

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ  
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Кафедра вычислительной математики

**А. В. Войтишек**

**ДИСКРЕТНО-СТОХАСТИЧЕСКИЕ  
МОДИФИКАЦИИ СТАНДАРТНОГО  
МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО**

Учебное пособие

Новосибирск  
2009

ББК 22.19  
УДК 519.676  
В

**Войтишек А. В.** Дискретно-стохастические модификации стандартного метода Монте-Карло: Учеб. пособие / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2009. 104 с.

ISBN

Данное пособие содержит конспективное изложение лекций специального курса «Дискретно-стохастические методы численного интегрирования», который разработан автором для студентов старших курсов механико-математического факультета НГУ. Издание подготовлено в рамках выполнения программы «*Инновационные образовательные программы и технологии, реализуемые на принципах партнерства классического университета, науки, бизнеса и государства*» национального проекта «Образование». Работа над пособием выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 07-01-00024, 09-01-00035, 09-01-12116).

Все замечания и предложения читателей по содержанию данной работы будут приняты автором с благодарностью (контактный телефон (8-383)-330-07-28; e-mail: vav@osmf.sccc.ru).

Рецензент  
к.ф.-м.н. И. А. Шалимова

© Новосибирский государственный университет, 2009  
© Войтишек А. В., 2009

ISBN

## ПРЕДИСЛОВИЕ

С развитием вычислительной техники возрастает интерес к численным методам решения прикладных задач, в частности, к статистическому моделированию (или методу Монте-Карло) (см., например, [1], а также список литературы в этом учебнике). Традиционно методы Монте-Карло рассматриваются в качестве альтернативных «детерминированным» численным методам (в частности, конечно-разностным и конечно-элементным схемам) [2]. 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].

Следует сразу отметить, что спектр дискретно-стохастических численных методов достаточно широк. Комбинированные алгоритмы возникают во всех основных разделах теории методов Монте-Карло, к которым следует отнести: численное моделирование случайных величин, векторов и функций [3–5]; вычисление многократных интегралов; приближение интегралов, зависящих от параметра [3, 5]; решение интегральных уравнений второго рода [3, 5]; приложения методов Монте-Карло, связанные с решением задач вычислительной математики и математической физики [3]. В данном пособии описаны возможности применения дискретно-стохастических технологий в алгоритмах численного интегрирования.

Для приближенного вычисления интегралов  $I$  малых размерностей с гладкими (в обычном или обобщенном смысле) подынтегральными функциями и относительно простыми областями интегрирования развита *теория кубатурных формул* [2, 6]. Кубатурная формула в общем случае имеет вид

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx S_n = \sum_{j=1}^n c_j g(\mathbf{x}_j), \quad (0.1)$$

где  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$  – заданные детерминированные (и, как правило, регулярные) узлы сетки в  $R^d$ , а  $\{c_1, \dots, c_n\}$  – веса. Оптимальный выбор узлов и весов в (0.1) связан с минимизацией погрешности  $\delta_n = |I - S_n|$  и основан (явно или неявно) на использовании аппроксимаций подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$ . Главным достоинством кубатурных формул является возможность получения гарантированной и сравнительно быст-

рой сходимости  $\delta_n$  к нулю при  $n \rightarrow \infty$  для классов гладких подынтегральных функций  $g(\mathbf{x})$ .

К недостаткам «классических» (детерминированных) кубатурных формул на классах подынтегральных функций следует отнести: слабый учет специфики той или иной подынтегральной функции, необходимость разработки специальных численных алгоритмов поиска оптимальных весов и (или) узлов, чувствительность к росту размерности  $d$  и к гладкости начальных данных (подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  и области интегрирования  $X$ ), трудности в построении показательных тестовых численных примеров и контроля точности и затрат при практических вычислениях.

Для существенно многомерных задач (т. е. для случая  $d \gg 1$  и даже  $d \rightarrow \infty$ ) достаточно эффективным оказывается *стандартный метод Монте-Карло* (см. далее разд. 1, 3). Этот алгоритм основан на представлении

$$I = \int q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \zeta_j, \quad \zeta = q(\boldsymbol{\xi}) = \frac{g(\boldsymbol{\xi})}{f(\boldsymbol{\xi})}; \quad (0.2)$$

здесь  $d$ -мерный случайный вектор  $\boldsymbol{\xi}$  распределен согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ . Этот алгоритм имеет следующие положительные свойства. Имеется возможность уменьшения трудоемкости алгоритма за счет удачного (согласованного с видом подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$ ) выбора весовой функции  $f(\mathbf{x})$  (алгоритм выборки по важности) или преобразования исходного интеграла (выделение главной части) и весовой функции (методы математического ожидания и расщепления, выборка по группам и т. п.). Веса имеют простой вид  $c_j = 1/n$ , а узлы реализуются согласно выбираемому вероятностному распределению с плотностью  $f(\mathbf{x})$ . Эффективность алгоритма (0.2) относительно слабо зависит от роста размерности  $d$  и от отсутствия гладкости начальных данных (подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  и области интегрирования  $X$ ). Имеется возможность контроля затрат и точности вычислений.

Главным недостатком метода Монте-Карло является относительно низкая (порядка  $1/\sqrt{n}$ ) скорость сходимости погрешности к нулю при возрастании числа случайных узлов  $n$  (см. разд. 1).

Эффективными могут оказаться и смешанные, комбинированные процедуры численного интегрирования, сочетающие в себе элементы кубатурных формул и метода Монте-Карло. По-видимому, одна из первых численных схем подобного рода была представлена Н. С. Бахвалов-

вым в начале шестидесятых годов прошлого века [7]. Исходной областью  $X$  являлся  $d$ -мерный единичный куб  $Q_d$ , который разбивался на  $n$  равных кубов с вершинами в точках равномерной сетки. В каждом  $j$ -ом элементарном кубе выбирался узел  $\mathbf{x}_j$  кубатурной формулы случайным образом (согласно равномерному распределению). Этот алгоритм можно считать как кубатурной формулой со случайными узлами, так и предельным случаем выборки по группам в методе Монте-Карло. Н. С. Бахвалов показал, что его алгоритм является оптимальным (по скорости сходимости к нулю погрешности  $\delta_n$  при  $n \rightarrow \infty$ ) в пространстве непрерывно дифференцируемых подынтегральных функций  $C^1(Q_d)$ . Для этого ему потребовалось получать оценки сверху и снизу для  $\delta_n$ . Методология работ Н. С. Бахвалова явилась основой для интенсивного развития (в основном на Западе) так называемой *теории сложности* [8]. В ней изучается вопрос о том, каков максимальный порядок стремления к нулю погрешности  $\tilde{\delta}_{\tilde{n}}$  для данного класса вычислительных алгоритмов с количеством операций  $\tilde{n}$ .

Упомянутый пример подтверждает целесообразность разработки комбинированных алгоритмов численного интегрирования. Такие численные схемы могут уменьшить трудоемкость стандартного метода Монте-Карло. В ряде случаев удается получить эффективные дискретно-стохастические модификации метода Монте-Карло, приводящие к состоятельным (вообще говоря, смещенным) оценкам.

При разработке дискретно-стохастических численных методов возникают проблемы выбора подходящих аппроксимационных базисов и тестовых функций, подтверждающих эффективность исследуемых комбинированных алгоритмов.

Представляемый в пособии учебный курс следует рассматривать как дополнительный к курсу «Методы Монте-Карло», который многие годы читается для студентов четвертого курса механико-математического факультета НГУ. Поэтому основные «классические» результаты, касающиеся численного стохастического интегрирования (см., например, главу 3 из учебника [1]), изложены в этом пособии конспективно, без подробных обоснований и доказательств. Необходимо также отметить, что ряд результатов, представленных в данной книге, получен автором совместно с Е. Г. Каблуковой (эти результаты вошли в диссертацию [9], выполненную под научным руководством автора пособия).

# 1. Вычисление интеграла методом Монте-Карло. Погрешность и трудоемкость метода Монте-Карло

**1.1. Общая схема метода Монте-Карло.** Под численным статистическим моделированием обычно понимают реализацию с помощью компьютера вероятностной модели некоторого объекта с целью оценивания средних характеристик модели на основе закона больших чисел.

В самом общем виде схема метода Монте-Карло выглядит следующим образом (см., например, [1]). 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:

$$I = \mathbf{E}\zeta \approx \bar{\zeta}_n = \frac{\zeta_1 + \dots + \zeta_n}{n}. \quad (1.1)$$

Базовая случайная величина  $\zeta$  называется *оценкой* величины  $I$ . Таким образом, понятие оценки в теории методов Монте-Карло несколько отличается от аналогичного термина в математической статистике, в которой оценкой величины  $I$  называется среднее арифметическое  $\bar{\zeta}_n$ . Выбор оценки  $\zeta$ , как правило, неоднозначен. Поэтому главными проблемами при использовании методов численного статистического моделирования является выбор оптимальной оценки  $\zeta$  искомой величины  $I$  и разработка алгоритмов, позволяющих получать выборочные значения  $\{\zeta_j\}$  на ЭВМ.

Чаще всего оценка  $\zeta$  из соотношения (1.1) имеет вид

$$\zeta = q(\boldsymbol{\xi}), \quad (1.2)$$

где  $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$  – случайный вектор или случайная последовательность (например, обрывающаяся с вероятностью единица цепь Маркова, для которой, вообще говоря,  $d \rightarrow \infty$ ) с заданным абсолютно непрерывным распределением, а  $q(\mathbf{x})$  – функция (неслучайная)  $d$  переменных. При этом соотношение (1.1) приобретает вид

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q(\boldsymbol{\xi}_i), \quad (1.3)$$

где  $\xi_1, \dots, \xi_n$  – выборочные значения случайного вектора  $\xi$ .

**1.2. Вычисление интеграла.** В связи с задачей (1.1) возникает ряд вопросов.

1. Какие величины  $I$  допускают представление (1.1)?
2. Единствен ли выбор случайной величины  $\zeta$ , и если неединствен, то как оптимизировать этот выбор?
3. Сколько выборочных значений  $\zeta_1, \dots, \zeta_n$  требуется для достижения заданного уровня погрешности?
4. Как построить эффективные алгоритмы реализации выборочных значений  $\zeta_1, \dots, \zeta_n$  на ЭВМ?

Забегая вперед, отметим, что вопрос 4 будет исследоваться в разд. 5; вопросы 2 и 3 обсуждаются в подразд. 1.3.

Исследуем вопрос 1. Отметим прежде всего, что если оценка  $\zeta$  имеет вид (1.2), то

$$I = \mathbf{E}\zeta = \int q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (1.4)$$

где  $f(\mathbf{x}) = f(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$  – плотность распределения случайного вектора  $\xi$ . В связи с этим можно объявить, что с математической точки зрения теория методов Монте-Карло является специальным разделом *численного интегрирования*. Отметим, что этот раздел включает (если иметь в виду именно методы Монте-Карло) и такую важную тему, как решение интегральных уравнений второго рода (см. далее разд. 3). Эти уравнения, в свою очередь, могут описывать многие физические процессы, связанные, в частности, с переносом частиц. Во многих задачах математической физики имеются возможности построения интегрального и вероятностного представлений решения и конструирования соответствующего численного алгоритма метода Монте-Карло.

Предположим, что решение  $I$  некоторой задачи допускает интегральное представление  $I = \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ . Выберем плотность  $f(\mathbf{x})$  такую, что  $f(\mathbf{x}) \neq 0$  при  $g(\mathbf{x}) \neq 0$ . Тогда на основе соотношений (1.2)–(1.4) имеем

$$I = \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \frac{g(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta \approx \bar{\zeta}_n = \frac{1}{n} \left( \frac{g(\xi_1)}{f(\xi_1)} + \dots + \frac{g(\xi_n)}{f(\xi_n)} \right), \quad (1.5)$$

при этом  $\zeta = q(\xi) = g(\xi)/f(\xi)$ . Равенство (1.5) отражает принцип построения *стандартной весовой оценки* метода Монте-Карло для интеграла  $I$ . В дальнейшем приближенное равенство в соотношении (1.5) будем называть АЛГОРИТМОМ 1.1.

**1.3. Погрешность и трудоемкость метода Монте-Карло.** Погрешность  $\delta_n = |\bar{\zeta}_n - I|$  приближения (1.1) представима в виде

$$\delta_n = \left| \frac{S_n - nI}{n} \right| = \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}} \left| \frac{S_n - n\mathbf{E}\zeta}{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}\sqrt{n}} \right|,$$

где  $S_n = \zeta_1 + \dots + \zeta_n$ . Из центральной предельной теоремы для одинаково распределенных случайных величин (см., например, [10]) следует, что при достаточно большом  $n$  случайная величина  $(S_n - n\mathbf{E}\zeta)/(\sqrt{\mathbf{D}\zeta}\sqrt{n})$  близка по распределению к стандартной нормальной случайной величине  $\gamma \in N(0, 1)$ . Следовательно, для малого  $\varepsilon > 0$  найдется константа  $H_\varepsilon$ , для которой при  $n \gg 1$  выполнено соотношение

$$\mathbf{P} \left( \delta_n \leq H_\varepsilon \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}} \right) \approx \mathbf{P}(|\gamma| < H_\varepsilon) \geq 1 - \varepsilon. \quad (1.6)$$

Например, для  $\varepsilon = 0.003$  имеем  $H_\varepsilon \approx 3$  (это соотношение отражает «правило трех сигма»). Из соотношения (1.6) следует, что скорость сходимости метода Монте-Карло определяется величиной  $n^{-1/2}$ , т. е. относительно невелика. Для того чтобы получить следующий знак после запятой величины  $I$  (т. е. уменьшить погрешность примерно в 10 раз) требуется в 100 раз увеличить число испытаний  $n$ . Поэтому характерные числа испытаний в практических вычислениях по методу Монте-Карло весьма велики.

Для сравнения при вычислении одномерного интеграла  $I = \int_a^b g(x) dx$  с гладкой подынтегральной функцией  $g(x)$  погрешность простейшей формулы прямоугольников

$$I \approx \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) g \left( \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \right); \quad a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b, \quad (1.7)$$

определяемая числом  $n$  вычислений подынтегральной функции  $g(x)$  из равенства (1.5), имеет порядок  $n^{-2}$  (на четыре порядка лучше метода Монте-Карло), а чуть более сложная формула Симпсона

$$I \approx \frac{1}{6} \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) \left( g(x_i) + 4g \left( \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \right) + g(x_{i+1}) \right) \quad (1.8)$$

имеет еще более высокий порядок погрешности  $n^{-3}$ . Упомянутые формулы являются частными случаями так называемых *квадратурных фор-*



мул Ньютона–Котеса (см., например, [2]), построение которых основано на интегрировании полиномиальных аппроксимаций подынтегральной функции  $g(x)$ . Хорошо известно, что при переходе к кратностям  $d$  интеграла (1.5), больших единицы, и при рассмотрении негладких подынтегральных функций  $g(\mathbf{x})$  построение хороших аппроксимаций для  $g(\mathbf{x})$  и соответствующих им кубатурных формул значительно усложняется (подробнее этот вопрос будет рассмотрен далее в разд. 21). Скорость сходимости метода Монте-Карло (1.5)  $n^{-1/2}$  не зависит от кратности  $d$  (эта скорость сохраняется в том числе и для сумм интегралов бесконечно возрастающей кратности – см. далее разд. 3). Свойства функции  $g(\mathbf{x})$  влияют лишь на величину  $\mathbf{D}\zeta$  в соотношении (1.6).

Таким образом, при переходе к сложным многомерным задачам конкурентоспособность методов Монте-Карло возрастает. Принято считать, что для  $1 \leq d \leq 3$  предпочтительнее использовать кубатурные формулы, для  $d \geq 10$  не имеет конкурентов простейший метод Монте-Карло, а для размерностей  $3 < d < 10$  имеет смысл рассматривать смешанные *дискретно-стохастические методы* численного интегрирования. Подтверждению этого вывода посвящен, в частности, данный курс.

Важным преимуществом метода Монте-Карло является простота учета вычислительных затрат, позволяющая проводить оптимизацию оценки  $\zeta$  за счет специального выбора плотности  $f(\mathbf{x})$ . Действительно, затраты на вычисление величины  $\zeta_n$  равны  $s = nt$ , где  $t$  – среднее время для получения одного выборочного значения  $\zeta_j$  случайной величины  $\zeta$ . Из практических расчетов известно, что при больших  $n$  формула  $H\sqrt{\mathbf{D}\zeta}/\sqrt{n}$  (здесь  $0 < H < H_\varepsilon$  – см. соотношение (1.6)) определяет поведение погрешности  $\delta_n$ . Отсюда получаем, что при заданном уровне погрешности  $\Delta$  величина  $\mathbf{D}\zeta$  пропорциональна  $n$ , т. е. из соотношения  $\Delta = H\sqrt{\mathbf{D}\zeta}/\sqrt{n}$  следует равенство  $n = (H/\Delta)^2 \times \mathbf{D}\zeta$ . Поэтому можно заменить величину  $s$  на

$$S = t \times \mathbf{D}\zeta. \quad (1.9)$$

Величина (1.9), называемая *трудоемкостью метода Монте-Карло*, является критерием качества алгоритма 1.1, определяемого соотношением (1.5). Тот выбор плотности  $f(\mathbf{x})$  считается лучше, для которого величина  $S$  меньше.

**1.4. Оценка трудоемкости с помощью предварительных расчетов.** Среднее время  $t$  несложно определить экспериментально, предварительно (до использования алгоритма (1.5) для  $n \gg 1$ ) реализуя относительно небольшое количество  $\hat{n}$  выборочных значений  $\zeta_1, \dots, \zeta_{\hat{n}}$ , и деля соответствующее время счета на  $\hat{n}$ .

Неизвестная величина  $\mathbf{D}\zeta$  из соотношений (1.5) и (1.9) также допускает предварительное оценивание с помощью выборочных значений  $\zeta_1, \dots, \zeta_{\hat{n}}$ . Простейшее приближение несложно получить из соотношений (1.2), (1.3) для  $\mathbf{u} = u \in R$  и  $q(u) = u^2$ :

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}\zeta^2 - (\mathbf{E}\zeta)^2 \approx \mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} = \frac{1}{\hat{n}} \sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i^2 - \left( \frac{1}{\hat{n}} \sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i \right)^2. \quad (1.10)$$

Если в равенстве (1.10) трактовать  $\zeta_1, \dots, \zeta_{\hat{n}}$  как независимые и одинаково распределенные (так же, как случайная величина  $\zeta$ ) случайные величины, то несложно показать, что

$$\mathbf{E}\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} = \left(1 - \frac{1}{\hat{n}}\right) \mathbf{D}\zeta. \quad (1.11)$$

Действительно,  $\mathbf{E}\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} = \mathbf{E}\zeta^2 - \mathbf{E}\bar{\zeta}_{\hat{n}}^2 = \mathbf{D}\zeta - \mathbf{D}\bar{\zeta}_{\hat{n}}$ , так как  $\mathbf{E}\bar{\zeta}_{\hat{n}} = \mathbf{E}\zeta$ . Учитывая, что  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_{\hat{n}} = \mathbf{D}\zeta/\hat{n}$ , получаем равенство (1.11). Разделив  $\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)}$  на  $(1 - 1/\hat{n})$

$$\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(2)} = \frac{1}{\hat{n} - 1} \sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i^2 - \frac{1}{\hat{n}(\hat{n} - 1)} \left( \sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i \right)^2, \quad (1.12)$$

получаем несмещенную оценку дисперсии.

