемой “столкновительной” модели процесса переноса и характеризуется соотношением:

$$\varphi(x) = \int_R \int_V \int_0^t f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t - \tau; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau, \quad \forall f \in L_1(X).$$

Далее будем полагать, что  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, -t) \equiv 0$ .

**Лемма 6.1.** Пусть  $f \in L_1(X)$ . Тогда

$$J(t) = \int_R \int_V \int_0^\infty f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau. \quad (6.35)$$

**Доказательство.** Замена переменных  $\tau \rightarrow t - \tau$  в (6.34) дает равенство

$$J(t) = - \int_R \int_V \int_t^0 f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau.$$

Изменив направление интегрирования по  $\tau$  с учетом соотношения  $F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, -t) \equiv 0$  при  $t > 0$ , отсюда получаем (6.35).  $\square$

Обозначим через  $\eta(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$  оценку по столкновениям для функционала

$$J_h^{(0)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) = \int_R \int_V \int_0^\infty \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \tau; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) |h(\mathbf{r}, \mathbf{v})| d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\tau,$$

который, очевидно, представляет собой решение задачи, сопряженной к рассматриваемой, в точке  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$ , при  $h \equiv |h(\mathbf{r}, \mathbf{v})|$ , т.е.

$$\mathbf{E}\eta(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) = \varphi^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0) \quad \text{для} \quad h \equiv |h(\mathbf{r}, \mathbf{v})|.$$

Известно, что  $\mathbf{E}\eta^2(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) < +\infty$ , если  $\rho(K)_p < 1$  (см. разд. 4.4).

Отметим, что функцию Грина  $\varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$  можно формально рассматривать как сопряженное решение  $\varphi^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$  при  $h(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v}) \delta(t' - t)$ .

**Теорема 6.4.** Пусть точка  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$  распределена для  $t_0 \equiv 0$  с плотностью  $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , причем

$$|f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t)/f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)| < C < +\infty, \quad \text{и} \quad f_1 \mathbf{E}\eta^2 \in L_1(R \times V).$$

Тогда в условиях леммы 6.1 выполняется соотношение  $J(t) = \mathbf{E}\xi_t$ , где

$$\xi_t = \sum_{n=0}^N Q_n h(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n) f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - t_n) / f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0), \quad Q_0 \equiv 1, \quad (6.36)$$

причем  $\mathbf{D}\xi_t < +\infty$ .

**Доказательство.** Используя теорему Фубини, получаем

$$\begin{aligned} J(t) &= \int_R \int_V f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) \left\{ \int_R \int_V \int_0^\infty \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \tau; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) \left[ \frac{f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau)}{f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)} h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\tau \right] \right\} d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 = \\ &= \int_R \int_V f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) J_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 = \mathbf{E}_{f_1} J_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) = \mathbf{E}_{f_1} \varphi_t^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0), \end{aligned}$$

причем  $\varphi_t^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$  является сопряженным решением для

$$h \equiv h_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \tau) = \frac{f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau)}{f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)} h(\mathbf{r}, \mathbf{v}).$$

Рандомизация полученного выражения величины  $J(t)$  с использованием оценки по столкновениям для сопряженного решения (см. подразд. 6.10.1) и дает (6.36). Соотношение  $\mathbf{E}\xi_t^2(t) < +\infty$  выполняется вследствие условия  $f_1 \mathbf{E}\eta^2 \in L_1(R \times V)$  и равномерной ограниченности величины  $|f/f_1|$ .  $\square$

**Лемма 6.2.** Пусть функция  $f_t^{(n-1)}(x)$  абсолютно непрерывна по  $t$  во всяком конечном временном интервале  $\forall (\mathbf{r}, \mathbf{v}) \in R \times V$ ,  $|f_t^{(m)}| \leq C f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  для почти всех  $x$ , причем  $f_1 F \in L_1(X)$ ,  $m = 0, 1, \dots, n$ , и  $F(x) < C < +\infty$ . Тогда

$$J_t^{(m)}(t) = \int_R \int_V \int_0^\infty f_t^{(m)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau, \quad (6.37)$$

причем  $J_t^{(m)} \in L_1(-\infty, +\infty)$ ,  $m = 0, 1, \dots, n$ .

**Доказательство.** В выражении (6.35) интеграл по времени имеет, очевидно, переменный верхний предел  $t$ . Производные по этому пределу имеют нулевые значения, так как в условиях леммы  $f_t^{(m-1)}(0) = 0$ ,  $m = 0, 1, \dots, n-1$ , и в силу ограниченности  $F(x)$  соответствующие подынтегральные функции для  $\tau = t$  непрерывны. С другой стороны, внесение производной под знак интеграла здесь допустимо вследствие известной теоремы о параметрическом дифференцировании интеграла Лебега. Последнее утверждение леммы доказывается путем замены  $\tau \rightarrow t - \tau$  и последующего интегрирования по  $t$  в (6.37).  $\square$

Путем использования соотношения (6.37) вместо (6.35) получается следующее утверждение.

**Теорема 6.5.** В условиях теоремы 6.4 с заменой  $f \rightarrow f_t^{(n)}$  при выполнении условий леммы 6.2 выполняется соотношение  $J^{(n)}(t) = \mathbf{E}\xi_t^{(n)}$ , причем  $\mathbf{D}\xi_t^{(n)} < +\infty$ .

**6.10.2. Оценка временной константы.** Рассмотрим теперь оценку параметра экспоненциальной временной асимптотики. Известно, что при выполнении довольно общих условий имеет место асимптотическое соотношение

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \sim C(\mathbf{r}, \mathbf{v}) e^{\lambda t}, \quad t \rightarrow +\infty, \quad (6.38)$$

где  $\lambda$  – ведущее характеристическое число соответствующего однородного стационарного уравнения переноса с заменой  $\sigma_c \rightarrow \sigma_c + \lambda/|v|$ . Эти условия, в частности, имеют место для односкоростного процесса переноса в ограниченной среде с функцией источника, достаточно быстро убывающей по времени.

В этом подразделе мы предполагаем, что, если  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \exp(-\lambda t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0$  для всех  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , то выполняются соотношения (6.38) и

$$J(t) = C e^{\lambda t} [1 + \varepsilon(t)], \quad \varepsilon(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0. \quad (6.39)$$

Вследствие (6.37) функция  $J'(t)$  обладает тем же свойством, то есть

$$J'(t) = C_1 e^{\lambda t} [1 + \varepsilon_1(t)], \quad \text{если} \quad f'(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \exp(-\lambda t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0 \quad \text{для всех} \quad (\mathbf{r}, \mathbf{v}).$$

В этом случае для  $\lambda < 0$  интегрирование функции  $J'(t)$  в пределах  $(\tau, +\infty)$  при  $\tau \rightarrow +\infty$  показывает, что

$$J'(t) = C \lambda e^{\lambda t} [1 + \varepsilon_1(t)], \quad \varepsilon_1(t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0. \quad (6.40)$$

Действительно, для  $\lambda < 0$  имеем

$$J(\tau) = C e^{\lambda \tau} [1 + \varepsilon(\tau)] = - \int_{\tau}^{+\infty} J'(t) dt = C_1 \lambda^{-1} e^{\lambda \tau} - C_1 \int_{\tau}^{\infty} e^{\lambda t} \varepsilon_1(t) dt = C_1 \lambda^{-1} e^{\lambda \tau} [1 + \varepsilon_2(\tau)],$$

т. е.  $C_1 = C \lambda$ . Пусть теперь  $\lambda \geq 0$ . Введя дополнительное поглощение с коэффициентом  $\sigma_c^{(0)} > \lambda$ , получаем (см., например, [2])

$$J_0(t) = \exp(-\sigma_c^{(0)} t) J(t) = C \exp((\lambda - \sigma_c^{(0)}) t) [1 + \varepsilon(t)],$$

причем  $J'_0 = C \exp((\lambda - \sigma_c^{(0)}) t) [1 + \varepsilon_1(t)]$ . Используя последние равенства после дифференцирования соотношения  $J(t) = \exp(\sigma_c^{(0)} t) J_0(t)$ , получаем (6.40) и в случае  $\lambda \geq 0$ .

Вследствие соотношений (6.39) и (6.40), величина  $J'(t)/J(t)$  для достаточно большого значения  $t$  дает оценку временной константы  $\lambda$ . Отметим, что соответствующую, определяемую теоремами 6.4 и 6.5, оценку метода Монте-Карло, можно рандомизировать (см. разд. 4.7) с целью определения флуктуаций временной константы процесса переноса частиц в случайной среде.

## 6.11. РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ОБРАТНЫХ И СТОХАСТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

**6.11.1. Обратные задачи.** Предположим, что экспериментально получены значения  $\tilde{I}_k$  функционалов

$$I_k(\sigma_1, \dots, \sigma_n) = (\varphi, h_k) = (\Phi, p_k), \quad k = 1, \dots, N,$$

где  $\varphi$  – решение интегрального уравнения переноса, а  $\Phi$  – соответствующая интенсивность (см. подразд. 6.1.1). Необходимо оценить параметры  $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ . Пусть  $(\sigma_1^{(0)}, \dots, \sigma_n^{(0)})$  – начальные оценки, тогда в линейном приближении имеем систему:

$$\sum_{i=1}^n a_{ki} \delta_i = \tilde{I}_k - I_k, \quad k = 1, \dots, N, \quad \text{где} \quad I_k \equiv I_k(\sigma_1^{(0)}, \dots, \sigma_n^{(0)}),$$

$$a_{ki} = \frac{\partial I_k(\sigma_1^{(0)}, \dots, \sigma_n^{(0)})}{\partial \sigma_i}, \quad \delta_i = \sigma_i - \sigma_i^{(0)},$$

или в векторной форме:

$$\mathbf{A} \boldsymbol{\delta} = \tilde{\mathbf{I}} - \mathbf{I}, \quad \boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^{(0)}. \quad (6.41)$$

Производные  $\{a_{ki}\}$  вычисляются методом Монте-Карло одновременно с  $\{I_k\}$  (см. раздел 6.4). Если линейное приближение неудовлетворительно, то можно строить следующие итерации. Система (6.41) может быть переопределенной и тогда необходимо использовать метод наименьших квадратов, т. е. определять  $(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$  путем минимизации квадратической нормы  $(\mathbf{A} \boldsymbol{\delta} - (\tilde{\mathbf{I}} - \mathbf{I}), \mathbf{A} \boldsymbol{\delta} - (\tilde{\mathbf{I}} - \mathbf{I}))$ . В результате получаем систему:

$$\mathbf{A}^* \mathbf{A} \boldsymbol{\delta} = \mathbf{A} (\tilde{\mathbf{I}} - \mathbf{I})$$

с квадратной матрицей  $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ . Предварительно целесообразно поделить  $k$ -ю строку исходной системы (6.41) на среднеквадратическую погрешность  $s_k$  экспериментальной оценки  $\tilde{I}_k$  и умножить  $i$ -й столбец матрицы  $\mathbf{A}$  на  $\sigma_i^{(0)}$  ( $k = 1, \dots, N$ ;  $i = 1, \dots, n$ ). Такую процедуру можно назвать *масштабированием*; она представляет собой простейшую регуляризацию решения рассматриваемой обратной задачи. Как правило, целесообразно использовать более детализированную регуляризацию на основе априорной информации о  $(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ . Кроме того необходимо проводить исследование устойчивости получаемых оценок к ошибкам в исходной модели задачи переноса.

**6.11.2. Стохастические задачи теории переноса излучения.** В качестве первого примера рассмотрим задачу теории переноса излучения в среде, которая представляет собой случайный конгломерат шаровых неоднородностей. Предполагается, что центры шаров образуют пространственный пуассоновский поток точек (см. пример 2.2 из разд. 2.4), т. е. числа центров в непересекающихся областях независимы и подчинены закону Пуассона; возможно пересечение шаров. Полное сечение вещества внутри сфер равно  $\sigma_1$  и равно  $\sigma_2$  в остальной части рассматриваемой области; для определенности будем полагать, что  $\max(\sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1$ .

Моделирование траекторий в реализации такой среды можно осуществлять методом максимального сечения (см. подразд. 6.2.1). Соответствующий алгоритм состоит в том, что длина свободного пробега частицы выбирается по формуле  $l = -\ln \alpha$ , где  $\alpha$  – случайное число, равномерно распределенное в  $(0, 1)$ , и, если полученная точка столкновения не находится внутри какой-либо сферы, то моделируется дельта-рассеяние, т. е. частица снова движется в том же направлении с вероятностью  $(\sigma_1 - \sigma_2)/\sigma_1$ . Иногда целесообразно использовать весовой способ моделирования, дисперсию которого для сред рассматриваемого типа можно оценивать на основе методики, изложенной в разделе 4.4.

Для построения реализации среды здесь достаточно выбрать значение  $N$  числа центров сфер из соответствующего распределения Пуассона и затем выбрать точки каждого из  $N$  центров независимо и равномерно по объему области. Для уменьшения числа вычислительных операций можно разбить область на части и довыбирать в этих частях реализацию потока центров по мере попадания в них траектории частицы. Очевидно, что линейные размеры указанных частей должны быть велики по сравнению с радиусами сфер. Уже выбранные части потока точек, вообще говоря, следует запоминать, так как возможно возвращение частицы в соответствующие части области. Перевыбор частей потока не соответствует изложенному в разделе 4.7 принципу рандомизации и дает смещение оценки, которым можно пренебречь лишь при сильной анизотропии рассеяния.

Известно, что рассмотренная выше модель стохастической среды вполне удовлетворительна для описания кучевой облачности при решении задач переноса солнечного излучения в атмосфере. Известно также, что при описании дымов более подходящей является модель, в которой плотности для общих точек шаровых областей являются суммарными, т. е.  $\sigma_1$  заменяется на  $n\sigma_1$ , где  $n$  – число шаров, которым принадлежит данная точка.

Другая общая модель стохастической среды определяется представлением полного сечения  $\sigma(r)$  в виде

$$\sigma^{(m)}(r) = \sum_{i=1}^m \sigma_i^{(m)}(r), \quad (6.42)$$

где  $\sigma_i^{(m)}$  ( $i = 1, \dots, m$ ) – независимые реализации некоторого однородного случайного поля, например, случайного кусочно-постоянного поля, связанного со стационарными

точечными потоками (см. раздел 2.7). Напомним, что корреляционная функция поля  $\sigma$  совпадает с корреляционной функцией отдельного слагаемого  $\sigma_i^{(m)}$ , а одномерное распределение определяется правилом композиции, т. е. представление (6.42) удобно, если одномерное распределение моделируемого поля безгранично делимо.

Различные свойства полей вида (6.42) представлены в [2]. В частности, там определен класс корреляционных функций  $k(r)$  для изотропных полей (6.42), который оказывается близким к классу выпуклых функций, что вполне достаточно для создания удовлетворительных моделей при решении многих практических задач теории переноса.

Следует отметить, что практически достоверной информацией о корреляционных характеристиках реального случайного поля бывает только величина масштаба, иначе длины корреляции  $\rho$ . Величина  $\rho$  обычно определяется формулой  $\rho = \int_0^\infty k(r) dr$ , но может быть определена и выражением  $\rho_1 = [-k(0)/(2k''(0))]^{1/2}$ .

Целесообразно использовать представления (6.42) с большими значениями  $m$ , так как при  $m \rightarrow \infty$  реализации даже случайного кусочно-постоянного поля  $\sigma^{(m)}$  становятся практически непрерывными, а это наиболее естественно (для полей с абсолютно непрерывными одномерными распределениями). Однако при решении задач теории переноса вполне удовлетворительным является значение  $m$ , для которого характерный размер областей постоянства  $\sigma^{(m)}$  существенно меньше средней длины свободного пробега частицы; такое значение  $m$  целесообразно определять с помощью специальных предварительных расчетов.

Возможны различные алгоритмы моделирования длины свободного пробега частицы в среде с полным сечением вида (6.42). Наиболее простым (но, возможно, не самым экономичным) здесь является алгоритм, состоящий в том, что длина пробега моделируется независимо для каждого из слагаемых  $\sigma_i^{(m)}(r)$ , а затем выбирается минимальная из полученных длин; распределение такой величины совпадает с физическим распределением длины свободного пробега (это легко проверяется).

Известны некоторые результаты решения методом Монте-Карло задач теории переноса излучения в стохастических плоских средах. Как оказалось, эти результаты хорошо согласуются с приведенной далее асимптотикой средней интенсивности излучения, проходящего через такие среды. Эта асимптотика показывает важность учета стохастической неоднородности реальных сред и дает тестовые значения для алгоритмов статистического моделирования; кроме того, в некоторых случаях коэффициент при асимптотическом выражении целесообразно вычислять с помощью метода Монте-Карло. Поэтому далее кратко представлена указанная асимптотика.

Хорошо известно, что асимптотика интенсивности в плоском слое с точностью до постоянного множителя определяется решением уравнения переноса в бесконечной среде, поэтому целесообразна следующая математическая модель.

*1. Плотность бесконечной среды представляет собой однородное случайное поле с плоской асимметрией; точнее, коэффициенты рассеяния и поглощения зависят лишь от одной координаты  $z$  следующим образом:*

$$\sigma_s = \sigma_s(z) = q\sigma(z), \quad \sigma_c = \sigma_c(z) = (1 - q)\sigma(z), \quad 0 \leq q < 1,$$

*а индикатриса рассеяния везде одинакова. Случайная функция  $\sigma(z)$  однородна по  $z$  и удовлетворяет условиям, обеспечивающим выполнение центральной предельной теоремы для  $\tau = \int_0^z \sigma(z') dz'$ .*

*2. Источник распределен равномерно на плоскости  $z = 0$ , причем угловое распределение интенсивности источника удовлетворяет характеристическому уравнению*

теории переноса [2] и, следовательно, воспроизводится при переносе в бесконечной среде. Поэтому интенсивность излучения для данной реализации  $\sigma$  определяется оптическим расстоянием точки наблюдения от плоскости  $z = 0$ :

$$I(z; \sigma) = I(\tau(z)) = e^{-\tau/L}, \quad \tau = \int_0^z \sigma(z') dz',$$

где  $L$  – длина диффузии, являющаяся первым собственным числом характеристического уравнения для случая  $\sigma = 1$ ,  $\sigma_s = q$ ; иначе говоря,  $L$  – безразмерная длина диффузии для данных индикатрисы рассеяния и вероятности выживания кванта в акте однократного рассеяния.

3. Необходимо определить асимптотику при  $z \rightarrow \infty$  средней интенсивности, т. е. математического ожидания  $\mathbf{E}I(z; \sigma)$ .

Таким образом сформулированная задача обобщается на случай произвольного момента случайной интенсивности  $\mathbf{E}I^k(z; \sigma)$  путем замены  $L \rightarrow L/k$ . Поскольку  $e^{-x}$  – выпуклая функция, то в силу неравенства Йенсена имеем

$$\mathbf{E}I(z; \sigma) \geq \mathbf{E}e^{-\mathbf{E}\tau/L} = e^{-\sigma_0\tau/L}, \quad \sigma_0 = \mathbf{E}\sigma.$$

Отсюда следует, что если  $\mathbf{E}I(z; \sigma) \sim ce^{-\alpha z}$  при  $z \rightarrow \infty$ , то  $\alpha \leq \sigma_0/L$ . На основе предельной теоремы для однородных случайных функций была получена следующая асимптотическая формула:

$$\mathbf{E}I(z; \sigma) \approx \exp \left\{ -\frac{z\sigma_0}{L} \left( 1 - \frac{s^2\rho}{L\sigma_0} \right) \right\},$$

где  $s^2 = \mathbf{D}\sigma$ ,  $\rho$  – корреляционная длина случайной функции  $\sigma(z)$ , в предположении, что выполняется неравенство  $2s^2\rho < L\sigma_0$ . Универсальная асимптотика построена в [2] на основе следующей модификации нормального (в асимптотике) распределения  $N(\sigma_0 z, 2z\rho s^2)$ : “хвост” отрицательных значений собирается в “атом” в точке  $\tau = 0$ . При этом указанная выше асимптотика реализуется, если  $2s^2\rho < L\sigma_0$ , и

$$\mathbf{E}I(z) \sim \frac{2\rho s^3 \sqrt{2\rho}}{\sigma_0(2\rho s^2 - L\sigma_0)\sqrt{2\pi z}} \exp \left\{ -\frac{z\sigma_0}{L} \frac{L\sigma_0}{4s^2\rho} \right\},$$

если  $2s^2\rho > L\sigma_0$ . Приведенные асимптотические формулы показывают, что стохастичность среды может в среднем существенно усиливать прохождение излучения. Это относится и к протяженному детерминированному слою, плотность которого является реализацией случайного эргодического поля.

## 6.12. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ

**6.12.1. Система уравнений переноса с поляризацией.** Существуют разные способы описания поляризационных свойств света. Наиболее распространенным и удобным является способ, предложенный Стоксом в 1852 г. Он ввел четыре параметра:  $I, Q, U, V$ , имеющие размерность интенсивности, которые определяют соответственно интенсивность, степень поляризации, плоскость поляризации и степень эллиптичности излучения. В дальнейшем будем рассматривать их, как компоненты вектор-функции интенсивности света

$$\mathbf{I}(\mathbf{r}, \omega) = (I_1(\mathbf{r}, \omega), I_2(\mathbf{r}, \omega), I_3(\mathbf{r}, \omega), I_4(\mathbf{r}, \omega))^T$$

в четырехмерном функциональном пространстве.

“Феноменологическая” марковская модель переноса излучения с поляризацией наиболее проста в предположении изотропности среды. Она отличается от рассмотренной ранее скалярной модели (см. раздел 6.1) лишь тем, что индикатриса рассеяния заменяется на матрицу рассеяния, которая преобразует ассоциируемый с данным “фотоном” числовой вектор Стокса в конце свободного пробега. Введем обозначения:  $x = (\mathbf{r}, \omega)$ ,  $\Phi(x)$  – вектор-функция плотности столкновений, т. е.

$$\Phi \equiv (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4)^T = (\sigma I_1, \sigma I_2, \sigma I_3, \sigma I_4),$$

$P(\mu, \mathbf{r})$  – матрица рассеяния,  $\mu = (\omega^*, \omega)$  – косинус угла рассеяния,  $q(\mathbf{r}) = \sigma_s(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r})$ .

Согласно сказанному выше, ядро (6.5) с учетом поляризации заменяется на следующее матричное ядро:

$$K(x', x) = \frac{q(\mathbf{r}') e^{-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r})} \sigma(\mathbf{r}) P(\mu, \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \delta \left( \omega - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right).$$

Более детализированное представление матричного ядра с использованием вспомогательных переменных – длины пробега и азимутального угла рассеяния – использовано далее в подразд. 6.12.3.

Таким образом, получаем интегральное уравнение переноса с учетом поляризации относительно вектор-функции плотности столкновений  $\Phi$ :

$$\Phi(x) = \int_X K(x', x) \Phi(x') dx' + F(x) \quad (6.43)$$

$$\text{или } \varphi_i(x) = \sum_{j=1}^4 \int_X k_{ij}(x', x) \varphi_j(x') dx' + f_i(x), \quad i = 1, \dots, 4. \quad (6.44)$$

Алгоритмы метода Монте-Карло основаны на представлении решения уравнения (6.43) рядом Неймана. Такое представление имеет место, если норма оператора  $\mathbf{K}$  (или какой-нибудь его степени  $\mathbf{K}^{n_0}$ ) меньше единицы. Простые физические соображения, связанные с быстрым убыванием интенсивности многократно рассеянного излучения показывают, что для задачи о поляризации света в сферической атмосфере это соотношение выполняется, например, при  $n_0 = 3$ .

Далее приводится строгое обоснование сходимости ряда Неймана для системы интегральных уравнений переноса. Запишем систему (6.44) в виде

$$\varphi_i(x) = [\mathbf{K}\Phi]_i(x) + f_i(x), \quad i = 1, \dots, 4, \quad (6.45)$$

где  $X$  – конечномерное евклидово пространство, а вектор-функции  $\Phi$  и  $F$  принадлежат функциональному пространству  $L_1$ , причем  $\|F\| = \sum_{i=1}^4 \int_X |f_i(x)| dx$ . Предполагается, что  $\mathbf{K} \in [L_1 \rightarrow L_1]$ . Легко показать, что

$$\|\mathbf{K}\|_{L_1} \leq \sup_{j, x'} \sum_{i=1}^4 \int_X |k_{ij}(x', x)| dx.$$

Пусть  $\mathbf{F}$  – множество вектор-функций Стокса из  $L_1$ :

$$\Phi = (I, Q, U, V) = (I[\Phi], Q[\Phi], U[\Phi], V[\Phi]),$$

которые обладают, в частности, следующими свойствами:  $I \geq 0$ ,  $I^2 \geq Q^2 + U^2 + V^2$ . Отсюда  $|Q| + |U| + |V| \leq \sqrt{3}I$  и

$$\|\Phi\|_{L_1} \leq (1 + \sqrt{3}) \int_X I dx = (1 + \sqrt{3}) \|I[\Phi]\|_{L_1}.$$



Оператор  $\mathbf{K}$  представим в виде  $\mathbf{K} = D \times S$ , где  $S$  – “оператор рассеяния”, а  $D$  – “оператор ослабления”. Непосредственно из физического смысла указанных операторов следует, что  $\mathbf{K}, D, S \in [\mathbf{F} \rightarrow \mathbf{F}]$ ,  $\|I[S\Phi]\|_{L_1} = \|I[\Phi]\|_{L_1}$ , т.е. интегральная интенсивность после рассеяния сохраняется, и  $\|I[D\Phi]\|_{L_1} \leq q\|I[\Phi]\|_{L_1}$ , где  $q < 1$  для системы конечных размеров или при наличии поглощения. Объединяя последние соотношения, получаем

$$\|\mathbf{K}^n F\|_{L_1} \leq (1 + \sqrt{3})\|I[\mathbf{K}^n F]\|_{L_1} \leq (1 + \sqrt{3})q^n\|I(F)\|_{L_1},$$

что и доказывает сходимость ряда Неймана для системы (6.45) при  $F \in \mathbf{F}$ .

### 6.12.2. Решение систем интегральных уравнений методом Монте-Карло.

Методом Монте-Карло обычно оценивают линейные функционалы от решения рассматриваемого интегрального уравнения. Ниже приводится общий алгоритм метода Монте-Карло для оценки таких функционалов в случае системы интегральных уравнений второго рода. Пусть необходимо вычислить функционал

$$I_H = (\Phi, H) = \sum_{i=1}^m \int_X \varphi_i(x) h(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (\mathbf{K}^n F, H)$$

от решения системы интегральных уравнений

$$\varphi_i(x) = [\mathbf{K}\Phi]_i(x) + f_i(x) = \sum_{j=1}^4 \int_X k_{ij}(x', x) \varphi_j(x') dx' + f_i(x).$$

Здесь  $H$  – вектор-функция с ограниченными компонентами т.е.  $H \in L_\infty$ . Определим в фазовом пространстве  $X$  однородную цепь Маркова  $\{x_n\}$  плотностью вероятностей  $r_0(x)$  начального состояния  $x_0$ , плотностью вероятностей перехода  $r(x', x)$  из  $x'$  в  $x$  и вероятностью  $p(x)$  обрыва траектории при переходе из состояния  $x$ . Введем также вспомогательный случайный вектор “весов”  $\mathbf{Q}$  по формулам:

$$Q_0^{(i)} = \frac{F_i(x_0)}{r_0(x_0)}, \quad Q_n^{(i)} = \sum_{j=1}^4 Q_{n-1}^{(j)} \frac{k_{ij}(x_{n-1}, x_n)}{r(x_{n-1}, x_n)} \times \frac{1}{1 - p(x_{n-1})}.$$

Аналогично тому, как это делается для одного интегрального уравнения (см. раздел 4.3), можно показать, что

$$\mathbf{E} \sum_{n=0}^N [Q_n^{(i)} F_i(x_n)] = (\Phi, H) = I_H = (F, \Phi^*) \quad (6.46)$$

Здесь  $N$  – случайный номер последнего состояния цепи. Соотношение (6.46) описывает алгоритм метода Монте-Карло для оценки величины  $I_H$ . При обосновании этого соотношения существенно используется разложение решения системы уравнений в ряд Неймана. В (6.46)  $\Phi^*$  – это решение сопряженной системы (см. далее подразд. 6.12.3).

Далее рассматривается подробное описание алгоритма метода Монте-Карло для расчетов интенсивности и поляризации многократно рассеянного излучения в сферической атмосфере. Наиболее “физической” для этой задачи является плотность вероятностей перехода  $r(x', x)$ , определяемая ядром  $k_{11}(x', x)$ , которое соответствует процессу переноса излучения без учета поляризации. Очевидно, при моделировании такого процесса вектор “весов” преобразуется после рассеяния матрицей с элементами  $p_{ij}(\omega', \omega, \mathbf{r})/p_{11}(\omega', \omega, \mathbf{r})$ . Заметим, что эта схема обеспечивает наименьшие флуктуации “весов”, но не наименьшую вероятностную погрешность оценки результата. Оценки с

малой дисперсией можно получить, учитывая информацию о решении сопряженной задачи. В частности, существенное уменьшение дисперсии можно получить, используя в расчетах следующие модификации: ценностное распределение начальных точек траекторий, моделирование первых нескольких столкновений без “вылета”, умножение вероятности прихода фотона на Землю на приближенную “ценность” альбедного случая, пропорциональную величине интегрального альбеда.

Наиболее полно световой луч характеризуется вектор-параметром Стокса  $\vec{I}(I, Q, U, V)$ , компоненты которого определяют интенсивность, степень поляризации, плоскость поляризации и степень эллиптичности излучения. Предполагается, что нерассеянный солнечный свет  $\vec{I}_0$  является естественным, т. е.  $\vec{I}_0 = (I_0, 0, 0, 0)$ .

После рассеяния вектор-параметр Стокса  $\vec{I}$  преобразуется согласно формуле

$$\vec{I}_1(r, \omega) = P(\omega', \omega, \mathbf{r}) \cdot \vec{I}(\mathbf{r}, \omega'), \quad (6.47)$$

где  $P(\omega', \omega, \mathbf{r}) = L(\pi - i_2)R(\omega', \omega, \mathbf{r})L(-i_1)$ ,

$$L(i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2i & \sin 2i & 0 \\ 0 & \sin 2i & \cos 2i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Здесь  $i_1$  и  $i_2$  – углы между плоскостью рассеяния и плоскостями, проходящими через ось системы координат и векторы  $\vec{\omega}'$  и  $\vec{\omega}$  соответственно,  $L$  – матрица поворота [1]. Матрица рассеяния света в воздухе  $R(\omega', \omega, \mathbf{r})$  получается как средневзвешенное от матриц молекулярного и аэрозольного рассеяния:

$$R(\omega', \omega, \mathbf{r}) = \frac{R_a(\omega', \omega, \mathbf{r})\sigma_a(r) + R_M(\omega', \omega)\sigma_M(\mathbf{r})}{\sigma_a(\mathbf{r}) + \sigma_M(\mathbf{r})}.$$

Для анизотропной среды, вообще говоря, все 16 компонент матрицы рассеяния различны. В случае изотропной среды вид матрицы рассеяния упрощается:

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 & 0 \\ r_{21} & r_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} \\ 0 & 0 & -r_{43} & r_{44} \end{pmatrix} \quad (6.48)$$

Если рассеивающие частицы сами являются однородными сферами, то  $r_{11} = r_{22}$ ,  $r_{12} = r_{21}$ ,  $r_{33} = r_{44}$ ,  $r_{34} = r_{43}$ . Многочисленные эксперименты, проведенные для определения матрицы рассеяния света в атмосфере, показали, что матрица  $R_a$  для атмосферного аэрозоля имеет также вид (6.48). Матрица молекулярного рассеяния задается следующим образом:

$$R_M(\omega', \omega) = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} (1 + \mu^2)/2 & -(1 - \mu^2)/2 & 0 & 0 \\ -(1 - \mu^2)/2 & (1 + \mu^2)/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix}$$

где  $\mu = (\omega', \omega)$  – косинус угла рассеяния  $\Theta$ . Матрица  $R$  нормировалась таким образом, что  $\int_{-1}^1 r_{11}(\mu) d\mu = 1$ . Косинус  $\mu$  угла рассеяния  $\Theta$  моделируется соответственно элементу  $r_{11}$  матрицы рассеяния  $R(\omega', \omega, \mathbf{r})$ , т. е. по индикатрисе рассеяния, азимутальный угол  $\varphi$  считается изотропным. Углы  $\Theta$  и  $\varphi$  задают новое направление фотона после рассеяния. Для определения величин  $I, Q, U, Y$  вводится система координат, ось которой

совпадает с радиусом-вектором точки рассеяния. При таком выборе системы координат вектор-функция  $\vec{I}$  симметрична относительно оси, параллельной направлению солнечного излучения. Это позволяет применить модификации метода локального счета. Кроме того, введенная система координат наиболее удобна для представления результатов расчетов и сравнения их с экспериментальными данными. После выбора нового направления углы  $i_1$  и  $i_2$  [1] можно найти, воспользовавшись формулами сферической тригонометрии.

Введем следующие обозначения:  $x, y, z$  – координаты точки рассеяния  $O$ ,  $r$  – расстояние от точки рассеяния до центра Земли,  $s = (x/r, y/r, z/r)$  – единичный вектор направления оси  $OZ'$ ,

$$\mu = \cos \Theta = (\omega', \omega), \quad \mu_0 = \sin \Theta, \quad \mu_1 = \cos \nu' = (\omega', s),$$

$$\mu_2 = \sin \nu', \quad \mu_3 = \cos \nu = (\omega, s), \quad \mu_4 = \sin \nu.$$

Из сферического треугольника  $(0, \omega, \omega')$  находим

$$\mu_3 = \mu_1 \mu + \mu_2 \mu_0 \cos i_1, \quad \mu_1 = \mu_3 \mu + \mu_4 \mu_0 \cos i_2,$$

отсюда  $\cos i_1 = (\mu_3 - \mu_1 \mu) / (\mu_2 \mu_0)$ ,  $\cos i_2 = (\mu_1 - \mu_3 \mu) / (\mu_4 \mu_0)$ ,

$$\sin i_1 = \sqrt{1 - \cos^2 i_1} \operatorname{sign}(q), \quad \sin i_2 = \sqrt{1 - \cos^2 i_2} \operatorname{sign}(q), \quad q = \omega' \times \omega \times r.$$

Знаки синусов определяются знаком смешанного произведения  $q$  для того, чтобы учесть направление вращения системы координат вектора Стокса от плоскости  $\omega', \mathbf{r}$  к плоскости  $\omega, \mathbf{r}$ .

Важной частью алгоритма является метод локального счета для оценки потока частиц в точке наблюдения. Координаты вектор-параметра Стокса для локальной оценки пересчитываются относительно  $\mu^* = (\omega', \omega^*)$  – косинуса угла между направлением  $\omega'$  частицы до столкновения и направлением  $\omega^*$  из точки рассеяния  $\mathbf{r}(x, y, z)$  в точку наблюдения  $\mathbf{r}^*(x^*, y^*, z^*)$ :  $\vec{I}_1(\mathbf{r}, \omega^*) = P(\omega', \omega^*, \mathbf{r}) \times \vec{I}(\mathbf{r}, \omega')$ . История частицы после столкновения в точке продолжается обычным образом с параметрами, преобразованными согласно формуле (6.47). Процедура пересчета вектор-параметра после рассеяния частицы содержит следующие расчетные формулы:

$$I(\mathbf{r}, \omega) = R_{11}I_0(\mathbf{r}, \omega') + R_{12}A, \quad V(\mathbf{r}, \omega) = R_{43}B + R_{44}V_0(\mathbf{r}, \omega');$$

$$Q(\mathbf{r}, \omega) = (R_{21}I_0(\mathbf{r}, \omega') + AR_{22}) \cos i_2 - (R_{33}B - R_{34}V_0(\mathbf{r}, \omega')) \sin 2i_2,$$

$$U(\mathbf{r}, \omega) = (R_{21}I_0(\mathbf{r}, \omega') + AR_{22}) \sin 2i_2 + (R_{33}B - R_{34}V_0(\mathbf{r}, \omega')) \cos 2i_2,$$

где  $A = Q_0(\mathbf{r}, \omega') \cos 2i_1 - U_0(\mathbf{r}, \omega') \sin 2i_1$ ,  $B = Q_0(\mathbf{r}, \omega') \sin 2i_1 + U_0(\mathbf{r}, \omega') \cos 2i_1$ .

**6.12.3. Критерий конечности дисперсии.** Для исследования дисперсии оценки функционала (6.46) в виде  $(F, \Phi^*)$  рассматривается сопряженная система интегральных уравнений переноса с учетом поляризации

$$\varphi_i^*(x) = \int \sum_{j=1}^4 k_{ji}(x, x') \varphi_j^*(x') dx' + h_i(x), \quad i = 1, \dots, 4.$$

Используются обозначения:  $H(x)$  – вектор-столбец функций  $h_1(x), \dots, h_4(x)$ ;  $K(x, x')$  – матрица ядер системы. Здесь  $x = (\mathbf{r}, \omega)$ , где  $\mathbf{r}$  – точка физического пространства

$R$ , а  $\omega \in \Omega$  – единичный вектор направления скорости кванта в точке столкновения.  
Функция

$$\Phi^*(x) = (\varphi_1^*(x), \varphi_2^*(x), \varphi_3^*(x), \varphi_4^*(x))^T$$

представляет собой векторную ценность столкновений. Сравнительно с (6.44) система является сопряженной, поэтому

$$K(x, y) = qp_\chi(l; \mathbf{r}, \omega') P^T(\mu) \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \varphi)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega'l),$$

где  $y = (\mathbf{t}', x') = (\mu, \varphi, l, x')$ ,  $P^T(\mu, \varphi) = L(i_1)R^T(\mu)L(-\pi + i_2)/2\pi$ ,  $\mu = (\omega, \omega')$ ,

$$R(\mu) = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} \\ 0 & 0 & -r_{43} & r_{44} \end{pmatrix}, \quad L(i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2i & \sin 2i & 0 \\ 0 & -\sin 2i & \cos 2i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

где  $i_k = i_k(\omega, \mu, \varphi)$ ;  $k = 1, 2$ ;  $\varphi \in U(0, 2\pi)$ ;  $r_{ij} = r_{ij}(\mu)$ ;  $r_{11} \geq 0$ ;  $\int_{-1}^{+1} r_{11}(\mu) d\mu = 1$ . Предполагается, что среда изотропна и  $P$  не зависит от  $\mathbf{r}$ .

Для оценки решения методом Монте-Карло строится векторная случайная величина  $\xi_x$ , такая, что  $\mathbf{E}\xi_x = \Phi^*(x)$ . Если почленное осреднение ряда для  $\xi_x \xi_x^T$  допустимо, то ковариационная матрица  $\mathbf{E}(\xi_x \xi_x^T) = \psi(x)$  удовлетворяет матрично-интегральному уравнению (см. раздел 4.8)

$$\psi(x) = A(x) + \int \frac{K(x, y)\psi(y)K^T(x, y)}{p(x, y)} dy,$$

где  $A = H\Phi^{*T} + \Phi^*H^T - HH^T$ , а  $p(x, y)$  – переходная плотность моделируемой цепи Маркова:

$$p(x, y) = q_1 p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega') p_2(\mu) \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \varphi)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega'l)/(2\pi).$$

Уравнение для  $\psi$  рассматривается в пространстве  $E(R \times \Omega)$  матричнозначных функций, непрерывных на  $R \times \Omega$ , с нормой  $\|\psi\| = \sup_{i,j,x} |\psi_{ij}(x)|$ . Обозначим матрично-интегральный оператор из этого уравнения через  $\mathbf{K}_p$ . Если спектральный радиус  $\rho(\mathbf{K}_p)$  меньше единицы, то указанное выше осреднение матрицы  $\xi_x \xi_x^T$  при  $H^T \equiv (1, 0, 0, 0)$  допустимо, так как в силу свойств функции Стокса здесь  $\xi_{x,1} \geq 0$ ,  $\mathbf{E}\xi_{x,1}^2 < +\infty$ ,  $|\xi_{x,i}| \leq c\xi_{x,1}$ . Последнее неравенство сохраняется, если в нем слева рассматривать величины, соответствующие произвольной ограниченной  $H$ .

Нетрудно показать, что при выполнении условия  $r_{ij}(\mu)[p_2(\mu)]^{-1/2} \in C[-1, +1]$ , где  $i, j = 1, 2, 3, 4$ , оператор  $S_p$ , получаемый из  $K_p$  подстановкой  $x \rightarrow \omega$ ,  $y \rightarrow \omega'$ ,  $p \rightarrow p_2/2\pi$ ,  $K \rightarrow P^T$ , вполне непрерывен ( $S_p$  соответствует “чистому” рассеянию).

Известно неравенство

$$\rho(\mathbf{K}_p) \leq q_0 \rho(S_p), \quad \text{где } q_0 = \sup_{\mathbf{r}, \omega} \int_0^\infty \frac{q^2 p_\chi^2(l; \mathbf{r}, \omega)}{q_1 p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega)} dl.$$

Таким образом, если  $q_0 < 1/\rho(S_p)$ , то обычно используемые оценки вида  $F^T \xi_x$  имеют конечную дисперсию.

Далее будем искать собственную матрицу  $\psi^{(0)}(\omega)$  оператора  $S_p$  в виде диагональной матрицы с неотрицательными элементами  $(1, a_1, a_1, a_2)$  на диагонали. Прямые выкладки показывают, что матрица  $S_p \psi^{(0)}$  диагональна; при этом зависимость от  $i_2$  исчезает,

а  $i_1 \in U(0, 2\pi)$ . Приравнивая элементы матрицы  $S_p \psi^{(0)}$  соответствующим элементам матрицы  $\lambda_0 \psi^{(0)}$ , получаем систему уравнений

$$c_{11} + c_{21}a_1 = \lambda_0, \quad c_{12} + (c_{22} + c_{33})a_1 + c_{43}a_2 = 2\lambda_0a_1, \quad c_{34}a_1 + c_{44}a_2 = \lambda_0a_2,$$

где  $c_{ij} = \int [r_{ij}^2(\mu)/p_2(\mu)] d\mu$ .

**Утверждение 6.1.** *Если существует решение последней системы с положительными компонентами  $\lambda_0$ ,  $a_1$  и  $a_2$ , то  $\rho(S_p) = \lambda_0$ .*

**Доказательство.** Вполне непрерывный оператор  $S_p$  оставляет инвариантным воспроизводящий конус  $T_p \subset E(\Omega)$  неотрицательно-определенных матриц-функций. Поскольку  $\psi^{(0)}$  – внутренний элемент конуса, то  $\lambda_0 = \rho(S_p)$ .  $\square$

Для  $\zeta = F^T \xi_x$  имеем  $\mathbf{E}\zeta = (F, \Phi^*)$  и  $\mathbf{E}\zeta^2 = \mathbf{E}[F^T \psi(x) F / \pi^2(x)]$ . Для релеевского рассеяния было получено [1]:  $\rho(S_p) = 1 + (3\pi - 8)/8 \approx 1.178$ . Если  $q_0 \rho(S_p) \geq 1$ , то целесообразно после рассеяния некоторого заданного порядка переходить к моделированию процесса переноса без поляризации.

### 6.13. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ РАДИАЦИОННО-КОНДУКТИВНОГО ТЕПЛОПЕРЕНОСА

Уравнение переноса является составной частью многих нелинейных задач. Так, например, радиационно-кондуктивный перенос энергии в плоском слое  $0 \leq z \leq L$  вещества, нагреваемом внешним излучением, описывается следующей системой уравнений:

$$c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + F[I_\lambda], \quad t > 0, \quad 0 < z < L; \quad (6.49)$$

$$T(0, z) = T_0(z); \quad k \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0, L} = 0; \quad F[I_\lambda] = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^\infty \sigma_{\alpha\lambda} (I_\lambda - I_{\lambda b}(T)) d\lambda; \quad (6.50)$$

$$\mu \frac{\partial I_\lambda}{\partial z} + \sigma_\lambda I_\lambda = \sigma_{\alpha\lambda} I_{\lambda b}(T) + \sigma_{s\lambda} \int_{-1}^1 \tilde{g}_\lambda(\mu', \mu) I_\lambda(z, \mu') d\mu', \quad (6.51)$$

$$0 < z < L, \quad -1 \leq \mu \leq 1, \quad 0 \leq \lambda \leq \infty; \quad I(0, \mu) = I_0(\mu), \quad \mu > 0, \quad I(L, \mu) = 0, \quad \mu < 0.$$

Здесь  $T$  – температура,  $\lambda$  – длина волны излучения,  $c$  – удельная теплоемкость вещества,  $k$  – коэффициент теплопроводности,  $I_{\lambda b} = c_1 \lambda^{-5} / [\exp\{c_2/(\lambda T)\} - 1]$  – функция Планка,  $I_\lambda$  – интенсивность излучения,  $\sigma_\lambda = \sigma_{\alpha\lambda} + \sigma_{s\lambda}$ ,  $g_\lambda$  – усредненная по азимутальному углу индикатриса рассеяния,  $\mu = \cos v$ ,  $v$  – угол направления переноса с осью  $z$ .

Уравнение (6.51) известным способом (см. раздел 6.1) можно преобразовать в интегральное уравнение относительно плотности столкновений  $\varphi(x) = \sigma_\lambda I_\lambda(z, \mu)$ :

$$\varphi(x) = f(x) + \int_X k(x', x) \varphi(x') dx', \quad x = (z, \mu, \lambda) \in X. \quad (6.52)$$

Будем рассматривать оператор  $K: L_1(X) \rightarrow L_1(X)$ . Чтобы представить величину  $F[I_\lambda]$  из (6.50) в виде линейного функционала, дискретизируем (6.49) с помощью метода конечных элементов. Для этого введем по  $z$  сетку  $0 = z_0 < z_1 < \dots < z_m = L$  и рассмотрим на ней аппроксимацию температуры вида

$$\tilde{T}(t, z) = \sum_{i=0}^m T_i(t) \psi_i(z),$$

где  $\tilde{T} \in H_m([0, L])$ ,  $H_m$  – некоторое конечномерное пространство с базисом  $\{\psi_i\}$ ,  $\psi_i$  – функции с конечными носителями.

Для вектора  $T = (T_0, \dots, T_m)$  методом Галеркина получим систему уравнений вида

$$\sum_{j=0}^m A_{ij}(T) \frac{dT_j}{dt} = \sum_{j=0}^m B_{ij}(T) T_j + F_i - F_i^{(0)}, \quad t > 0, \quad T_j = T_j^{(0)}, \quad i = 0, \quad (6.53)$$

$$F_i^{(0)} = \int_0^L dz \int_0^\infty d\lambda \int_{-1}^1 \sigma_{a\lambda} I_{\lambda b}(\tilde{T}) \psi_i(z) d\mu, \quad F_i = \int_0^L \psi_i(z) dz \int \frac{\sigma_{a\lambda}}{\sigma_\lambda} d\lambda \int_{-1}^1 \varphi(z, \mu, \lambda) d\mu, \quad (6.54)$$

где  $i = 0, \dots, m$ . При условии  $\sigma_\lambda \geq \sigma_0 > 0$  функции  $h_i(x) = \psi_i(z) \sigma_{a\lambda} / \sigma_\lambda$  принадлежат пространству  $L_\infty(X)$  и величины (6.54) представимы скалярными произведениями:

$$F_i = (h_i, \varphi) = \int_X h_i(x) \varphi(x) dx,$$

которые можно оценить при решении уравнения (6.52) методом Монте-Карло на заданной временной сетке, определяющей процесс последовательного решения уравнений (6.51), (6.53). Различные аспекты такой методики решения задачи (6.49)–(6.51) разработаны О.А.Махоткиным.

## 6.14. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

**6.14.1. Краткий обзор методов.** Математическая сложность исходного уравнения, связанная с отсутствием эффективного математического аппарата для исследования нелинейности с одной стороны, и простая, наглядная физическая интерпретация уравнения Больцмана с другой стороны, породили большое количество приближенных методов решения. Условно их можно разделить на две группы.

Первую группу образуют так называемые *алгоритмические методы*. Они существуют в основном на описательном уровне и конструируются из физических соображений, аналогичных тем, которые положены в основу вывода уравнения Больцмана. Среди методов этой группы наибольшее распространение получили *метод прямого моделирования Берда* и *метод испытаний Бернулли*.

Вторую группу образуют *итерационные методы*. Они основаны на различных итерационных процессах, для реализации которых строятся и методы статистического моделирования. С целью повышения эффективности схем моделирования этой группы применяется аппарат методов Монте-Карло для решения линейных уравнений. Наиболее известен *подход Хэвилленда*, основанный на последовательной линеаризации уравнения Больцмана. Однако, как и большинство методов этой группы, он имеет лишь частичное обоснование. Доказана сходимость этого метода при условии, что на каждой итерации искомая функция распределения вычисляется с пренебрежимо малой погрешностью. Исключение составляет подход, использующий связь между ветвящимися марковскими процессами и нелинейными уравнениями.