## 2. Метод выборки по важности. Включение особенности в плотность

**2.1. Метод выборки по важности.** Способы уменьшения времени  $t$  из (1.9) направлены, как правило, на оптимизацию моделирования случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$  (соответствующие алгоритмы и их дискретно-стохастические модификации подробнее рассмотрены далее в разд. 5–9 и 19).

Имеется также целый ряд приемов, позволяющих уменьшать дисперсию

$$\mathbf{D}\zeta = \int \frac{g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{f(\mathbf{x})} - I^2 \quad (2.1)$$

для случайной величины  $\zeta = g(\boldsymbol{\xi})/f(\boldsymbol{\xi})$  из равенства (1.5) (эти приемы рассмотрены далее в разд. 10–18, 20).

В этом подразделе мы рассмотрим наиболее употребимый способ уменьшения дисперсии (2.1) – *метод выборки по важности*, основанный на следующем утверждении (см., например, [1]).

**ЛЕММА 2.1.** *Минимальная дисперсия  $(\mathbf{D}\zeta)_{min}$  реализуется в случае, когда плотность  $f(\mathbf{x})$  пропорциональна модулю подынтегральной функции:*

$$f_{min}(\mathbf{x}) = \frac{|g(\mathbf{x})|}{\int |g(\mathbf{y})| d\mathbf{y}}, \quad (2.2)$$

и равна  $(\mathbf{D}\zeta)_{min} = (\int |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x})^2 - I^2$ .

Сформулируем также важное следствие леммы 2.1 для случая знакопостоянной подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$ .

**ЛЕММА 2.2.** *Пусть*

$$g(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in R^d. \quad (2.3)$$

*Если*

$$f(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{I} \quad \text{при } \mathbf{x} \in R^d, \quad (2.4)$$

то  $(\mathbf{D}\zeta)_{min} = 0$ .

Плотности (2.2) и (2.4) не используются для вычисления интеграла  $I$  по той причине, что нахождение величины  $\int |g(\mathbf{y})| d\mathbf{y}$  из соотношения (2.2) представляет собой задачу, эквивалентную по сложности исходной задаче (1.5) (в случае (2.3) – в точности эквивалентную). Более того, для случая (2.3) алгоритм 1.1 «вырождается», и приближенное равенство (1.5) превращается в тождество  $I = (1/n) \times \sum_{i=1}^n I$ .

Из лемм 2.1 и 2.2 можно сделать вывод о том, что в ряде случаев можно добиться уменьшения трудоемкости (1.9) алгоритма 1.1, выбирая плотность  $f(\mathbf{x})$ , близкой (с точностью до постоянного множителя) к функции (2.2):

$$f(\mathbf{x}) \approx H |g(\mathbf{x})|; \quad (2.5)$$

здесь  $H = \text{const}$ . Алгоритм (1.5) 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  $\{\xi_i\}$ .

**2.2. Включение особенности в плотность.** Одна из принципиальных ситуаций, в которых применяется выборка по важности, связа-

на с довольно широко распространенным случаем, когда подынтегральные функции имеют особенности, которые описываются обобщенными функциями:

$$I = \int G(\mathbf{x}) \left( \sum_{j=1}^A g_j(\mathbf{x}) \delta(\Psi_j(\mathbf{x})) \right) d\mathbf{x}, \quad A = M \vee \infty. \quad (2.6)$$

Здесь функции  $g_j(\mathbf{x})$  принимают положительные значения на гиперповерхностях  $\Gamma_j$ , определяемых уравнениями  $\Psi_j(\mathbf{x}) = 0$ . Символы  $\delta(u)$  обозначают *дельта-функцию Дирака*, т. е. для любой непрерывной функции  $z(u)$  выполнено  $\int z(u) \delta(u - u_0) du = z(u_0)$ . Таким образом, выражение (2.6) можно трактовать как интеграл по объединению гиперповерхностей  $\Gamma_j$ . Как правило, «классические» кубатурные формулы (0.1) не дают эффективных алгоритмов вычисления таких интегралов.

Для понимания дальнейших рассуждений полезно рассмотреть обобщение теории непрерывных случайных величин, в котором ключевым является понятие случайной величины  $\xi$ , распределенной согласно *дельта-плотности*  $f_\xi(x) = \delta(x - a)$  (здесь  $a = \text{const}$ ), которое означает, что  $\xi = a$  с вероятностью единица (т. е. по сути «обычное» число  $a$  трактуется как случайная величина). Такой подход позволяет, в том числе, рассматривать дискретную случайную величину как случайный элемент с плотностью распределения, представляющей собой смесь дельта-плотностей (см., например, [1]). По аналогии с этим приемом для вычисления интеграла (2.6) можно выбрать *допустимую плотность* вида

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^A p_j f_j(\mathbf{x}) \delta(\Psi_j(\mathbf{x})).$$

Здесь функции  $f_j(\mathbf{x})$  являются плотностями распределения на гиперповерхностях  $\Gamma_j$ , а числа  $\{p_j\}$  – вероятности (т. е.  $p_j > 0$  и  $\sum_{j=1}^A p_j = 1$ ). Учитывая, что при  $\mathbf{x} \in \Gamma_j$  выполнено  $f(\mathbf{x}) = p_j f_j(\mathbf{x})$ , перепишем исходный интеграл в виде (1.5):

$$\begin{aligned} I &= \int G(\mathbf{x}) \left( \sum_{j=1}^A \frac{g_j(\mathbf{x}) \delta(\Psi_j(\mathbf{x}))}{p_j f_j(\mathbf{x})} p_j f_j(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} = \\ &= \int \left( \sum_{j=1}^A \frac{G(\mathbf{x}) g_j(\mathbf{x}) \delta(\Psi_j(\mathbf{x}))}{p_j f_j(\mathbf{x})} \right) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta. \end{aligned}$$

Здесь

$$\zeta = \sum_{j=1}^A \frac{G(\boldsymbol{\xi}) g_j(\boldsymbol{\xi}) \delta(\Psi_j(\boldsymbol{\xi}))}{p_j f_j(\boldsymbol{\xi})},$$

а случайный вектор  $\boldsymbol{\xi}$  имеет плотность распределения  $f(\mathbf{x})$ . Таким образом, можно реализовать алгоритм 1.1, причем при моделировании выборочных значений  $\boldsymbol{\xi}_i$  применяется метод суперпозиции (см., например, [1], а также разд. 5 – алгоритм 5.9): сначала согласно вероятностям  $\{p_j\}$  выбирается номер  $m_i$ , а затем согласно плотности  $f_{m_i}(\mathbf{x})$  реализуется точка  $\boldsymbol{\xi}_i$  на гиперповерхности  $\Gamma_{m_i}$ . Соответствующий вклад в оценку (1.5) равен

$$\zeta_i = \frac{G(\boldsymbol{\xi}_i) g_{m_i}(\boldsymbol{\xi}_i)}{p_{m_i} f_{m_i}(\boldsymbol{\xi}_i)}.$$

По аналогии с леммой 2.1 несложно показать, что минимальная дисперсия  $D\zeta$  достигается в случае, когда плотность  $f(\mathbf{x})$  имеет вид

$$f(\mathbf{x}) = H \sum_{j=1}^A |G(\mathbf{x})| g_j(\mathbf{x}) \delta(\Psi_j(\mathbf{x})),$$

где  $H$  – нормирующая константа. Описанный прием носит название *включение особенности в плотность*.

### 3. Вычисление бесконечных сумм интегралов методом Монте-Карло

**3.1. Линейный функционал от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода, как интеграл бесконечно возрастающей кратности.** Ряд важных прикладных задач (в частности, задачи переноса частиц – см., например, [1]) приводят к необходимости вычисления линейных функционалов вида

$$I_h = (\varphi, h) = \int \varphi(x) h(x) dx; \quad \varphi \in L_1(X), \quad h \in L_\infty(X). \quad (3.1)$$

Здесь  $h(x)$  – заданная функция, а  $\varphi(x)$  – решение (неизвестное) *интегрального уравнения Фредгольма второго рода*

$$\varphi(x) = \int k(x', x) \varphi(x') dx' + f(x) \quad \text{или} \quad \varphi = K\varphi + f. \quad (3.2)$$

Принадлежность функции  $\varphi$  пространству  $L_1(X)$ ,  $X \subseteq R^l$ , с нормой  $\|g\|_{L_1} = \int |g(x)| dx$  обусловлена тем, что в подавляющем числе приложений свободный член  $f(x)$  и ядро  $k(x', x)$  интегрального оператора  $K$  имеют особенности, которые описываются обобщенными функциями (по аналогии с формулой (2.6)). При этом функция  $h(x)$  выбирается из пространства  $L_\infty(X)$  ограниченных (почти везде) функций с нормой  $\|h\|_{L_\infty} = \text{vrai sup}_{x \in X} |h(x)|$ . Для существования и единственности решения  $\varphi(x)$  уравнения (3.2) достаточно потребовать, чтобы

$$\int k(x', x) dx = q(x') \leq 1 - \delta < 1; \quad (3.3)$$

при этом интегральный оператор  $K$  является сжимающим. С помощью непосредственной проверки (подстановки в уравнение (3.2)) легко убедиться в том, что это решение может быть представлено в виде *ряда Хеймана*

$$\varphi(x) = \sum_{m=0}^{\infty} K^m f(x), \quad (3.4)$$

а искомый функционал – в виде

$$I_h = \sum_{m=0}^{\infty} (K^m f, h); \quad (3.5)$$

здесь

$$(K^m f, h) = \int f(y^{(0)}) k(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \dots \times k(y^{(m-1)}, y^{(m)}) h(y^{(m)}) dy^{(0)} \dots dy^{(m)}. \quad (3.6)$$

Таким образом, правая часть соотношения (3.5) представляет собой сумму интегралов бесконечно возрастающей кратности. Сходимость ряда (3.4) следует из условия (3.3).

**3.2. Однородная цепь Маркова, обрывающаяся с вероятностью единица и ее моделирование.** Стандартный метод Монте-Карло (1.5) не позволяет вычислять интегралы бесконечно возрастающей кратности из-за необходимости моделирования вектора  $\xi$  бесконечной размерности. Однако специальный вид подынтегральных функций из соотношений (3.5), (3.6), в которых при переходе от номера  $m$  к номеру  $m + 1$  происходит умножение на функцию двух переменных  $k(y^{(m)}, y^{(m+1)})$  (и меняется аргумент функции  $h(y^{(m+1)})$ ), и принцип выборки по важности (который подразумевает выбор плотности распределения случайного вектора  $\xi$ , близкой к модулю подынтегральной

функции) наводят на мысль об использовании плотностей распределения векторов  $\tilde{\xi}_m = (\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m)})$  вида

$$\tilde{f}(y^{(0)}, y^{(1)}, \dots, y^{(m)}) = \pi(y^{(0)})r(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \dots \times r(y^{(m-1)}, y^{(m)}), \quad (3.7)$$

где  $r(x', x) = r(x|x')$  – некоторая условная плотность. При этом

$$(K^m f, h) = \mathbf{E}\zeta^{(m)}; \quad \zeta^{(m)} = \tilde{Q}^{(m)}h(\xi^{(m)}), \quad (3.8)$$

где

$$\tilde{Q}^{(0)} = \frac{f(\xi^{(0)})}{\pi(\xi^{(0)})}, \quad \tilde{Q}^{(i)} = \tilde{Q}^{(i-1)} \times \frac{k(\xi^{(i-1)}, \xi^{(i)})}{r(\xi^{(i-1)}, \xi^{(i)})}; \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.9)$$

Функция (3.7) представляет собой плотность распределения отрезка  $(\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m)})$  *однородной цепи Маркова*  $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \dots$  с начальной плотностью  $\pi(x)$  и переходной плотностью  $r(x', x)$ . Напомним, что «классическая» цепь Маркова – это бесконечная последовательность случайных величин (случайных векторов), для которой распределение состояния  $\xi^{(m)}$  полностью определяется значением предыдущего состояния  $\xi^{(m-1)}$  (однородность означает, что вероятностные характеристики перехода  $\xi^{(m-1)} \rightarrow \xi^{(m)}$  – одни и те же для всех  $m = 1, 2, \dots$ ). Переходная плотность  $r(x', x) = r(x|x') = r(x|\xi^{(m-1)} = x')$  – это условная плотность распределения последующего ( $m$ -го) состояния при фиксированном предыдущем (для однородной цепи эта функция не зависит от  $m$ ). Моделирование  $m$ -го состояния однородной цепи Маркова происходит следующим образом. Сначала реализуется выборочное значение случайной величины (случайного вектора)  $\xi^{(0)}$  согласно плотности  $\pi(x)$ , а затем последовательно реализуются значения  $\xi^{(i)}$ ;  $i = 1, \dots, m$  согласно плотностям  $r(\xi^{(i-1)}, x) = r(x|\xi^{(i-1)})$  (см. далее алгоритм 5.7).

В связи с необходимостью приближения бесконечной суммы (3.5) в методах Монте-Карло вводится *цепь Маркова, обрывающаяся с вероятностью единица*. Это делается по аналогии с «физическими» соображениями из теории переноса частиц (см., например, [1]). Определяется *переходная функция*

$$p(x', x) = r(x', x)(1 - p(x')), \quad (3.10)$$

где значение  $0 \leq p(x') \leq 1$  играет роль вероятности обрыва траектории. Модификация моделирования состоит в следующем: после реализации начального состояния  $\xi^{(0)}$  при реализации перехода  $\xi^{(i-1)} \rightarrow \xi^{(i)}$

согласно вероятности  $p(\xi^{(i-1)})$  разыгрывается обрыв траектории. Если обрыв происходит, то дальнейшие переходы не моделируются, иначе происходит реализация выборочного значения  $\xi^{(i)}$  согласно плотности  $r(\xi^{(i-1)}, x)$ .

Если потребовать  $p(x') \geq \delta > 0$ , то

$$\int p(x', x) dx = 1 - p(x') \leq 1 - \delta < 1 \quad (3.11)$$

(это аналог соотношения (3.3)) и  $\mathbf{E}N < +\infty$ , где  $N$  – случайный номер обрыва траектории. Несмотря на соотношение (3.11), функцию (3.10) часто называют *переходной плотностью* однородной цепи Маркова, обрывающейся с вероятностью единица.

**3.3. Оценка по столкновениям для вычисления линейного функционала от решения интегрального уравнения второго рода.** Справедливо следующее соотношение (см., например, [1]):

$$I_h = (\varphi, h) = \mathbf{E}\zeta, \quad \zeta = \sum_{m=0}^N Q^{(m)} h(\xi^{(m)}). \quad (3.12)$$

Здесь  $I_h$  – линейный функционал (3.1) от решения  $\varphi(x)$  интегрального уравнения второго рода (3.2);  $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)}$  – однородная цепь Маркова, обрывающаяся с вероятностью единица, с начальной плотностью  $\pi(x)$  и переходной функцией (плотностью)  $p(x', x)$ ;  $N$  – случайный номер обрыва цепи. Случайные веса  $Q^{(m)}$  определяются рекуррентно по аналогии с соотношением (3.9):

$$Q^{(0)} = \frac{f(\xi^{(0)})}{\pi(\xi^{(0)})}; \quad Q^{(m)} = Q^{(m-1)} \times \frac{k(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}{p(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}.$$

Для выполнения равенства (3.12) достаточно потребовать выполнения соотношений (3.11) и

$$\pi(x) \neq 0 \quad \text{при} \quad f(x) \neq 0 \quad \text{и} \quad p(x', x) \neq 0 \quad \text{при} \quad k(x', x) \neq 0. \quad (3.13)$$

Случайная величина  $\zeta$  называется *весовой оценкой по столкновениям* функционала  $I_h$ . Равенство (3.12) дает следующий способ вычисления функционала (3.2).

**АЛГОРИТМ 3.1. Реализуем  $n$  траекторий**

$$\xi_j^{(0)}, \xi_j^{(1)}, \dots, \xi_j^{(N_j)}; \quad j = 1, \dots, n \quad (3.13)$$



цепи Маркова с начальной плотностью  $\pi(x)$  и переходной функцией  $p(x', x)$  и вычисляем среднее арифметическое вида (1.1):

$$I_h \approx \bar{\zeta}_n = \frac{\zeta_1 + \dots + \zeta_n}{n}, \quad \text{где } \zeta_j = \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} h(\xi_j^{(m)}).$$

Таким образом, метод Монте-Карло позволяет получать приближения бесконечных сумм (3.5) интегралов бесконечно возрастающей кратности (3.6).

**3.4. Использование оценки по столкновениям.** Для целого ряда актуальных прикладных задач можно представить искомую величину в виде линейного функционала (3.1) от решения интегрального уравнения второго рода (3.2) (см., например, [1]). Для оценки этого функционала можно использовать алгоритм 3.1.

Достаточно часто свободный член  $f(x)$  уравнения (3.2) представляет собой начальную плотность, а ядро  $k(x', x)$  – переходную функцию (плотность) цепи Маркова, обрывающейся с вероятностью единица. В этом случае можно реализовать *прямое моделирование* цепи Маркова с начальной плотностью  $\pi(x) = f(x)$  и переходной функцией  $p(x', x) = k(x', x)$ , и тогда  $I_h = \mathbf{E} \left[ \sum_{m=0}^N h(\xi^{(m)}) \right]$ . Однако нередко функции  $f(x)$  и  $k(x', x)$ , имеющие указанный выше вероятностный смысл, являются весьма сложными, и моделирование соответствующей цепи Маркова затруднено. Тогда можно моделировать другую, вспомогательную цепь Маркова с простыми плотностью перехода  $p(x', x)$  и начальной плотностью  $\pi(x)$ , для которых выполнены условия (3.13), и строить весовую оценку по столкновениям (3.12). Последнюю возможность существенно ограничивает наличие особенностей в функциях  $f(x)$  и  $k(x', x)$ , что вынуждает использовать прием, описанный в подразд. 2.2 – включение особенности в плотность.

## 4. Стохастическая тестовая система функций

**4.1. Требования к тестовой системе функций.** Первым делом отметим, что материал данного раздела в более развернутом виде представлен в специальном курсе кафедры вычислительной математики НГУ «Функциональные оценки метода Монте-Карло» [5] (см. также работы [3, 9, 11]).

Важнейшим элементом исследования алгоритмов численного интегрирования (0.1), (0.2), (1.5) и др. является *тестирование*. При этом от-

носителем подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  должны выполняться следующие ТРЕБОВАНИЯ.

1. Чтобы соблюсти «независимость» тестирования, нужно добиться того, чтобы вид (график) функции  $g(\mathbf{x})$  был случайным, заранее непредсказуемым.

2. Для рассмотрения случаев «сложных» подынтегральных функций  $g(\mathbf{x})$  нужно, чтобы имелась возможность варьировать вычислительные затраты на получение одного значения функции.

3. Нужно, чтобы хотя бы в простейших ситуациях (например, в одномерном случае при  $d = 1$ ) можно было проверить расчеты аналитически.