Рассмотрим кратко некоторые упомянутые выше методы. Метод прямого моделирования Берда и метод испытаний Бернулли строятся по следующему принципу: моделируемый газ заменяется на  $N$  частиц, а физический объем моделирования разбивается на ячейки. Характерный размер ячейки должен быть таким, чтобы изменение параметров течения в каждой ячейке было малым. Изменение времени производится

дискретными шагами  $\Delta t$ , малыми по сравнению со средним временем между столкновениями молекул. Временной параметр  $\Delta t$  является одновременно параметром, по которому производится расщепление эволюции системы, имеющей  $N$  частиц, на два этапа.

**Этап I.** Все  $N$  молекул перемещаются на расстояние, определяемое их скоростями и шагом по времени  $\Delta t$ . Производятся определенные действия, учитывающие граничные условия, если молекулы пересекают поверхности твердого тела, линии или поверхности симметрий, либо внешние границы выделенного объема. Новые молекулы генерируются на границах объема, через которые есть поток молекул внутрь области.

**Этап II.** Производятся столкновения между молекулами, соответствующие интервалу времени  $\Delta t$ . Скорости молекул до столкновения заменяются скоростями, приобретаемыми ими после столкновения. Поскольку изменения параметров течения в ячейках малы, то можно не учитывать относительное расстояние между частицами при выборе пары молекул для столкновения.

Ради простоты рассмотрим однокомпонентный газ с сечением столкновений  $\sigma$ . Пусть в ячейке объема  $V$  находятся  $N$  частиц со скоростями  $v_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Алгоритм розыгрыша столкновений по Берду состоит из последовательности следующих действий:

1) разыгрывается пара  $(i, j)$  в соответствии с распределением вероятностей

$$\mathbf{P}_{ij} = \frac{\omega_{ij}}{\lambda}, \quad \lambda = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \omega_{ij}, \quad \omega_{ij} = \frac{|v_j - v_i| \sigma}{V};$$

2) в счетчик времени  $\sum_{k=1}^{\nu} \tau_k$  добавляется величина  $\tau_{\nu+1} = 2/[N(N-1)\omega_{ij}]$  и скорости  $v_i, v_j$  заменяются на их значения после столкновения, которые моделируются соответственно заданному распределению.

Эти действия производятся до тех пор, пока  $\sum_k \tau_k$  не станет больше  $\Delta t$ . Затем осуществляется этап I и т. д.

Способ розыгрыша столкновений, использующий испытания Бернулли, заключается в следующем: производится поочередной перебор всех пар  $(i, j)$  и для каждой пары:

1) разыгрывается столкновение с вероятностью  $\mathbf{P}_{ij} = \omega_{ij} \Delta t$ ;

2) если столкновение осуществилось, то скорости  $v_i, v_j$  заменяются на их значения после столкновения, в противном случае остаются прежними.

Из второй группы, как уже упоминалось, наиболее известен подход Хэвиленда. Он заключается в применении метода последовательной линеаризации к уравнению Больцмана. Рассмотрим стационарный случай. В основе конструирования алгоритма лежит следующая итерационная схема:

$$w \frac{\partial}{\partial r} f_n = \int g \sigma dv \int [f_n(w') f_{n-1}(v') - f_n(w) f_{n-1}(v)] d\Omega, \quad (6.55)$$

где  $w', v'$  – скорости после столкновения,  $g$  – относительная скорость,  $v$  – дифференциальное сечение рассеяния,  $\Omega$  – угол между векторами  $w$  и  $w'$ . Отсюда видно, что на каждом итерационном шаге нужно решать линейную относительно  $f_n$  задачу. В силу аналогии (6.55) с уравнением переноса здесь можно применять различные методы Монте-Карло, позволяющие снизить трудоемкость метода.

Примером подхода к решению нелинейного уравнения Больцмана, сочетающего в себе конечно-разностный метод и метод Монте-Карло, может служить следующий метод. Рассмотрим пространственно-однородный случай и разобьем скоростное пространство

на ячейки. Неявная разностная схема, используемая в этом подходе, имеет вид

$$\frac{f_\beta^{j+1} - f_\beta^j}{\Delta t} = -\nu_\beta^j(f) f_\beta^{j+1} + N_\beta^j(f).$$

Здесь интеграл столкновений разделен на две части – интеграл частоты столкновений  $\nu_\beta^j(f)$  и интеграл обратных столкновений  $N_\beta^j(f)$ . Эти интегралы вычисляются методом Монте-Карло в данной ячейке  $\beta$  скоростного пространства на временном шаге  $j$ . Для распространения метода на неоднородный по пространству случай используется конструкция схем расщепления.

В начале 80-х годов появился новый подход к построению и обоснованию алгоритмов решения уравнения Больцмана. Он основан на моделировании марковского процесса, который управляется *уравнением Каца*

$$\frac{d}{dt}\varphi(w, t) + g(w)\varphi(w, t) = \int \varphi(w, t)\mathbf{P}(w|\omega) d\omega, \quad g(w) = \int \mathbf{P}(\omega|w) d\omega, \quad (6.56)$$

где  $d\varphi/dt$  – полная производная по времени,  $w = (w_1, \dots, w_n)$ ,  $w_i = (v_i, v'_i)$  – фазовые координаты  $i$ -й частицы. Плотность  $\varphi(w, t)$  описывает эволюцию кинетической системы из  $n$  частиц. Функция  $\mathbf{P}(w|\omega)$  имеет следующее представление:

$$\mathbf{P}(w|\omega) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \mathbf{P}^{(2)}(w_i, w_j|\omega_i, \omega_j) \prod_{k=1; k \neq i, j}^n \delta(w_k - \omega_k),$$

где  $\mathbf{P}^{(2)}(w_i, w_j|\omega_i, \omega_j)$  полностью определяется эффективным сечением столкновений частиц.

Однако поскольку физический процесс столкновения частиц является локальным в пространстве, то он, естественно, нереализуем точно при моделировании. Поэтому вместо физического используют регуляризованное сечение, “размазанное” по области взаимодействия. Моделирование соотношения (6.56) в силу его полной аналогии с уравнением переноса осуществляется обычным способом. Интегрируя (6.56) по  $n-1$  переменным и стягивая область взаимодействия в точку, можно получить уравнение Больцмана для одночастичной плотности распределения при выполнении дополнительной гипотезы о молекулярном хаосе. Далее подробно рассматривается этот подход в пространственно-однородном случае.

**6.14.2. Уравнение Больцмана и вероятностная модель многочастичной системы в пространственно-однородном случае.** Для определенности будет рассматриваться задача об однородной релаксации простого однокомпонентного газа, однако все построения весовой схемы носят общий характер и без труда переносятся на более общие случаи. Итак, рассматривается физический процесс однородной релаксации простого однокомпонентного газа, который описывается следующим нелинейным кинетическим уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}, t) = \int \{f(\mathbf{v}', t)f(\mathbf{v}'_1, t) - f(\mathbf{v}, t)f(\mathbf{v}_1, t)\} w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1|\mathbf{v}, \mathbf{v}_1) d\mathbf{v}' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}_1 \quad (6.57)$$

В данном случае уравнение Больцмана записано с использованием условной плотности вероятности перехода пары скоростей частиц от  $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$  к  $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ . Плотность  $w(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2|\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$  и дифференциальное сечение рассеяния частиц связаны следующим соотношением

$$w(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2|\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \sigma(g_{12}, \chi_{12}) \delta_1 \left[ \frac{(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^2 - (\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'_2)^2}{2} \right] \delta_3 \left[ \frac{\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'_2}{2} \right]. \quad (6.58)$$



Здесь  $f(\mathbf{v}, t)$  – “одночастичная” функция плотности распределения по  $\mathbf{v}$  в момент времени  $t$ . Скорости  $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$  и  $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ , как следует из вида  $w(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2 | \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ , удовлетворяют законам сохранения импульса и энергии при столкновении:  $\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1$ ,  $\mathbf{v}^2 + \mathbf{v}_1^2 = \mathbf{v}'^2 + \mathbf{v}'_1^2$ . Функция  $f(\mathbf{v}, t)$  удовлетворяет условию нормировки  $\int f(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = 1$ ,  $t \geq 0$ . Присоединяя к (6.57) начальные данные

$$f(\mathbf{v}, t = 0) = f_0(\mathbf{v}), \quad t \in (0, T]; \quad \mathbf{v}, \mathbf{v}_1 \in R^3 \quad (6.59)$$

получим задачу Коши для нелинейного уравнения Больцмана. Численное решение задачи Коши (6.57), (6.59) мы будем понимать в смысле нахождения линейных функционалов от функции  $f(\mathbf{v}, t)$ .

Для рассматриваемого процесса однородной релаксации простого однокомпонентного газа хорошо известна математическая модель, в основу которой положено представление о газе как об ансамбле конечного числа взаимодействующих частиц. При выполнении определенных требований, накладываемых на характеристики этого ансамбля и на стохастический процесс его эволюции во времени можно исследовать вопрос о степени аппроксимации данной математической моделью рассматриваемого физического процесса, который описывается нелинейным кинетическим уравнением Больцмана (6.57). Для его приближенного решения используется линейное интегро-дифференциальное уравнение, описывающее эволюцию ансамбля  $N$  частиц во времени, так называемое “основное” кинетическое уравнение (6.56).

В пространственно однородном случае уравнение для  $N$ -частичной функции распределения имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_N(t, V) = \frac{n}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \{f_N(t, V'_{ij}) - f_N(t, V)\} |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j| b_{ij} db_{ij} d\varepsilon_{ij}, \quad (6.60)$$

где  $V = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$  –  $3N$ -мерный вектор,  $V'_{ij} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}'_i, \dots, \mathbf{v}'_j, \dots, \mathbf{v}_N)$ ,  $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$  и  $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$  – скорости пары частиц до и после столкновения соответственно, удовлетворяющие законам сохранения момента и энергии,  $b_{ij}$  и  $\varepsilon_{ij}$  – параметры столкновения пары,  $n$  – плотность среды;  $\int f_N(t, V) dV = 1$ . Используя условную плотность вероятности  $w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) = w(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$  перехода пары скоростей частиц от  $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$  к  $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ , уравнение (6.60) можно записать в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} f_N(t, V) = \frac{n}{N} \sum_{i < j} \int \{f_N(t, V'_{ij}) - f_N(t, V)\} w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j | \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j. \quad (6.61)$$

Плотность  $w$  и дифференциальное сечение  $\sigma(g_{ij}, \chi_{ij})$  связаны следующим соотношением:

$$w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j | \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \sigma(g_{ij}, \chi_{ij}) \delta_1 \left[ \frac{(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)^2 - (\mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j)^2}{2} \right] \delta_3 \left[ \frac{\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_j - \mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j}{2} \right] \quad (6.62)$$

где  $g_{ij} = |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|$ ,  $\chi_{ij}$  – угол рассеяния,  $\delta_1$  и  $\delta_3$  – одно- и трехмерные дельта-функции, соответственно:  $\int \delta_1(g) dg = 1$ ,  $\int \delta_3(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1$ .

Соответствующий модельный процесс стохастической кинетики системы из  $N$  частиц представляет собой однородную цепь Маркова, переходы в которой осуществляются в результате элементарных парных взаимодействий. Распределение времени между элементарными взаимодействиями в системе определяется состоянием системы и является экспоненциальным. Участок  $N$ -частичной траектории, соответствующей прямолинейному движению всех частиц между двумя последовательными элементарными взаимодействиями, называется *свободным пробегом системы*. Введем фазовое пространство

$\mathbf{V}$  скоростей ансамбля  $V = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$ . Вероятность элементарного взаимодействия в системе  $N$  частиц за время  $dt$  равна  $\nu(V) dt$ , где

$$\begin{aligned}\nu(V) &= \frac{n}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \int w(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j | \mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) d\mathbf{v}'_i d\mathbf{v}'_j = \\ &= \frac{n}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N g_{ij} \sigma_t(g_{ij}) = \frac{n}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j).\end{aligned}$$

Вероятность того, что столкновение в системе  $N$  частиц реализует пара частиц с номерами  $i$  и  $j$  равна  $a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)/\nu(V)$ , причем распределение новых скоростей частиц  $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$  определяется дифференциальным сечением столкновения пары

$$k(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j \rightarrow \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j | \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) [\sigma_t(g_{ij}) g_{ij}]^{-1},$$

$$\text{где } \sigma_t(g_{ij}) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \sigma(g_{ij}, \chi_{ij}) \sin \chi_{ij} d\chi_{ij} d\varepsilon_{ij},$$

а скорости остальных частиц не изменяются. Время свободного пробега системы распределено с экспоненциальной плотностью  $\nu(V) E(V, t)$ , где  $E(V, t) = \exp(-t\nu(V))$ .

Описанный модельный стохастический процесс эволюции системы, содержащей  $N$  взаимодействующих частиц, фактически определяет алгоритм моделирования для численного решения задачи однородной релаксации газа. Такой *алгоритм прямого статистического моделирования (ПСМ)* хорошо известен и был эвристически сформулирован на основе марковского характера стохастического процесса эволюции  $N$ -частичной системы с учетом только парных взаимодействий. Из описания этого алгоритма не следует, что он имеет прямое отношение к решению уравнения Больцмана. Однако, численные эксперименты свидетельствуют о наличии такой связи.

С другой стороны, относительно соответствующего кинетического уравнения (6.61) известно, что оно асимптотически при  $N \rightarrow \infty$  эквивалентно уравнению Больцмана в предположении “*молекулярного хаоса*”. Однако не известна универсальная оценка скорости сходимости по  $N$  осредненного решения кинетического уравнения к решению уравнения Больцмана. В связи с этим возрастает интерес к численному исследованию зависимости решения  $N$ -частичного уравнения (6.61) от числа модельных частиц  $N$ .

Рассмотрим какой-либо функционал  $G_N$  от решения  $f_N(t, V)$  уравнения (6.61). Предполагая аналитическую зависимость  $G_N$  от  $1/N$ , представим его в следующем виде:

$$G_N = G_\infty + \frac{\gamma}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (6.63)$$

Первое слагаемое в правой части (6.63) описывает предельное значение рассматриваемого функционала и соответствует бесконечному числу частиц в модельной системе. Коэффициент  $\gamma$  от  $N$  не зависит, поэтому можно провести два расчета при  $N_1$  и  $N_2$ , а затем, считая  $N_1, N_2$  достаточно большими (в смысле справедливости разложения (6.63)), исключить линейное по  $1/N$  слагаемое из (6.63) и получить приближение к  $G_\infty$

$$G_\infty \approx G_{N_2} + \frac{N_1}{N_2 - N_1} (G_{N_2} - G_{N_1}) \quad (6.64)$$

Значение разности  $G_{N_2} - G_{N_1}$  может оказаться малым по сравнению со значениями  $G_{N_2}, G_{N_1}$ , поэтому для ее вычисления необходимо применять метод коррелированной

выборки. Удовлетворительность (6.64) вытекает из соотношения  $|G_\infty - G_N| = O(N^{-1})$ , которое проверяется модельными расчетами.

При построении алгоритмов метода Монте-Карло удобно исходить непосредственно из интегральной формы кинетического уравнения (6.61). При таком подходе связь получаемых алгоритмов с решением уравнения Больцмана становится достаточно ясной.

Для обоснования алгоритмов статистического моделирования обычно используют следующее интегральное уравнение для плотности  $\varphi(V, t)$  столкновений в системе:

$$\varphi(V, t) = \int_0^t \int_V \varphi(V', t') K(V', t' \rightarrow V, t) dV' dt' + \varphi_0(V, t), \quad (6.65)$$

где

$$K(V', t' \rightarrow V, t) = \sum_{\pi} a(\pi') \nu^{-1}(V') K_1(V' \rightarrow V | \pi) \nu(V) E(V, t - t'),$$

$$K_1(V' \rightarrow V | \pi) = k(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j \rightarrow \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) \prod_{m=1; m \neq i, j}^N \delta(\mathbf{v}_m - \mathbf{v}'_m)$$

$$\varphi_0(V, t) = \int_{R^{3N}} f_0(V) \delta(t') \nu(V) E(V, t - t') dV' dt'.$$

Это уравнение выводится, как указано в разделе 6.1. Процесс прямого моделирования для уравнения (6.65) (см. подразд. 4.3.3) совпадает с алгоритмом ПСМ. Уравнение (6.65) использовать непосредственно для построения стандартных весовых модификаций прямого моделирования, вообще говоря, невозможно, поскольку его ядро  $K(V', t' \rightarrow V, t)$  представляет собой сумму взаимно сингулярных слагаемых. Это затруднение может быть преодолено посредством модификации фазового пространства системы путем введения номера взаимодействующей пары в число координат фазового пространства системы. Данный прием дает возможность сформулировать новое интегральное уравнение, структура ядра которого позволяет стандартным способом ввести весовые модификации прямого моделирования, поскольку содержит сингулярности лишь в виде сомножителей.

**6.14.3. Метод Монте-Карло для нелинейного уравнения коагуляции.** В настоящем подразделе рассматриваются методы Монте-Карло для численного решения нелинейного уравнения Смолуховского в пространственно-однородном случае. Данное уравнение описывает широкий класс процессов коагуляции в физических системах – как процессы слипания частиц, так и процессы их распада на частицы меньшего размера. Для определенности мы будем рассматривать случай чистого парного слипания частиц. Этот процесс в сущности и является причиной нелинейности уравнения коагуляции. В данном случае оно имеет вид:

$$\frac{\partial n(l, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=l} k(i, j) n(i, t) n(j, t) - n(l, t) \sum_{i=1}^{\infty} k(l, i) n(i, t), \quad (6.66)$$

где  $n(l, t)$  – числовая плотность частиц размера  $l$  в момент времени  $t$ ; причем размер частицы  $l$  принимает натуральные значения;  $k(i, j)$  – коэффициенты коагуляции, которые являются заданными величинами. Таким образом решение  $n(l, t)$  уравнения (6.66) является функцией дискретного аргумента  $l$  и непрерывного аргумента  $t$ . Присоединяя к (6.66) начальные данные

$$n(l, t = 0) = n_0(l), \quad (6.67)$$

получим задачу Коши для нелинейного уравнения Смолуховского. Все величины в задаче считаются обезразмеренными на соответствующие характерные значения. Численное решение задачи Коши (6.66), (6.67) мы будем понимать в смысле нахождения линейных функционалов от функции  $n(l, t)$ .

Для физического процесса однородной коагуляции хорошо известна математическая модель, в основу которой положено представление о коагулирующей системе как об ансамбле конечного числа взаимодействующих частиц. При выполнении определенных требований, накладываемых на характеристики этого ансамбля и на стохастический процесс его эволюции во времени, можно исследовать вопрос о степени аппроксимации данной математической моделью рассматриваемого физического процесса, связанного с уравнением (6.66). Аналогичная ситуация имеет место в методах статистического моделирования решения пространственно однородного нелинейного уравнения Больцмана, однако имеются существенные различия. Первое заключается в том, что количество частиц в моделируемом ансамбле становится переменным и фиксированным является лишь число  $N = N_0$  начальных частиц. Второе связано с тем, что  $N$ -частичное уравнение Каца, которое используется для построения методов статистического моделирования, является общепринятым и связь его с нелинейным кинетическим уравнением Больцмана известна. В случае уравнения Смолуховского такого “основного” общепринятого  $N$ -частичного уравнения нет. Для построения численных методов Монте-Карло, как алгоритмов прямого моделирования, так и их весовых модификаций важно иметь линейное интегральное уравнение Фредгольма второго рода. В частности, наличие интегральной формы уравнения Каца дало возможность построить универсальные весовые методы для приближенного решения нелинейного уравнения Больцмана (см. подразд. 6.14.2).

С.В.Рогазинским было предложено использовать для решения нелинейных кинетических уравнений больцмановского типа уравнение Колмогорова, представляющее собой вероятностное описание эволюции системы из  $N$  частиц. При некоторых условиях решение уравнения Колмогорова дает приближенное решение соответствующего нелинейного кинетического уравнения.

Процесс коагуляции в системе  $N$  частиц представляет собой однородную марковскую цепь, переходы в которой осуществляются в результате элементарных парных взаимодействий (слипаний) частиц. Распределение времени между элементарными взаимодействиями в системе определяется состоянием системы и является экспоненциальным. Вероятность элементарного взаимодействия в системе из  $N$  частиц за время  $dt$  равна  $A(N, L_N) dt$ , где

$$A(N, L_N) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N a(N, l_i, l_j).$$

Величина  $a(N, l_i, l_j)$  определяется следующим образом

$$a(N, l_i, l_j) = \begin{cases} \sum_{l=1}^{\infty} k(l_i, l_j \rightarrow l), & \text{если } N \geq 2; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Вероятность того, что взаимодействие в системе реализует пара частиц с номерами  $i$  и  $j$ , равна  $a(N, l_i, l_j)/A(N, L_N)$ . При этом обе частицы заменяются на новую частицу, имеющую размер  $l_i + l_j$ , а размеры остальных частиц не изменяются. Время между элементарными взаимодействиями в системе распределено с экспоненциальной плотностью  $A(N, L_N)E(N, L_N, t)$ , где  $E(N, L_N, t) = \exp(-A(N, L_N)t)$ . Этой цепи Маркова можно поставить в соответствие интегрально-алгебраическое уравнение второго рода,

аналогичное уравнению (6.65).

## ГЛАВА 7. РЕШЕНИЕ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

### 7.1. ВЕСОВЫЕ ОЦЕНКИ, СВЯЗАННЫЕ С "БЛУЖДЕНИЕМ ПО СФЕРАМ"

**7.1.1. "Блуждание по сферам".** Рассмотрим трехмерную задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца

$$\Delta u + cu = -g, \quad u|_{\Gamma} = \psi, \quad (7.1)$$

в области  $D \subset R^3$  с границей  $\Gamma$ , причем  $c < c^*$ , где  $c^*$  – первое собственное число оператора Лапласа для области  $D$ ,  $r = (x, y, z) \in D$ . Предполагаются выполненными условия регулярности функций  $g$ ,  $\psi$  и границы  $\Gamma$ , обеспечивающие существование и единственность решения задачи (7.1), а также его вероятностное представление и интегральное представление с помощью шаровой функции Грина [1].

Рассматриваемые далее оценки метода Монте-Карло связаны с так называемым процессом "блуждания по сферам" в области  $D$  [2]. Для его описания введем следующие обозначения:  $\bar{D}$  – замыкание области  $D$ ;  $d(P)$  – расстояние от точки  $P$  до границы  $\Gamma$ ;  $\Gamma_\varepsilon$  –  $\varepsilon$ -окрестность границы  $\Gamma$ , т. е.  $\Gamma_\varepsilon = \{P \in \bar{D} : d(P) < \varepsilon\}$ ,  $S(P)$  – максимальная из сфер с центром в точке  $P$ , целиком лежащих в  $\bar{D}$ :  $S(P) = \{Q \in \bar{D} : |Q - P| = d(P)\}$ .

В процессе "блуждания по сферам" очередная точка  $P_{k+1}$  выбирается равномерно по поверхности сферы  $S(P_k)$ ; процесс обрывается, если точка попадает в  $\Gamma_\varepsilon$ .

Обозначим через  $s_0(P, \varepsilon)$  поверхность той части сферы  $S(P)$ , которая принадлежит множеству  $\Gamma_\varepsilon$ . Построим сферу  $S_\varepsilon$  радиуса  $\varepsilon$  с центром в точке касания границы  $\Gamma$  сферой  $S(P)$ . Тогда площадь части сферы  $S(P)$ , целиком лежащей внутри  $S_\varepsilon(P)$ , равна  $\pi\varepsilon^2$ . Отсюда получаем следующую оценку снизу для вероятности попадания очередной точки в  $\Gamma_\varepsilon$ :

$$\frac{s_0(P, \varepsilon)}{4\pi d^2(P)} \geq \frac{\pi\varepsilon^2}{4\pi d^2(P)} \geq \frac{\varepsilon^2}{4d_{\max}^2} = \nu(\varepsilon), \quad (7.2)$$

где  $d_{\max}$  – точная верхняя граница радиусов сфер, целиком лежащих в области  $D$ , которая может быть и неограниченной.

Дадим точное определение процесса "блуждания по сферам". Зададим цепь Маркова  $\{P_n\}_{n=1,2,\dots,N}$  следующими характеристиками:

1)  $\pi(r) = \delta(r - P_0)$  – плотность начального распределения (т. е. цепь "выходит" из точки  $P_0$ );

2)  $p(r, r') = \delta_r(r')$  – плотность перехода из  $r$  в  $r'$ , представляющая собой обобщенную трехмерную плотность равномерного распределения вероятностей на сфере  $S(r)$ ;

3)  $p_0(r)$  – вероятность обрыва цепи, определяемая выражением

$$p_0(r) = \begin{cases} 0 & \text{при } r \notin \Gamma_\varepsilon; \\ 1 & \text{при } r \in \Gamma_\varepsilon; \end{cases}$$

4)  $N$  – номер последнего состояния.

Как уже указывалось, данная цепь называется процессом "блуждания по сферам". Ее можно, очевидно, записать в виде

$$P_n = P_{n-1} + \omega_n d(P_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots,$$

где  $\omega_n$  – последовательность независимых изотропных векторов единичной длины.

**7.1.2. Среднее число переходов.** Вероятность  $p_1(r)$  обрыва цепи после очередного перехода из  $r$  в  $r'$  можно оценивать следующим образом:

$$p_1(r) = \int_{\Gamma_\varepsilon} p(r, r') p_0(r') dr' \geq \nu(\varepsilon). \quad (7.3)$$

Следовательно, среднее число  $q(P_0, \varepsilon)$  переходов в цепи “блуждания по сферам”, определяющее среднее время моделирования цепи на ЭВМ, не превосходит величины  $\nu^{-1}(\varepsilon)$ . Более того, для широкого класса границ  $\Gamma$  на основе теории восстановления удалось построить логарифмическую оценку.

$$q(P_0, \varepsilon) \leq C |\ln \varepsilon|, \quad (7.4)$$

которая заведомо выполняется для выпуклых областей.

Оценка (7.4) становится эвристически очевидной на основе следующего рассмотрения плотности центров сфер. Известно [2], что процесс “блуждания по сферам”, с вероятностью единица сходится к границе, поэтому практически достаточно рассмотреть эту плотность вблизи плоской границы. Обозначим через  $x$  расстояние до плоской границы. Соображения подобия показывают, что плотность распределения  $f(x)$  центров сфер по  $x$  с точностью до постоянного множителя должна быть близкой к  $x^{-1}$ . Отсюда непосредственно следует оценка (7.4).

Впрочем, для плоской границы в трехмерном случае теория восстановления дает следующий точный результат.

**Теорема 7.1.** *Если  $\Gamma$  – плоскость, то*

$$q(P_0, \varepsilon) = \frac{\ln(\varepsilon/d_0) - 1}{\ln 2 - 1},$$

где  $d_0 = d(P_0)$ .

**Доказательство.** Величину  $\ln d_N$  можно представить следующим образом:

$$\ln d_N = \ln d_0 + \sum_{k=1}^N \ln \frac{d_k}{d_{k+1}}.$$

Для плоской границы величины  $\ln(d_k/d_{k+1})$ , очевидно, независимы и одинаково распределены; в частности, в трехмерном случае справедливо представление  $d_k = 2d_{k-1}\alpha_k$ , где  $\{\alpha_k\}$  – независимые в совокупности случайные величины, равномерно распределенные в интервале  $(0, 1)$ , и  $\mathbf{E} \ln(d_{k+1}/d_k) = \ln 2 - 1$ . Согласно теории восстановления (см., например, [3]), имеем

$$q(P_0, \varepsilon) = \frac{\ln(\varepsilon/d_0) + \mathbf{E} \gamma(\ln \varepsilon)}{\ln 2 - 1},$$

где  $\gamma(\ln \varepsilon)$  – случайная величина перескока величины  $\ln d_N$  через уровень  $\ln \varepsilon$ , т.е.  $\gamma(\ln \varepsilon) = \ln d_N - \ln \varepsilon$ . Очевидно, что в данном случае величина  $\gamma(\ln \varepsilon)$  имеет стандартное экспоненциальное распределение, т.е.  $\mathbf{E} \gamma(\ln \varepsilon) \equiv -1$ .  $\square$

Отметим, что определяемое теоремой 7.1 выражение дает верхнюю оценку величины  $q(P_0, \varepsilon)$  для выпуклой области.

**7.1.3. Оценка решения.** Далее будут сформулированы алгоритмы “блуждания по сферам” на основе интегральных представлений. Рассмотрим следующую трехмерную задачу Дирихле:

$$\Delta u - cu = -g, \quad u|_\Gamma = \psi, \quad (7.5)$$

в области  $D$  с границей  $\Gamma$ ;  $c = \text{const} \geq 0$ . Предполагаются выполненными условия регулярности  $g$ ,  $\psi$  и  $\Gamma$ , обеспечивающие существование и единственность решения задачи (7.5), а также возможность его представления с помощью функции Грина для шара. Для функции  $u(r)$  можно записать интегральное уравнение

$$u(r) = \int_D k(r, r') u(r') dr' + h(r), \quad (7.6)$$

где

$$k(r, r') = \frac{d\sqrt{c}}{\sinh(d\sqrt{c})} \delta_r(r') \text{ при } r \notin \Gamma_\varepsilon \text{ и } k(r, r') = 0 \text{ при } r \in \Gamma_\varepsilon;$$

$$h(r) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\sinh[(d - |r' - r|)\sqrt{c}]}{|r' - r| \sinh(d\sqrt{c})} g(r') dr' \text{ при } r \notin \Gamma_\varepsilon \text{ и } h(r) = u(r) \text{ при } r \in \Gamma_\varepsilon.$$

Здесь  $d = d(r)$ ,  $\delta_r(r')$  – обобщенная плотность, соответствующая равномерному распределению вероятностей на сфере  $S(r)$ . Поскольку  $d\sqrt{c}/\sinh(d\sqrt{c}) \leq 1$  при  $c \geq 0$ , то в силу условия (7.2)

$$\int_D \int_D k(r, r') k(r', r'') dr'' dr' \leq \int_{D-\Gamma_\varepsilon} \delta_r(r') \left( \int_D \delta_{r'}(r'') dr'' \right) dr' = \int_{D-\Gamma_\varepsilon} \delta_r(r') dr' \leq 1 - \nu(\varepsilon).$$

Следовательно, в естественном здесь пространстве  $L_\infty$  имеем  $\|K^2\| \leq 1 - \nu(\varepsilon) < 1$ . Это обеспечивает сходимость ряда Неймана для уравнения (7.6) и тем самым возможность применения метода Монте-Карло. Кроме того, отсюда следует, что решение исходной дифференциальной задачи является единственным решением уравнения (7.6). Проблемы следов здесь не возникает, так как оператор  $K$  оставляет инвариантным множество функций, имеющих разрывы первого рода лишь на внутренней границе множества  $\Gamma_\varepsilon$ .

Для оценки здесь можно применить соотношение

$$u(r_0) = \mathbf{E}\zeta, \quad \zeta = h(r_0) + \sum_{n=1}^N Q_n h(r_n),$$

где  $\{r_n\}$  – обрывающаяся в  $\Gamma_\varepsilon$  цепь изотропного блуждания по сферам, которую при  $\varepsilon > 0$  целесообразно также называть  $\varepsilon$ -сферическим процессом, а веса определяются формулами

$$Q_0 = 1, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{d_{n-1}\sqrt{c}}{\sinh(d_{n-1}\sqrt{c})} \leq Q_{n-1}, \quad d_n = d(P_n), \quad n = 1, 2, \dots$$

Теперь можно вспомнить, что здесь временно вводилось нереальное предположение: решение  $u(r)$  известно в  $\Gamma_\varepsilon$ . Однако вместо точных значений  $u(r)$  в  $\Gamma_\varepsilon$  можно использовать приближенные, например, беря их с ближайших точек границы, т.е. полагать

$$u(r) \approx \psi(r^*), \quad r \in \Gamma_\varepsilon, \quad |r - r^*| = d(r).$$

В результате получаем смещенную оценку  $\zeta_\varepsilon$ , среднее значение  $u_\varepsilon(r_0)$  которой отличается от  $u(r_0)$  на величину порядка  $\varepsilon$ . Действительно, если рассмотреть выражение для разности оценок  $\zeta$  и  $\zeta_\varepsilon$ , то получим

$$|u - u_\varepsilon| \leq |\mathbf{E}\{Q_N[u(r_N) - \psi(r_N^*)]\}| \leq A\varepsilon,$$

где  $A$  – некоторая константа, которая конечна вследствие ограниченности в области  $D$  производных от решения (здесь использовано соотношение  $Q_N \leq 1$ ).

Совершенно просто в данном случае показывается равномерная ограниченность величины  $\mathbf{D}\zeta_\varepsilon$ .

**Теорема 7.2.** В условиях задачи имеем  $\mathbf{D}\zeta_\varepsilon < C < +\infty$  для всех  $\varepsilon > 0$ .

**Доказательство.** Величина  $\zeta_\varepsilon$  монотонно возрастает при  $c \rightarrow 0$ , а при  $c = 0$  имеем  $Q_N \equiv 1$  и (см. подразд. 4.4)  $\mathbf{E}\zeta_\varepsilon^2 = h_\varepsilon(2u_\varepsilon - h_\varepsilon) + K_\varepsilon(\mathbf{E}\zeta_\varepsilon^2)$ . Следовательно,  $\mathbf{E}\zeta_\varepsilon^2 \leq K_\varepsilon(\mathbf{E}\zeta_\varepsilon^2) + C|h_\varepsilon|$ , и тем самым величина  $\mathbf{E}\zeta_\varepsilon^2$  мажорируется решением уравнения  $\chi = K_\varepsilon\chi + Ch_\varepsilon^{(1)}$ , которое соответствует исходной задаче с заменой  $g \rightarrow C_0|g|$ ,  $\psi \rightarrow C_0|\psi|$ . Таким образом, величина  $\mathbf{D}\zeta_\varepsilon$  здесь равномерно ограничена, если после указанной замены решение остается ограниченным, а это заведомо выполняется при  $c \geq 0$  и упомянутой регулярности условий задачи.  $\square$

Интеграл, выражающий  $h(r)$  при  $r \notin \Gamma_\varepsilon$ , здесь можно оценивать методом Монте-Карло по одному случайному узлу, в результате чего вместо  $\zeta_\varepsilon$  получаем случайную величину  $\zeta_{\varepsilon,1}$  (см. далее соотношение (7.10)). Повторное осреднение показывает, что  $\mathbf{E}\zeta_{\varepsilon,1} = u_\varepsilon(r_0)$ . Применяя аналогичное осреднение для дисперсии, так же легко показать, что  $\mathbf{D}\zeta_{\varepsilon,1}$  ограничена вследствие ограниченности  $g(r)$ .

Оценим количество арифметических операций, необходимое для достижения заданной погрешности  $\varepsilon$  в оценке решения. Ранее было показано, что число сфер при обрыве траекторий в  $\Gamma_\varepsilon$  имеет порядок величины  $|\ln \varepsilon|$ . С другой стороны, чтобы вероятностная погрешность оценки была порядка  $\varepsilon$ , необходимо моделировать  $C\varepsilon^{-2}$  траекторий. Отсюда

$$R_\varepsilon \sim C_n |\ln \varepsilon| / \varepsilon_2, \quad (7.7)$$

где  $C_n$  – число арифметических операций, приходящееся на одну сферу в пространстве  $n$  измерений. При больших  $n$  величина  $C_n$  зависит от  $n$  линейно.

**7.1.4. Дополнительная информация.** Рассмотрим задачу Дирихле для системы уравнений:

$$\Delta u_i(r) + \sum_{j=1}^m c_{ij}(r)u_j(r) = -g_i(r), \quad u_i(r)|_\Gamma = \psi_i(r), \quad i = 1, \dots, m$$

в области  $D \in R^3$  с границей  $\Gamma$ . Функции  $\{c_{ij}, g_i, \psi_i\}$  могут быть комплекснозначными. Векторное решение  $u$  удовлетворяет следующей системе уравнений:

$$u_i(r) = \frac{1}{4\pi d^2(r)} \int_{S(r)} u_i(r(s)) ds + \int_{D(r)} G_r(r') \left[ \sum_{j=1}^m c_{ij}(r)u_j(r) \right] dr' + \int_{D(r)} G_r(r')g_i(r') dr'. \quad (7.8)$$

Используя систему (7.8), можно построить алгоритм “блуждания по сферам и шарам” для оценки  $u$ , если выполняется неравенство  $\sum_{j=1}^m |c_{ij}(r)| < c^*$  для всех  $r$  и  $i$ . Этот алгоритм можно распространить на задачу Дирихле для интегро-дифференциального уравнения

$$\Delta u(r, \lambda) = - \int_\Lambda u(r, \lambda')c(r, \lambda, \lambda') d\lambda' - g(r, \lambda), \quad u(r, \lambda)|_\Gamma = \psi(r, \lambda)$$

при условии, что  $\int |c(r, \lambda, \lambda')| d\lambda' < c^*$  для всех  $r$  и  $\lambda$ . Аналогично, для нелинейной задачи

$$\Delta u + cu^n = 0, \quad u|_\Gamma = \psi, \quad n \geq 2$$

в области  $D \in R^3$ , используя интегральное представление решения

$$u(r) = \frac{1}{4\pi d^2(r)} \int_{S(r)} u(r(s)) ds + \int_{D(r)} u^n(r')G_r(r') dr',$$



можно построить специальный алгоритм “блуждания по сферам и шарам” с ветвлением (при некоторых дополнительных предположениях).

**7.1.5. Случай комплексного параметра.** Рассмотрим теперь задачу (7.1) с комплексным параметром:  $c = a + bi$ . Предполагаются выполненными условия регулярности функций  $g$ ,  $\psi$  и границы  $\Gamma$ , обеспечивающие существование и единственность решения этой задачи, а также используемое далее интегральное представление решения с помощью функции Грина для вписанного в  $D$  шара. Построенные ранее оценки метода Монте-Карло для вещественного параметра распространяются далее на случай комплексного параметра.

Решение задачи (7.8), так же как в вещественном случае, удовлетворяет интегральному соотношению

$$u_1(r) = \int_{\overline{D}} k(r, r') u_1(r') dr' + h(r), \quad (7.9)$$

где

$$k(r, r') = q(c, d) \delta_r(r') \text{ при } r \notin \Gamma_\varepsilon \text{ и } k(r, r') = 0 \text{ при } r \in \Gamma_\varepsilon; \quad q(c, d) = \frac{d\sqrt{c}}{\sin(d\sqrt{c})};$$

$$h(r) = \int_{D(r)} G(\rho; c, d) g(\rho) d\rho \text{ при } r \notin \Gamma_\varepsilon \text{ и } h(r) = u(r) \text{ при } r \in \Gamma_\varepsilon.$$

Здесь  $\delta_r(r')$  – обобщенная плотность, соответствующая равномерному распределению вероятностей на сфере  $S(r)$ ,  $G(\rho; c, d)$  – функция Грина для шара  $D(r)$ , ограниченного сферой  $S(r)$ . Справедливо представление

$$\begin{aligned} \int_{D(r)} G(\rho; c, d) g(\rho) d\rho &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} d\omega \int_0^d x \left(1 - \frac{x}{d}\right) \frac{q(c, d)}{q(c, d-x)} g(x, \omega) dx = \\ &= \frac{d^2}{6} \mathbf{E} \left\{ \frac{q(c, d)}{q(c, d-\nu)} g(\nu, \omega) \right\}, \end{aligned} \quad (7.10)$$

где  $\omega$  – изотропное направление, а  $\nu$  – случайная величина, распределенная в интервале  $(0, d)$  с плотностью  $6x(1-x/d)d^{-2}$ . Полученные далее результаты связаны со свойствами функции  $q(c, d)$  комплексного переменного  $c$ , которые представлены в следующем утверждении.

**Лемма 7.1.** Для  $c = a + bi$  справедливы неравенства

$$|q(c, d)| \leq |q(a, d)|; \quad (7.11)$$

$$|q(c, d)| \leq |q(bi, d)|, \quad a < 0; \quad (7.12)$$

$$|q(c, d)| \leq |q(c, d-x)|, \quad a < 0, \quad 0 \leq x \leq d. \quad (7.13)$$

**Доказательство.** Для функции  $\sin z/z$  известно представление

$$\frac{\sin z}{z} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2}{n^2\pi^2}\right), \quad (7.14)$$

из которого имеем

$$\left| \frac{\sin d\sqrt{c}}{d\sqrt{c}} \right| = \left| \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{d^2c}{n^2\pi^2}\right) \right| \geq \prod_{n=1}^{\infty} \left| 1 - \frac{d^2a}{n^2\pi^2} \right| = \left| \frac{\sin d\sqrt{a}}{d\sqrt{a}} \right|,$$

откуда получается (7.11). Далее, при  $a < 0$  выполняется соотношение

$$\left| 1 - \frac{d^2 c}{n^2 \pi^2} \right|^2 = \left( 1 + \frac{d^2 |a|}{n^2 \pi^2} \right)^2 + \left( \frac{bd^2}{n^2 \pi^2} \right)^2 \geq \left| 1 - \frac{id^2 b}{n^2 \pi^2} \right|^2, \quad (7.15)$$

из которого следует (7.12). Неравенство (7.13) легко получается из первой части (7.15).  $\square$

Перейдем теперь к построению и обоснованию необходимых вероятностных представлений. Символом  $c^*$  будет обозначаться абсолютная величина первого собственного числа оператора Лапласа для области  $D$ .

**Лемма 7.2.** *Если  $\operatorname{Re}(c) = a \leq 0$ , то ряд Неймана  $\sum_{n=0}^{\infty} K^n h$  для уравнения (7.9) сходится и после замены ядра  $k$  и функции  $h$  на их модули.*

**Доказательство.** На основе (7.11) лемма 7.2 следует из доказанного ранее (см. раздел 7.1) соответствующего утверждения для вещественного параметра.  $\square$

**Теорема 7.3.** *Если  $\operatorname{Re}(c) \leq 0$ , то существует единственное ограниченное решение уравнения (7.9), представляемое соответствующим рядом Неймана и совпадающее с решением задачи (7.8).*

**Доказательство.** Если  $u_0(r)$  – ряд Неймана и  $K_0$  – интегральный оператор уравнения (7.9) при  $c = 0$  и  $\psi \equiv g \equiv C_0$ , то  $u_0(r) \geq C_0$  и  $\lim_{n \rightarrow \infty} K_0^n u_0(r) = 0$ . Поэтому, если  $u(r)$  – решение уравнения (7.9) и  $|u(r)| < C_1$ , то с учетом (7.11) имеем

$$u = \sum_{i=0}^n K^i h + K^{n+1} u, \quad \text{причем} \quad |K^{n+1} u| < C_1 C_0^{-1} K_0^{n+1} u_0.$$

$\square$

На основе доказанных утверждений решение задачи (7.8) может быть представлено, как математическое ожидание стандартной “оценки по столкновениям”, связанной с “блужданием по сферам”. Рандомизируя значение  $h(r)$  согласно (7.10), эту оценку можно записать следующим образом:

$$\xi = \sum_{n=0}^N \left[ \prod_{i=0}^{n-1} q(c, d_i) \right] g(\nu_n, \omega_n) \frac{d_n^2 q(c, d_n)}{6q(c, d_n - \nu_n)} + \left[ \prod_{n=0}^{N-1} q(c, d_n) \right] u(r_N).$$

Ясно, что  $|q(c, d_n)/q(c, d_n - \nu_n)| < C < +\infty$ . Из общей теории оценки по столкновениям (см. разд. 4.3) с учетом леммы 7.2 следует, что  $\xi = u(r)$ . Кроме того, используя оценку величины  $\xi^2$  для вещественного параметра и неравенство (7.11), получаем, что здесь  $|\xi^2| < +\infty$ , если  $\operatorname{Re}(c) \leq 0$ .

Аналогично устанавливается, что замена величины  $u(r_N)$  на значение  $\psi(P(r_N))$  в ближайшей точке границы (модифицированную таким образом оценку обозначим  $\xi_\varepsilon$ ), приводит к  $\varepsilon$ -смещению, т. е.  $|u(r) - \mathbf{E}\xi_\varepsilon| < C\varepsilon$ , при дополнительном условии равномерной ограниченности модуля градиента решения в  $\Gamma_\varepsilon$ . Здесь величина  $\mathbf{E}|\xi_\varepsilon^2|$  ограничена вместе с  $\mathbf{E}|\xi^2|$ .

**7.1.6. Многомерный случай.** Для общего  $n$ -мерного случая в соотношении (7.9) имеем

$$q(c, d) = \frac{(d\sqrt{c}/2)^{(n-2)/2}}{(n/2)J_{(n-2)/2}(d\sqrt{c})},$$

где  $J_{(n-2)/2}$  – функция Бесселя. Величину  $h(r)$  можно рандомизировать следующим образом:

$$h(r) = \frac{d^2}{2n} \int p_0(r, \rho) [G(\rho; c, d)/G(\rho; 0, d)] g(\rho) d\rho, \quad (7.16)$$

где (при  $n > 2$ )

$$p_0(r, \rho) = 2nd^{-2}G(\rho; 0, d) = \frac{2n}{(n-2)d^2\omega_n} \left( \frac{1}{(\rho-r)^{n-2}} - \frac{1}{d^{n-2}} \right), \quad |\rho-r| \leq d.$$

Здесь  $\omega_n = 2(\sqrt{\pi})^n/(n/2)$  – поверхность  $n$ -мерной сферы единичного радиуса. Нетрудно проверить, что  $\int p_0(r, \rho) d\rho = 1$ . При  $n = 2$  имеем

$$p_0(r, \rho) = 4d^{-2}G(\rho; 0, d) = \frac{2}{\pi} \ln \frac{d}{|\rho-r|}, \quad |\rho-r| \leq d.$$

Отношение значений функции  $G$  в выражении (7.16) ограничено, так как функции Грина для различных значений  $c$  имеют в точке  $\rho = 0$  полюса одного порядка. Соответственно (7.16) в выражении (7.10) функция  $d^2q(c, d)/[6q(c, d - \nu)]$  заменяется на  $d^2G(\rho; c, d)/[2nG(\rho; 0, d)]$ , где  $\rho$  – случайная точка в  $D(r)$ , плотность распределения вероятностей которой равна  $p_0(r, \rho)$ .

Лемма 7.1 справедлива в  $n$ -мерном случае, так как функция

$$\psi(z) = (n/2)J_{(n-2)/2}(z)/(z/2)^{(n-2)/2}$$

представима в виде (7.14) с заменой величин  $\{n\pi\}$  на положительные корни функции  $J_{(n-2)/2}$  (известно, что  $\psi(0) = 1$ , все корни функции Бесселя вещественны и их множество симметрично относительно нуля. Следовательно, все результаты подразд. 7.2.1 распространяются на  $n$ -мерный случай.

## 7.2. РЕШЕНИЕ МНОГОМЕРНОЙ РАЗНОСТНОЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ

**7.2.1. Оценки решения.** В этом разделе проводится сравнительный анализ эффективности различных вариантов “блуждания по решетке” с целью вероятностного решения задач Дирихле для разностного уравнения Гельмгольца и для системы таких уравнений.

Рассмотрим краевую задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца

$$\Delta u + cu = -g, \quad u|_{\Gamma} = \Psi, \quad (7.17)$$

в области  $D \subset R^n$  с границей  $\Gamma$ , причем  $c(r) < c^*$ , где  $c^*$  – первое собственное число оператора Лапласа для области  $D$ ,  $r = (x_1, \dots, x_n) \in D$ . Предполагаются выполненными условия регулярности функций  $c$ ,  $g$ ,  $\Psi$  и границы  $\Gamma$ , обеспечивающие существование и единственность решения данной задачи.

В области  $D$  строится равномерная сетка с шагом  $h$  и в качестве оценки решения исходной задачи в узлах сетки  $r = (i_1h, \dots, i_nh)$  рассматривается решение разностной задачи

$$\Delta_h u^h + c^h u^h = -g^h \quad \text{в } D_h \quad \text{и} \quad a^h u^h = \Psi^h \quad \text{на } \Gamma_h, \quad (7.18)$$

где  $\Delta_h$  – стандартный разностный аналог оператора Лапласа;  $D_h$  – множество внутренних узлов сетки;  $\Gamma_h$  – множество узлов, на которых аппроксимируются граничные значения;  $u^h$  – сеточная функция, определенная на  $D_h \cup \Gamma_h$ ;  $g^h$ ,  $c^h$  – значения функций  $g(r)$ ,  $c(r)$  в узлах сетки;  $a^h$  – разностная аппроксимация граничных условий, обеспечивающая погрешность порядка  $h^2$ ;  $\Psi^h$  – значения функции  $\Psi(\tilde{r})$ , где  $\tilde{r}$  – определенным образом выбранная точка границы  $\Gamma$ .

Свойства разностной аппроксимации оператора Лапласа позволяют предположить, что при достаточно малых  $h$  все собственные числа оператора  $\Delta_h$  для области  $D_h$  отрицательны. Обозначим через  $-c_h^*$  то из них, которое имеет наименьшую абсолютную величину. Тогда для  $c^h < c_h^*$  задача (7.18) имеет единственное решение.