4. В связи с тем, что сходимость многих кубатурных формул обусловлена требованиями вида  $g(\mathbf{x}) \in G(X)$  (здесь  $G(X)$  – некоторое функциональное пространство), должна присутствовать возможность контроля свойств подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  (в частности, свойств гладкости при  $G(X) = C^r(X)$ ).

5. Для изучения теоретической эффективности алгоритмов численного интегрирования нужно, чтобы имелась возможность получать уточненные верхние границы для погрешностей используемых методов для заданных множеств функций  $g(\mathbf{x})$ .

**4.2. Использование численных моделей случайных полей.** В работах [3–5, 9, 11] показано, что достаточно удачным (с точки зрения выполнения сформулированных требований 1–5) оказывается выбор в качестве тестовых функций траекторий спектральных моделей однородных гауссовских случайных полей (см., например, [1, 5]) с конечным спектром вида

$$g(\mathbf{x}) = \tilde{g}(\mathbf{x}) = A^d \Xi_K(\mathbf{x}), \quad \Xi_K(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K a_k [\gamma_k^{(1)} \cos(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}_k) + \gamma_k^{(2)} \sin(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}_k)]. \quad (4.1)$$

Здесь  $\gamma_k^{(i)}$ ,  $i = 1, 2$  – независимые в совокупности стандартные нормальные величины;  $\mathbf{x} \in X$  (чаще всего  $X = Q_d = [0, 1]^d$  – единичный куб). Векторы  $\boldsymbol{\lambda}_k$  выбираются случайно в области  $\Lambda = [0, A]^d$  (или в регулярных подобластях  $\Lambda_k$  равного объема) согласно плотности равномерного распределения

$$p(\boldsymbol{\lambda}) = \left\{ \frac{1}{A^d} \text{ при } \boldsymbol{\lambda} \in [0, A]^d; 0 \text{ иначе} \right\},$$

т. е. используется *рандомизированная модель без разбиения (или с разбиением) спектра* [1, 5]; при этом  $a_k = 1/\sqrt{K}$ .

Заметим также, что пару независимых значений стандартной нормальной случайной величины можно получить по формулам (см., например, [1, 4])

$$\gamma_k^{(1)} = (-2 \ln \alpha_{k,1})^{1/2} \cos 2\pi \alpha_{k,2}, \quad \gamma_k^{(2)} = (-2 \ln \alpha_{k,1})^{1/2} \sin 2\pi \alpha_{k,2}; \quad (4.2)$$

здесь и далее буквой  $\alpha$  – с индексами или без индексов – обозначается *стандартное случайное число*, т. е. выборочное значение случайной величины, равномерно распределенной на интервале  $(0, 1)$  (см., например, [1, 4], а также подразд. 5.1). Тогда соотношение (4.1) принимает вид, удобный для непосредственных вычислений на ЭВМ:

$$\Xi_K(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{K}} \sum_{k=1}^K (-2 \ln \alpha_{k,1})^{1/2} \cos((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{x}) + 2\pi \alpha'_{k,2}), \quad \alpha'_{k,2} = 1 - \alpha_{k,2}. \quad (4.3)$$

**4.3. Выполнение требований 1–5.** Функции вида (4.1), (4.3) удовлетворяют сформулированным требованиям. Действительно, «случайность» получаемых подынтегральных функций (требование 1) очевидна, так как, например, в (4.1) используются реализации стандартных нормальных случайных величин  $\{\gamma_k^{(j)}, j = 1, 2\}$  и случайных точек  $\{\boldsymbol{\lambda}_k\}$ . Идея умножения на константу  $A^d$  в формуле (4.1) пришла после реальных тестовых расчетов [3, 9, 11]. Смысл этой идеи состоит в более тщательном учете больших амплитуд синуса и косинуса при увеличении параметра размера  $A$  спектрального множества  $\Lambda$ . Варьировать затраты на вычисление одного значения функции  $\tilde{g}(\mathbf{x})$  (требование 2) можно за счет изменения числа слагаемых (параметра  $K$ ) в сумме (4.1). Аналитически вычисляется интеграл (требование 3):

$$\int_0^1 \tilde{g}(x) dx = \int_0^1 A \Xi_K(x) dx = \frac{A}{\sqrt{K}} \sum_{k=1}^K \frac{\gamma_k^{(1)} \sin \lambda_k - \gamma_k^{(2)} (\cos \lambda_k - 1)}{\lambda_k};$$

здесь  $d = 1$ . Для этого случая несложно вычисляется и  $q$ -я производная случайной функции  $A \Xi_K(x)$  по  $x$ , которая имеет вид (здесь мы пользуемся формулой (4.3))

$$\tilde{g}^{(q)}(x) = A \Xi_K^{(q)}(x) = A \sum_{k=1}^K \left( \frac{-2 \ln \alpha_{k,1}}{K} \right)^{1/2} \lambda_k^q \cos(\lambda_k x + 2\pi \alpha'_{k,2} + q\pi/2).$$

При достаточно большом  $A$  в этой сумме возникнут большие коэффициенты  $\lambda_k^q$  (во всяком случае, для реализаций  $\lambda_k$ , близких к  $A$ ), причем эти коэффициенты растут с увеличением  $q$  степенным образом. Хотя формально функция (4.2) является бесконечно дифференцируемой по  $x$ , можно считать, что  $\tilde{g}(x) = A\Xi_K(x) \in C^r(X)$ , если  $|A\Xi_K^{(q)}(x)| \leq B$  для  $q \leq r$ ,  $x \in [0, 1]$  и  $|A\Xi_K^{(q)}(x)| > B$  для  $q > r$ , где  $B$  – заданное достаточно большое положительное число (т.е. на практике разумно полагать, что производная не существует, если ее значение по модулю превышает заданный уровень  $B$ ). Варьируя  $A$  и задавая  $B$ , можно добиться принадлежности функции  $\tilde{g}(\mathbf{x}) = A\Xi_K(\mathbf{x})$  пространству  $C^r(X)$  для нужного  $r$  (см. требование 4).

Что касается требования 5, то в работах [3, 9, 11] получены зависимости от параметров  $A$  и  $K$  оценок сверху для средних погрешностей формул прямоугольников, трапеций, Симпсона, а также дискретно-стохастических алгоритмов численного интегрирования, представленных в данном пособии. В тех же работах указана возможность расширения класса тестовых функций за счет использования моделей негауссовских случайных полей.

## 5. Методы численного моделирования случайных векторов

**5.1. Стандартное случайное число.** Сразу отметим, что материал данного раздела в более развернутом виде представлен в специальном курсе кафедры вычислительной математики НГУ «Дополнительные сведения о численном моделировании случайных элементов» [4] (см. также главу 1 учебника [1]).

Из предыдущих разделов следует, что ключевым моментом реализации метода Монте-Карло является моделирование (или реализация выборочных значений) случайных величин и случайных векторов на ЭВМ, которое состоит из двух этапов:

1) *реализуются значения  $\alpha_1, \dots, \alpha_k$  стандартного случайного числа  $\alpha$ , равномерно распределенного в интервале  $(0, 1)$ , с помощью специальной программы или устройства, которое называется **генератором случайных (псевдослучайных) чисел**;*

2) *с помощью некоторых преобразований полученных чисел  $\{\alpha_j\}$  вычисляются значения случайных величин с заданными законами распределения.*

Наличие надежного генератора стандартных случайных чисел  $\alpha$  позволяет получать выборочные значения случайных величин (одномерных и многомерных) с произвольными законами распределения. Особое внимание в этом разделе будет уделено алгоритмам (в том числе, дискретно-стохастическим) реализации величин вида  $\zeta = q(\xi)$  (см. соотношение (1.2)), где  $q(\mathbf{x})$  – неслучайная функция многих переменных, а  $\xi$  – многомерный случайный вектор.

**5.2. Моделирование дискретного распределения.** Рассмотрим вопрос о моделировании дискретной случайной величины  $\xi$  с конечным числом значений  $x_1, \dots, x_N$  и распределением вероятностей

$$\mathbf{P}(\xi = x_i) = p_i; \quad p_i > 0, \quad \sum_{i=1}^N p_i = 1. \quad (5.1)$$

В силу соотношений (5.1), реализация того или иного значения  $x_m$  случайной величины  $\xi$  означает розыгрыш события с вероятностью  $p_m$ . Кроме того, из соотношений (5.1) 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. Из свойств стандартного случайного числа (см., например, [1]) следует, что  $\mathbf{P}(\alpha \in \Delta_m) = p_m$ . 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 переписывания.

**АЛГОРИТМ 5.1.** *Реализуем значение  $Q := \alpha$  и полагаем  $t := 1$ . Производим переписывание*

$$Q := Q - p_m \quad (5.2)$$

*(т. е. заносим новое значение  $(\alpha - p_1)$  в ячейку  $Q$ ). Если новое  $Q$  не положительно, то в качестве  $t$  выбираем текущее его значение и*

полагаем  $\xi = x_m$ , в противном случае производим переприсваивания  $m := m+1$  и (5.2) и вновь производим проверку  $Q$  на положительность и т. д.

В данном пособии в основном будут использоваться целочисленные дискретные случайные величины  $\eta$ , для которых

$$x_i = i, \quad \mathbf{P}(\eta = i) = p_i; \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (5.3)$$

Алгоритм 5.1 в этом случае имеет следующий вид.

**АЛГОРИТМ 5.2.** *Реализуем значение  $Q := \alpha$  и полагаем  $m := 1$ . Производим переприсваивание (5.2). Если новое значение  $Q$  не положительно, то полагаем  $\eta = m$ , в противном случае производим переприсваивания  $m := m + 1$  и (5.2) и вновь производим проверку  $Q$  на положительность и т. д.*

Подсчет средних затрат алгоритмов 5.1 и 5.2, оптимизация этих алгоритмов, их применение для случая малого и большого (в том числе, счетного) числа вероятностей  $N$  подробно описаны в [1, 4].

Реализация случайной величины  $\xi$  с конечным числом значений заметно упрощается, когда все значения  $x_1, \dots, x_N$  равновероятны, т. е. в соотношении (5.1) все  $p_i$  равны  $1/N$  (такое распределение вероятностей называется *дискретным равномерным*).

**АЛГОРИТМ 5.3.** *Реализуем выборочное значение  $\alpha$  стандартного случайного числа и полагаем*

$$m = [\alpha N] + 1 = [\alpha N + 1] \quad (5.4)$$

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

Алгоритм 5.3 позволяет построить следующую эффективную модификацию алгоритмов 5.1 и 5.2, которая носит название *квантильный метод* (см., например, [1, 4]).

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*. 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 алгоритме вида 5.1, 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 5.4.** 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 (5.4):  $j = [K\alpha + 1]$ .

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

Тестовые вычисления показали, что при  $N \leq 3M_0$  (здесь через  $M_0$  обозначен размер максимального массива для заданного компьютера и выбранного языка программирования) следует выбирать число  $K$  квантилей  $[(j-1)/K, j/K)$  так, чтобы выполнялось соотношение  $N/K \approx 3$  (при этом трудоемкость алгоритма 5.4 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  $K \approx M_0$ .

Эффективные версии квантильного метода можно строить и для относительно малого числа вероятностей. Пусть  $1/p_{min} < M_0$  (здесь  $p_{min} = \min(p_1, \dots, p_N)$ ). Тогда можно взять число квантилей, равное  $K = [1/p_{min}] + 1$ . При этом для реализации третьего пункта алгоритма 5.4 потребуется не более одного вычитания типа (5.2).

Заметим также, что в целом ряде ситуаций целесообразно использовать вместо квантильного метода алгоритм Уолкера или даже бинарный поиск (см., например, [1]), однако алгоритм 2.6 является более универсальным и простым для реализации на ЭВМ.

**5.3. Метод обратной функции распределения.** 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  $F(u) = \mathbf{P}(\xi < u)$  непрерывна и строго возрастает при  $u \in (a, b)$ . Более того, будем предполагать существование непрерывной или кусочно-непрерывной плотности распределения  $f(x)$ :

$$F(u) = \int_{-\infty}^u f(x) dx, \quad (5.5)$$

положительной на интервале  $(a, b)$  (и равной нулю вне этого интервала). Сформулируем *стандартный алгоритм (метод обратной функции распределения)* (см., например, [1]).

АЛГОРИТМ 5.5. Для численной реализации (моделирования) выборочного значения  $\xi \in (a, b)$  используем формулу

$$\xi = F^{-1}(\alpha); \quad (5.6)$$

здесь  $\alpha$  – стандартное случайное число.

Алгоритм 5.5 на первый взгляд закрывает вопрос о моделировании случайных величин  $\xi \in (a, b)$ . Однако остается одна важная «техническая» проблема, связанная с использованием формул вида (5.6) в реальных вычислительных программах: представить зависимость  $\psi(u) = F^{-1}(u)$  в виде простой композиции элементарных функций так, чтобы вычисление значения  $\psi(u)$  могло быть эффективно реализовано на ЭВМ. В случае, когда эта проблема разрешима, распределение случайной величины  $\xi$  и соответствующую формулу (5.6) называют *элементарными* (с точки зрения возможности численного моделирования) [1, 4].

С учетом того что величины  $\xi$  и  $F^{-1}(\alpha)$  принадлежат интервалу  $(a, b)$ , а функция  $F(u)$  является возрастающей на этом интервале, перепишем (5.6) в эквивалентной форме  $F(\xi) = \alpha$ . В свою очередь, в силу соотношения (5.5), последнее равенство можно переписать в виде

$$\int_a^\xi f(x) dx = \alpha. \quad (5.7)$$

Распределение случайной величины  $\xi$  является элементарным, если решение уравнения (5.7) представимо в виде  $\xi = \psi(\alpha)$ , где  $\psi(u)$  – простая композиция элементарных функций, и вычисление значения  $\psi(u)$  на ЭВМ реализуется достаточно эффективно. Например, для *экспоненциального распределения* с плотностью  $f(x) = \lambda e^{-\lambda x}$ ;  $x > 0$ ,  $\lambda > 0$  решение уравнения (5.7) приводит к формуле  $\xi = -\ln \alpha' / \lambda$  (здесь  $\alpha' = 1 - \alpha$ ) – см., например, [1].

Уравнение (5.7) может быть неразрешимым по двум причинам. Первая причина: интеграл в левой части равенства (5.7) не берется (т.е. соответствующая первообразная не выражается в элементарных функциях). Вторая причина: даже если интеграл берется, получаемое уравнение может быть неразрешимым (в элементарных функциях) относительно  $\xi$ . Несмотря на перечисленные трудности, можно построить неограниченное количество примеров элементарных распределений (эту возможность дает, в частности, использование леммы о замене случайных переменных) [4].





Обоснование формулы (5.8) и алгоритма 5.6 осуществляется индукцией по размерности  $d$ . При этом индуктивный переход основан на рассмотрении двумерного вектора  $(\xi, \eta)$  (случайные компоненты  $\xi$  и  $\eta$  могут быть как скалярными, так и векторными) с плотностью распределения  $f(x, y)$ , для которой справедливы два представления:

$$f(x, y) = f_\xi(x)f_\eta(y|x); f_\xi(x) = \int f(x, y) dy, f_\eta(y|x) = \frac{f(x, y)}{f_\xi(x)}; \quad (5.9)$$

$$f(x, y) = f_\eta(y)f_\xi(x|y); f_\eta(y) = \int f(x, y) dx, f_\xi(x|y) = \frac{f(x, y)}{f_\eta(y)}. \quad (5.10)$$

Для представления (5.9) алгоритм 5.6 выглядит следующим образом: сначала реализуется выборочное значение  $\xi_0$  согласно плотности  $f_\xi(x)$ , а затем моделируется выборочное значение  $\eta_0$  согласно плотности  $f(\xi_0, y)/f_\xi(\xi_0)$ . Аналогично для представления (5.10) сначала реализуется выборочное значение  $\eta_0$  согласно плотности  $f_\eta(y)$ , а затем моделируется выборочное значение  $\xi_0$  согласно плотности  $f(x, \eta_0)/f_\eta(\eta_0)$ .

При моделировании случайного вектора  $\xi$  основной проблемой является выбор того из  $d!$  разложений (5.8), для которого возможно построение наиболее эффективных алгоритмов последовательной реализации выборочных значений  $\{\xi^{(i_j)}\}$ . Уже для двумерного случая часто можно наблюдать следующую ситуацию: одно из разложений (5.9) или (5.10) позволяет построить эффективные алгоритмы получения выборочных значений  $\xi_0$  и  $\eta_0$  компонент  $\xi$  и  $\eta$ , а второе разложение не дает таких алгоритмов [1, 4]. Поэтому во многих приложениях, связанных с конструированием вероятностных плотностей, компоненты вектора  $(\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$  берутся независимыми, при этом функция  $f(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$  имеет вид

$$f(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) = f_1(x^{(1)}) \times f_2(x^{(2)}) \times \dots \times f_d(x^{(d)}), \quad (5.11)$$

т. е. условные плотности в (5.8) превращаются в «безусловные», и разница в представлениях вида (5.8) состоит лишь в порядке перемножения плотностей  $\{f_i(x^{(i)})\}$ . При этом каждая случайная компонента  $\xi^{(i)}$  моделируется согласно своей плотности  $f_i(x)$ , причем порядок моделирования, в отличие от алгоритма 5.6, произволен.

Для приближенного решения многомерных (в том числе, бесконечномерных) задач численного интегрирования (см., в частности, под-

разд. 3.2) рассматриваются (конструируются)  $(m + 1)$ -мерные случайные векторы  $\tilde{\xi}_m = (\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m)})$  с плотностью распределения вида

$$\tilde{f} \left( x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(m)} \right) = \pi(x^{(0)})p_1(x^{(1)}|x^{(0)})p_2(x^{(2)}|x^{(1)}) \dots p_m(x^{(m)}|x^{(m-1)}) \quad (5.12)$$

(см. соотношение (3.7)). Представление (5.12) отражает то обстоятельство, что вектор  $\tilde{\xi}_m$  обладает *марковским свойством*: в одном из представлений вида (5.8) (конкретнее, для тождественной перестановки  $(i_0, i_1, \dots, i_m) = (0, 1, \dots, m)$ ) распределение случайной компоненты  $\xi^{(j)}$  полностью определяется значением предыдущей компоненты  $\xi^{(j-1)}$ :

$$f_j \left( x|x^{(0)}, \dots, x^{(j-1)} \right) \equiv p_j \left( x|x^{(j-1)} \right).$$

Таким образом, вектор  $(\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m)})$  представляет собой начальный отрезок длины  $(m + 1)$  цепи Маркова с начальной плотностью  $\pi(x)$  и переходной плотностью  $p_j(x', x) = p_j(x|\xi^{(j-1)} = x')$ . В случае, когда переходные плотности  $p_j(x', x)$  одинаковы для всех  $j = 1, 2, \dots$ , цепь Маркова  $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \dots$  является однородной. Численное моделирование начальных выборочных значений  $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m)}$  траектории цепи Маркова происходит согласно следующему варианту алгоритма 5.6 (см. также подразд. 3.2).

**АЛГОРИТМ 5.7.** *Реализуем выборочное значение случайной компоненты  $\xi^{(0)}$  согласно начальной плотности  $\pi(x)$ . Затем последовательно для  $j = 1, 2, \dots, m$  реализуем выборочные значения случайных компонент  $\xi^{(j)}$  согласно переходным плотностям  $p_j(\xi^{(j-1)}, x)$ .*

Для однородной цепи Маркова розыгрыш компонент  $\xi^{(j)}$  в алгоритме 5.7 происходит согласно одинаковой для всех  $j = 1, \dots, m$  переходной плотности  $p(x', x)$ . Кроме того, в приложениях, связанных с решением интегральных уравнений, число  $m$  является случайным (цепь «обрывается»), и в алгоритмы типа 5.7 включаются специальные приемы для реализации выборочного значения  $m$  для данной траектории (см. подразд. 3.2).

**5.5. Методы интегральной и дискретной суперпозиции.** Пусть требуется построить алгоритм численной реализации выборочных значений  $k_1$ -мерного случайного вектора  $\xi$ , плотность которого может быть представлена в виде интеграла, зависящего от многомерного параметра  $\mathbf{x} \in R^{k_1}$ :

$$f(\mathbf{x}) = \int_{R^{k_2}} p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (5.13)$$

при этом:

- 1) функция  $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  является плотностью  $(k_1 + k_2)$ -мерного вектора  $(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$ ;
- 2) в соответствующей формуле полной плотности вероятностей

$$f(\mathbf{x}) = \int_{R^{k_2}} f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (5.14)$$

(см. соотношения (5.9), (5.10)) для выборочных значений  $\boldsymbol{\xi}_0$  и  $\boldsymbol{\eta}_0$  случайных векторов  $\boldsymbol{\xi}$  и  $\boldsymbol{\eta}$  с плотностями  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})$  и  $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  имеются эффективные алгоритмы (формулы) численного моделирования вида  $\boldsymbol{\eta}_0 = \psi_{\boldsymbol{\eta}}(\bar{\alpha}_1)$ ,  $\boldsymbol{\xi}_0 = \psi_{\boldsymbol{\xi}}(\bar{\alpha}_2; \mathbf{y})$ , где  $\bar{\alpha}_i$  – соответствующие наборы стандартных случайных чисел.

При сделанных предположениях можно использовать алгоритм метода суперпозиции (см., например, [1]).

**АЛГОРИТМ 5.8.** Реализуем выборочное значение  $\boldsymbol{\xi}_0$  случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$ , имеющего плотность распределения вида (5.14), согласно алгоритму (формуле)  $\boldsymbol{\xi}_0 = \psi_{\boldsymbol{\xi}}(\bar{\alpha}_2; \boldsymbol{\eta}_0)$ , где выборочное значение  $\boldsymbol{\eta}_0$  вектора  $\boldsymbol{\eta}$  моделируется согласно алгоритму (формуле)  $\boldsymbol{\eta}_0 = \psi_{\boldsymbol{\eta}}(\bar{\alpha}_1)$ .

Ситуация, когда плотность моделируемого распределения представляет собой интеграл (5.13), 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 формула (5.14) имеет вид

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(\mathbf{x}); \quad f_i(\mathbf{x}) = f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}|\eta = i). \quad (5.15)$$

Согласно требованиям, при которых применим алгоритм 5.8, должны существовать эффективные алгоритмы получения выборочных значений случайной величины  $\eta$  (в рассматриваемом частном случае следует применять стандартный алгоритм 5.2 моделирования дискретного распределения или его модификацию – квантильный метод – алгоритм 5.3) и вектора  $\boldsymbol{\xi}$  согласно плотности  $f_i(\mathbf{x})$  для любого  $i$ . Таким образом, соотношение (5.15) представляет собой взвешенную сумму (смесь) эффективно моделируемых плотностей  $\{f_i(\mathbf{x})\}$ . Метод суперпозиции для плотности (5.15) формулируется следующим образом.

**АЛГОРИТМ 5.9. 1.** Реализовав выборочное значение  $\alpha_1$  стандартного случайного числа, согласно вероятностям  $\{p_i\}$ , используя алго-

ритм 5.2 или его модификации (например, алгоритм 5.3), выбираем номер  $\eta_0 = m$ .

2. Реализуем выборочное значение  $\xi_0$  случайного вектора  $\xi$  согласно плотности  $f_m(\mathbf{x})$ .

Алгоритм 5.9 называется *методом дискретной суперпозиции* или просто *методом суперпозиции* (соответственно, алгоритм 5.8 называют *методом интегральной суперпозиции*) [1, 4].

**5.6. Метод исключения.** Пусть требуется моделировать случайный вектор (случайную величину)  $\xi$ , распределенный в области  $X \in R^d$  согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ , которая пропорциональна заданной неотрицательной функции  $g(\mathbf{x})$ , т. е.

$$f(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{G}, \quad \bar{G} = \int_X g(\mathbf{x}) dx. \quad (5.16)$$

Предполагается, что ни один из рассмотренных ранее методов не дает эффективного алгоритма моделирования вектора  $\xi$ . Выберем мажоранту  $g_1(\mathbf{x})$  функции  $g(\mathbf{x})$  такую, что  $g(\mathbf{x}) \leq g_1(\mathbf{x})$  при  $\mathbf{x} \in X$ . Первое требование к мажоранте  $g_1(\mathbf{x})$  таково, что для плотности

$$f_1(\mathbf{x}) = \frac{g_1(\mathbf{x})}{G_1}, \quad \bar{G}_1 = \int_X g_1(\mathbf{x}) dx \quad (5.17)$$

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 5.6 (здесь  $\bar{\alpha}_1$  – соответствующий набор стандартных случайных чисел). Это дает *мажорантный метод исключения*.

АЛГОРИТМ 5.10. 1. Реализуем выборочное значение  $\xi_1$  согласно плотности (5.17):  $\xi_1 = \psi_1(\bar{\alpha}_1)$ , а также значение  $\eta = \alpha_2 g_1(\xi_1)$ .

2. Если

$$\eta < g(\xi_1), \quad (5.18)$$

то в качестве искомого выборочного значения принимаем  $\xi = \xi_1$ . В случае, когда неравенство (5.18) не выполнено, повторяем п. 1 данного алгоритма и т. д.

Несложно показать (см., например, [1, 4]), что точка  $(\xi_1, \eta)$ , реализуемая в п. 1 алгоритма 5.10, равномерно распределена в «подграфике»  $G_1 = \{\mathbf{x} \in X, 0 < y < g_1(\mathbf{x})\}$  функции  $g_1(\mathbf{x})$ . Если выполнено условие (5.18), то пара  $(\xi_1, \eta)$  принадлежит области  $G = \{\mathbf{x} \in X, 0 < y < g(\mathbf{x})\}$  и равномерно распределена в этой области, и тогда величину  $\xi_1$  можно

принять в качестве искомого выборочного значения случайной величины  $\xi$ , распределенной согласно плотности (5.16) (см., например, [1, 4]).

Трудоемкость алгоритма 5.10 пропорциональна среднему числу реализаций пары  $(\xi_1, \eta)$  до выполнения неравенства (5.18). Это число равно

$$s = \frac{1}{\mathbf{P}((\xi_1, \eta) \in G)} = \frac{\bar{G}_1}{\bar{G}}$$

(см., например, [1, 4]). Таким образом, мажоранту  $g_1(\mathbf{x})$  функции  $g(\mathbf{x})$  следует подбирать так, чтобы объемы  $\bar{G}_1$  и  $\bar{G}$  были близки; это выполнено при  $g_1(\mathbf{x}) \gtrsim g(\mathbf{x})$ .

**5.7. Двусторонний метод исключения.** Следующая модификация алгоритма 5.10 эффективна в достаточно распространенном случае, когда требуется моделировать выборочное значение случайного вектора  $\xi$ , плотность распределения которого пропорциональна функции  $g(\mathbf{x})$ , вычисление значений которой весьма трудоемко. В этом случае помимо мажоранты  $g_1(\mathbf{x})$  строим миноранту  $g_2(\mathbf{x})$  такую, что

$$g_2(\mathbf{x}) \leq g(\mathbf{x}) \leq g_1(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x} \in X. \quad (5.19)$$

**АЛГОРИТМ 5.11.** 1). Реализуем выборочное значение  $\xi_1 = \psi_1(\bar{\alpha}_1)$  согласно плотности (5.17), а также значение  $\eta = \alpha_2 g_1(\xi_1)$ .

2). Вместо неравенства (5.18) проверяем сначала соотношение  $\eta < g_2(\xi_1)$ . Если оно выполнено, то пара  $(\xi_1, \eta)$  принадлежит «подграфу» функции  $g_2(\mathbf{x})$ , 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 (5.18). Если оно выполнено, то  $\xi = \xi_1$ , иначе повторяется п. 1 данного алгоритма и т. д.

В связи с соотношением (5.19) алгоритм 5.11 можно называть *двусторонним методом исключения*. В случае, когда все три функции из неравенства (5.19) близки, а миноранта  $g_2(\mathbf{x})$  и мажоранта  $g_1(\mathbf{x})$  легко вычислимы, проверка (5.18), связанная с трудоемким вычислением значения  $g(\xi_1)$ , будет происходить относительно редко, и двусторонний метод может дать существенный выигрыш по сравнению с «односторонним» алгоритмом 5.10.

Проведенные нами исследования (см. работы [3, 9]) показали, что в качестве функций  $g_2(\mathbf{x})$  и  $g_1(\mathbf{x})$  целесообразно использовать кусочно-полиномиальные (в частности, кусочно-постоянные и кусочно-линейные) приближения снизу и сверху для функции  $g(\mathbf{x})$ . В этом случае при

реализации первых пунктов алгоритмов 5.10 и 5.11 нужно использовать специальные алгоритмы метода суперпозиции для «моделируемых» функциональных базисов (см. далее разд. 6).

**5.8. Другие специальные методы моделирования непрерывных случайных величин.** Описанные в подразд. 5.5–5.7 методы суперпозиции и исключения являются, с одной стороны, специальными (отличными от стандартных алгоритмов 5.5 и 5.6), а с другой стороны, обладают определенными чертами «универсализма» (т. е. они применимы для достаточно широких классов распределений).

Существует также немало примеров эффективных «чисто специальных» алгоритмов моделирования непрерывных случайных величин, построенных на основании особых вероятностных свойств соответствующих распределений (см., например, [1, 4]). Например, пара формул (4.2) дает эффективный алгоритм моделирования стандартной нормальной случайной величины  $\gamma$  с плотностью

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

Это распределение не является элементарным: интеграл в левой части соответствующего уравнения (5.7) не берется.

## 6. Использование кусочно-полиномиальных приближений функций в методах Монте-Карло. Моделируемые базисы

**6.1. Полиномиальные приближения функций.** В этом разделе рассмотрены алгоритмы метода Монте-Карло, в которых используются полиномиальные и кусочно-полиномиальные приближения функций вида

$$g(\mathbf{x}) \approx L_M g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w_i(\mathbf{g}) \chi_i(\mathbf{x}) \quad (6.1)$$

на компактном множестве  $X \subset R^d$ . В формуле (6.1)  $L_M g(\mathbf{x})$  обозначает аппроксимацию (или интерполяцию) функции  $g(\mathbf{x})$  на сетке  $X^{(M)} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$ . Базисные полиномиальные функции  $\Xi^{(M)} = \{\chi_1, \dots, \chi_M\}$  и коэффициенты  $W^{(M)}(\mathbf{g}) = \{w_1(\mathbf{g}), \dots, w_M(\mathbf{g})\}$  определенным образом связаны с узлами сетки  $X^{(M)}$ . В частности, коэффициенты  $W^{(M)}(\mathbf{g})$  являются, как правило, комбинациями значений  $\mathbf{g} = (g(\mathbf{x}_1), \dots, g(\mathbf{x}_M))$ ;

чаще всего

$$w_i(\mathbf{g}) = g(\mathbf{x}_i), \quad i = 1, \dots, M. \quad (6.2)$$

Прежде всего рассмотрим примеры ситуаций, в которых нужно решать следующую

**ЗАДАЧА 6.1.** Построить алгоритм численного моделирования случайного вектора  $\xi$ , имеющего плотность распределения

$$f(\mathbf{x}) = C L_M g(\mathbf{x}), \quad C = 1/c, \quad c = \int_{R^d} L_M g(\mathbf{y}) d\mathbf{y}; \quad g(\mathbf{x}) \geq 0. \quad (6.3)$$

**6.2. Использование гистограммы и полигона частот.** Пусть параметр  $\theta$  моделируемого физического процесса  $U$  случаен и имеется возможность получить выборочные значения  $\theta_1^{(U)}, \dots, \theta_k^{(U)}$  этого параметра с помощью проведения достаточно дорогих экспериментов. Пусть также  $V_U$  является математической моделью, описывающей процесс  $U$  и включающей параметр  $\theta$ , причем численная реализация модели  $V_U$  требует моделирования большой выборки

$$\theta_1^{(V_U)}, \dots, \theta_K^{(V_U)}, \quad \text{где } K \gg k. \quad (6.4)$$

В этом случае можно разделить интервал  $[a, b]$ ,  $a = \min(\theta_1^{(U)}, \dots, \theta_k^{(U)})$ ,  $b = \max(\theta_1^{(U)}, \dots, \theta_k^{(U)})$  на полуинтервалы  $[z_i, z_{i+1})$ ;  $i = 1, \dots, M - 1$ ;  $a = z_1 < z_2 < \dots < z_M = b$  и вычислить частоты  $\nu_i^* = m_i/k$  (здесь  $m_i$  есть число значений  $\{\theta_j^{(U)}\}$ , попавших в  $i$ -й полуинтервал). Пусть  $x_i = (z_i + z_{i+1})/2$  и  $g(x_i) = \nu_i^*/(z_{i+1} - z_i)$ . Тогда плотность вида (6.3) может быть использована для реализации выборки (6.4). Для кусочно-постоянного случая имеем  $\chi_i(x) \equiv 1$  при  $x \in [z_i, z_{i+1})$ ;  $w_i(\mathbf{g}) = g(x_i)$  и  $C = 1$ ; при этом функция (6.3) называется *гистограммой* [12]. Соответствующая кусочно-линейная версия функции (6.3) называется *полигоном частот* [12].

**6.3. Использование аппроксимаций функций в методе исключения.** В алгоритмах метода исключения (алгоритм 5.10) и двустороннего метода исключения (алгоритм 5.11) требуется строить мажоранту  $g_1(\mathbf{x})$  и миноранту  $g_2(\mathbf{x})$  функции  $g(\mathbf{x})$ , пропорциональной плотности  $f(\mathbf{x})$ , для которой не удастся построить эффективного алгоритма реализации соответствующих выборочных значений. Оптимизация алгоритмов 5.10 и 5.11 связана с выбором функций  $g_1(\mathbf{x}), g_2(\mathbf{x})$ , близких к функции  $g(\mathbf{x})$ . Для построения таких функций целесообразно использовать приближения «сверху» и «снизу» для плотности  $f(\mathbf{x})$  (здесь,



особенно в многомерном случае, эффективными оказываются кусочно-полиномиальные, в частности, кусочно-постоянные аппроксимации); в этом случае плотность  $f_1(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x})/\bar{G}_1$  имеет вид (6.3).

**6.4. Приближение «сложных» плотностей.** В случае, когда функция  $g(\mathbf{x})$  пропорциональна «немоделируемой» плотности  $\tilde{f}(\mathbf{x})$  случайной величины или вектора  $\boldsymbol{\theta}$ , кроме мажорантного метода исключения можно использовать следующий прием. Выберем «близкую» к  $\tilde{f}(\mathbf{x})$  плотность (6.3) и будем моделировать соответствующий случайный вектор  $\boldsymbol{\xi}$  вместо  $\boldsymbol{\theta}$ . При этом приближение (6.1) должно обладать достаточно хорошими аппроксимационными свойствами, т. е. расстояние  $\rho_{B(X)}(g, L_M g)$  должно быть мало; здесь  $\rho_{B(X)}$  – метрика функционального пространства  $B(X)$ . Здесь уместно заметить, что имеется хорошо развитая вероятностная теория приближения плотностей, в которой в основном изучается случай пространства  $B(X) = L_1(X)$  (см., в частности, [13]). Однако метрика этого пространства является недостаточно «сильной» для ряда приложений теории методов Монте-Карло (здесь требуются метрики пространств  $L_2(X)$ ,  $C(X)$  и даже  $W_2^r(X)$  и  $C^r(X)$ ) – см., в частности, работы [1, 3, 5, 9, 14], а также разд. 7, 10, 12, 19, 20.

**6.5. Использование приближений функций в численном стохастическом и дискретно-стохастическом интегрировании. Функциональные оценки.** Рассмотрим стандартный алгоритм метода Монте-Карло (1.5) приближенного вычисления многократного интеграла  $I = \int g(\mathbf{x}) dx$ . Напомним, что при оптимизации этого алгоритма следует стремиться к тому, чтобы величина трудоемкости (1.9) была наименьшей. Согласно принципу выборки по важности (см. подразд. 2.1), уменьшить дисперсию  $\mathbf{D}\zeta$  из соотношения (1.9) можно за счет выбора плотности  $f(\mathbf{x})$ , близкой к  $H|g(\mathbf{x})|$  (здесь  $H$  – соответствующая нормирующая константа) – см. соотношение (2.5). Для неотрицательной функции  $g(\mathbf{x})$  в качестве плотности  $f(\mathbf{x})$  можно выбрать функцию (6.3); при этом получаем *дискретно-стохастическую версию выборки по важности* (этот алгоритм подробно изучен далее в разд. 10; см. также работы [1, 3, 5, 14]). В свою очередь, к уменьшению величины  $t$  может привести использование *взвешенной равномерной выборки* (см., например, [15, 16]):

$$I \approx \sum_{i=1}^n q(\boldsymbol{\alpha}_i) / \sum_{i=1}^n f(\boldsymbol{\alpha}_i).$$

Здесь интеграл  $I$  берется по единичному кубу  $Q_d$ , и векторы  $\{\boldsymbol{\alpha}_i\}$  равно-

мерно распределены в  $Q_d$ . Дискретно-стохастическая версия взвешенной равномерной выборки рассмотрена далее в разд. 19 (см. также работы [9, 17]).

Другой способ понижения дисперсии дает *метод выделения главной части* (см., например, [1]), идея которого состоит в том, чтобы выбрать функцию  $g_0(\mathbf{x})$ , близкую к подинтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  и такую, что интеграл  $I_0$  берется аналитически; при этом искомый интеграл представим в виде суммы  $I = I_0 + \int (g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x})) d\mathbf{x}$ , и метод Монте-Карло (1.5) применяется для оценки второго слагаемого этой суммы. Если взять  $g_0(\mathbf{x}) = L_M g(\mathbf{x})$  (см. соотношение (6.1)), то получается (в ряде случаев весьма эффективная) *дискретно-стохастическая версия выборки выделения главной части* (этот алгоритм подробно изучен далее в разд. 12; см. также работы [3, 9, 14]).

Еще один дискретно-стохастический метод уменьшения дисперсии – *метод Монте-Карло с поправочным множителем* [16] связан с использованием оценки

$$I \approx \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q(\xi_i) \right) \times \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n H(\xi_i) \right),$$

где  $H(\mathbf{x}) = 2 - CL_M q(\mathbf{x})$  (этот алгоритм изучен далее в разд. 20; см. также работы [9, 17]).