Система (7.18) имеет вид

$$u_{i_1, i_2, \dots, i_n}^h = \frac{u_{i_1-1, i_2, \dots, i_n}^h + \dots + u_{i_1, i_2, \dots, i_n+1}^h}{2n - c_{i_1, i_2, \dots, i_n}^h h^2} + \frac{g_{i_1, i_2, \dots, i_n}^h h^2}{2n - c_{i_1, i_2, \dots, i_n}^h h^2}.$$

На границе сеточной области полагаем

$$u_{i_1, \dots, i_n}^h = \frac{\varepsilon u_{i_1, \dots, i_{k-1}, \dots, i_n}^h + h\Psi(\tilde{r})}{\varepsilon + h},$$

где  $\tilde{r}$  – ближайшая к данному граничному узлу точка границы  $\Gamma$ , лежащая на пересечении  $\Gamma$  и одной из прямых, образующих сетку;  $u_{i_1, \dots, i_{k-1}, \dots, i_n}^h$  – соседний узел, лежащий на этой же прямой;  $\varepsilon$  – расстояние от  $\tilde{r}$  до данного узла. Этот способ аппроксимации граничных условий предложен в [4].

Таким образом, получается система линейных алгебраических уравнений

$$u^h = Au^h + f^h. \quad (7.19)$$

Перепишем (7.19) в виде

$$u_i^h = q_i \sum_{j=1}^L p_{ij} u_j^h + f_i^h, \quad (7.20)$$

где  $i, j = (1, \dots, L)$  – номера узлов сетки, причем  $p_{ij} \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^L p_{ij} = 1$ . В соответствии с видом системы имеем:  $p_{ij} = 1/(2n)$ , если  $i$  – внутренний узел, а  $j$  – соседний с ним;  $p_{ii} = 1$  для граничных узлов,  $p_{ij} = 0$  в остальных случаях. Для граничных узлов полагаем  $q_i = 0$ ; для всех узлов, не имеющих соседним граничный узел,

$$q_i = (1 - c_i^h h^2 / (2n))^{-1};$$

для предграничных узлов в результате подстановки граничных условий получаем

$$\tilde{q}_i = q_i q_\varepsilon = (1 - c_i^h h^2 / (2n))^{-1} \times \left(1 - \frac{1}{2n} \times \frac{\varepsilon}{\varepsilon + h} \times (1 - c_i^h h^2 / (2n))^{-1}\right)^{-1}.$$

Свободный элемент  $f^h$  определяется соотношением

$$f_i^h = \frac{g_i^h h^2}{2n - c_i^h h^2} \text{ при } r_i \in D_h \text{ и } f_i^h = \frac{h}{\varepsilon + h} \Psi(\tilde{r}_i) \text{ при } r_i \in \Gamma_h.$$

Для простоты изложения будем далее рассматривать вариант, когда все граничные узлы сетки лежат на исходной границе  $\Gamma$ , т. е. область  $D_h$  является объединением “координатных” параллелепипедов. В этом случае имеем  $q_i = (1 - c_i^h h^2 / (2n))^{-1}$ ,

$$f_i^h = \frac{g_i^h h^2}{2n - c_i^h h^2} \text{ при } r_i \in D_h \text{ и } f_i^h = \Psi(\tilde{r}_i) \text{ при } r_i \in \Gamma_h. \quad (7.21)$$

Далее будут использованы обозначения:  $\rho(A)$  – спектральный радиус матрицы  $A$ ;  $A_0$  – матрица  $A$  при  $c \equiv 0$ .

**Лемма 7.3.** *Выполнено соотношение  $\rho(A_0) \leq 1 - c_h^* h^2 / (2n)$ .*

**Доказательство.** Из сказанного выше следует, что система уравнений

$$u^h = (1 - ch^2/(2n))^{-1} A_0 u^h + f^h$$

имеет единственное решение для всех  $f$  при постоянном  $c$ , таком, что  $-\infty < c < c_h^*$ . Известно, что спектральный радиус субстохастической матрицы  $A_0$  реализуется на положительном собственном значении  $\lambda_0$ . Предположим, что  $\lambda_0 > 1 - c_h^* h^2 / (2n)$ . Тогда существует  $c < c_h^*$ , такое, что  $1 - ch^2 / (2n) = \lambda_0$ . Для этого значения  $c$  рассматриваемая система имеет решение не для всех  $f$ , т. е. получено противоречие.  $\square$

На основе леммы 7.3 для  $c^h < c_{\max}^h < c_h^*$  получаем

$$\rho(A) \leq (1 - c_{\max}^h h^2 / (2n))^{-1} (1 - c_h^* h^2 / (2n)) < 1.$$

Из теории методов Монте-Карло (см. разд. 4.3) известно, что решение системы (7.20) в этом случае можно представить следующим образом:

$$u_{i_0}^h = \mathbf{E} \xi_{i_0} = \mathbf{E} \sum_{j=0}^l \left( \prod_{k=0}^{j-1} q_{i_k} \right) f_{i_j}^h,$$

где  $i_0, i_1, \dots, i_l$  – номера узлов случайной траектории цепи Маркова с начальным распределением  $\delta_{i_0}$  и вероятностями перехода  $p_{ij}$ ;  $l$  – случайный номер первого попадания на границу сеточной области. Данная оценка реализует вероятностное представление ряда Неймана для системы (7.19).

Заметим, что для оценки решения в разных точках можно использовать одни и те же траектории, считая, что траектория началась в состоянии  $i$ , если она попадает в него на каком-то этапе блуждания. При этом, если начальное состояние выбирать равновероятно по границе, то среднее число посещений точек будет постоянной величиной, не зависящей от номера узла (см. далее лемму 7.5).

Таким образом, для глобальной оценки решения системы (7.19) получен следующий алгоритм. Начальное состояние цепи Маркова выбираем равномерно по границе, затем с вероятностью единица траектория попадает в ближайший внутренний узел, после чего с одинаковой вероятностью она может перейти в любой из соседних узлов. Цепь обрывается, когда траектория вновь окажется на границе. Оценка решения имеет вид (здесь и в дальнейшем, не умаляя общности, для простоты записи формул будем полагать  $c \equiv \text{const} < c_h^*$ , индекс  $h$  будем опускать):  $u_i = \mathbf{E}_i \sum_{j=m_i}^l q^{(j-m_i)} f_{i_j}$ , где среднее берется по траекториям, прошедшим через  $i$ -й узел,  $m_i$  – момент первого в него попадания. Изложенный способ решения назовем “*прямым методом*”.

С другой стороны, можно воспользоваться соотношением  $u_i = (u, \delta_i) = (f, u^*)$ , где  $u^*$  – решение сопряженного уравнения:  $u^* = A^* u^* + \delta_i$ , а  $\delta_i$  – “индикатор” узла:  $\delta_i(j) = 1$ , если  $i = j$  и  $\delta_i(j) = 0$ , если  $i \neq j$ .

По аналогии с предыдущим, для оценки решения получается соотношение

$$u_i = \mathbf{E} \frac{f_{i_0}}{p_{i_0}} \sum_{j=0}^l q^j \delta_i(i_j),$$

где  $i_0, \dots, i_l$  – номера узлов траектории цепи “блуждания по решетке” с начальным распределением, равномерным по области, т. е.  $p_{i_0} \equiv p = 1/L$ , где  $L$  – число узлов в области. Данный способ оценки решения принято называть “*сопряженным методом*”.

**7.2.2. Оценка дисперсий методов.** Для изучения дисперсии “прямого метода” воспользуемся соотношением (см. подразд. 4.4)

$$\mathbf{E}\xi_{i_0}^2 = \mathbf{E} \left( \sum_{j=0}^l q^j f_{i_j} \right)^2 = \mathbf{E} \left( \sum_{j=0}^l q^{2j} f_{i_j} (2u_{i_j} - f_{i_j}) \right),$$

т. е.  $\mathbf{E}\xi_i^2 = (\chi, \delta_i)$ , где  $\chi$  – ряд Неймана для системы уравнений

$$\chi_i = f_i(2u_i - f_i) + \sum_{j=1}^L \frac{a_{ij}^2}{p_{ij}} \chi_j, \quad i = 1, \dots, L.$$

Рассмотрим условия сходимости ряда. Из неравенства

$$q^2(c) = (1 - ch^2/(2n))^{-2} \leq (1 - 2ch^2/(2n))^{-1} = q(2c)$$

следует, что величина  $\mathbf{E}\xi_i^2$  ограничена сверху решением системы разностных уравнений вида (7.19) для  $c' = 2c$  с заменой  $f$  на  $|f|$ , которое при  $h \rightarrow 0$  равномерно сходится к решению соответствующей краевой задачи. Следовательно, при  $c < c_h^*/2$  дисперсия “прямого метода” равномерно ограничена по  $h$ :  $\mathbf{D}\xi_i \leq \text{const} + O(h^2)$ .

Для оценки дисперсии “сопряженного метода” воспользуемся соотношением

$$\mathbf{E}\xi_i^2 = \mathbf{E} \left( \frac{f_{i_0}}{p_{i_0}} \sum_{j=0}^L q^j \delta_i(i_j) \right)^2 = \mathbf{E} \left( \frac{f_{i_0}}{p_{i_0}} \right)^2 \sum_{j=0}^L q^{2j} \delta_i(i_j) (2u_{i_j}^* - \delta_i(i_j)) = (\chi, \delta_i(2u^* - \delta_i)),$$

где  $\chi$  – ряд Неймана для системы уравнений

$$\chi_i = \frac{f_i^2}{p_i} + \sum_{j=1}^L \frac{a_{ij}^2}{p_{ij}} \chi_j, \quad i = 1, \dots, L.$$

Данный ряд сходится при  $c < c_h^*/2$ . Напомним, что  $p_i \equiv p = 1/L = O(h^n)$  и

$$f_i^2 = \left( \frac{g_i h^2}{2n - ch^2} \right)^2 = O(h^2) \frac{h^2}{2n - ch^2} \text{ при } r_i \in D_h \text{ и } f_i^2 = (\Psi_i)^2 \text{ при } r_i \in \Gamma_h.$$

Следовательно, при  $\Psi \equiv 0$  и  $h \rightarrow 0$  выполняется неравенство  $\mathbf{D}\xi_i \leq \text{const}/h^{n-2} + O(h^2)$ , а при  $\Psi \neq 0$  выполнено  $\mathbf{D}\xi_i \leq \text{const}/h^n + O(h^2)$ . Таким образом, дисперсия “сопряженного метода” оценивается величиной порядка  $O(h^{-n})$ .

**7.2.3. Оценка решения в целом.** Для глобальной оценки решения задачи (7.17) в области  $D$  можно оценить значения решения системы (7.18) в узлах сетки и построить линейное восполнение  $\tilde{u}(r)$ . При этом трудоемкость метода будет определяться величиной  $S = N \times t \times \mathbf{E}l$ , где  $N$  – число моделируемых траекторий, необходимое для достижения заданной погрешности,  $\mathbf{E}l$  – средняя длина одной траектории,  $t$  – время моделирования одного перехода (асимптотически при  $n \rightarrow \infty$  линейно по  $n$  растущая функция). Заметим, что  $\mathbf{E}l = \sum_{j=1}^L \mathbf{E}\nu_j$ , где  $\mathbf{E}\nu_j$  – среднее число посещений точки номера  $j$  на одной траектории.

**Лемма 7.4.** Если  $p_0 \equiv p = 1/L$ , т. е. начальное состояние цепи “блуждания по решетке” выбирается равновероятно по области  $D_h \cup \Gamma_h$ , то  $\mathbf{E}l = O(h^{-2})$ .

**Доказательство.** Среднее число посещений  $i$ -го узла сетки можно представить в виде

$$\mathbf{E}\nu_i = \mathbf{E} \sum_{j=0}^l \delta_i(i_j) = \mathbf{E} \frac{p_0}{p_0} \sum_{j=0}^l \delta_i(i_j) = (u_2, \delta_i),$$

где  $u_2$  – решение разностной задачи

$$u_2 = A_0 u_2 + \frac{1}{L}, \quad (7.22)$$

т. е. задачи (7.19) при  $c \equiv 0$  и  $f \equiv 1/L$ . С учетом сделанного перед (7.21) предположения о свойстве “параллелепипедальности”  $D_h$  имеем  $L = \text{const} \times h^{-n}$ , и систему (7.22) можно преобразовать к виду

$$\left( \frac{u_2}{h^{n-2}} \right) = A_0 \left( \frac{u_2}{h^{n-2}} \right) + \text{const} \times h^2.$$

При  $h \rightarrow 0$  решение данной системы равномерно сходится к решению краевой задачи для уравнения Пуассона:  $\Delta u = \text{const}$ ,  $u|_{\Gamma} = 0$ . Отсюда следует, что

$$\mathbf{E}\nu_i = (u_2, \delta_i) = O(h^{n-2}), \quad \mathbf{E}l = \sum_{i=0}^L \mathbf{E}\nu_i = O(h^{-n}) \times O(h^{n-2}) = O(h^{-2}).$$

□

**Лемма 7.5.** Пусть начальное состояние цепи Маркова выбирается равновероятно из множества точек границы, т. е.  $p_i \equiv 0$  в  $D_h$ , и  $p_i \equiv L_1^{-1} = C_0 h^{n-1}$  на  $\Gamma_h$ . Тогда:

1) среднее число посещений заданного внутреннего узла равно  $C_0 h^{n-1}$ , т. е. одинаково для всех узлов;

2) средняя длина траектории  $\mathbf{E}l = O(h^{-1})$ .

**Доказательство.** В условиях леммы среднее число посещений разных внутренних узлов представляет собой решение разностной задачи  $\Delta_h u_h = 0$ ,  $u_h|_{\Gamma_h} = C_0 h^{n-1}$ , из чего и следует первое утверждение леммы. Далее, по аналогии с доказательством леммы 2.9, получаем  $\mathbf{E}l = \sum_{i=1}^L \mathbf{E}\nu_i = O(h^{-1})$ . □

Оценим теперь среднюю погрешность методов. Известно [4], что если  $u(r) \in C^4(D)$ , то  $|u(r_i) - \mathbf{E}\xi_i| \leq Ch^2$  и, следовательно,  $|u(r) - \mathbf{E}\tilde{u}(r)| \leq Ch^2$ , где  $\tilde{u}(r)$  – линейное восполнение оценки разностного решения по  $N$  траекториям. Отсюда получаются следующие оценки погрешности в метрике пространства  $L_2(D)$ : для “прямого метода”

$$\mathbf{E}\|u(r) - \tilde{u}(r)\|_{L_2}^2 \leq \int_D \mathbf{D}\tilde{u}(r) dr + \int_D \mathbf{E}(u(r) - \mathbf{E}\tilde{u}(r))^2 dr \leq \frac{d_1}{N_1} + C^2 h^4, \quad (7.23)$$

для “сопряженного метода”

$$\mathbf{E}\|u(r) - \tilde{u}(r)\|_{L_2}^2 \leq \frac{d_2}{Nh^n} + C^2 h^4.$$

Здесь коэффициент  $C$  оценивается через верхнюю границу производных второго порядка от решения; коэффициенты  $d_i$  являются верхними границами дисперсий оценок, равномерно по  $h$  ограничены (см. выше), и оцениваются через решения соответствующих краевых задач с  $c' = 2c$ ,  $f \equiv \text{const}$ . Величина  $N_1$  есть среднее число траекторий, проходящих через один узел. Ясно, что  $N_1 = N \times \mathbf{E}\nu_i^{(1)}$ , где  $\mathbf{E}\nu_i^{(1)}$  – среднее число первых посещений  $i$ -го узла или, что то же самое, вероятность того, что траектория хотя бы раз пройдет через данный узел.

**Лемма 7.6.** Справедливо неравенство  $\mathbf{E}\nu_i^{(1)} \geq (1 - F_n)\mathbf{E}\nu_i$ , где  $F_n$  – вероятность возврата траектории в фиксированный узел после старта из него на бесконечной решетке.

**Доказательство.** Для бесконечной решетки, очевидно, выполняется равенство  $\mathbf{E}\nu_i = \mathbf{E}\nu_i^{(1)}/(1 - F_n)$ . Поскольку на границе траектория поглощается, то для ограниченной решетки вероятность возврата меньше  $F_n$ . □

Ясно, что если положение  $i$ -го узла фиксированно и  $h \rightarrow 0$ , то  $\mathbf{E}\nu_i^{(1)} \asymp (1 - F_n)\mathbf{E}\nu_i$ , и это асимптотическое равенство выполняется равномерно для всех узлов, не лежащих в некоторой фиксированной окрестности границы. Отметим, что вследствие известной *теоремы Паба*  $F_i < 1$  для  $n > 2$ , причем  $f \approx 0.35$  при  $n = 3$ .

Из леммы 7.6 во всяком случае следует, что

$$N_1 = N \mathbf{E}\nu_i^{(1)} \geq (1 - F_n) N \mathbf{E}\nu_i \asymp Nh^{n-1}.$$

Подставляя это выражение в (7.23) получаем следующую оценку погрешности “прямого метода”:

$$\mathbf{E}\|u(r) - \tilde{u}(r)\|_{L_2}^2 \leq \frac{d_1}{Nh^{n-1}} + C^2h^4.$$

Получить аналогичные погрешности в метрике пространства непрерывных функций, используя теоремы вложения, невозможно. Действительно, даже, если  $u(r)$  – достаточно гладкая функция, погрешность аппроксимации задачи (7.17) системой (7.18) имеет порядок  $h^2$ , следовательно, зная решение системы (7.18), можно получить оценки только первых производных от решения задачи (7.17), в то время как использование теорем вложения требует оценок производных более высокого порядка.

Задача минимизации трудоемкости в смысле необходимого числа операций для достижения требуемой оценки погрешности  $\delta$  для “прямого метода” имеет вид

$$S = N \times t \times \mathbf{E}l \rightarrow \min_{N,h}, \quad \frac{d_1}{Nh^{n-1}} + C^2h^4 = \delta^2.$$

В результате решения этой задачи получаем:

$$h^* = \left( \frac{n}{C^2(4+n)} \right)^{1/4} \delta^{1/2}, \quad N^* = \left( \frac{C^2(4+n)}{n} \right)^{(n-1)/4} \frac{d_1(4+n)}{4} \delta^{-(n+3)/2},$$

$$S^* = \left( \frac{C^2(4+n)}{n} \right)^{n/4} \frac{td_1(4+n)}{4} \delta^{-n/2-2}.$$

Соответствующие значения для “сопряженного метода” в общем случае таковы:

$$h^* = \left( \frac{n+2}{C^2(6+n)} \right)^{1/4} \delta^{1/2}, \quad N^* = \left( \frac{C^2(6+n)}{n+2} \right)^{n/4} \frac{d_2(6+n)}{4} \delta^{-(n+4)/2},$$

$$S^* = \left( \frac{C^2(6+n)}{n+2} \right)^{(n+2)/4} \frac{td_2(6+n)}{4} \delta^{-n/2-3},$$

а для  $\Psi \equiv 0$

$$h^* = \left( \frac{n}{C^2(4+n)} \right)^{1/4} \delta^{1/2}, \quad N^* = \left( \frac{C^2(4+n)}{n} \right)^{(n-2)/4} \frac{d_2(4+n)}{4} \delta^{-(n+2)/2},$$

$$S^* = \left( \frac{C^2(4+n)}{n} \right)^{n/4} \frac{td_2(4+n)}{4} \delta^{-n/2-2}.$$

Рассмотрим теперь результаты методических расчетов. “Прямой” и “сопряженный” методом решалась задача Дирихле в кубе  $0 \leq x_i \leq 1$ ,  $i = 1, \dots, n$ , для уравнения

$$\Delta u + cu = 0, \quad u|_{\Gamma} = \cos(x_1\sqrt{c/n}) \times \dots \times \cos(x_n\sqrt{c/n}).$$



Точное решение имеет вид  $u(r) = \cos(x_1\sqrt{c/n}) \times \dots \times \cos(x_n\sqrt{c/n})$ . Решение оценивалось в узлах решетки вдоль прямой линии  $x_2 = x_3 = \dots = x_n$ ,  $x_1 \in [0, 1]$ . При реализации “прямого метода” использовался следующий алгоритм: вдоль траектории запоминались номера проходимых узлов, а при выходе на границу осуществлялся обратный проход вдоль траектории и суммирование с соответствующими весами. При реализации “сопряженного метода” суммирование осуществляется при первом проходе. Таким образом, вычислительные затраты на один переход в цепи блуждания при реализации “прямого метода” несколько выше, чем в “сопряженном” методе, что, однако, никак не отражается на порядке оценки трудоемкости при  $\delta \rightarrow 0$ . В табл. 7.1 приведены результаты расчетов для  $h = 0.01$ ,  $N = 10^6$ . Здесь  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  – оценки максимального среднеквадратического уклонения “прямого” и “сопряженного” методов соответственно;  $\text{sig}_1$ ,  $\text{sig}_2$  – соответствующие значения максимальной абсолютной погрешности;  $T_1$ ,  $T_2$  – время счета в относительных единицах.

Расчеты подтвердили, что “прямой метод” обладает меньшей дисперсией оценки и является более эффективным, чем “сопряженный”, даже при невысоких требованиях к точности оценок.

**Таблица 7.1.** Результаты расчетов “прямым” и “сопряженным” методами

$n$	$c$	$\sigma_1$	$\text{sig}_1$	$\sigma_2$	$\text{sig}_2$	$T_1$	$T_2$
3	15	0.021	0.030	0.193	2.975	415	322
4	20	0.017	0.025	0.247	2.207	532	346
6	25	0.084	0.076	0.9102	1.130	635	395

Отметим, что при  $c = \text{const}$  используемые веса просто  $m$ -кратно дифференцируются по  $c$ ; несмещенность и конечность дисперсий, получаемых на этой основе оценок производных  $u_m^h$ , например для задачи

$$\Delta_h u^h + cu^h = 0, \quad u^h|_{\Gamma} \equiv 1,$$

легко обосновываются. Таким образом, легко реализуется итерационный процесс

$$mu_{m-1}^h/u_m^h \rightarrow c_h^* - c$$

для оценки первого собственного числа разностного оператора Лапласа. Известно также, что функции  $u_m^h$  дают решение задачи Рикье для разностного метагармонического уравнения.

Достаточно ясно, что рассмотренные алгоритмы и полученные выводы без принципиальных изменений распространяются на решение систем эллиптических уравнений

$$\Delta u_i(r) + \sum_{j=1}^m c_{ij}(r)u_j(r) = -g_i(r), \quad u_i(r)|_{\Gamma} = \psi_i(r), \quad (7.24)$$

где  $i = 1, \dots, m$ . При этом особенно эффективным может быть векторный алгоритм, в котором используется матричный вес, домножаемый после каждого перехода на матричный множитель, определяемый по аналогии с  $q_i$  через коэффициенты системы. Векторная оценка решения системы (7.24) “прямым методом” в этом случае имеет вид

$$\vec{u}_{i_0} = \mathbf{E}\vec{\xi}_{i_0} = \mathbf{E} \sum_{j=0}^l \left( \prod_{k=0}^{j-1} Q_{i_k} \right) \vec{f}_{i_j},$$

где  $Q_s = (E - (h^2/(2n))C_s)^{-1}$  – матричный вес;  $C_s = \{c_{ij}(r_s)\}$  – матрица значений коэффициентов системы (7.24) в  $s$ -м узле;

$$\vec{f}_s = h^2(2nE - h^2C)^{-1}\vec{g}_s \text{ при } r \in D_h \text{ и } \vec{f}_s = \vec{\Psi}_s \text{ при } r \in \Gamma_h.$$

Аналогичным образом строится оценка “сопряженного метода”:

$$\vec{u}_i = \mathbf{E}\vec{\xi}_i = \mathbf{E}\frac{\vec{f}_{i_0}}{p_{i_0}} \sum_{j=0}^l \left( \prod_{k=0}^{j-1} Q_{i_k} \right) \delta_i(i_j).$$

При достаточно малом  $h$  выполняется соотношение  $(h^2/(2n))\|C(r)\| < 1$  для всех  $r \in \bar{D}$ , которое обеспечивает оценку  $\|Q\| \leq 1/(1-h^2/(2n))\|C\|$ . Следовательно, при выполнении условия  $\|C(r)\| < c_h^* \forall r \in \bar{D}$  полученные выше утверждения и оценки распространяются на векторный случай.

Если определение обратной матрицы  $(E - (h^2/(2n))C)^{-1}$  затруднительно, то его можно рандомизировать стандартным способом, используя представление в виде матричной прогрессии, т.е. заменять матричный вес  $Q$  его независимой случайной несмещенной оценкой  $\tilde{Q}$ .