К существенному уменьшения величины  $t$  из соотношения (1.9) может привести использование *дискретно-стохастической версии двустороннего геометрического метода Монте-Карло*, в которой, по аналогии с двусторонним методом исключения, строятся кусочно-полиномиальные приближения (6.1) «сверху» и «снизу» для сложно вычисляемой подинтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  (этот алгоритм подробно изучен далее в разд. 9; см. также работу [9]).

Приближения функций (6.1) используются также при реализации так называемых *дискретно-стохастических численных процедур приближения функций, заданных в интегральной форме* [3, 5]. Основными примерами таких функций являются интеграл, зависящий от параметра, и решение интегрального уравнения второго рода. Дискретно-стохастический метод включает в себя предварительную дискретизацию задачи (введение сетки), оценку решения в узлах сетки методом Монте-Карло с последующим конечно-элементным восполнением решения по полученным приближенным значениям в узлах сетки. В этих задачах особенно важным является свойство *устойчивости* соответствующего приближения (6.1).

**6.6. Использование метода суперпозиции при решении задачи 6.1.** Пусть для плотности (6.3) выполнены соотношения

$$\chi_i(\mathbf{x}) \geq 0 \text{ для } \mathbf{x} \in R^d \text{ и } w_i(\mathbf{g}) \geq 0, \quad i = 1, \dots, M. \quad (6.5)$$

Тогда можно записать плотность (6.3) в виде

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M P_i f_i(\mathbf{x}); \quad f_i(\mathbf{x}) = \frac{\chi_i(\mathbf{x})}{Y_i}, \quad Y_i = \int \chi_i(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad P_i = C w_i(\mathbf{g}) Y_i. \quad (6.6)$$

Выберем функциональный базис  $\Xi^{(M)}$  таким образом, что для случайных величин  $\xi_i$ , распределенных согласно плотностям  $\{f_i(\mathbf{x})\}$  из (6.6), имеются эффективные алгоритмы численного статистического моделирования. Тогда возникает следующий алгоритм метода суперпозиции (см. алгоритм 5.9).

**АЛГОРИТМ 6.1.** *Согласно вероятностям  $\{P_i\}$  из (6.6) выбираем номер  $m$  (здесь  $P_i = \mathbf{P}(m = i)$ ). Реализуем  $\xi$  согласно плотности  $f_m(\mathbf{x})$ .*

Количество узлов сетки  $M$  может быть достаточно велико и затраты на поиск номера  $m$  могут быть также велики. В этом случае целесообразно использование квантильного метода (см. алгоритм 5.4).

**6.7. Выбор функционального базиса.** Суммируя соображения подразделов 6.1–6.6, сформулируем ТРЕБОВАНИЯ к функциональному базису  $\Xi^{(M)}$ .

1. *Базисные функции  $\chi_i(\mathbf{x})$  и коэффициенты  $\{w_i(\mathbf{g})\}$  неотрицательны (см. соотношение (6.5)).*
2. *Выборочные значения, распределенные согласно соответствующим плотностям  $\{f_i(\mathbf{x})\}$ , эффективно численно реализуемы.*
3. *Функция  $f(\mathbf{x})$  близка к функции  $Hg(\mathbf{x})$  в некоторой функциональной норме.*
4. *Аппроксимация (6.1) устойчива.*

Требования 3 и 4 являются «традиционными» для теории аппроксимации функций (см., например, [2]), а требования 1, 2 специфичны именно для перечисленных выше приложений. Будем называть *моделируемыми* функциональные базисы  $\Xi^{(M)}$ , удовлетворяющие требованиям 1 и 2.

Нами был проведен подробный анализ известных функциональных базисов с точки зрения сформулированных требований 1–4 [3, 9]. Оказалось, что далеко не все «классические» аппроксимационные базисы

являются моделируемыми. Например, функции *базиса Лагранжа*

$$\chi_i(x) = \prod_{j=1, j \neq i}^M (x - x_j)/(x_i - x_j), \quad x \in R$$

являются знакопеременными (т. е. требования 1 и 2 не выполняются). Обладая весьма хорошими аппроксимационными свойствами, аппроксимация Лагранжа имеет весьма неважные свойства устойчивости (особенно для равномерной сетки) [2, 18]. Аналогичные недостатки имеют *тригонометрические базисы* [2, 19].

## 7. Моделируемость аппроксимации Стренга–Фикса

**7.1. Построение аппроксимации Стренга–Фикса.** Наиболее удачной для использования в дискретно-стохастических численных процедурах (с точки зрения сформулированных в подразд. 6.7 требований 1–4) оказалась конечно-элементная *аппроксимация Стренга–Фикса*. В одномерном случае хорошие свойства моделируемости имеет *базис Бернштейна* (см. далее разд. 8).

Опишем сначала аппроксимацию Стренга–Фикса [20, 21]. Для простоты в дальнейшем в качестве множества  $X \subset R^d$ , на котором рассматривается приближение (6.1) функции  $g(\mathbf{x})$ , возьмем прямоугольный параллелепипед

$$X = \left\{ \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) \in R^d \mid a_k \leq x^{(k)} \leq b_k, k = 1, \dots, d \right\};$$

во многих случаях далее будет выполнено  $a_k = 0$ ,  $b_k = 1$ ;  $k = 1, \dots, d$  (т. е.  $X = Q_d$  – единичный куб). Предполагается также, что в  $R^d$  задана равномерная прямоугольная сетка, и каждому узлу  $\mathbf{x}_i$  из  $X^{(M)}$  можно сопоставить мультииндекс  $\mathbf{j}_{(i)} = (j_{(i)}^{(1)}, \dots, j_{(i)}^{(d)})$  так, что  $\mathbf{x}_i = (j_{(i)}^{(1)}h, \dots, j_{(i)}^{(d)}h)$ , где  $h$  – шаг сетки, а  $j_{(i)}^{(s)}$  – целые числа. Аппроксимация Стренга–Фикса определяется базисом

$$\chi_i(\mathbf{x}) = \chi_{(j_{(i)}^{(1)}, \dots, j_{(i)}^{(d)})}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) = \chi_{j_{(i)}^{(1)}}(x^{(1)}) \times \dots \times \chi_{j_{(i)}^{(d)}}(x^{(d)}), \quad (7.1)$$

где  $\chi_{j_{(i)}^{(m)}}(x^{(m)}) = \chi(x^{(m)}/h - j_{(i)}^{(m)})$ , а  $\chi(x)$  – финитная, одинаковая для всех координат, *производящая базис функция*. Как правило, в качестве

производящей функции выбирают  $B$ -сплайн  $\beta^{(l)}(x)$  порядка  $l$ , который определяется рекуррентно:  $\beta^{(i+1)}(x) = \beta^{(i)} * \beta^{(0)}(x)$ , где

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

а знак «\*» обозначает свертку.

**7.2. Моделирование случайного вектора  $\xi$ .** Использование  $B$ -сплайна в качестве производящей функции имеет большое преимущество с точки зрения эффективной численной реализуемости полученных аппроксимаций (см. требование 2 из подразд. 6.7), поскольку для случайных величин, имеющих в качестве плотности распределения комбинацию  $B$ -сплайнов (типа (7.1)), существуют эффективные моделирующие алгоритмы, основанные на следующем утверждении.

**ЛЕММА 7.1** [4]. *Функция  $\beta^{(l)}(x)$  является плотностью распределения случайной величины*

$$\eta = \alpha_1 + \dots + \alpha_l + \alpha_{l+1} - (l+1)/2, \quad (7.2)$$

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

Лемма 7.1 доказывается индукцией по  $l$  с учетом того, что функция  $\beta^{(0)}(x)$  является плотностью распределения случайной величины  $(\alpha - 1/2)$ , а функция  $f_1 * f_2(x)$  является плотностью распределения суммы  $\xi_1 + \xi_2$  независимых случайных величин  $\xi_i$ , распределенных согласно плотностям  $f_i(x)$ ;  $i = 1, 2$  [10]. Из леммы 7.1 следует, что если  $\{w_i(\mathbf{g})\}$  положительны, приближение (7.1) пропорционально плотности случайного вектора, моделируемого методом суперпозиции.

**АЛГОРИТМ 7.1.** *Пусть требуется моделировать случайный вектор  $\xi$ , имеющий плотность распределения  $f(\mathbf{x}) = CL_M g(\mathbf{x})$ . Действуем согласно алгоритму 6.1. Перепишем плотность в виде (6.6). Для базиса (7.1) плотности  $f_i(\mathbf{x})$  из (6.6) можно представить в виде*

$$f_i(\mathbf{x}) = \frac{\chi_i^{(1)}(x^{(1)})}{\int \chi_i^{(1)}(y) dy} \times \dots \times \frac{\chi_i^{(d)}(x^{(d)})}{\int \chi_i^{(d)}(y) dy} = f_i^{(1)}(x^{(1)}) \times \dots \times f_i^{(d)}(x^{(d)}).$$

Таким образом, компоненты  $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)}$  вектора  $\xi$  на втором шаге алгоритма 6.1 (после выбора номера  $m$ ) следует моделировать независимо согласно плотностям  $f_m^{(1)}(x), \dots, f_m^{(d)}(x)$ . Все эти плотности имеют вид  $f_\xi(x) = K_3 \chi(K_1 x + K_2)$ ,  $x \in R$ . Произведя замену  $y = K_1 x + K_2$ ,

будем моделировать случайную величину  $\eta = K_1\xi + K_2$ , которая имеет плотность распределения  $f_\eta(y) = K_3\chi(y)/K_1$ . Для  $\chi(y) = \beta^{(1)}(y)$  имеем, что  $K_3/K_1 = 1$  и что моделирующая формула для  $\eta$  имеет вид (7.2). Получив реализацию случайной величины  $\eta$ , подсчитываем нужное значение по формуле  $\xi = (\eta - K_2)/K_1$ .

Чаще всего в качестве производящей функции используются сплайны первого порядка (или «функции-крышки»)

$$\chi(x) = \beta^{(1)}(x) = \begin{cases} 1+x & \text{при } -1 \leq x \leq 0; \\ 1-x & \text{при } 0 \leq x \leq 1; \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases}$$

и тогда приближение (6.1), (7.1) называется *мультилинейной аппроксимацией*.

**7.3. Аппроксимационные свойства и устойчивость приближения Стренга–Фикса.** Справедлива следующая

ЛЕММА 7.2 [21]. *А). Пусть  $g(\mathbf{x}) \in W_2^{r+1}(X)$  и  $\chi(x) \in W_2^r(R)$ . Тогда найдутся такие коэффициенты  $\{w_i(\mathbf{g})\}$  из соотношения (6.1), что справедлива оценка*

$$\rho_{W_2^s(X)}(g, L_M g) \leq H'_s h^{r+1-s} \|g\|_{W_2^{r+1}(X)}, \quad 0 \leq s \leq r, \quad (7.3)$$

где константы  $H'_s$  не зависят от  $g(\mathbf{x})$  и  $h$ .

*Б). Пусть  $g(\mathbf{x}) \in C^{r+1}(X)$  и  $\chi(x) \in C^r(R)$ . Тогда найдутся такие коэффициенты  $\{w_i(\mathbf{g})\}$  из соотношения (6.1), что справедлива оценка*

$$\rho_{C^s(X)}(g, L_M g) \leq H''_s h^{r+1-s} \|g\|_{C^{r+1}(X)}, \quad 0 \leq s \leq r, \quad (7.4)$$

где константы  $H''_s$  не зависят от  $g(\mathbf{x})$  и  $h$ .

Здесь  $C^r(X)$  – пространство функций, непрерывных на  $X$  вместе со своей  $r$ -ой производной с нормой

$$\|g\|_{C^r(X)} = \sum_{\mathbf{m}: |\mathbf{m}| \leq r} \sup_{\mathbf{x} \in X} |D^{\mathbf{m}} g(\mathbf{x})|; \quad D^{\mathbf{m}} g(\mathbf{x}) = \frac{\partial^{|\mathbf{m}|}}{\partial (x^{(1)})^{m^{(1)}} \dots \partial (x^{(d)})^{m^{(d)}}} g(\mathbf{x}),$$

$\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$ ,  $\mathbf{m} = (m^{(1)}, \dots, m^{(d)})$ ,  $m^{(i)}$  – целые неотрицательные числа,  $|\mathbf{m}| = m^{(1)} + \dots + m^{(d)}$ . Соответственно  $W_2^r(X)$  – пространство Соболева ( $L_2$ -расширение пространства  $C^r(X)$ ) с нормой

$$\|g\|_{W_2^r(X)} = \left( \sum_{\mathbf{m}: |\mathbf{m}| \leq r} \int_X (D^{\mathbf{m}} g(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2}.$$

Расстояние определяется через норму:  $\rho_B(g_1, g_2) = \|g_1 - g_2\|_B$ ,  $B = C^r(X) \vee W_2^r(X)$ .

Из леммы 7.2 следует, что для получения более высокого порядка по  $h$  оценки погрешности аппроксимации Стренга–Фикса следует выбирать более гладкие производящие функции. В данной пособии лемма 7.2 будет в основном использоваться для оценки погрешности аппроксимации Стренга–Фикса в пространствах  $L_2(X) = W_2^0(X)$ ,  $C(X) = C^0(X)$ . В этих пространствах для кусочно-постоянной и мультилинейной аппроксимаций (т. е. для  $\chi(x) = \beta^{(0)}(x)$  и  $\chi(x) = \beta^{(1)}(x)$ ) оптимальный порядок сходимости в лемме 7.2 дают коэффициенты (6.2) (при этом выполнено требование 1 из подразд. 6.7), и аппроксимация (6.1) является *интерполяцией*:  $L_M g(\mathbf{x}_i) = g(\mathbf{x}_i)$ . Более того, для этих интерполяций и для гладких функций  $g(\mathbf{x})$  (а именно такие в основном будут рассматривать в дальнейшем) оценки (7.3), (7.4) могут быть уточнены и усилены. В частности, в работе [14] доказано, что для случая  $\chi(x) = \beta^{(1)}(x)$ ,  $g(\mathbf{x}) \in C^2(X)$  справедливо неравенство

$$\rho_{C(X)}(g, L_M g) \leq \hat{H} h^2, \quad \hat{H} = \frac{1}{8} \sum_{s=1}^d \sup_{\mathbf{x} \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial (x^{(s)})^2} g(\mathbf{x}) \right|. \quad (7.5)$$

Из (7.5) и определения нормы пространства  $L_2(X)$  следует оценка

$$\rho_{L_2(X)}(g, L_M g) \leq \hat{H} \sqrt{\text{mes } X} h^2. \quad (7.6)$$

В случае  $l > 1$  выбор подходящих (с точки зрения леммы 7.2) коэффициентов  $\{w_i(\mathbf{g})\}$  в (6.1) более сложен [14]. Это затрудняет реализацию таких алгоритмов на ЭВМ и, кроме того, усложняет исследование свойства 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 (см. требование 4 из подразд. 6.7).

ЛЕММА 7.3 [3]. Пусть заданы две функции  $g(\mathbf{x}), \tilde{g}(\mathbf{x}) \in C(X)$ . Тогда для мультилинейной аппроксимации имеет место

$$\sup_{\mathbf{x} \in X} \rho_{C(X)}(L_M g, L_M \tilde{g}) = \max_{i=1, \dots, M} |g(\mathbf{x}_i) - \tilde{g}(\mathbf{x}_i)|. \quad (7.7)$$

Иными словами, если функция  $g(\mathbf{x})$  задана с ошибкой, то построенная мультилинейная аппроксимация отличается от аппроксимации,

построенной по точным значениям, на величину, по модулю не превосходящую максимальную ошибку в узлах сетки  $X^{(M)}$ .

## 8. Моделируемость аппроксимации Бернштейна

**8.1. Аппроксимация Бернштейна.** Для одномерного случая ( $d = 1$ ) рассмотрим в качестве базисных функций приближения (6.1) рассмотрим *полиномы Бернштейна*

$$\chi_i(x) = C_M^i x^i (1-x)^{M-i}, \quad i = 0, 1, \dots, M; \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (8.1)$$

Полагаем

$$g(x) \geq 0 \quad \text{при } x \in [0, 1] \quad \text{и} \quad w_i(\mathbf{g}) = g(ih). \quad (8.2)$$

Моделируемость аппроксимации (6.1), (8.1), (8.2) основано на следующем утверждении (см., например, [22]). Пусть  $\theta_1, \dots, \theta_n$  – набор независимых, одинаково распределенных случайных величин. *Вариационным рядом*  $\theta_1^{(n)}, \dots, \theta_n^{(n)}$  называется упорядоченный по возрастанию набор случайных величин  $\theta_1, \dots, \theta_n$ . При этом  $r$ -й член вариационного ряда  $\theta_r^{(n)}$  называется  *$r$ -ой порядковой статистикой*. В частности,  $\theta_1^{(n)} = \min\{\theta_1, \dots, \theta_n\}$  и  $\theta_n^{(n)} = \max\{\theta_1, \dots, \theta_n\}$ . Справедлива следующая

**ЛЕММА 8.1** [22]. *Пусть случайные величины  $\theta_1, \dots, \theta_n$  имеют функцию распределения  $F_\theta(x)$  и плотность  $f_\theta(x)$ . Тогда  $r$ -я порядковая статистика  $\theta_r^{(n)}$  имеет плотность распределения*

$$f_r^{(n)}(x) = n C_{n-1}^{r-1} F_\theta^{r-1}(x) (1 - F_\theta(x))^{n-r} f_\theta(x), \quad (8.3)$$

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

Рассмотрим случай  $\{\theta_i = \alpha_i \in U(0, 1)\}$ , когда величины  $\theta_i$  имеют равномерное распределение в интервале  $(0, 1)$ , при этом плотность (8.3) порядковой статистики  $\theta_r^{(n)} = \alpha_r^{(n)}$  имеет вид

$$\hat{f}_r^{(n)}(x) = n C_{n-1}^{r-1} x^{r-1} (1-x)^{n-r}, \quad x \in (0, 1), \quad (8.4)$$

т. к.  $F_\alpha(x) = x$ ,  $f_\alpha(x) \equiv 1$  при  $x \in (0, 1)$ .

При решении задачи 6.1 для аппроксимации Бернштейна (6.1), (8.1), (8.2) можно представить соответствующую плотность (6.3) в виде (6.6), где

$$P_i = \frac{Cg(ih)}{M+1}, \quad f_i(x) = (M+1)C_M^i x^i (1-x)^{M-i}, \quad (8.5)$$



и использовать алгоритм 6.1. На втором шаге этого алгоритма требуется моделировать случайную величину  $\xi$  согласно плотности  $f_m(x)$  вида (6.6). Учитывая соотношение (8.4), в этом случае требуется реализовать  $(m+1)$ -ю порядковую статистику  $\alpha_{m+1}^{(M+1)}$  независимой выборки объема  $(M+1)$  из совокупности с равномерным распределением в интервале  $(0, 1)$ .

**8.2. Моделирование порядковых статистик.** Для численного моделирования (т.е. для получения выборочных значений) случайной величины  $\theta_r^{(n)}$  можно использовать следующую процедуру. Предполагаем, что имеется эффективный алгоритм выбора максимального элемента  $A_K$  и номера  $K$  соответствующей ячейки массива  $(a_1, \dots, a_r)$ , состоящего из  $r$  компонент.

АЛГОРИТМ 8.1 (см., например, [4]). 1). Реализуем  $r$  выборочных значений  $\hat{\Theta} = (\theta_1, \dots, \theta_r)$  случайной величины  $\theta$  согласно функции распределения  $F_\theta(x)$  (или плотности распределения  $f_\theta(x)$ ), параллельно выбирая максимальный элемент  $A_K$  получаемого массива  $\hat{\Theta}$ . Полагаем  $\theta_r^{(n)} := A_K$ .

2). Для  $s = r + 1, \dots, n$  реализуем выборочные значения  $\theta_s$ . Если  $\theta_s < A_K$ , то заменяем  $K$ -ю компоненту массива  $\hat{\Theta}$ :  $\theta_K := \theta_s$  и находим максимальный элемент  $A_K$  и номер  $K$  для преобразованного массива  $\hat{\Theta}$ . Полагаем  $\theta_r^{(n)} := A_K$ .

Недостатком алгоритма 8.1 является необходимость проведения большого числа сравнений (порядка  $O(r \times n)$ ).

Нами были подробно изучены возможные модификации алгоритма 8.1; при этом особое внимание было уделено случаю  $\{\theta_i = \alpha_i\}$  [23]. Удалось выяснить, что для больших  $n$  к существенному уменьшению числа сравнений может привести использование доверительных интервалов. Было также замечено, что для моделирования порядковой статистики  $\alpha_r^{(n)}$  согласно плотности (8.4) можно использовать специальные (отличные от алгоритма 8.1) методы моделирования бета-распределения с натуральными параметрами. Проведенные нами численные эксперименты показали, что наиболее эффективной формулой для моделирования случайной величины  $\alpha_r^{(n)}$  является

$$\alpha_r^{(n)} = \frac{\ln \prod_{i=1}^r \alpha_i}{\ln \prod_{i=1}^{n+1} \alpha_i},$$

которая основана на представлении случайной величины, имеющей бета-распределение с натуральными параметрами, в виде композиции слу-

чайных величин, имеющих гамма-распределение с целыми параметрами [10].

**8.3. Аппроксимационные свойства и устойчивость приближения Бернштейна.** Справедливо следующее утверждение.

ЛЕММА 8.2 [19]. *Если  $g(x)$  принадлежит  $C[0, 1]$  и удовлетворяет условию Липшица с константой  $L$ , то  $\rho_{C[0,1]}(g, L_M g) \leq L/(2\sqrt{M})$ .*

Таким образом, скорость сходимости приближения (6.1), (8.1), (8.2) (см. требование 3 из подразд. 6.7) относительно невелика. Например, для рассмотренной выше в разд. 7 конечно-элементной аппроксимации Стренга–Фикса с образующей базис функцией  $\chi(x) = \beta^{(1)}(x)$  скорость сходимости имеет порядок  $1/M^2$ .

Для аппроксимации Бернштейна выполнено утверждение леммы 7.3 и соотношение (7.7), т. е. это приближение обладает «идеальным» свойством устойчивости (см. требование 4 из подразд. 6.7).

## 9. Двусторонний геометрический метод (дискретно-стохастическая версия)

**9.1. Геометрический метод И.М.Соболя.** Вернемся к задаче вычисления интеграла (1.4). Рассмотрим случай, когда вычисление значений функции  $q(\mathbf{x})$  в алгоритме (1.5) является трудоемким, т. е. величина  $t$  из (1.9) достаточно велика. Укажем прием, с помощью которого за счет некоторого роста дисперсии  $D\zeta$  из (1.9) можно существенно уменьшить величину  $t$ . Идея этого приема основана на так называемом *геометрическом методе Монте-Карло*, который сформулирован в монографии [16] в качестве альтернативного к стандартному алгоритму 1.1 следующим образом.

Пусть для функции  $q(\mathbf{x})$  из (1.5) выполнено условие  $0 \leq q(\mathbf{x}) < C$ , где  $\mathbf{x} \in X$  и  $C = \text{const}$ . Введем дополнительную координату  $x^{(d+1)}$  и в  $(d+1)$ -мерном пространстве  $(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}, x^{(d+1)})$  рассмотрим цилиндрическую область  $\tilde{G} = X \times (0, C)$ , а в ней – случайную точку  $\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(d)}, \tilde{\xi}^{(d+1)})$ , распределенную согласно плотности

$$\tilde{f}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}, x^{(d+1)}) = \tilde{f}(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) = \frac{f(\mathbf{x})}{C}. \quad (9.1)$$

Заметим, что в этом случае вектор  $\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(d)})$  распределен согласно плотности  $f(\mathbf{x})$  в  $X$ , а компонента  $\tilde{\xi}^{(d+1)}$  равномерно распределена в интервале  $(0, C)$ .

АЛГОРИТМ 9.1 [16]. 1. Реализуем  $n$  значений  $\tilde{\xi}_j = (\xi_j, \tilde{\xi}_j^{(d+1)})$  (здесь  $j = 1, \dots, n$ )  $(d+1)$ -мерного случайного вектора  $\tilde{\xi}$ .

2. Обозначим через  $\nu$  количество точек, оказавшихся ниже поверхности  $x^{(d+1)} = q(\mathbf{x})$ , для которых

$$\tilde{\xi}_j^{(d+1)} \leq q(\xi_j), \quad (9.2)$$

и приближаем интеграл по формуле

$$I \approx \tilde{\zeta}_n = \frac{C\nu}{n}.$$

В монографии [16] алгоритм 9.1 сформулирован для  $d = 2$  и показано, что  $\mathbf{E}\tilde{\zeta}_n = I$ . Этот же результат (для произвольного  $d$ ) легко получить, если заметить, что алгоритм 9.1 является на самом деле алгоритмом 1.1 для вычисления  $(d+1)$ -кратного интеграла

$$I = \int_{\tilde{G}} C \chi_G(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) \tilde{f}(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) d\mathbf{x} dx^{(d+1)}$$

с плотностью  $\tilde{f}(\mathbf{x}, x^{(d+1)})$  вида (9.1). В последнем соотношении  $G$  обозначает область

$$G = \{(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) : \mathbf{x} \in X, 0 \leq x^{(d+1)} \leq q(\mathbf{x})\},$$

а  $\chi_G(\mathbf{x}, x^{(d+1)})$  – индикатор множества  $G$ .

**9.2. Модификация геометрического метода.** Алгоритм 9.1 можно рассматривать как частный случай следующей численной схемы. Пусть требуется вычислить интеграл (1.4). Предположим, что  $0 \leq q(\mathbf{x}) \leq q_{up}(\mathbf{x})$ , где  $\mathbf{x} \in X$ .

АЛГОРИТМ 9.2. 1. Реализуем  $n$  значений  $\hat{\xi}_j = (\xi_j, \hat{\xi}_j^{(d+1)})$ ,  $j = 1, \dots, n$ ,  $(d+1)$ -мерного случайного вектора  $\hat{\xi}$  в области

$$G_{up} = \{(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) : \mathbf{x} \in X, 0 \leq x^{(d+1)} \leq q_{up}(\mathbf{x})\}$$

согласно плотности  $\hat{f}(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) = f(\mathbf{x})/q_{up}(\mathbf{x})$ , т. е. вектор  $\xi$  разыгрывается согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ , а компонента  $\hat{\xi}^{(d+1)}$  – равномерно в интервале  $(0, q_{up}(\xi))$ .

2. Строим оценку интеграла (1.4):

$$I \approx \hat{\zeta}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n q_{up}(\xi_j) \chi_G(\xi_j, \hat{\xi}_j^{(d+1)}). \quad (9.3)$$

Для алгоритма 9.1 имеем  $q_{up}(\mathbf{x}) \equiv C$ . Для вычисления значения  $\chi_G(\boldsymbol{\xi}_j, \hat{\xi}_j^{(d+1)})$  из (9.3) следует проверять неравенство (9.2) для  $\tilde{\xi}_j^{(d+1)} = \hat{\xi}_j^{(d+1)}$ . Заметим, что алгоритм 9.1 представляет собой аналог метода исключения Неймана (с постоянной мажорантой; см., например, [1]), а алгоритм 9.2 – метода исключения с произвольной мажорантой (см. алгоритм 5.10). По той же аналогии при  $0 \leq q(\mathbf{x}) \leq q_{up,1}(\mathbf{x}) \leq q_{up,2}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in X$  оценка  $\hat{\zeta}_n^{(1)}$  из алгоритма 9.2 с мажорирующей функцией  $q_{up}(\mathbf{x}) = q_{up,1}(\mathbf{x})$  имеет меньшую дисперсию, чем оценка  $\hat{\zeta}_n^{(2)}$  из алгоритма 9.2 с функцией  $q_{up}(\mathbf{x}) = q_{up,2}(\mathbf{x})$ , а минимум дисперсии оценки  $\hat{\zeta}_n$  достигается при

$$q_{up}(\mathbf{x}) = q(\mathbf{x}). \quad (9.4)$$

Действительно,  $\mathbf{D}\hat{\zeta}_n^{(i)} = \mathbf{D}\hat{\zeta}^{(i)}/n$ ,  $i = 1, 2$ , и

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\hat{\zeta}^{(2)} &= \mathbf{D}q_{up,2}(\boldsymbol{\xi})\chi_G(\boldsymbol{\xi}, \hat{\xi}^{(d+1)}) = \\ &= \int_{G_{up,2}} q_{up,2}^2(\mathbf{x})\chi_G^2(\mathbf{x}, x^{(d+1)})\hat{f}(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) d\mathbf{x} dx^{(d+1)} - I^2 = \\ &= \int_X d\mathbf{x} \int_0^{q(\mathbf{x})} dx^{(d+1)} q_{up,2}(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) - \tilde{I}^2 = \int_X q(\mathbf{x})q_{up,2}(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 \geq \\ &\geq \mathbf{D}\hat{\zeta}^{(1)} = \int_X q(\mathbf{x})q_{up,1}(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 \geq \int_X q^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 = \mathbf{D}\zeta, \end{aligned}$$

где  $\zeta$  – оценка, соответствующая случаю (9.4). Если затраты на вычисление значений функций  $q(\mathbf{x})$ ,  $q_{up,1}(\mathbf{x})$  и  $q_{up,2}(\mathbf{x})$  приблизительно одинаковы, то одинаковы и средние времена  $t$  (см. соотношение (1.9)) для подсчета значений  $q_{up}(\boldsymbol{\xi}_j)\chi_G(\boldsymbol{\xi}_j, \hat{\xi}_j^{(d+1)})$  из (9.4) для различных вариантов алгоритма 9.2 (т. е. для  $q_{up}(\mathbf{x}) = q_{up,1}(\mathbf{x})$ ,  $q_{up,2}(\mathbf{x})$ ,  $q(\mathbf{x})$ ). Если, кроме того, при подсчете  $\chi_G(\boldsymbol{\xi}_j, \hat{\xi}_j^{(d+1)})$  (т. е. при проверке неравенства (9.2)) приходится непосредственно вычислять значение  $q(\boldsymbol{\xi}_j)$ , то получается, что трудоемкость (1.9) алгоритма 9.2 с мажорантой (9.4) будет наименьшей. Однако в этом случае алгоритм 9.2 совпадает с алгоритмом 1.1, только в алгоритме 9.2 имеется лишнее (и в этом случае – совершенно бесполезное) действие – розыгрыш величины  $\hat{\xi}^{(d+1)}$ .

Таким образом, геометрический метод из монографии [16] (алгоритм 9.1) и его модификация (алгоритм 9.2), с одной стороны, могут быть представлены как стандартный алгоритм (1.5) с  $\tilde{q}(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) =$

$q_{up}(\mathbf{x}) \chi_G(\mathbf{x}, x^{(d+1)})$ ,  $\hat{f}(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) = f(\mathbf{x})/q_{up}(\mathbf{x})$ , а с другой стороны, в случае необходимости вычисления значений  $q(\boldsymbol{\xi}_j)$  при проверке неравенства (9.2) они являются неэффективными модификациями стандартного алгоритма 1.1. Как отмечено в [16], применение геометрического метода может оказаться полезным в следующей (достаточно «экзотической») ситуации: вычисление значений  $q(\boldsymbol{\xi}_j)$  является трудоемким, а соотношение (9.2) удастся заменить на равносильное неравенство, при проверке которого не требуется вычислять  $q(\boldsymbol{\xi}_j)$ .

**9.3. Двусторонний геометрический метод.** Гораздо более широкое применение может найти следующая модификация алгоритма 9.2 из работы [24], идея которой во многом аналогична идее построения двустороннего метода исключения (см. алгоритм 5.11).

Предположим, что существуют легко вычисляемые неотрицательные функции  $q_{low}(\mathbf{x})$  и  $q_{up}(\mathbf{x})$  такие, что

$$q_{low}(\mathbf{x}) \leq q(\mathbf{x}) \leq q_{up}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in X. \quad (9.5)$$

АЛГОРИТМ 9.3 [24]. 1. Реализуем  $n$  значений  $\hat{\boldsymbol{\xi}}_j = (\boldsymbol{\xi}_j, \hat{\xi}_j^{(d+1)})$ ,  $j = 1, \dots, n$ ,  $(d+1)$ -мерного случайного вектора  $\hat{\boldsymbol{\xi}}$  в области  $G_{up}$  согласно плотности  $\hat{f}(\mathbf{x}, x^{(d+1)}) = f(\mathbf{x})/q_{up}(\mathbf{x})$ .

2. Если  $\hat{\xi}_j^{(d+1)} < q_{low}(\boldsymbol{\xi}_j)$ , то полагаем  $\theta_j = 1$ , иначе проверяем неравенство неравенство (9.2) для  $\tilde{\xi}_j^{(d+1)} = \hat{\xi}_j^{(d+1)}$ . Если оно выполнено, то полагаем  $\theta_j = 1$ , иначе  $\theta_j = 0$ .

3. Строим оценку интеграла:

$$I \approx \check{\zeta}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (q_{up}(\boldsymbol{\xi}_j) \times \theta_j). \quad (9.6)$$

Дисперсия  $\mathbf{D}\check{\zeta}$  оценки (9.6) из алгоритма 9.3 совпадает с дисперсией  $\mathbf{D}\hat{\zeta}$  алгоритма 9.2, а значит, она больше дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$  стандартного алгоритма (1.5). Однако, если функции  $q_{low}(\mathbf{x})$ ,  $q(\mathbf{x})$  и  $q_{up}(\mathbf{x})$  близки, то разница  $(\mathbf{D}\check{\zeta} - \mathbf{D}\zeta)$  невелика и, кроме того, проверка неравенства (9.2) (а значит, и трудоемкий подсчет значений  $q(\boldsymbol{\xi}_j)$ ) происходит достаточно редко. В этом случае можно достичь уменьшения общей трудоемкости  $S$  из (1.9).

**9.4. Дискретно-стохастическая версия двустороннего геометрического метода.** В связи с тем, что кратность  $d$  интеграла  $I$ , как правило, достаточно велика, в качестве мажоранты  $q_{up}(\mathbf{x})$  и миноранты  $q_{low}(\mathbf{x})$  функции  $q(\mathbf{x})$  (см. соотношение (9.5)) целесообразно выбрать кусочно-постоянные приближения сверху и снизу функции  $q(\mathbf{x})$ . В дальнейшем для простоты будем рассматривать в качестве области интегрирования единичный куб  $X = Q_d = [0, 1]^d$ . Разобьем область интегрирования на ячейки

$$X_m = \{\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) : (j_m^{(i)} - 1)/\mu \leq x^{(i)} \leq j_m^{(i)}/\mu\}; \quad (9.7)$$

здесь  $i = 1, \dots, d$ ,  $j_m^{(i)} = 1, \dots, \mu$ . В качестве приближенных значений мажоранты (миноранты) в каждой ячейке можно взять максимальные (минимальные) из значений подынтегральной функции  $q(\mathbf{x})$  в узлах сетки, определяющих данную ячейку (этот способ будет считаться в дальнейших рассуждениях основным). Для большей точности нахождения мажоранты и миноранты можно также использовать значения функции  $q(\mathbf{x})$  в дополнительных точках, в частности, значения в центре ячейки и/или в средних точках каждого ребра ячейки. Однако, и в этом случае нет гарантии того, что найденные мажоранта (миноранта) будут действительно ограничивать функцию  $q(\mathbf{x})$ , из-за этого возникает дискретная ошибка метода.

В случае, когда нахождение точных минимумов и максимумов в ячейках затруднено, можно использовать приближенные мажоранты и миноранты (при этом несколько возрастает трудоемкость метода). Например, если подынтегральная функция  $q(\mathbf{x})$  Липшицева с константой  $L$ , то в качестве мажорант и минорант в ячейках можно взять

$$q_{up}(\mathbf{x}) \equiv q_{up,m} = \max \left[ q((j_m^{(1)} - 1)h, \dots, (j_m^{(d)} - 1)h), \dots, \right. \\ \left. q(j_m^{(1)}h, \dots, j_m^{(d)}h) \right] + Lh\sqrt{d}/2, \\ q_{low}(\mathbf{x}) \equiv q_{low,m} = \max \left\{ 0; \min \left[ q((j_m^{(1)} - 1)h, \dots, (j_m^{(d)} - 1)h), \dots, \right. \right. \\ \left. \left. q(j_m^{(1)}h, \dots, j_m^{(d)}h) \right] - Lh\sqrt{d}/2 \right\}, \quad \mathbf{x} \in X_m, \quad h = 1/\mu.$$

Пусть для простоты  $f(\mathbf{x}) \equiv 1$  при  $\mathbf{x} \in Q_d$  (в этом случае  $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$ ) и  $g(\mathbf{x}) \in C^{(1, \dots, 1)}(L, \dots, L; Q_d)$ . Это частный случай множества

$$C^{\mathbf{r}}(\mathbf{L}; Q_d) = C^{(r^{(1)}, \dots, r^{(d)})} (L^{(1)}, \dots, L^{(d)}; Q_d)$$

функций  $d$  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  $L^{(s)}$  в кубе  $Q_d$  для  $s = 1, \dots, d$ . Функция  $g(\mathbf{x}) \in C^{(1, \dots, 1)}(L, \dots, L; Q_d)$ , в частности, удовлетворяет условию Липшица с константой  $L$  по каждой из переменных.