### 7.3. ДИФФУЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим  $k$ -мерную задачу Дирихле для уравнения

$$Lu + cu + g \equiv \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^k b_{ij}(r) \frac{\partial^2 u}{\partial y_i \partial y_j} + \sum_{i=1}^k v_i(r) \frac{\partial u}{\partial y_i} + cu + g = 0, \quad u|_{\Gamma} = \psi \quad (7.25)$$

в ограниченной области  $\Omega$  с границей  $\Gamma$ , которая предполагается односвязной и кусочно-гладкой. Будем полагать также, что функции  $b_{ij}, v_i, c$  и  $g$  удовлетворяют условию Гельдера в  $\bar{\Omega}$ , функция  $\psi$  непрерывна на  $\Gamma$ , а  $B(r) = (b_{ij}(r))_{i,j=1,\dots,k}$  – равномерно положительно определенная матрица в  $\Omega$ . Кроме того, считаем, что  $c(r) < c^*$ , где  $-c^*$  – первое собственное число оператора  $L$  в  $\Omega$ . Далее будет указано, как построенные алгоритмы можно распространить на случай парболической задачи со смешанными краевыми условиями.

Дифференциальному оператору  $L$  из (7.25) можно поставить в соответствие систему стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) в смысле Ито, исходная интегральная форма которой имеет вид:

$$\xi_t = \xi_0 + \int_0^t v(\xi_l) dl + \int_0^t \sigma(\xi_l) dw(l), \quad (7.26)$$

где  $\xi_t \in R^k$ ,  $\sigma(r)$  – нижняя треугольная матрица диффузии, определяемая разложением Холесского:  $B = \sigma(r)\sigma^T(r)$  (см. подразд. 1.10.4), а  $w(t)$  – стандартный винеровский процесс. Известно [1] вероятностное представление для решения (7.25) в точке  $r_0$ :

$$u(r_0) = \mathbf{E} \left[ \int_0^{\tau} \exp \left( \int_0^t c(\xi_l) dl \right) g(\xi_t) dt + \psi(\xi_{\tau}) \exp \left( \int_0^{\tau} c(\xi_l) dl \right) \right], \quad (7.27)$$

где  $\xi_t$  – решение системы (7.26) с начальным условием  $\xi_0 = r_0$ ,  $\tau$  – момент первого выхода траектории  $\xi_t$  из  $\Omega$ . Для приближенного статистического моделирования решения системы (7.26) в смысле Ито можно, в частности, использовать схему Эйлера с постоянным шагом  $h$ :

$$r_{n+1} = r_n + hv(r_n) + \sqrt{h}\sigma(r_n)\eta_n, \quad n = 0, 1, \dots, N$$

(см. также формулу (2.24) и алгоритм 2.6), где  $r_n$  – численная оценка решения (7.26) в узлах равномерной сетки по времени  $\{nh\}$ , а  $\{\eta_n\}$  – последовательность независимых между собой случайных векторов с независимыми стандартными гауссовскими компонентами. Для простоты изложения, не умаляя общности, далее будем полагать  $c \equiv 0$ . Переход к варианту с  $c \neq 0$  осуществляется с помощью экспоненциального веса соответственно (7.27).

При использовании схемы Эйлера интегралы в соотношении (7.27) оцениваются по формуле Симпсона с шагом  $h$ . Значение  $\tau$  оценивается с помощью линейного восполнения траектории в первом из временных интервалов, соответствующих выходу из области  $\Omega$ :  $\xi_{Nh} \in \Omega$ ,  $\xi_{(N+1)h} \notin \Omega$ . В результате соотношение (7.27) заменяется на следующее приближенное:  $\tilde{u} = \mathbf{E}\tilde{\zeta}$ . Известно, что при сформулированных условиях имеет место порядок  $O(h^{1/2})$  детерминированной погрешности, т. е.  $|u - \tilde{u}| = O(h^{1/2})$ , а средние затраты на построение траектории определяются величиной порядка  $O(h^{-1})$ .

Нетрудно заметить, что, если  $c \leq 0$ , то  $\mathbf{D}\tilde{\zeta} \leq c < \infty$ . Обозначив через  $\tilde{\zeta}_M$  оценку величины  $\tilde{u}$  по  $M$  независимым испытаниям получаем

$$\mathbf{E}(u - \tilde{\zeta}_M)^2 = (u - \tilde{u})^2 + \frac{\mathbf{D}\tilde{\zeta}}{M} = O_1(h) + O_2(M^{-1}).$$

Следовательно, условно оптимальным является здесь число испытаний  $M = O(h^{-1})$ , а соответствующая трудоемкость имеет порядок  $O(\gamma^{-4})$ , где  $\gamma$  – требуемая погрешность (см. подразд. 5.3.7). В случае  $|u - \tilde{u}| = O(h)$  трудоемкость имеет порядок  $O(\gamma^3)$ .

Для повышения порядка сходимости (при  $h \rightarrow 0$ ) вместо схемы Эйлера вблизи границы можно использовать схему, в которой моделируются “прыжки” фиксированной малой длины:

$$r_{n+1} = r_n + hv(r_n) + \sqrt{kh}\sigma(r_n)\nu_n, \quad n = 1, 2, \dots,$$

где  $\{\nu_n\}$  – последовательность независимых равномерно распределенных по поверхности единичной сферы случайных векторов. Эта схема при выполнении определенных условий регулярности задачи обеспечивает порядок погрешности  $O(h)$  оценки функционалов, выражающих  $u(r_0)$  (7.27) в случае краевых условий первого рода. Отметим, что рассмотренный алгоритм применим для функционалов  $\mathbf{E}f(\xi_{\min(t,\tau)})$ , связанных с решением параболического уравнения. При этом можно учитывать смешанные краевые условия, используя “отскок” от границы.

Заметим, что для однородных граничных условий справедливо представление  $(f, u) = (g, u^*)$ . Здесь  $f$  – некоторая плотность вероятностей в  $\Omega$ , а  $u^*$  – решение соответствующего “прямого” диффузионного уравнения

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^k \frac{\partial}{\partial y_i} \left( b_{ij}(r) \frac{\partial u^*}{\partial y_j} \right) - \sum_{i=1}^k \frac{\partial}{\partial y_i} (e_i(r)u^*) + f(r) = 0, \quad \text{где} \quad e_i = v_i - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k \frac{\partial b_{ij}}{\partial y_j}.$$

На этой основе можно оценивать функционалы от  $u^*$ . Следовательно, используя веса  $g$  с достаточно малым локальным носителем, можно приближенно оценивать концентрацию  $u^*$  диффундирующих частиц. Более точные оценки  $u^*$  можно получить в случае однородных краевых условий путем преобразования “прямого” уравнения к виду (7.25).

#### 7.4. ОЦЕНКА ПО ВРЕМЕНИ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЛИНЕЙНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ТРАЕКТОРИЙ МНОГОМЕРНЫХ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Здесь построен более общий способ оценки функционалов  $(g, u^*)$ . Рассмотрим  $n$ -мерный диффузионный процесс  $\xi_t$  в ограниченной области  $\Omega \subset R^n$  (см., например, [1]), в которой находится пространственно-временной источник диффундирующих “частиц”, т.е. траекторий процесса, с плотностью распределения  $f(x, t)$ . Предполагается также, что в области  $\Omega$  происходит поглощение частиц со скоростью  $c(x) \geq 0$ , непрерывной по Гельдеру в  $\bar{\Omega}$ , т.е. вероятность поглощения частицы, движущейся из точки  $x$ , за время  $\Delta t$  задается соотношением

$$P_c(\Delta t) = c(x)\Delta t + o(\Delta t). \quad (7.28)$$

Полагаем, что на границе  $\partial\Omega$  частицы поглощаются. Границы рассматриваемых областей предполагаются регулярными.

Если  $F(V, t)$  – число частиц в подобласти  $V \subset \Omega$  в момент времени  $t$ , то  $F(V, t)$  – неотрицательная аддитивная функция подобласти  $V$ . Производная этой функции по  $V$  представляет собой функцию точки  $u^*(x, t)$  и называется концентрацией:

$$u^*(x, t) = \lim_{V \rightarrow x} \frac{F(V, t)}{|V|} \geq 0.$$

Из общей теории аддитивных функций области следует, что число частиц в произвольной подобласти  $V$  выражается формулой

$$F(V, t) = \int_V u^*(x, t) dx. \quad (7.29)$$

Через  $I_V(x)$  далее будем обозначать индикатор области  $V$ :  $I_V(x) = 1$  при  $x \in V$  и  $I_V(x) = 0$  при  $x \notin V$ . Функцию  $F(V, t)$  можно статистически оценивать с помощью методов Монте-Карло. Например, в случае нормированного источника, т.е. при  $\int_0^T \int_{\Omega} f(x, t) dx dt = 1$ , верно соотношение

$$F(V, t) = \mathbf{E} I_V(\xi_t). \quad (7.30)$$

Рассмотрим задачу оценки линейного функционала

$$(u^*, g) = J_g^T = \int_0^T dt \int_D u^*(x, t) g(x) dx,$$

где  $D$  – ограниченная подобласть  $\Omega$ ,  $g \in C^1(D)$ ; будем полагать, что  $g = 0$  в  $\Omega \setminus D$ .

**Теорема 7.4.** Пусть  $\eta_g = \int_0^{\min(T, \tau)} g(\xi_t) dt$ , где  $\tau$  – момент поглощения частицы. Тогда  $J_g^T = \mathbf{E} \eta_g$ .

**Доказательство.** Заметим, что  $\eta_g$  существует с вероятностью единица, поскольку траектории процесса  $\xi_t$  с вероятностью единица непрерывны. Рассмотрим сначала случай  $g \geq 0$  при нормированном источнике. Разобьем область  $D$  сеткой на подобласти:  $D = \cup_{i=1}^K V_i$ . Обозначим  $|V_i| = \text{diam} V_i$  и полагаем, что  $\max |V_i| \rightarrow 0$  при  $K \rightarrow \infty$ . Пусть также

$$0 = t_0 < \dots < t_M = T, \quad \Delta t_k = t_{k+1} - t_k, \quad \Delta t = \max \Delta t_k,$$

причем  $\Delta t \rightarrow 0$  при  $M \rightarrow \infty$ . Тогда

$$J_g^T = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^M \left[ \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^K g(x_i) \int_{V_i} u^*(x, t_k) dx \right] \Delta t_k, \quad (7.31)$$

где  $x_i$  – любая точка из  $V_i$ . Из равенств (7.29) и (7.30) следует:  $\int_{V_i} u^*(x, t_k) dx = \mathbf{E}I_{V_i}(\xi_{t_k})$ . В качестве  $x_i = x_i^{(k)} \in V_i$  рассмотрим такую точку, что выполняется равенство

$$g(x_i^{(k)})\mathbf{E}I_{V_i}(\xi_{t_k}) = \mathbf{E}g(\xi_{t_k})I_{V_i}(\xi_{t_k}).$$

Точка  $x_i^{(k)}$  существует в силу непрерывности функции  $g$ . Выражение (7.31) теперь можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} & \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^M \left( \lim_{K \rightarrow \infty} \mathbf{E} \left[ g(\xi_{t_k}) \sum_{i=1}^K I_{V_i}(\xi_{t_k}) \right] \right) \Delta t_k = \\ & = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^M \mathbf{E}g(\xi_{t_k})\Delta t_k = \int_0^T \mathbf{E}g(\xi_t) dt = \mathbf{E} \int_0^{\min(T, \tau)} g(\xi_t) dt. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Использованная в (7.32) перестановка операций интегрирования и осреднения допустима, так как  $g \geq 0$ . Если функция  $g$  не является знакопостоянной, то использованная перестановка операций все же допустима и (7.32) выполняется в силу конечности величины  $J_{|g|}^T$ . Переход к ненормированному источнику осуществляется путем умножения величины  $J_g^T$  на соответствующую константу.  $\square$

Заметим, что теорема 7.4 соответствует тому факту, что для фиксированной траектории  $\xi_t$  концентрация формально равна  $\delta(x - \xi_t)$ .

**Теорема 7.5.** *Если траектории  $\xi_t$  моделируются в модифицированной среде без поглощения, а “физическая” скорость поглощения  $c(x) \geq 0$ , то*

$$\int_0^T dt \int_D u^*(x, t)g(x) dx = \mathbf{E} \int_0^{\min(T, \tau)} g(\xi_t) \exp\left(-\int_0^t c(\xi_s) ds\right) dt, \quad (7.33)$$

т. е. случайная величина

$$\tilde{\eta}_g = \int_0^{\min(T, \tau)} g(\xi_t) \exp\left(-\int_0^t c(\xi_s) ds\right) dt \quad (7.34)$$

является несмещенной оценкой функционала  $J_g^T$ .

**Доказательство.** Согласно (7.28) вероятность непоглощения в точке  $x$  за промежуток времени  $\Delta t$  равна величине  $1 - c(x)\Delta t + o(\Delta t)$ . Таким образом, для учета поглощения интегральную сумму  $\eta_g^M = \sum_{k=1}^M g(\xi_{t_k})\Delta t_k$  следует заменить на  $\tilde{\eta}_g^M = \sum_{k=1}^M g(\xi_{t_k})Q_k\Delta t_k$ , где веса  $Q_k$  определяются по формулам

$$Q_0 \equiv 1, \quad Q_k = Q_{k-1}[1 - c(\xi_{t_k})\Delta t_k + o(\Delta t)] = \prod_{i=1}^k [1 - c(\xi_{t_i})\Delta t_i + o(\Delta t)].$$

Стандартным методом, логарифмируя последнее выражение и устремляя  $\Delta t$  к нулю, получим требуемое равенство (7.34).  $\square$

Величины  $\eta_g$  и  $\tilde{\eta}_g$  будем называть *оценками “по времени”*. Отметим, что в случае  $g \geq 0$  оценку  $\eta_g$  можно построить на основе простых эвристических соображений, связанных с аддитивностью математического ожидания. Действительно, если вводится дополнительное фиктивное поглощение со скоростью  $g(x)$ , то условное математическое ожидание числа фиктивных поглощений, при фиксированной реализации процесса  $\xi_t$ , в элементарном интервале времени  $(t, t + dt)$  равно  $g(\xi_t) dt$ ; сумма таких величин по всем элементарным интервалам и дает  $\eta_g$ . С другой стороны, по определению скорости

поглощения, полное число фиктивных поглощений равно  $(u^*, g)$ , что и подтверждает равенство  $\mathbf{E}\eta_g = (u^*, g)$ . Заметим также, что в случае  $g(x) = c(x)$  функционал  $J_g^T$  равен числу частиц, поглощенных в области  $D$ .

Рассмотрим теперь случай  $T = +\infty$ . Для этого в равенстве (7.33) устремим  $T$  к бесконечности, заменяя  $\min(T, \tau)$  на  $\tau$ . Пусть сначала  $g \geq 0$ . В этом случае имеем две монотонно неубывающие функции аргумента  $T$ , которые совпадают для любого конечного  $T$ . Следовательно, их пределы также равны, т. е.

$$J_g \equiv \int_0^\infty dt \int_D u^*(x, t) g(x) dx = \mathbf{E} \int_0^\tau g(\xi_t) \exp\left(\int_0^t c(\xi_s) ds\right) dt. \quad (7.35)$$

В случае знакопеременной функции  $g$ , при условии существования  $J_{|g|}$ , равенство (7.35) также выполняется.

Рассмотрим далее вопрос о конечности дисперсии случайных величин  $\eta_g$  и  $\tilde{\eta}_g$ . Пусть  $H = \max_{x \in D} |g(x)|$ , причем  $H < \infty$ , так как  $g \in C^1(\bar{D})$ . В случае  $T < \infty$  дисперсия  $\eta_g$  ограничена, поскольку  $\mathbf{E}\eta_g^2 \leq H^2 T^2 < +\infty$ . В случае  $T = +\infty$  при  $c(x) \geq c > 0$  дисперсия  $\tilde{\eta}_g$  тоже конечна, поскольку

$$\mathbf{E}\tilde{\eta}_g^2 \leq H^2 \mathbf{E} \left( \int_0^\tau e^{-ct} dt \right)^2 \leq \frac{H^2}{c^2} < +\infty.$$

Пусть теперь  $c \equiv 0$ . Известно, что распределение случайной величины  $\tau$  для винеровского процесса в шаре является экспоненциальным. Из этого очевидным образом следует, что  $\mathbf{E}\tau^2 < +\infty$  для винеровского процесса в ограниченной области  $\Omega$ . Ясно, что это свойство выполняется и при наличии постоянного сноса.

Будем считать, что характеристики процесса  $\xi_t$  и области  $\Omega$  таковы, что выполняется соотношение  $\mathbf{E}\tau^2 < +\infty$ . В этих условиях дисперсия величины  $\tilde{\eta}_g$  конечна и при  $c(x) \equiv 0$ . Расчеты показали, что при использовании схемы Эйлера для реализации “оценки по времени” детерминированная погрешность может быть близкой к  $O(\Delta t)$ , если подобласть  $V$  отделена от границы  $\partial\Omega$ .

Построенный метод оценки функционалов  $(g, u^*)$  применим для произвольного непрерывного процесса  $\xi_t$ , причем допускается возможность отражения от границы. В частности, этот метод дает несмещенную оценку функционалов от концентрации “эйлеровских” траекторий.

## 7.5. ВЕРОЯТНОСТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПОЛИГАРМОНИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

**7.5.1. Исходная информация.** Рассмотрим краевую задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца в области  $D \subset R^n$  с границей  $\Gamma$ :

$$(\Delta + c + \lambda)u = -g, \quad u|_\Gamma = \varphi. \quad (7.36)$$

Предположим выполненными следующие условия. Функции  $g, c$  удовлетворяют условию Гёльдера в  $\bar{D}$ ,  $D$  - ограниченное открытое множество в  $R^n$  с регулярной границей  $\Gamma$ , функция  $\varphi$  непрерывна на  $\Gamma$ ,  $c + \lambda < c^*$ , где  $-c^*$  - первое собственное значение оператора Лапласа для области  $D$ . Дополнительно будем предполагать, что функция  $\varphi$  достаточно регулярно зависит от скалярного параметра  $\lambda$  в интервале  $|\lambda| < \lambda_0$ , причём  $c + \lambda_0 < c^*$ . Эти условия, обеспечивающие существование и единственность решения данной задачи, предполагаются выполненными, в том числе, и после замены всех параметрических функций на их модули.

Известно [1], что, если функция  $u$  является решением задачи (7.36), то при выполнении сформулированных в подразд. 7.5.1 условий для нее справедливо следующее вероятностное представление

$$u(x) = \mathbf{E} \left[ \int_0^\tau e^{\lambda t + s(t;c)} g(\xi_t) dt + e^{\lambda \tau + s(\tau;c)} \varphi(\xi_\tau) \right], \quad s(t;c) = \int_0^t c(\xi_{t'}) dt', \quad (7.37)$$

где  $\xi_t$  – начинающийся в точке  $x$  соответствующий оператору Лапласа диффузионный процесс,  $\tau$  – момент первого выхода процесса из области  $D$ . Далее аргумент  $x$  будет опускаться.

**7.5.2. Требуемое вероятностное представление.** Рассмотрим теперь общую задачу следующего вида:

$$\begin{cases} (\Delta + c)^{p+1} u = -g, \\ (\Delta + c)^k u|_\Gamma = \varphi_k, \quad k = 0, \dots, p. \end{cases} \quad (7.38)$$

**Лемма 7.6.** Пусть выполнены условия, сформулированные в подразд. 7.5.1,  $u$  – решение задачи (7.38). Тогда  $u = \mathbf{E} \zeta_p$ , где

$$\zeta_p = (-1)^p \int_0^\tau \frac{t^p}{p!} e^{s(t;c)} g(\xi_t) dt + \sum_{l=0}^p \frac{(-1)^l}{l!} e^{s(\tau;c)} \tau^l \varphi_l(\xi_\tau). \quad (7.39)$$

**Доказательство.** Задача (7.38) эквивалентна следующей системе задач

$$\begin{cases} (\Delta + c)^p u = w, \\ (\Delta + c)^k u|_\Gamma = \varphi_k, \quad k = 0, \dots, p-1; \end{cases} \quad \begin{cases} (\Delta + c)w = -g, \\ w|_\Gamma = \varphi_p. \end{cases} \quad (7.40)$$

Предположим, что, согласно формуле (7.39), для решения первой части из (7.40) справедливо тождество:

$$u = \mathbf{E} \left[ (-1)^p \int_0^\tau \frac{t^{p-1}}{(p-1)!} e^{s(t;c)} w(\xi_t) dt + \sum_{l=0}^{p-1} \frac{(-1)^l}{l!} e^{s(\tau;c)} \tau^l \varphi_l(\xi_\tau) \right]. \quad (7.41)$$

Используя вероятностное представление (7.37) для решения второй задачи из (7.40) и теорему Фубини, перепишем соотношение (7.41) в следующем виде:

$$u = \mathbf{E} \left\{ (-1)^p \int_0^\tau \frac{t^{p-1}}{(p-1)!} e^{s(t;c)} \left[ \int_t^\tau e^{s(t_1;c) - s(t;c)} g(\xi_{t_1}) dt_1 + e^{s(\tau;c) - s(t;c)} \varphi(\xi_\tau) \right] dt + \sum_{l=0}^{p-1} \frac{(-1)^l}{l!} e^{s(\tau;c)} \tau^l \varphi_l(\xi_\tau) \right\}.$$

Применяя формулу интегрирования по частям, получаем равенства:

$$u = \mathbf{E} \left[ (-1)^p \frac{t^p}{p!} \int_t^\tau e^{s(t_1;c)} g(\xi_{t_1}) dt_1 \Big|_{t=0}^{t=\tau} + (-1)^p \int_0^\tau \frac{t^p}{p!} e^{s(t;c)} g(\xi_t) dt + \sum_{l=0}^p \frac{(-1)^l}{l!} e^{s(\tau;c)} \tau^l \varphi_l(\xi_\tau) \right] = \mathbf{E} \left[ (-1)^p \int_0^\tau \frac{t^p}{p!} e^{s(t;c)} g(\xi_t) dt + \sum_{l=0}^p \frac{(-1)^l}{l!} e^{s(\tau;c)} \tau^l \varphi_l(\xi_\tau) \right].$$

Таким образом, с помощью индукции по  $p$  лемма доказана.  $\square$

**7.5.3. Параметрическое дифференцирование.** Предполагая справедливость перестановки оператора Лапласа с производной по параметру  $\lambda$ , получаем следующее соотношение для  $p$ -кратной параметрической производной от решения уравнения Гельмгольца (7.36):

$$(\Delta + c + \lambda)u^{(p)} = -pu^{(p-1)}, \quad u^{(p)}|_{\Gamma} = \varphi^{(p)}, \quad p = 1, 2, \dots$$

Следовательно, можно предполагать, что  $p$ -кратная производная по параметру  $\lambda$  при  $\lambda = 0$  от решения уравнения (7.36) удовлетворяет следующей краевой задаче для полигармонического уравнения

$$\begin{cases} (\Delta + c)^{p+1}u^{(p)} = (-1)^{p+1}p!g, \\ (\Delta + c)^k u^{(p)}|_{\Gamma} = (-1)^k \frac{p!}{(p-k)!} \varphi^{(p-k)}, \quad k = 0, \dots, p. \end{cases} \quad (7.42)$$

**Лемма 7.7.** Пусть выполнены условия, сформулированные в подразд. 7.5.1, и  $c < c^*$ . Тогда

$$\left. \frac{\partial^p u}{\partial^p \lambda} \right|_{\lambda=0} = u^{(p)} = \mathbf{E} \left[ \int_0^\tau t^p e^{s(t;c)} g(\xi_t) dt + \sum_{l=0}^p \tau^{p-l} e^{s(\tau;c)} C_p^l \frac{\partial^l \varphi(\xi_\tau)}{\partial^l \lambda} \right]. \quad (7.43)$$

**Доказательство.** Согласно правила Лейбница верно тождество

$$\frac{\partial^p}{\partial^p \lambda} [e^{\lambda\tau+s(\tau;c)} \varphi(\xi_\tau)] = \sum_{l=0}^p \tau^{p-l} e^{\lambda\tau+s(\tau;c)} C_p^l \frac{\partial^l \varphi(\xi_\tau)}{\partial^l \lambda}.$$

Дифференцируя равенство (7.37), можно вносить производные по параметру  $\lambda$  под знак математического ожидания, так как в интервале  $|\lambda| < \lambda' < \lambda_0$  имеет место следующее мажорирование

$$\left| t^p e^{\lambda t+s(t;c)} g(\xi_t) \right| \leq C_1 e^{\lambda_0 t+s(t;c)} |g(\xi_t)|, \quad \left| \sum_{l=0}^p \tau^{p-l} e^{\lambda\tau+s(\tau;c)} C_p^l \frac{\partial^l \varphi(\xi_\tau)}{\partial^l \lambda} \right| \leq C_2 e^{\lambda_0 \tau+s(\tau;c)}.$$

Соответствующее этим мажорантам математическое ожидание конечно, так как оно представляет собой решение задачи Дирихле со следующими значениями функциональных параметров:  $g_1 = C_1 |g|$ ,  $\varphi = C_2$ ,  $c + \lambda = c + \lambda_0$ .  $\square$

**Теорема 7.7.** В условиях леммы 7.6 параметрическая производная  $p$ -ой степени от решения задачи (7.36) с функциональными параметрами

$$\varphi = \sum_{k=0}^p \frac{(-1)^k \lambda^{p-k}}{p!} \varphi_k, \quad g_1 = \frac{(-1)^p}{p!} g \quad (7.44)$$

является решением задачи (7.38).

**Доказательство.** Для заданных равенствами (7.44) функций  $\varphi$ ,  $g_1$  задача (7.42) совпадает с задачей (7.38) и, следовательно, выражение (7.39) совпадает с выражением, находящимся под знаком математического ожидания в (7.43). Это доказывает справедливость утверждения теоремы и тем самым допустимость перестановки оператора Лапласа с производной по параметру  $\lambda$ .  $\square$

Теорема 7.7 показывает возможность построения оценок метода Монте-Карло для решения задачи (7.38) на "блужданиях по сферам и решетке" путем параметрического дифференцирования соответствующих оценок для уравнения Гельмгольца со специальными краевыми условиями.



**Теорема 7.8.** Если  $c < c_0 < c^*/2$ , то дисперсии случайных величин  $\zeta_p$  конечны.

**Доказательство.** Верны следующие неравенства

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \left[ \int_0^\tau (1 \times t^p e^{s(t;c)} g(\xi_t)) dt \right]^2 &\leq \mathbf{E} \left[ \left( \int_0^\tau t^{2p} e^{s(t;2c)} g^2(\xi_t) dt \right) \left( \int_0^\tau 1 dt \right) \right] = \\ &= \mathbf{E} \left[ \tau \int_0^\tau t^{2p} e^{s(t;2c)} g^2(\xi_t) dt \right] < C_1 \mathbf{E} \int_0^\tau e^{(2c_0+\varepsilon)t} dt < \infty, \\ \mathbf{E}[\tau^p e^{s(\tau;c)} \varphi(\xi_\tau)]^2 &< C_2 \mathbf{E} e^{(2c_0+\varepsilon)\tau} < \infty, \quad \varepsilon > 0, \quad 2c_0 + \varepsilon < c^*. \end{aligned}$$

Здесь использованы неравенство Коши–Буняковского и мажорирование решением уравнения Гельмгольца со следующими значениями функциональных параметров:  $g = -C_1$ ,  $\varphi = C_2$ ,  $c = 2c_0 + \varepsilon$ .  $\square$

Численные эксперименты показали, что для соответствующих оценок по схеме Эйлера при  $p = 1$  сохраняется порядок детерминированной погрешности  $O(\sqrt{\Delta t})$ . Это можно объяснить детерминированностью дополнительного временного множителя.

Вычисление параметрических производных для задачи

$$Lu + cu = 0, \quad u|_{\partial\Omega} = 1,$$

реализует итерации резольвентного оператора  $[L + c]^{-1}$  при однородных граничных условиях. Действительно, для  $u^{(1)}$  имеем

$$Lu^{(1)} + cu^{(1)} = -u, \quad u^{(1)}|_{\partial\Omega} = 0.$$

С помощью индукции получим

$$Lu^{(m)} + cu^{(m)} = -mu^{(m-1)}, \quad u^{(m)}|_{\partial\Omega} = 0, \quad m = 1, 2, \dots$$

Следовательно, здесь выполняется соотношение

$$\frac{mu^{(m-1)}(x)}{u^{(m)}(x)} \rightarrow c^* - c \quad \text{при } m \rightarrow \infty \quad \forall x \in \Omega,$$

где  $(-c^*)$  – первое собственное число оператора  $L$  для области  $\Omega$ .

**7.5.4. Алгоритмы “блуждания по сферам”.** Рассмотрим задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца

$$\Delta u + cu = -g, \quad u|_\Gamma = \varphi, \tag{7.45}$$

в области  $D \subset R^n$  с границей  $\Gamma$ , причем  $c < c^*$ , где  $-c^*$  – первое собственное число оператора Лапласа для области  $D$ ,  $r = (x_1, \dots, x_n) \in D$ .

Предполагаются выполненными сформулированные в подразд. 7.5.1 условия регулярности функций  $g$ ,  $\varphi$  и границы  $\Gamma$ , обеспечивающие существование и единственность решения задачи (7.45), а также его вероятностное представление и интегральное представление с помощью шаровой функции Грина.

Рассматриваемые далее оценки метода Монте-Карло связаны с так называемым процессом “блуждания по сферам” в области  $D$  (см. подразд. 7.1.6).

Для случая  $c = \text{const} < c^*$  вероятностное представление решения задачи (7.45) имеет вид

$$u(r_0) = \mathbf{E} \int_0^\tau e^{ct} g(\xi(t)) dt + \mathbf{E}[e^{c\tau} \varphi(\xi(\tau))],$$

где  $\xi(t)$  – начинающийся в точке  $r_0$  соответствующий оператору Лапласа диффузионный процесс,  $\tau$  – момент первого выхода процесса из области  $D$ . На основе строго марковского свойства процесса отсюда имеем

$$\begin{aligned} u(r_0) &= \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E} \sum_{i=0}^{\infty} \int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} e^{ct} g(\xi(t)) dt + \mathbf{E} \left[ \varphi(\xi(\tau)) \prod_{i=0}^{\infty} e^{c(\tau_{i+1}-\tau_i)} \right] = \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \mathbf{E} \left[ e^{c\tau_i} \int_0^{\tau_{i+1}-\tau_i} e^{ct} g(\xi(t+\tau_i)) dt \right] + \mathbf{E} \left[ \varphi(\xi(\tau)) \prod_{i=0}^{\infty} e^{c(\tau_{i+1}-\tau_i)} \right], \end{aligned}$$

где  $\tau_i$  – момент первого выхода процесса  $\xi(t)$  на поверхность  $i$ -й сферы соответствующего блуждания по сферам  $\{r_m\}$ . Пусть  $N = \min\{m : r_m \in \Gamma_\varepsilon\}$ . Используя повторное осреднение, интегральное представление задачи (7.45) в центре  $n$ -мерного шара, и указанное во введении мартингалное свойство вероятностного представления, нетрудно далее получить, что  $u(r_0) = \mathbf{E}\eta_\varepsilon$ , где

$$\eta_\varepsilon = \sum_{i=0}^N \left[ \prod_{j=0}^{i-1} s(c, d_j) \right] \int_{D(r_i)} G(\rho; c, d_i) g(\rho) d\rho + \left[ \prod_{j=0}^{N-1} s(c, d_j) \right] u(r_N). \quad (7.46)$$

Здесь  $d_j = d(r_j)$ ,  $D(r_i)$  – шар радиуса  $d_i$  с центром в точке  $r_i$ ,

$$s(c, d) = \frac{(d\sqrt{c}/2)^{(n-2)/2}}{\Gamma(n/2)J_{(n-2)/2}(d\sqrt{c})}, \quad (7.47)$$

$$G(\rho; c, d) = \begin{cases} K_n z^{(2-n)/2} \left[ J_{(2-n)/2}(z\sqrt{c}) - J_{(n-2)/2}(z\sqrt{c}) \frac{J_{(2-n)/2}(d\sqrt{c})}{J_{(n-2)/2}(d\sqrt{c})} \right], & n = 2k + 1 \\ K_n z^{(2-n)/2} \left[ N_{(n-2)/2}(z\sqrt{c}) - J_{(n-2)/2}(z\sqrt{c}) \frac{N_{(n-2)/2}(d\sqrt{c})}{J_{(n-2)/2}(d\sqrt{c})} \right], & n = 2k, \end{cases} \quad (7.48)$$

$$K_n = \begin{cases} [(\sqrt{c}/2)^{(n-2)/2} \Gamma((2-n)/2 + 1)] / [\omega_n(n-2)], & n = 2k + 1 \\ (\sqrt{c}/2)^{(n-2)/2} / [\omega_n(n-2)(k-1)!], & n = 2k \quad (n > 2) \\ -1/4 & n = 2, \end{cases} \quad (7.49)$$

$z = |\rho - r|$ ,  $\omega_n = 2(\sqrt{\pi})^n / \Gamma(n/2)$  – "площадь" поверхности  $n$ -мерной сферы единичного радиуса, функции Бесселя и функция Неймана имеют соответственно следующий вид:

$$J_n(x) = (x/2)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (x/2)^{2k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+n+1)},$$

$$\begin{aligned} N_n(x) &= \frac{2}{\pi} (\gamma + \ln(x/2)) J_n(x) - \frac{1}{\pi} \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(n-p-1)!}{p!} (x/2)^{2p-n} - \\ &- \frac{1}{\pi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!(n+p)!} (x/2)^{2p+n} \left( 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{p} + 1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n+p} \right), \end{aligned}$$

где  $\gamma$  эйлерова постоянная 0,57721... При  $p = 0$  последнюю скобку следует положить равной  $(1 + 1/2 + \dots + 1/n)$ .

Возможность использованного осреднения становится очевидной, если учесть, что величины  $\tau_{i+1} - \tau_i$  условно (при фиксированных  $\{r_i\}$ ) независимы и распределение величины  $\tau_{i+1} - \tau_i$  не зависит от положения точки  $\xi(\tau_{i+1})$  на сфере  $S(r_i)$ .

Выражение (7.46) получается из следующей модификации вероятностного представления решения:

$$u(r_0) = \mathbf{E} \int_0^{\tau_N} e^{ct} g(\xi_t) dt + \mathbf{E} e^{c\tau_N} u(r_N) = \mathbf{E} \zeta_\varepsilon, \quad (7.50)$$

где  $\tau_N$  – момент первого выхода “блуждания по сферам” (т.е. центров сфер  $S(r_N)$ ) в  $\Gamma_\varepsilon$ . Из (7.46) и (7.50) следует, что  $\eta_\varepsilon = \mathbf{E}(\zeta_\varepsilon | \{r_N\})$ . Очевидно, что лемма 7.7 остается верной после замены в её формулировке  $\tau$  на  $\tau_N$  и  $\varphi(\xi_\tau)$  на  $u(r_N)$ . Ясно также, что использованное в этой лемме мажорирование позволяет вносить параметрическую производную под знак “внешнего” осреднения по распределению последовательностей  $\{r_m\}$ . Следовательно, с учетом теоремы 7.7 справедливо следующее утверждение (все производные рассматриваются в точке  $c = c_0$ ).

**Теорема 7.9.** *В условиях теоремы 7.7 для решения задачи (7.38) справедливо выражение  $u = \mathbf{E}(\partial \eta_{1,\varepsilon} / \partial c^p) = \mathbf{E}(\eta_{1,\varepsilon}^{(p)})$  для всех  $p \geq 0$ , где  $\eta_{1,\varepsilon}$  получается из  $\eta_\varepsilon$  путём замены*

$$g \rightarrow g_1 = \frac{(-1)^p}{p!} g, \quad u(r_N) \rightarrow \varphi(r_N, c) = \sum_{k=0}^p \frac{(-1)^k (c - c_0)^{p-k}}{p!} u_k(r_N).$$

Здесь  $u_k$  – решение задачи (7.45) с  $\varphi \equiv \varphi_k$ ,  $k = 0, \dots, p$ , причём функция  $g$  зануляется для  $k = 0, \dots, p-1$ .

**Теорема 7.10.** *Если  $c < c^*/2$  то  $\mathbf{D}(\eta_{1,\varepsilon}^{(p)}) < C_p < +\infty$  для всех  $p \geq 0$ .*

**Доказательство.** Величина  $\eta_{1,\varepsilon}^{(p)}$  получается условным осреднением при фиксированной последовательности  $\{r_m\}$  соответствующей величины  $\zeta_{1,\varepsilon}^{(p)}$ , а  $\zeta_{1,\varepsilon}$  – условным осреднением соответствующей величины  $\zeta_1^{(p)}$  при фиксированном значении траектории  $\xi(t)$ ,  $0 \leq t \leq \tau_N$ . Поскольку условное осреднение не увеличивает дисперсию случайной величины, то утверждение теоремы следует из теоремы 7.8.  $\square$

Теперь перейдём к рассмотрению практически реализуемой оценки  $\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)}$ , которая получается после замены величин  $u_k(r_N)$  на  $\varphi_k(P)$ , где  $P$  – точка границы, ближайшая к  $r_N$ . Из (7.46) получаем выражение

$$\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)} = \sum_{i=1}^N \left[ Q_i(c) \int_{D(r_i)} G(\rho; c, d_i) g_1(\rho) d\rho \right]^{(p)} + [Q_N(c) \varphi(P, c)]^{(p)}.$$

**Теорема 7.11.** *Если  $c < c^*$  и первые пространственные производные функций  $\{u_k^{(i)}\}$ ,  $i = 1, \dots, p+1$ , равномерно ограничены в  $\bar{D}$ , то*

$$\left| u(r) - \mathbf{E} \tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)} \right| \leq C_p \varepsilon, \quad r \in D, \quad \varepsilon > 0. \quad (7.51)$$

**Доказательство.** Ясно, что

$$\left| u(r) - \mathbf{E} \tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)} \right| = \left| \mathbf{E}(\eta_{1,\varepsilon}^{(p)} - \tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)}) \right| = \left| \mathbf{E} \left\{ Q_N(c) \sum_{k=0}^p \frac{(-1)^k (c - c_0)^{p-k}}{p!} [u_k(r_N) - \varphi_k(P)] \right\}^{(p)} \right|. \quad (7.52)$$

Следовательно, для получения неравенства (7.51) достаточно обосновать соотношение

$$\mathbf{E} Q_N^{(k)}(c) \leq C < +\infty, \quad k = 1, \dots, p+1; \quad r_0 \in D. \quad (7.53)$$

С этой целью при  $c < c^*$  рассмотрим задачу вида

$$\Delta v + cv = c, \quad v|_{\Gamma} = 1, \quad (7.54)$$

для которой  $v \equiv 1$ . Соответственно (7.50) имеем

$$-\mathbf{E} \left[ c \int_0^{\tau_N} e^{ct} dt \right]^{(k)} + \mathbf{E} Q_N^{(k)}(c) = v^{(k)}.$$

Отсюда очевидным образом следует (7.53) и, следовательно, (7.51).  $\square$

**Теорема 7.12.** В условиях теоремы 7.11 при  $c < c^*/2$  имеем  $\mathbf{D}\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)} < C_p < +\infty$  для всех  $\varepsilon > 0$ .

**Доказательство.** Из вероятностного представления решения задачи (7.54) следует равномерная ограниченность величин  $\mathbf{D}Q_N^{(k)}$ ,  $k = 1, \dots, p+1$ ;  $r_0 \in D$ , в условиях теоремы. Далее доказательство строится очевидным образом на основе соотношения (7.52).  $\square$

Интегралы, входящие в выражение для  $\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)}$ , можно несмещенно оценивать по одному случайному узлу на основе представления

$$\int_{D(r)} G(\rho; c, d) g(\rho) d\rho = \frac{d^2}{2n} \int_{D(r)} p_0(r, \rho) \frac{G(\rho; c, d)}{G(\rho; 0, d)} g(\rho) d\rho = \frac{d^2}{2n} \mathbf{E} \left\{ \frac{G(\rho; c, d)}{G(\rho; 0, d)} g(\rho) \right\}, \quad (7.55)$$

где  $\rho$  – случайная точка в  $D(r)$ , плотность распределения вероятностей которой равна (при  $n > 2$ )

$$p_0(r, \rho) = 2nd^{-2}G(\rho; 0, d) = \frac{2n}{(n-2)d^2\omega_n} \left( \frac{1}{(\rho-r)^{n-2}} - \frac{1}{d^{n-2}} \right), \quad |\rho-r| \leq d. \quad (7.56)$$

Нетрудно проверить, что  $\int p_0(r, \rho) d\rho = 1$ . При  $n = 2$  имеем

$$p_0(r, \rho) = 4d^{-2}G(\rho; 0, d) = \frac{2}{\pi d^2} \ln \frac{d}{|\rho-r|}, \quad |\rho-r| \leq d.$$

Отношение значений функции  $G$  в выражении (7.55) ограничено, так как функции Грина для различных значений имеют в точке  $\rho = 0$  полюса одного порядка. После такой рандомизации получаем оценку

$$\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)} = \sum_{i=0}^N \left\{ \left[ \prod_{j=0}^{i-1} s(c, d_j) \right] g_1(\rho_i) \frac{d_i^2 G(\rho; c, d_i)}{2nG(\rho; 0, d_i)} \right\}^{(p)} + \left\{ \left[ \prod_{j=0}^{N-1} s(c, d_j) \right] \varphi(r_N, c) \right\}^{(p)}, \quad (7.57)$$

причем  $\mathbf{E}\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)} = \mathbf{E}\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)}$ . Нетрудно видеть, что доказательство теоремы 7.12 остается справедливым и после замены  $\tilde{\eta}$  на  $\tilde{\eta}$ , т. е.  $\mathbf{D}\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(p)} < C_p < +\infty$  для всех  $\varepsilon > 0$ .

Рассмотрим теперь в области  $D \subset R^n$  первую краевую задачу для неоднородного бигармонического уравнения

$$\Delta^2 u = -g, \quad u|_{\Gamma} = \varphi_0, \quad \Delta u|_{\Gamma} = \varphi_1. \quad (7.58)$$

Для построения соответствующей оценки  $\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(1)}$  используем равенства

$$s(c, d) = 1/[1 - \frac{d^2 c}{2n} + o(c)], \quad s'(c, d) = \frac{d^2}{2n} - \frac{d^4 c}{4n(n+2)} + o(c),$$

$$s(0, d) = 1, \quad s'(0, d) = \frac{d^2}{2n}, \quad g_1 = -g, \quad \varphi = c\varphi_0 - \varphi_1.$$

В результате получаем:

$$\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(1)} = \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^N \left[ -\sum_{j=0}^{i-1} \frac{d_j^2}{2n} - \frac{G'(\rho_i; 0, d)}{G(\rho_i; 0, d)} \right] d_i^2 g(\rho_i) - \frac{1}{2n} \left( \sum_{j=0}^{N-1} d_j^2 \right) \varphi_1(r_N) + \varphi_0(r_N), \quad (7.59)$$

где  $\rho_i$  - случайная точка распределенная в  $D(r_i)$  в соответствии с формулой (7.56).

Известно, что при  $n = 3$  выполняются следующие соотношения:

$$\frac{G(\rho_i; c, d)}{G(\rho_i; 0, d)} = \frac{s(c, d_i)}{s(c, d_i - \nu_i)}, \quad \frac{G'(\rho_i; 0, d)}{G(\rho_i; 0, d)} = \frac{1}{6} (d_i^2 - (d_i - \nu_i)^2), \quad \rho_i = r_i + \nu_i \omega_i.$$

Следовательно, имеем

$$\tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(1)} = \frac{1}{36} \sum_{i=0}^N \left[ -\sum_{j=0}^i d_j^2 + (d_i - \nu_i)^2 \right] d_i^2 g(\rho_i) - \frac{1}{6} \left( \sum_{j=0}^{N-1} d_j^2 \right) \varphi_1(r_N) + \varphi_0(r_N). \quad (7.60)$$

Случайная величина  $\nu_i$ , распределенная в интервале  $(0, d_i)$  с плотностью  $6x(1-x/d_i)d_i^{-2}$  и единичный изотропный вектор  $\omega_i$  моделируются при помощи известных формул.

**7.5.5. Вычисление ковариационной функции решения бигармонического уравнения при  $n = 2$ .** Колебания пластины в ограниченной области  $D \subset R^2$  под действием случайного поля нагрузок  $\sigma(r) = -g(r)$  описываются уравнением вида (7.58), при этом можно учитывать также случайность граничных функций  $\varphi_0(r)$  и  $\varphi_1(r)$ . Решение этой задачи также является случайным полем. Требуется определить его ковариационную функцию  $v(r, r') = \mathbf{E}[u(r)u(r')]$ . Предполагается, что  $\mathbf{E}g(r) \equiv \mathbf{E}\varphi_0(r) \equiv \mathbf{E}\varphi_1(r) \equiv 0$  и, следовательно,  $\mathbf{E}u(r) \equiv 0$ . Согласно формулам (7.47) и (7.48) имеем

$$s(c, d) = \frac{1}{J_0(d\sqrt{c})}, \quad G(\rho; c, d) = \frac{1}{4} \left[ -N_0(z\sqrt{c}) + \frac{J_0(z\sqrt{c}) N_0(d\sqrt{c})}{J_0(d\sqrt{c})} \right]. \quad (7.61)$$

Используя асимптотические при  $c \rightarrow 0$  выражения

$$J_0(z\sqrt{c}) \sim 1 - \left( \frac{z\sqrt{c}}{2} \right)^2, \quad N_0(z\sqrt{c}) \sim \frac{2}{\pi} \left[ \gamma + \ln \frac{z\sqrt{c}}{2} \right] J_0(z\sqrt{c}), \quad (7.62)$$

$$J_0'(z\sqrt{c}) \sim -\frac{z^2}{4}, \quad N_0'(z\sqrt{c}) \sim \frac{2}{\pi} \left( \frac{1}{2c} + \frac{z^2}{8} - \frac{z^2}{4} \left[ \gamma + \ln \frac{z\sqrt{c}}{2} \right] \right), \quad (7.63)$$

получаем достаточно известные формулы:

$$s(0, d) = 1, \quad s'(0, d) = \frac{d^2}{4}, \quad G(\rho, 0, d) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{d}{z}, \quad G'(\rho, 0, d) = \frac{1}{8\pi} \left( d^2 - z^2 - z^2 \ln \frac{d}{z} \right).$$

Следовательно, при  $n = 2$  оценка для решения уравнения (7.58) имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(1)} &= \frac{1}{16} \sum_{i=0}^N \left[ -\sum_{j=0}^{i-1} d_j^2 - \frac{d_i^2 - \nu_i^2 - \nu_i^2 \ln(d/\nu_i)}{\ln(d/\nu_i)} \right] d_i^2 g(\nu_i, \omega_i) - \\ &- \frac{1}{4} \left( \sum_{j=0}^{N-1} d_j^2 \right) \varphi_1(r_N) + \varphi_0(r_N) = \sum_{i=0}^N Q_i g(\rho_i) + \widehat{Q}_N \varphi_1(r_N) + \varphi_0(r_N), \end{aligned} \quad (7.64)$$

где  $\omega_i$  - единичный изотропный вектор,  $\nu_i/d_i$  - случайная величина, распределённая в интервале  $(0, 1)$  с плотностью  $-4x \ln x$ .

Осредняя (условно, для фиксированных траекторий  $\{r_i\}$ ,  $\{r'_i\}$ ) произведение соответствующих оценок типа (7.64), приходим к следующему соотношению

$$\begin{aligned}
v(r, r') &= \mathbf{E} \left[ \tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(1)}(r) \tilde{\eta}_{1,\varepsilon}^{(1)}(r') \right] = \mathbf{E} \left[ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N'} Q_i Q'_j K(\rho_i, \rho'_j) + \right. \\
&+ \sum_{i=1}^N \left( Q_i \hat{Q}'_{N'} K_1(\rho_i, r_{N'}) + Q_i K_0(\rho_i, r_{N'}) \right) + \sum_{j=1}^{N'} \left( Q'_j \hat{Q}_N K_1(\rho'_j, r_N) + Q'_j K_0(\rho'_j, r_N) \right) + \\
&\left. + \hat{Q}_N \hat{Q}'_{N'} K_{11}(r_N, r_{N'}) + \hat{Q}_N K_{10}(r_N, r_{N'}) + \hat{Q}'_{N'} K_{10}(r_{N'}, r_N) + K_{00}(r_N, r_{N'}) \right]. \tag{7.65}
\end{aligned}$$

Здесь приняты обозначения:

$$K(r, r') = \mathbf{E}[g(r)g(r')], \quad K_0(r, r') = \mathbf{E}[g(r)\varphi_0(r')], \quad K_1(r, r') = \mathbf{E}[g(r)\varphi_1(r')],$$

$$K_{00}(r, r') = \mathbf{E}[\varphi_0(r)\varphi_0(r')], \quad K_{10}(r, r') = \mathbf{E}[\varphi_1(r)\varphi_0(r')], \quad K_{11}(r, r') = \mathbf{E}[\varphi_1(r)\varphi_1(r')].$$

Таким образом, при помощи выражений (7.64), (7.65) можно оценивать ковариационную функцию решения  $v(r, r')$ , используя только ковариационные функции случайного поля нагрузок и случайных граничных условий. Соответствующая оценка имеет дисперсию, заведомо меньшую дисперсии метода “двойной рандомизации” (см. раздел 4.7), т. к. здесь осуществлено частичное аналитическое осреднение.