Предположим, что мажоранта  $q_{up}(\mathbf{x})$  и миноранта  $q_{low}(\mathbf{x})$  представляют собой кусочно-постоянные функции, построенные по описанному выше приближенному алгоритму, и их значения  $q_{low,m}$  и  $q_{up,m}$  близки к точным значениям максимума и минимума функции  $g(\mathbf{x})$  в ячейках разбиения (9.7). Найдем оптимальное число разбиений  $\mu$  по каждой из координат области интегрирования, при котором затраты  $s$  на реализацию алгоритма 9.3 минимальны. Пусть  $a$  – время, которое затрачивается на сравнение двух чисел,  $b$  – время вычисления функции  $g(\mathbf{x})$  в некоторой точке, причем  $a \ll b$ . Учитывая затраты на построение функций  $q_{low}(\mathbf{x})$ ,  $q_{up}(\mathbf{x})$  и на реализацию оценки (9.6), имеем

$$s = b(\mu + 1)^d + 2a(2^d - 1)\mu^d + (pa + (1-p)(b+a))n \approx b(n(1-p) + (\mu + 1)^d),$$

где  $p$  – вероятность попадания случайного вектора  $\hat{\xi}$  в подграфик  $G_{low}$  миноранты  $q_{low}(\mathbf{x})$ :

$$p = \mathbf{P}(\hat{\xi} \in G_{low}) = \sum_{X_m} \mathbf{P}\{\xi \in X_m\} \mathbf{P}\{\xi^{(d+1)} < q_{low,m}\} = \sum_{X_m} h^d \frac{q_{low,m}}{q_{up,m}}$$

Заметим, что

$$\begin{aligned} s &\approx bn \left( 1 - \sum_{X_m} h^d \frac{q_{low,m}}{q_{up,m}} \right) + b(\mu + 1)^d = bn \sum_{X_m} \left( \frac{q_{up,m} - q_{low,m}}{\mu^d q_{up,m}} \right) + \\ &+ b(\mu + 1)^d \lesssim \hat{s}(\mu) = \frac{b\sqrt{d}nL}{\mu} \times \frac{1}{\mu^d} \sum_{X_m} \frac{1}{q_{up,m}} + b(\mu + 1)^d. \end{aligned}$$

Замечая, что величина

$$F = \frac{1}{\mu^d} \sum_{X_m} \frac{1}{q_{up,m}} \approx \int_{Q_d} \frac{d\mathbf{x}}{g(\mathbf{x})}$$

приближенно равна константе, найдем точку минимума функции  $\hat{s}(\mu)$ . Дифференцируя эту функцию, получаем уравнение

$$-\frac{bLFn\sqrt{d}}{\mu_{min}^2} + bd(\mu_{min} + 1)^{d-1} = 0.$$

Отсюда, предполагая, что  $\mu + 1 \approx \mu$ , получаем  $\mu_{min} \approx \sqrt[d+1]{LnF/\sqrt{d}}$ .

В работах [3, 9] нами было проведено тестирование алгоритма 9.3, при этом использовались функции тестовой системы (4.1), (4.3) для случая большого числа слагаемых  $K$ .

## 10. Дискретно-стохастическая версия метода выборки по важности

**10.1. Зависимость дисперсии от шага сетки.** Рассмотрим алгоритм (1.5), в котором плотность  $f(\mathbf{x})$  выбирается (по принципу выборки по важности – см. разд. 2) в виде (6.3) (см. подразд. 6.1, 6.5):

$$f(\mathbf{x}) = CL_M|g(\mathbf{x})|, \quad C = 1/c, \quad c = \int_X L_M|g(\mathbf{x})| d\mathbf{x}, \quad (10.1)$$

причем в качестве приближения  $L_M|g(\mathbf{x})|$  берется мультилинейная аппроксимация Стренга–Фикса (см. подразд. 7.1, 7.2).

УТВЕРЖДЕНИЕ 10.1. Пусть

$$T = \min_{\mathbf{x} \in X} g(\mathbf{x}) > 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in X \quad (10.2)$$

и  $g(\mathbf{x}) \in C^2(X)$ . Тогда для дисперсии оценки (1.5), (10.1) выполнено неравенство

$$\mathbf{D}\zeta \leq \frac{\hat{H}^2 \text{mes}X c h^4}{T}. \quad (10.3)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Заметим, что

$$\frac{g^2(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} = \frac{(g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2 + 2g(\mathbf{x})L_M g(\mathbf{x}) - (L_M g(\mathbf{x}))^2}{f(\mathbf{x})}.$$

Учитывая формулы (10.1) и (2.1), получаем

$$\int \frac{g^2(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} = \int \frac{(g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2}{f(\mathbf{x})} + 2cI - c^2 \quad \text{и}$$

$$\mathbf{D}\zeta = \int \frac{(g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2}{f(\mathbf{x})} - (I - c)^2.$$



Учитывая неравенство (10.2) и тот факт, что базисные функции (7.1) для  $\chi(x) = \beta^{(l)}(x)$  образуют разложение единицы (см., например, [4]), имеем

$$f(\mathbf{x}) \geq C \min_{i=1, \dots, M} g(\mathbf{x}_i) \sum_{i=1}^M \chi_i(\mathbf{x}) \geq CT, \quad \mathbf{x} \in X.$$

Отсюда

$$\mathbf{D}\zeta \leq \int \frac{(g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2}{f(\mathbf{x})} \leq \frac{c\rho_{L_2}^2(g, L_M g)}{T}. \quad (10.4)$$

С учетом соотношения (7.6) имеем неравенство (10.3). Утверждение 10.1 доказано.

**ЗАМЕЧАНИЕ 10.1.** В случае, когда подинтегральная функция  $g(\mathbf{x})$  является знакопеременной (т. е. соотношение (10.2) не выполнено), справедливо неравенство

$$\mathbf{D}\zeta \leq \int \frac{(g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2}{f(\mathbf{x})} + \left( \int |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \right)^2 - I^2,$$

и получение зависимости дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$  от  $h$  затруднено.

**ЗАМЕЧАНИЕ 10.2.** Неравенство типа (10.3) можно также получить как следствие известного неравенства (см., например, [1])

$$\mathbf{D}\zeta \leq \frac{(m_2 - m_1)^2}{4} \quad \text{при } 0 \leq m_1 \leq q(\mathbf{x}) \leq m_2, \quad \mathbf{x} \in X. \quad (10.5)$$

Предположим, что  $g(\mathbf{x}) \in C^2(X)$  и выполнены соотношения (7.5), (10.2). Тогда

$$\sup_{\mathbf{x} \in X} \left| \frac{g(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} - c \right| \leq \frac{\hat{H}ch^2}{T}$$

и, следовательно, для достаточно малого  $h$  выполнено неравенство (10.5) для  $m_1 = c - \hat{H}ch^2/T$ ,  $m_2 = c + \hat{H}ch^2/T$ . Далее получаем  $m_2 - m_1 = 2\hat{H}h^2c/T$  и

$$\mathbf{D}\zeta \leq \frac{\hat{H}^2c^2h^4}{T^2}. \quad (10.6)$$

Полученная оценка дисперсии несколько хуже, чем (10.3), т. к. для неотрицательных функций  $g(\mathbf{x})$  выполнено  $c \geq T \text{mes}X$ .

**ЗАМЕЧАНИЕ 10.3.** Рассмотрим случай, когда подинтегральная функция неотрицательна, но не отделена от нуля (т. е. условие (10.2) не выполнено). Здесь в соотношении (10.4) можно применить неравенство

Коши–Буняковского

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\zeta &\leq \int \frac{(g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2}{f(\mathbf{x})} \leq \left( \int (g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2} \times \\ &\times \left( \int \frac{(g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}}{f^2(\mathbf{x})} \right)^{1/2} = \rho_{L_2}(g, L_M g) (I_{2,3} - 2cI_{1,2} + c^2)^{1/2}, \end{aligned}$$

где  $I_{q,t} = \mathbf{E} (g^q(\boldsymbol{\xi})/f^t(\boldsymbol{\xi}))$ . Отсюда следует

**УТВЕРЖДЕНИЕ 10.2.** *Если  $g(\mathbf{x}) \in C^2(X)$  и величины  $I_{1,2}$ ,  $I_{2,3}$  ограничены, то для дисперсии оценки (1.5), (10.1) выполнено неравенство  $\mathbf{D}\zeta \leq Hh^2$ , где  $H = \hat{H}(\text{mes}X (I_{2,3} - 2cI_{1,2} + c^2))^{1/2}$ .*

**10.2. «Отделение» подынтегральной функции от нуля.** Для рассматриваемого случая неотрицательной, не отделенной от нуля подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  можно применить следующий прием. Перепишем интеграл (1.4) в виде  $I = \tilde{I} - T\text{mes}X$ , и будем вычислять методом Монте-Карло интеграл

$$\tilde{I} = \int_X \tilde{g}_T(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_X (g(\mathbf{x}) + T) d\mathbf{x},$$

здесь  $T$  – фиксированная константа. В этом случае в оценках типа (10.3), (10.6), с одной стороны, увеличивается знаменатель ( $T$  или  $T^2$ ), а с другой стороны, увеличивается числитель, содержащий величины  $c(T) = I + T\text{mes}X$  и  $c^2(T)$  (суммы вторых производных функций  $g(\mathbf{x})$  и  $\tilde{g}(\mathbf{x})$  совпадают). При выборе «высоты подъема»  $T$  следует учитывать, что верхняя граница дисперсии имеет вид

$$D(T) = \frac{H(I + T\text{mes}X)}{T} = H\text{mes}X + \frac{HI}{T}, \quad H = (\hat{H})^2 \text{mes}X h^4$$

(см. правую часть неравенства (10.3)); при этом  $D(T) \rightarrow \text{const}$  для  $T \rightarrow \infty$ .

**10.3. Выбор оптимального числа разбиений.** В силу того, что  $h \sim 1/M^{1/d}$ , из соотношения (10.3) следует, что дисперсия  $\mathbf{D}\zeta$  убывает с ростом числа узлов  $M$ . Однако при увеличении  $M$  возрастает время реализации векторов  $\boldsymbol{\xi}_j$  согласно плотности (10.1) в связи с необходимостью выбора номера  $m$  плотности  $f_m(\mathbf{x})$  согласно вероятностям  $\{P_1, \dots, P_M\}$  в алгоритме 6.1. Поэтому можно предположить существование оптимального числа узлов  $M$ , которое минимизирует величину

трудоемкости (1.9). Найдем это значение в предположении, что  $X$  является единичным кубом  $Q_d$ . В этом случае число  $\mu$  делений по каждой координате при построении прямоугольной сетки с шагом  $h = 1/\mu$  одинаково и  $M = \mu^d$ . Предполагаем также, что при выборе номера  $m$  в алгоритме 6.1 использован квантильный метод с  $\mu^r$  квантилями (см. алгоритм 5.4). Тогда в самом плохом случае, когда плотность близка к равномерной (т.е. подинтегральная функция  $g(\mathbf{x})$  близка к константе), среднее количество необходимых вычитаний вероятностей  $P_j$  из стандартного числа  $\alpha$  будет  $\mu^d/(2\mu^r)$ . Тогда величина  $t$  равна  $G_1\mu^{d-r}/2 + G_2$ , где  $G_1$  – затраты на одно вычитание  $P_j$  из  $\alpha$ , а константа  $G_2$  включает затраты на моделирование вектора  $\xi_j$  согласно плотности  $f_m(\mathbf{x})$  и подсчет значения  $q(\xi_j)$ . Согласно (10.3) имеем, что дисперсия  $\mathbf{D}\zeta$  оценивается величиной  $G_3/\mu^4$ . Поэтому при выборе оптимального  $\mu$  следует минимизировать функцию  $\tilde{S}(\mu) = G_4(\mu^{d-r-4} + G_5\mu^{-4})$ . Приравняв к нулю производную этой функции и учитывая, что величины  $d, r, \mu, G_5$  неотрицательны, получаем, что условием существования оптимального количества разбиений по каждой координате будет:  $d - r - 4 > 0$ , а само условно-оптимальное значение равно

$$\mu_{opt} = \sqrt[d-r]{\frac{4G_5}{d-r-4}} \quad \text{и} \quad M_{opt} = \left(\frac{4G_5}{d-r-4}\right)^{d/(d-r)}.$$

В работах [3, 9] нами было проведено тестирование алгоритма (1.5), (10.1); при этом использовались функции тестовой системы (4.1), (4.3).

## 11. Использование существенной выборки в методе Монте-Карло

**11.1. Существенная выборка.** Рассмотрим следующую задачу. Пусть имеется набор выборочных значений

$$\Xi = (\xi_1, \dots, \xi_n), \quad n \gg 1 \quad (11.1)$$

(или эффективный численный алгоритм для получения такого набора)  $d$ -мерного случайного вектора  $\xi$  с плотностью распределения вида

$$f(\mathbf{x}) = H g(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in X \subseteq R^d, \quad (11.2)$$

где  $H = \text{const}$  и  $g(\mathbf{x})$  – заданная неотрицательная функция, причем  $X$  – замыкание множества тех  $\mathbf{x} \in R^d$ , для которых  $g(\mathbf{x}) > 0$ . Требуется

вычислить величину

$$H = 1/I, \quad \text{где} \quad I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

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 (11.1) строится приближение плотности (11.2).

**11.2. Алгоритм с использованием существенной выборки.** Решение сформулированной задачи сводится к вычислению интеграла  $I$  с использованием стандартного алгоритма 1.1. Как отмечалось в подразд. 2.1, напрямую использовать плотность (11.2) в алгоритме 1.1 невозможно, так как нам неизвестна константа  $H$ . Следующий прием, предложенный в работе [24], позволяет использовать существенную выборку (11.1) 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 11.1 [24]. *Вычисляем величину  $J/I$  согласно алгоритму (1.5), используя существенные выборочные значения (11.1):*

$$\frac{J}{I} \approx \bar{\zeta}_{G,n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_{G,i} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{G(\boldsymbol{\xi}_i)}{g(\boldsymbol{\xi}_i)} \quad \text{и полагаем} \quad I \approx \frac{J}{\bar{\zeta}_{G,n}}. \quad (11.3)$$

**11.3. Погрешность и трудоемкость алгоритма 11.1.** Из соотношений (1.6), (11.3) следует, что с вероятностью  $1 - \varepsilon$  выполнено

$$\bar{\zeta}_{G,n} = \frac{J}{I} + B\sqrt{\frac{\mathbf{D}\zeta_G}{n}}, \quad |B| < B_\varepsilon.$$

Следовательно,

$$I \approx \frac{J}{J/I + B\sqrt{\mathbf{D}\zeta_G/n}} = \frac{I}{1+v}, \quad v = \frac{BI}{J}\sqrt{\frac{\mathbf{D}\zeta_G}{n}}.$$

Учитывая, что при достаточно большом  $n$  величина  $v$  мала, и разлагая функцию  $\varphi(v) = I/(1+v)$  в ряд Тейлора, получаем

$$I \approx I - Iv + O(v^2) = I - \frac{BI^2}{J} \sqrt{\frac{\mathbf{D}\zeta_G}{n}} + O(1/n).$$

Из последнего соотношения следует, что погрешность алгоритма 11.1 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 (11.3)). По аналогии с доказательством леммы 2.1 (см., например, [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  $g(\mathbf{x})$ .

**11.4. О целесообразности реализации существенной выборки.** 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  $\xi^{(1)}$ , имеющего плотность распределения

$$f_1(\mathbf{x}) = \frac{G(\mathbf{x})}{\int_X G(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}, \quad (11.4)$$

то можно применить метод исключения (алгоритм 5.10) с мажорантой  $g_1(\mathbf{x}) = G(\mathbf{x})$  для получения новых существенных выборочных значений, имеющих плотность распределения (11.2). Для минимизации затрат алгоритма 5.10 нужно выбирать мажоранту  $G(\mathbf{x})$ , близкую к  $g(\mathbf{x})$  (см. подразд. 5.6, а также работы [1, 4]).

Следует, однако, заметить, что если существенная выборка (11.1) не задана и ставится задача вычисления константы  $H$  (или интеграла  $I$ ), то не обязательно получать существенные выборочные значения (11.1) согласно алгоритму 5.10 и применять алгоритм 11.1, а лучше использовать выборку по важности (см. разд. 2, 10): выбрать неотрицательную функцию  $G(\mathbf{x})$  (не обязательно мажоранту), близкую к  $g(\mathbf{x})$  (в частности, по аналогии с соотношением (10.1), можно взять

$G(\mathbf{x}) = L_M |g(\mathbf{x})|$  и такую, что моделирующие формулы, соответствующие плотности (11.4), являются эффективными, и применить алгоритм 1.1 с плотностью  $f(\mathbf{x})$ , тождественно равной функции  $f_1(\mathbf{x})$  из (11.4).

## 12. Дискретно-стохастическая версия метода выделения главной части

**12.1. Выделение главной части.** Допустим, что известна близкая к  $g(\mathbf{x})$  функция  $g_0(\mathbf{x})$ , для которой легко вычисляется интеграл  $I_0 = \int_X g_0(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  (аналитически или численно с малыми затратами и высокой точностью). Тогда для увеличения эффективности расчетов по методу Монте-Карло (1.5) можно использовать стандартный прием *выделения главной части* (см., например, [1, 16]), который основан на соотношении

$$I = I_0 + \int_X (g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \approx I_0 + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (q(\xi_j) - q_0(\xi_j)), \quad (12.1)$$

где  $q_0(\xi) = g_0(\xi)/f(\xi)$ . Дисперсия оценки (12.1) равна  $\mathbf{D}(q(\xi) - q_0(\xi))$  и может быть малой, если  $g_0(\mathbf{x})$  хорошо аппроксимирует  $g(\mathbf{x})$ .

**12.2. Использование мультилинейной аппроксимации Стренга–Фикса.** В качестве  $g_0(\mathbf{x})$  рассмотрим мультилинейное приближение из подразд. 7.1, 7.2:

$$g_0(\mathbf{x}) = L_M g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M g(\mathbf{x}_i) \chi_i(\mathbf{x}). \quad (12.2)$$

Для простоты рассмотрим случай, когда  $X$  —  $d$ -мерный единичный куб  $Q_d$ . Несложно вычислить  $I_0 = \int_{Q_d} L_M g_0(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx h^d \sum_{i=1}^M g_0(\mathbf{x}_i)$  (знак приближенного равенства связан с тем, что для узлов, расположенных на границе области интегрирования  $Q_d$ , носители соответствующих «функций-крышек» частично расположены во внешности куба). В силу соотношений (7.5), (7.6) функция  $g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x})$  «равномерно мала», и поэтому в качестве плотности  $f(\mathbf{x})$  в алгоритме (12.1) разумно выбрать плотность равномерного распределения:

$$f(\mathbf{x}) = 1 \text{ при } \mathbf{x} \in X, \quad f(\mathbf{x}) = 0 \text{ иначе.} \quad (12.3)$$

**УТВЕРЖДЕНИЕ 12.1.** Для дисперсии оценки (12.1)–(12.3) выполнено неравенство

$$\mathbf{D}(q(\xi) - q_0(\xi)) \leq \hat{H}^2 h^4 \text{ при } g(\mathbf{x}) \in C^2(Q_d). \quad (12.4)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. С учетом соотношений (12.1)–(12.3) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(q(\boldsymbol{\xi}) - q_0(\boldsymbol{\xi})) &= \int_{Q_d} \frac{(g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}}{f(\mathbf{x})} - \left( \int_{Q_d} (g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \right)^2 \leq \\ &\leq \int_{Q_d} (g(\mathbf{x}) - L_M g(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} = \rho_{L_2(Q_d)}^2(g, L_M g). \end{aligned}$$

Учитывая соотношение (7.6), получаем неравенство (12.4). Утверждение 12.1 доказано.

**12.3. Сравнение дискретно-стохастических версий алгоритмов выборки по важности и выделения главной части.** Сравнивая дискретно-стохастические алгоритмы (1.5), (10.1) и (12.1)–(12.3), отметим, что:

– порядки уменьшения дисперсии по шагу сетки  $h$  одинаковы (см. соотношения (10.3), (10.6), (12.4)), причем получение неравенства (12.4) намного проще в сравнении с неравенствами (10.3), (10.6) (см. доказательства утверждений 10.1, 12.1 и замечание 10.2);

– алгоритм (12.1)–(12.3) более прост для реализации: не требуются условия типа (10.2), просто реализуются выборочные значения  $\{\boldsymbol{\xi}_j\}$  согласно плотности (12.3) (в сравнении с плотностью (10.1), для которой требуется использование алгоритмов 6.1, 7.1).