Однако при реализации полученного метода возникает проблема, связанная с ограниченностью машинной памяти. В отличие от реализации оценок вида (7.60) здесь необходимо сохранять все веса и координаты центров случайных кругов в (7.65) хотя бы для одной траектории. Известно, что процесс “блуждания по кругам” весьма быстро сходится к границе области. Следовательно, можно при превышении количества точек  $\{r_i\}$  некоторого достаточно большого уровня  $M$  не сохранять информацию о следующих точках с номерами  $i = M + 1, \dots, N - 1$ , но в  $\Gamma_\varepsilon$  использовать полученные вес  $Q_N$  и координаты  $r_N$ . При этом  $Q_i = 0$  для  $i = M + 1, \dots, N - 1$ , и можно заменить  $Q_M$  на  $Q_M(N - M + 1)$ . Если такая замена практически не влияет на результат, то оценка удовлетворительна. Порядок (по  $\varepsilon$ ) величины  $M$  можно эвристически оценить с использованием асимптотической теории восстановления; при этом оказывается, что удовлетворительно  $M \asymp (\ln \varepsilon)^2$ .

## 7.6. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАНИЧНЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Далее рассматриваются граничные интегральные уравнения теории потенциала, для которых в стационарном случае спектральный радиус равен единице и построение алгоритмов метода Монте-Карло осуществляется на основе аналитического продолжения ряда Неймана. Эта методика разработана К.К.Сабельфельдом [5].

Рассмотрим уравнение Лапласа

$$\Delta u(x) = 0 \tag{7.66}$$

в ограниченной области  $G \subset R^3$  с кусочно гладкой границей  $\partial G$ . Удобно рассматривать одновременно две краевые задачи для (7.66): внутреннюю задачу Дирихле

$$u(t) = \Psi_1(t), \quad t \in \partial G, \quad (7.67)$$

и внешнюю задачу Неймана

$$\partial u / \partial n = \Psi_2(t), \quad t \in \partial G, \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x) = 0. \quad (7.68)$$

Известно, что в (7.66)–(7.68) границу  $\partial G$  можно заменить на  $\Gamma = \partial G - \Gamma_0$  где  $\Gamma_0$  – множество (меры нуль) граничных точек, в которых не определена нормаль. Решение задачи (7.66), (7.67) ищется в виде потенциала двойного слоя с неизвестной плотностью  $\mu(t)$  ( $t \in \Gamma$ ):

$$u(x) = \int_{\Gamma} \frac{\partial}{\partial n} \frac{1}{|x-t|} \mu(t) d\sigma(t), \quad (7.69)$$

где  $\sigma(t)$  – элемент поверхности,  $n(t)$  – внутренняя нормаль в точке  $t \in \Gamma$ .

Соотношение для разрыва потенциала двойного слоя на  $\Gamma$  дает интегральное уравнение для плотности:

$$\mu(t) = - \int_{\Gamma} k(t_1, t) \mu(t_1) d\sigma(t_1) + \frac{\Psi_1(t)}{2\pi}, \quad (7.70)$$

где  $k(t_1, t) = \cos \varphi_{t_1, t} / (2\pi |t_1 - t|^2)$ , а  $\varphi_{t_1, t}$  – угол между векторами  $n(t_1)$  и  $(t - t_1)$ . Решение внешней задачи Неймана ищется в виде потенциала простого слоя:

$$u(x) = \int_{\Gamma} \frac{1}{|x-t|} \nu(t) d\sigma(t).$$

Соотношение для разрыва нормальной производной потенциала простого слоя дает уравнение для неизвестной плотности:

$$\nu(t) = - \int_{\Gamma} k(t, t_1) \nu(t_1) d\sigma(t_1) + \frac{\Psi_2(t)}{2\pi}. \quad (7.71)$$

Это уравнение является сопряженным к уравнению (7.70).

Таким образом, решение краевых задач Дирихле и Неймана можно рассматривать как линейные функционалы от решения интегральных уравнений соответственно (7.70) и (7.71):

$$u(x) = 4\pi(h_x, \mu), \quad \text{где} \quad h_x(t) = \frac{\cos \varphi_{t,x}}{4\pi |t-x|^2}; \quad (7.72)$$

$$u(x) = (\nu, g_x), \quad \text{где} \quad g_x(t) = \frac{1}{|x-t|}. \quad (7.73)$$

Однако представления (7.72) и (7.73) еще не позволяют нам применить стандартные методы Монте-Карло, поскольку ряды Неймана для (7.70), (7.71) расходятся.

Положим  $K\mu(t) = - \int_{\Gamma} k(t_1, t) \mu(t_1) d\sigma(t_1)$  и преобразуем (7.70) в интегральное уравнение с параметром  $\lambda$ :

$$\mu_{\lambda}(t) = \lambda K \mu_{\lambda}(t) + f(t), \quad (7.74)$$

а (7.71) – в сопряженное к нему уравнение:

$$\nu_{\lambda}(t) = \lambda K^* \nu_{\lambda}(t) + e(t). \quad (7.75)$$

Поскольку  $\|K\| = \|K^*\| = 1$ , то при  $|\lambda| < 1$  решения уравнений (7.74), (7.75) представляются соответственно в виде сходящихся абсолютно и равномерно рядов:

$$\mu_\lambda(t) = R_\lambda f(t), \quad \nu_\lambda(t) = R_\lambda e(t), \quad (7.76)$$

где  $R_\lambda = I + \lambda K + \lambda^2 K^2 + \dots$  – резольвента.

Известно, что все характеристические числа интегральных уравнений (7.74), (7.75), т. е. полюсы резольвенты, действительны и отрицательны, а минимальное по модулю характеристическое число (простой полюс резольвенты)  $\lambda_1$  равно  $-1$ . Так как  $\lambda = 1$  не является характеристическим числом, то уравнения (7.69), (7.71) имеют единственное решение, однако оно не может быть представлено рядом Неймана, поскольку  $\lambda_1 = -1$ . Для нахождения решения, однако, можно заданную в виде ряда Неймана резольвенту  $R_\lambda$  продолжить за пределы круга  $|\lambda| < 1$ .

Наиболее простым способом продолжения является домножение резольвенты на  $(\lambda + 1)/2$  в целях уничтожения полюса. В результате получаем ряд, сходящийся абсолютно и равномерно в круге  $|\lambda| < |\lambda_2|$ , где  $\lambda_2 < -1$  – второе характеристическое число интегрального уравнения (7.74). В этом случае при  $\lambda = 1$  получаем решение уравнения (7.69) в виде

$$\mu(t) = \sum_{i=0}^{\infty} m_i(t), \quad (7.77)$$

где

$$m_0 = \mu_0(t) = f(t), \quad m_1(t) = \mu_1(t)/2, \quad m_i(t) = (\mu_{i-1}(t) + \mu_i(t))/2 \quad \text{при } i \geq 2$$

и  $\mu_i(t) = K\mu_{i-1}(t)$  при  $i \geq 1$ .

Другой способ продолжения связан с использованием замены  $\lambda = \omega(\eta)$ , в результате которой (7.76) переходит в абсолютно и равномерно сходящийся ряд. Таким образом, при  $\eta = \eta_0 = \omega^{-1}(1)$  получаем решение в виде

$$\mu(t) = \sum_{i=0}^{\infty} \eta_0^i M_i(t). \quad (7.78)$$

Например, в случае замены  $\lambda = \eta/(1 - \eta)$  имеем

$$\eta_0 = 1/2, \quad M_0(t) = \mu_0(t), \quad M_1(t) = 2\mu_1(t), \quad M_i(t) = KM_{i-1}(t) + M_{i-1}(t) \quad \text{при } i \geq 2.$$

Поскольку всюду использовалась лишь информация о спектре интегрального оператора, то решение сопряженного уравнения (7.71) также представляется в виде (7.77), (7.78) с заменами  $f(t) \rightarrow e(t)$  и  $K \rightarrow K^*$ , при этом  $\nu_i = K^*\nu_{i-1}$ ,  $\nu_0(t) = e(t)$ .

Абсолютная сходимость полученных рядов позволяет оценить остаток и тем самым число членов ряда, достаточное для достижения заданной точности. Простые соображения дают оценку для членов ряда (7.77), когда  $\Gamma$  – сфера  $|m_i(t)| \leq \sup_{\Gamma} |f| (1/3)^i$  при  $i \geq 1$ . Теперь можем оценить остаток:

$$\left| \sum_{i=k+1}^{\infty} m_i(t) \right| \leq \frac{1}{2} \sup_{\Gamma} |f| (1/3)^k.$$

Аналогично в случае замены  $\lambda = \eta/(1 - \eta)$  получаем

$$\left| \sum_{i=k+1}^{\infty} \eta_0^i M_i(t) \right| \leq \sup_{\Gamma} |f| (1/2)^k.$$



Выпишем теперь явный вид оценок, удобных в применении. Пусть  $\nu(t)$  – решение уравнения (7.71) со свободным элементом, равным  $h_x(t)$ . На границе  $\Gamma$  строится цепь Маркова  $\{t_i\}$  с переходной плотностью  $p(t_{i-1} \rightarrow t_i) = k(t_i, t_{i-1})$ , что в случае выпуклой области соответствует равномерному распределению точки  $t_i$  по углу видимости из точки  $t_{i-1}$ . Эту цепь можно назвать изотропным блужданием по границе. Точка  $t_0$  разыгрывается по плотности  $h_x(t_0)$ , т.е. равномерно по углу видимости из точки  $x$ . Тогда если исходить из представления  $u(x) = 2(\nu, \Psi_1)$  и выбрать  $\nu(t)$  в виде (7.77) или (7.78), то можно построить стандартную оценку, для которой

$$(\nu_i, \Psi_1) = \mathbf{E} Q_i \Psi_1(t_i), \quad \text{где } Q_0 = 1, \quad Q_i = (-1)^i.$$

Таким образом, решение задачи (7.66), (7.67) выражается приближенной формулой:

$$u(x) = \mathbf{E} \left\{ 2 \sum_{i=0}^k A_i Q_i \Psi_1(t_i) \right\} + r_k(x), \quad (7.79)$$

где постоянные  $A_i$  и остаточный член зависят от способа аналитического продолжения. Например, для способа домножения имеем

$$A_0 = \dots = A_{k-1} = 1, \quad A_k = 0.5 \quad \text{и} \quad |r_k(x)| \leq \sup_{\Gamma} |\Psi_1(t)| (1/3)^k.$$

Для решения внешней задачи Неймана получаем оценки, аналогичные (7.79), используя (7.73) и представления типа (7.77), (7.78) с конечным числом слагаемых. Марковская цепь  $\{t_i\}$  строится здесь следующим образом: начальная точка  $t_0$  выбирается по какой-либо подходящей плотности  $p_0(t_0)$ , а последующие – по переходной плотности  $k(t_i, t_{i-1})$ . В результате получаем

$$u(x) = \mathbf{E} \left\{ \sum_{i=0}^k Q_i A_i \frac{1}{|x - t_i|} \right\} + r_k(x), \quad \text{где } Q_0 = \frac{\Psi_2(t_0)}{2\pi p_0(t_0)}, \quad Q_i = -Q_{i-1}.$$

Для способа домножения имеем

$$|r_k(x)| \leq \sup_{\Gamma} \frac{1}{|x - t|} \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} |\Psi_2| d\sigma (1/3)^k.$$

Отметим, что на одной цепи Маркова можно оценивать решение обеих рассмотренных задач в произвольном числе заданных точек. Для внешней задачи Неймана это очевидно, поскольку построение цепи Маркова не связано с точкой  $x$ . В случае задачи Дирихле изменяется лишь начальный вес. Действительно, пусть наряду с оценкой в точке  $x$  необходимо оценить решение в точке  $y \in \Gamma$ . Тогда  $u(y)$  также представляется в виде (7.79), где

$$Q_0 = \frac{\cos \varphi_{t_0, y} |x - t_0|^2}{\cos \varphi_{t_0, x} |y - t_0|^2}.$$

На основе (7.79) строятся оценки для вычисления различных функционалов от решения, в частности, значений производных. Например, для  $\partial u(x)/\partial x_1$  ( $x = (x_1, x_2, x_3)$ ) в (7.79) изменяется начальный вес:

$$Q_0 = \frac{n_1(t_0)|x - t_0| - 3 \cos \varphi_{t_0, x} (x_1 - t_{01})}{|x - t_0|^2 \cos \varphi_{t_0, x}},$$

где  $n(t_0) = (n_1(t_0), n_2(t_0), n_3(t_0))$ .

Для задачи Неймана

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x_1} = \mathbf{E} \left\{ \sum_{i=0}^k Q_i A_i \frac{-x_1 + t_{i1}}{|x - t_i|^3} \right\} + r_k(x), \quad t_i = (t_{i1}, t_{i2}, t_{i3}),$$

$$|r_k(x)| \leq \sup_i \left\{ \frac{|-x_1 + t_{i1}|}{|x - t_i|^3} \right\} \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} |\Psi_2| d\sigma (1/3)^k.$$

Изложенные выше алгоритмы блуждания по границе допускают обобщение на нестационарный случай, в частности, для решения начально-краевых задач для параболических уравнений и задачи Коши для гиперболических уравнений. Однако в этих случаях интегральные уравнения являются вольтерровскими, т. е. ряд Неймана сходится и применимы стандартные оценки метода Монте-Карло; специфическим здесь является учет особенностей ядра.

## ЛИТЕРАТУРА

### Введение

1. Hammersley J.M., Handscomb D.C. Monte Carlo Methods. – New York: John Wiley and Sons, Inc., 1964.
2. Spanier J., Gelbard E.M. Monte Carlo principles and neutron transport problems. – Addison-Wesley, Reading, 1969 [Русск. перевод: Спанье Дж., Гелбард Э. Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов. – М.: Атомиздат, 1972].
3. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1974.
4. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973.
5. Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. – Новосибирск: Наука, 1976 [English translation: Springer-Verlag, 1980].
6. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.
7. Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. – М.: Наука, 1984 [English translation: Kluwer Academic Publishes, 1989].
8. Kalos M.H., Whitlock P.A. Monte Carlo methods. – New York: John Wiley and Sons, 1986.
9. Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. – М.: Наука, 1987 [English translation: Springer-Verlag, 1992].
10. Сабельфельд К.К. Методы Монте-Карло в краевых задачах. – М.: Наука, 1989 [English translation: Springer-Verlag, 1991].
11. Ogorodnikov V.A., Prigarin S.M. Numerical Modelling of Random Processes and Fields: Algorithms and Applications. – Utrecht: VSP, 1996.
12. Войтишек А.В. Основы метода Монте-Карло в алгоритмах и задачах. Части I–VI. – Новосибирск, изд-во НГУ, 1997–2004.
13. Mikhailov G.A. Parametric estimates by the Monte Carlo method. – Utrecht: VSP, 1995.

### Глава 1

1. Соболев И.М. Об одном подходе к вычислению многомерных интегралов // Вопросы вычислительной и прикладной математики. – Ташкент. – 1970. – № 38. – С. 100–111.

2. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973.
3. Михайлов Г.А. Весовые алгоритмы статистического моделирования – Новосибирск, изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2003.
4. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1974.
5. Боровков А.А. Теория вероятностей. – М.: Наука, 1986.
6. Королюк В.С., Петренко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. – М.: Наука, 1985.
7. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.
8. Devroy L. Non-uniform random variate generation. – Springer-Verlag, 1986.
9. Войтишек А.В. Основы метода Монте-Карло в алгоритмах и задачах. Части I–IV. – Новосибирск, изд-во НГУ, 1997–1999.
10. Walker A.J. An efficient method for generating discrete random variables with general distributions // ASM Trans. Math. Software. – 1977. – N 3. – P. 253–256.
11. Иванов М.С., Рогазинский С.В. Метод прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа. – Новосибирск: ВЦ СО РАН СССР, 1988.
12. Doob J.L. Stochastic processes. – New York: John Wiley and Sons, 1953 [Русск. перевод: Дуб Л.Дж. Вероятностные процессы. – М.: Иностранная литература, 1956].

## Глава 2

1. Гихман И.И., Скороход А.В. Теория случайных процессов. – М.: Наука, 1971. Т. 1–3.
2. Королюк В.С., Петренко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. – М.: Наука, 1985.
3. Doob J.L. Stochastic processes. – New York: John Wiley and Sons, 1953 [Русск. перевод: Дуб Л.Дж. Вероятностные процессы. – М.: Иностранная литература, 1956].
4. Яглом А.М. Корреляционная теория стационарных случайных функций. – Л.: Гидрометеиздат, 1981.
5. Ченцов Н.Н. Предельные теоремы для некоторых классов случайных функций // Труды Всесоюзного совещания по теории вероятностей и математической статистике. – Ереван, 1960. С. 280–285.
6. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.
7. Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. – М.: Наука, 1987.
8. Ogorodnikov V.A., Prigarin S.M. Numerical Modelling of Random Processes and Fields: Algorithms and Applications. – Utrecht: VSP, 1996.
9. Войтишек А.В. Основы метода Монте-Карло в алгоритмах и задачах. Часть IV. – Новосибирск, изд-во НГУ, 1997.
10. Пригарин С.М. Введение в численное моделирование случайных процессов и полей. Части I, II. – Новосибирск, изд-во НГУ, 1999.
11. Боровков А.А. Сходимость распределений функционалов от случайных процессов // Успехи математических наук. – 1972. – Т. 27, N 1 (163). – С. 3 – 41.
12. Биллингсли П. Сходимость вероятностных мер. – М.: Наука, 1977.

## Глава 3

1. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973.
2. Михайлов Г.А. Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. – Новосибирск: Наука, 1974.
3. Бахвалов Н.С. Численные методы. – М.: Наука, 1975.
4. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.

5. Войтишек А.В. Основы метода Монте–Карло в алгоритмах и задачах. Часть V. – Новосибирск, изд-во НГУ, 1999.
6. Traub J.F., Wasilkowski G.W. and Wozniakowski H. Information-based Complexity. – New York: Academic Press, 1988.
7. Ермаков С.М. Метод Монте–Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1974.
8. Соболев С.Л., Васкевич В.Л. Кубатурные формулы. – Новосибирск: изд-во ИМ СО РАН, 1996.

#### Глава 4

1. Кертисс Д. Методы Монте–Карло для итерации линейных операторов // Успехи математических наук. – 1957. – № 5. – С. 149–174.
2. Ермаков С.М., Золотухин В.Г. Применение метода Монте–Карло к расчету защиты от ядерных излучений // Вопросы физической защиты факторов. – М.: Госатомиздат, 1963. – С. 171–182.
3. Halton J.H. A retrospective and prospective survey of the Monte Carlo methods // SIAM Rev. – 1970. – Vol. 12. – P. 1–63.
4. Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте–Карло. – М.: Наука, 1987.
5. Ермаков С.М. Об аналоге схемы Неймана–Улама в нелинейном случае // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1973. – Т. 13, № 3. – С. 564–573.
6. Владимиров В.С. О применении метода Монте–Карло для отыскания наименьшего характеристического числа и соответствующей собственной функции линейного интегрального уравнения // Теория вероятностей и ее применения. – 1956. – Т. 1, № 1. – С. 113–130.

#### Глава 5

1. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.
2. Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте–Карло. – М.: Наука, 1987.
3. Войтишек А.В. Основы метода Монте–Карло в алгоритмах и задачах. Части V, VI. – Новосибирск, изд-во НГУ, 1999, 2004.
4. Литбеттер М., Ротсен Х., Линдгрэн Г. Экстремумы случайных последовательностей и процессов. – М.: Мир, 1989.
5. Фролов А.С., Ченцов Н.Н. Использование зависимых испытаний в методе Монте–Карло для получения гладких кривых // Труды Всесоюзного совещания по теории вероятностей и математической статистике. – Вильнюс, 1962. – С. 425 – 437.
6. Королюк В.С., Петренко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. – М.: Наука, 1985.
7. Пригарин С.М. Введение в численное моделирование случайных процессов и полей. Части I, II. – Новосибирск, изд-во НГУ, 1999.
8. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. – М.: Мир, 1977.
9. Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно–сеточные методы. – М.: Наука, 1981.
10. Михайлов Г.А. Весовые методы Монте–Карло. – Новосибирск: изд-во СО РАН, 2000.

#### Глава 6

1. Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др. Метод Монте–Карло в атмосферной оптике. – Новосибирск: Наука, 1976.
2. Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте–Карло. – М.: Наука, 1987.
3. Kalos M.N. On the estimation of flux at a point by Monte-Karlo // Nucl. Sci. and Engng. – 1963. – V. 16. – P. 111–117.
4. Соболев И.М. Численные методы Монте–Карло. – М.: Наука, 1973.

## Глава 7

1. Вентцель А.Д. Курс теории случайных процессов. – М.: Наука, 1975.
2. Muller M.E. Some continuous Monte Carlo methods for the Dirichlet problem // Ann. Math. Stat. – 1956. – Vol. 27, N 3. – P. 569–589.
3. Боровков А.А. Теория вероятностей. – М.: Наука, 1976.
4. Бахвалов Н.С. Численные методы. – М.: Наука, 1973.
5. Сабельфельд К.К. Методы Монте–Карло в краевых задачах. – М.: Наука, 1989.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

### Введение.

#### Глава 1. Моделирование случайных величин.

- 1.1. Генераторы стандартных случайных чисел.
- 1.2. Моделирование дискретного распределения (стандартный алгоритм).
- 1.3. Специальные алгоритмы моделирования дискретного распределения.
- 1.4. Стандартный алгоритм моделирования непрерывной случайной величины.
- 1.5. Стандартный алгоритм моделирования случайного вектора.
- 1.6. Метод суперпозиции.
- 1.7. Методы исключения.
- 1.8. Моделирование полиномиальных и кусочно-полиномиальных плотностей.
- 1.9. Моделирование гамма- и бета-распределений.
- 1.10. Моделирование нормального распределения. Моделирование изотропного направления.

#### Глава 2. Моделирование случайных процессов и полей.

- 2.1. Общие принципы моделирования траекторий случайных процессов и полей.
- 2.2. Адекватность моделей случайных процессов и полей.
- 2.3. Сходимость моделей случайных процессов и полей.
- 2.4. Модели случайных функций с дискретным временем.
- 2.5. Модели гауссовских случайных процессов с непрерывным временем.
- 2.6. Приближенные случайные модели однородных гауссовских случайных полей.
- 2.7. Модели случайных процессов и полей, связанных с точечными потоками Пальма.

#### Глава 3. Численное интегрирование.

- 3.1. Стандартный метод Монте–Карло.
- 3.2. Выборка по важности.
- 3.3. Выборка по важности по части переменных.
- 3.4. Метод математических ожиданий.
- 3.5. Метод расщепления.
- 3.6. Выделение главной части.
- 3.7. Интегрирование по части области.
- 3.8. Метод противоположной переменной.

- 3.9. Метод расслоенной выборки.
- 3.10. Случайные кубатурные формулы.

#### **Глава 4. Решение интегральных уравнений методом Монте-Карло.**

- 4.1. Интегральные уравнения.
- 4.2. Цепи Маркова.
- 4.3. Весовые оценки.
- 4.4. Дисперсии оценок.
- 4.5. Уменьшение дисперсии.
- 4.6. Рекуррентные представления оценок.
- 4.7. Рандомизация.
- 4.8. Векторные оценки.
- 4.9. Вычисление параметрических производных.
- 4.10. Тестовая задача.
- 4.11. Модификации фазового пространства и весовых оценок.

#### **Глава 5. Функциональные оценки.**

- 5.1. Оценка нескольких интегралов.
- 5.2. Метод зависимых испытаний.
- 5.3. Дискретно-стохастические численные методы.

#### **Глава 6. Решение задач переноса частиц.**

- 6.1. Вводная информация.
- 6.2. Моделирование траектории.
- 6.3. Весовые модификации.
- 6.4. Весовые параметрические оценки.
- 6.5. Модификация фазового пространства.
- 6.6. Весовая оценка по пробегу.
- 6.7. Экспоненциальное преобразование.
- 6.8. Сопряженное уравнение переноса. Теорема оптической взаимности.
- 6.9. Локальные оценки.
- 6.10. Оценки временных зависимостей.
- 6.11. Решение некоторых обратных и стохастических задач.
- 6.12. Моделирование поляризации.
- 6.13. Решение задач радиационно-кондуктивного теплопереноса.
- 6.14. Приближенное решение нелинейного кинетического уравнения Больцмана.

#### **Глава 7. Решение краевых задач для эллиптических уравнений.**

- 7.1. Весовые оценки, связанные с "блужданием по сферам".
- 7.2. Решение многомерной разностной задачи Дирихле.
- 7.3. Диффузионные процессы и уравнения.
- 7.4. Оценка по времени для вычисления линейных функционалов от концентрации траекторий многомерных диффузионных процессов.
- 7.5. Вероятностное представление и метод Монте-карло для решения полигармонического уравнения.
- 7.6. Использование граничных интегральных уравнений.

#### **Литература.**