В работах [3, 9] нами было проведено тестирование алгоритма (12.1), (12.2); при этом использовались функции тестовой системы (4.1), (4.3).

## 13. Интегрирование по части области

**13.1. 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 (1.4) и удастся вычислить (аналитически или численно с малыми затратами и высокой точностью) интегралы по некоторой части  $X_2$  области интегрирования  $X \subseteq R^d$ :

$$\int_{X_2} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = I_2 \quad \text{и} \quad \int_{X_2} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = i_2,$$

где  $0 < i_2 < 1$ . Здесь мы полагаем, что  $f(\mathbf{x}) = 0$  при  $\mathbf{x} \notin X$ .

Как правило, выгодно представить интеграл (1.4) в виде суммы

$$I = I_2 + \int_{X_1} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = I_2 + \int_{X_1} i_1 q(\mathbf{x})f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta^{(1)}, \quad (13.1)$$

где  $X_1 = X \setminus X_2$ ,  $i_1 = 1 - i_2$ ,  $\zeta^{(1)} = I_2 + i_1 q(\xi^{(1)})$ , а  $\xi^{(1)}$  – случайный вектор, распределенный в  $X_1$  согласно усеченной плотности  $f_1(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})/i_1$ . Замена алгоритма 1.1 на аналогичный алгоритм, соответствующий представлению (13.1), называется *интегрированием по части области* (см., например, [1, 16]). Если область  $X_2$  близка к  $X$ , то можно считать, что мы выделяем главную часть (см. разд. 12). 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 13.1).

**13.2. Уменьшение дисперсии.** Целесообразность применения методики интегрирования по части области обосновывает

УТВЕРЖДЕНИЕ 13.1. *Справедливо соотношение  $\mathbf{D}\zeta^{(1)} \leq i_1 \mathbf{D}\zeta$ .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно формуле (2.1) и определению дисперсии имеем

$$\begin{aligned} i_1 \mathbf{D}\zeta &= i_1 \left( \int_X q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 \right) = \\ &= i_1 \int_{X_1} q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + i_1 \int_{X_2} q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - i_1 I^2, \\ \mathbf{D}\zeta^{(1)} &= i_1^2 \mathbf{D}q(\xi^{(1)}) = i_1^2 \int_{X_1} q^2(\mathbf{x}) f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left( i_1 \int_{X_1} q(\mathbf{x}) f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = \\ &= i_1 \int_{X_1} q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left( \int_{X_1} q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2. \end{aligned}$$

Рассмотрим разность

$$i_1 \mathbf{D}\zeta - \mathbf{D}\zeta^{(1)} = i_1 \int_{X_2} q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - i_1 I^2 + \left( \int_{X_1} q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2.$$

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,

$$\begin{aligned} i_1 \mathbf{D}\zeta - \mathbf{D}\zeta^{(1)} &= i_1(\Delta + I_2^2/i_2) - i_1 I^2 + (I - I_2)^2 = i_1 \Delta + \\ &+ I_2^2/i_2 + i_2 I^2 - 2II_2 = i_1 \Delta + (I_2/\sqrt{i_2} - \sqrt{i_2}I)^2 \geq 0, \end{aligned}$$



что и требовалось доказать.

**13.3. О применении метода исключения для моделирования усеченного распределения.** Если имеется алгоритм реализации случайного вектора  $\xi \in X$  согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ , то для случайного вектора  $\xi^{(1)} \in X_1 \subset X$  можно использовать алгоритм метода исключения для моделирования усеченного распределения: принимаем  $\xi^{(1)} = \xi$ , если реализованное согласно плотности  $f(\mathbf{x})$  значение вектора  $\xi$  принадлежит подобласти  $X_1$  [1, 4]. 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  $\mathbf{P}(\xi \in X)/\mathbf{P}(\xi \in X_1) = 1/i_1$  выборочных значений вектора  $\xi$ .

Более предпочтительным является розыгрыш случайного вектора  $\xi^{(1)}$  непосредственно в области  $X_1$  согласно плотности  $f_1(\mathbf{x})$ .

**ПРИМЕР 13.1** [1]. Пусть требуется вычислить объем  $\bar{G}$  трехмерной фигуры  $G$ , ограниченной поверхностью (в сферических координатах  $(r, \theta, \phi)$ )

$$r = a + h t(\theta, \phi), \quad \text{где } -1 \leq t(\theta, \phi) \leq 1 \quad \text{и} \quad a - h > 0.$$

Обозначим через  $X_2$  и  $X$  вписанный в  $G$  и описанный около  $G$  шары, радиусы и объемы которых равны соответственно  $a - h$ ,  $a + h$  и  $\bar{X}_2$ ,  $\bar{X}$ . Заметим, что искомая величина равна интегралу

$$\bar{G} = \int_X \chi_G(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3,$$

где  $\chi_G(x_1, x_2, x_3)$  – индикатор множества  $G$ . Рассмотрим сначала алгоритм 1.1 со случайным вектором  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ , 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

$$\bar{G} = \bar{X} \mathbf{E} \chi_G(\xi) \approx \frac{\bar{X}}{n} \sum_{i=1}^n \chi_G(\xi_i). \quad (13.2)$$

Моделирующие формулы для выборочных значений компонент случайного вектора  $\xi$  имеют вид [1, 4]:

$$\xi_1 = \hat{r} \sin \hat{\theta} \cos \hat{\phi}, \quad \xi_2 = \hat{r} \sin \hat{\theta} \sin \hat{\phi}, \quad \xi_3 = \hat{r} \cos \hat{\theta}; \quad (13.3)$$

$$\hat{r} = (a + h) \alpha_1^{1/3}, \quad \cos \hat{\theta} = 1 - 2\alpha_2, \quad \hat{\phi} = 2\pi\alpha_3. \quad (13.4)$$

Заметим, что при получении значений  $\chi_G(\boldsymbol{\xi})$  вычисления (13.3) можно не осуществлять, а лишь проверять условие

$$\hat{r} \leq a + h t(\hat{\theta}, \hat{\phi}), \quad (13.5)$$

при выполнении которого  $\chi_G(\boldsymbol{\xi}) = 1$  (иначе  $\chi_G(\boldsymbol{\xi}) = 0$ ).

Выделим теперь объем  $\bar{X}_2 = (4/3)\pi(a - h)^3$  шара  $X_2$ :

$$\bar{G} = \bar{X}_2 + \int_{X_1} \chi_G(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

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:

$$\bar{G} = \mathbf{E} \left( \bar{X}_2 + \bar{X}_1 \chi_G(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \right) \approx \bar{X}_2 + \frac{\bar{X}_1}{n} \sum_{i=1}^n \chi_G(\boldsymbol{\xi}_i^{(1)}), \quad (13.6)$$

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 (13.3) и (13.4) для  $\xi_i = \xi_i^{(1)}$ ;  $i = 1, 2, 3$  с той лишь разницей, что по-другому вычисляется компонента  $\hat{r}$ :

$$\hat{r}^{(1)} = \sqrt[3]{\alpha_1^{(1)}(a + h)^3 + (1 - \alpha_1^{(1)})(a - h)^3}. \quad (13.7)$$

При подсчете  $\chi_G(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$  из (13.6) можно не производить вычисления (13.3), а лишь проверять условие (13.5) для  $\hat{r} = \hat{r}^{(1)}$ .

Из формул (13.2)–(13.7) следует, что вычислительные затраты на реализацию оценок (13.2) и (13.6) практически одинаковы, в то время как

$$\mathbf{D}(\bar{X} \chi_G(\boldsymbol{\xi})) > \mathbf{D}(\bar{X}_2 + \bar{X}_1 \chi_G(\boldsymbol{\xi}^{(1)})),$$

так как

$$\mathbf{D}(\bar{X}\chi_G(\boldsymbol{\xi})) = \bar{X}\bar{G} - \bar{G}^2 = \bar{G}(\bar{X} - \bar{G}),$$

$$\mathbf{D}(\bar{X}_2 + \bar{X}_1\chi_G(\boldsymbol{\xi}^{(1)})) = \bar{X}_1(\bar{G} - \bar{X}_2) - (\bar{G} - \bar{X}_2)^2 = (\bar{G} - \bar{X}_2)(\bar{X} - \bar{G});$$

здесь использовано равенство  $\bar{X}_1 + \bar{X}_2 = \bar{X}$ . Таким образом,

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{D}(\bar{X}_2 + \bar{X}_1\chi_G(\boldsymbol{\xi}^{(1)}))}{\mathbf{D}(\bar{X}\chi_G(\boldsymbol{\xi}))} &= \frac{\bar{G} - \bar{X}_2}{\bar{G}} \leq \frac{\bar{X} - \bar{X}_2}{\bar{X}_2} = \\ &= \frac{(4\pi/3)((a+h)^3 - (a-h)^3)}{(4\pi/3)(a-h)^3} \leq \frac{6h(a+h)^2}{(a-h)^3}. \end{aligned}$$

Последняя величина имеет асимптотику  $6h/a$  при  $h \rightarrow 0$ .

**ЗАМЕЧАНИЕ 13.1.** Отметим, что, с учетом соотношения (13.5), формулы (13.2) и (13.6) представляют собой варианты метода исключения (т. е. если реализации векторов  $\boldsymbol{\xi}$  и  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$  не попадают в область  $G$ , то вклады в соответствующие суммы не делаются).

**ЗАМЕЧАНИЕ 13.2.** По аналогии с примером 13.1 можно строить дискретно-стохастические алгоритмы, позволяющие вычислять объемы (площади)  $\bar{G}$  для широкого класса гладких трехмерных (двумерных) ограниченных областей  $G$ . Здесь следует ввести прямоугольную сетку с малым шагом  $h$  по каждой координате, взять в качестве области  $X$  объединение всех элементарных кубов (квадратов), имеющих непустое пересечение с  $G$ , а в качестве  $X_2$  – объединение кубов (квадратов), полностью лежащих внутри  $G$  (объем  $\bar{X}_2$  при этом несложно вычислить). Вклад в объем (площадь)  $\bar{G}$  от «приграничных» элементарных кубов (квадратов), объединение которых образует область  $X_1$ , можно вычислить методом Монте-Карло с использованием алгоритмов метода суперпозиции и исключения (см. подразд. 5.5, 5.6): сначала согласно дискретному равномерному распределению (см. алгоритм 5.3) выбирается «приграничный» элементарный куб (квадрат), в котором разыгрывается равномерная точка  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$ , и если  $\boldsymbol{\xi}^{(1)} \in G$ , то делается соответствующий вклад в оценку типа (13.6).

## 14. Выборка по важности по части переменных

**14.1. Разбиение переменных на две группы.** В разделах 14, 15 представлены методы уменьшения дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$ , основанные на разбиении переменных  $\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$  на две группы:  $\mathbf{y} = (x^{(1)}, \dots, x^{(k_1)})$ ,  $\mathbf{z} = (x^{(k_1+1)}, \dots, x^{(d)})$ ,  $0 < k_1 < d$ , и представлении интеграла (1.4) формулой полного математического ожидания:

$$\begin{aligned} I &= \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \int q(\mathbf{y}, \mathbf{z}) f(\mathbf{y}, \mathbf{z}) d\mathbf{y} d\mathbf{z} = \\ &= \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma}) = \mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}} \mathbf{E}_{\boldsymbol{\gamma}}(q(\boldsymbol{\xi}) | \boldsymbol{\eta}) = \int \mathbf{E}_{\boldsymbol{\gamma}}(q(\boldsymbol{\xi}) | \mathbf{y}) f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (14.1)$$

Здесь  $\boldsymbol{\xi}$  –  $d$ -мерный случайный вектор, распределенный согласно плотности  $f(\mathbf{y}, \mathbf{z})$  и составленный из компонент  $k_1$ -мерного вектора  $\boldsymbol{\eta} = (\eta^{(1)}, \dots, \eta^{(k_1)}) = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(k_1)})$  и  $k_2$ -мерного вектора  $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma^{(1)}, \dots, \gamma^{(k_2)}) = (\xi^{(k_1+1)}, \dots, \xi^{(d)})$ ;  $k_1 + k_2 = d$ . Кроме того, в соотношении (14.1) введены обозначения  $\mathbf{E}_{\boldsymbol{\gamma}}(q(\boldsymbol{\xi}) | \mathbf{y}) = \int q(\mathbf{y}, \mathbf{z}) f_{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{z} | \mathbf{y}) d\mathbf{z}$ ,

$$f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) = \int f(\mathbf{y}, \mathbf{z}) d\mathbf{z}, \quad f_{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{z} | \mathbf{y}) = f(\mathbf{y}, \mathbf{z}) / f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}). \quad (14.2)$$

Последнее соотношение воспроизводит представление (5.9) для вектора  $\boldsymbol{\xi} = (\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma})$  (см. подразд. 5.4). Равенство (14.1) проверяется прямой подстановкой формул (14.2) с учетом теоремы Фубини о представлении двойного интеграла в виде повторного.

**14.2. Выборка по важности по переменной  $\mathbf{y}$ .** В ряде приложений возникает следующая задача. Интеграл (1.4) оценивается с помощью стандартного алгоритма (1.5), причем плотность  $f_{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{z} | \mathbf{y})$  из представления (14.2) задана и требуется выбрать плотность  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})$ , минимизирующую величину дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$  из формулы (2.1). В этом случае алгоритм 1.1 с оптимальной плотностью  $f_{\boldsymbol{\eta}, \min}(\mathbf{y})$  называют *выборкой по важности по части переменных* (см., например, [1]). Заметим, что

$$\mathbf{D}\zeta = \int \frac{d\mathbf{y}}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})} \int \frac{g^2(\mathbf{y}, \mathbf{z}) d\mathbf{z}}{f_{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{z} | \mathbf{y})} - I^2.$$

Обозначим

$$g_1(\mathbf{y}) = \left( \int \frac{g^2(\mathbf{y}, \mathbf{z}) d\mathbf{z}}{f_{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{z} | \mathbf{y})} \right)^{1/2}$$

и перепишем формулу (2.1) в виде

$$\mathbf{D}\zeta = \int \frac{g_1^2(\mathbf{y}) d\mathbf{y}}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})} - I^2. \quad (14.3)$$

По аналогии с леммой 2.1 сформулируем

**УТВЕРЖДЕНИЕ 14.1.** *Минимальная дисперсия  $(\mathbf{D}\zeta)_{min}$  вида (14.3) реализуется в случае, когда плотность  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})$  пропорциональна функции  $g_1(\mathbf{y})$ , то есть*

$$f_{\boldsymbol{\eta},min}(\mathbf{y}) = \frac{g_1(\mathbf{y})}{\int g_1(\mathbf{w}) d\mathbf{w}} = \left( \int \frac{g^2(\mathbf{y}, \mathbf{z}) d\mathbf{z}}{f_{\gamma}(\mathbf{z}|\mathbf{y})} \right)^{1/2} \bigg/ \int \left( \int \frac{g^2(\mathbf{w}, \mathbf{z}) d\mathbf{z}}{f_{\gamma}(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \right)^{1/2} d\mathbf{w} \quad (14.4)$$

и равна

$$(\mathbf{D}\zeta)_{min} = \left( \int g_1(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right)^2 - I^2 = \left( \int \left( \int \frac{g^2(\mathbf{y}, \mathbf{z}) d\mathbf{z}}{f_{\gamma}(\mathbf{z}|\mathbf{y})} \right)^{1/2} d\mathbf{y} \right)^2 - I^2. \quad (14.5)$$

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Выражение (14.5) получается непосредственной подстановкой соотношения (14.4) в (14.3). Далее, из формул (14.3) и (14.5) следует, что величина  $(\mathbf{D}\zeta)_{min}$  является действительно наименьшей, так как для любой плотности  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})$  величина

$$\mathbf{D}\zeta - (\mathbf{D}\zeta)_{min} = \int \frac{g_1^2(\mathbf{y})}{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})} d\mathbf{y} - \left( \int g_1(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right)^2$$

является дисперсией (то есть величиной неотрицательной) случайной величины  $g_1(\boldsymbol{\eta})/f_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{\eta})$ , где вектор  $\boldsymbol{\eta}$  имеет плотность распределения  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})$ . Утверждение 14.1 доказано.

Учитывая то обстоятельство, что выполнено равенство

$$\int g(\mathbf{y}, \mathbf{z}) d\mathbf{z} = \mathbf{E} \left( \frac{g(\mathbf{y}, \gamma)}{f_{\gamma}(\gamma|\mathbf{y})} \right),$$

можно сделать вывод о том, что утверждение 14.1 показывает, что оптимальный выбор значения случайной величины  $\boldsymbol{\eta}$  осуществляется из распределения с плотностью (14.4), пропорциональной корню квадратному из среднего квадрата соответствующего «вклада» в оценку интеграла (1.4).

## 15. Метод математических ожиданий и метод расщепления (сравнение постановок задач)

**15.1. Понижение порядка интегрирования.** Рассмотрим еще две возможности использования представления (14.1) для уменьшения множителя  $\mathbf{D}\zeta$  из (2.1). Предположим, что величина условного математического ожидания

$$q_1(\mathbf{y}) = \mathbf{E}\gamma(q(\xi)|\mathbf{y}) = \int q(\mathbf{y}, \mathbf{z}) f\gamma(\mathbf{z}|\mathbf{y}) d\mathbf{z} \quad (15.1)$$

легко вычисляется аналитически для каждого  $\mathbf{y}$ . Из соотношения (14.1) имеем

$$I = \int q_1(\mathbf{y}) f\eta(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \mathbf{E}\zeta^{(1)}, \quad \text{где } \zeta^{(1)} = q_1(\eta). \quad (15.2)$$

АЛГОРИТМ 15.1. Вычисляем интеграл (15.2) по формуле

$$I = \mathbf{E}\zeta^{(1)} \approx \bar{\zeta}_n^{(1)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q_1(\eta_i),$$

где случайный вектор  $\eta$  и соответствующие выборочные значения  $\{\eta_i\}$  распределены согласно плотности  $f\eta(\mathbf{y})$ .

Алгоритм 15.1 называют *методом математических ожиданий* (см., например, [1, 16]). Этот алгоритм совпадает с алгоритмом (1.5) для интеграла (15.2) размерности  $k_1$ , меньшей чем  $d$ . Поэтому алгоритм 15.1 часто называют *методом понижения порядка интегрирования* [1, 16].

**15.2. Уменьшение дисперсии.** Имеет место следующая

ЛЕММА 15.1 (см., например, [1]). *Справедливо равенство – формула полной дисперсии:*

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{D}\zeta^{(1)} + \mathbf{E}\eta \mathbf{D}\gamma(q(\xi)|\eta), \quad (15.3)$$

т. е. полная дисперсия равна сумме дисперсии условного математического ожидания и математического ожидания условной дисперсии.

Из формулы (15.3) следует, что дисперсия условного математического ожидания  $\mathbf{D}\zeta^{(1)}$  не превосходит полной дисперсии  $\mathbf{D}\zeta$ .

**15.3. Использование дополнительных выборочных значений случайного вектора  $\gamma$ .** Следующая возможность использования представления (14.1) для уменьшения трудоемкости связана с реализацией дополнительных выборочных значений  $\{\gamma_k\}$  для приближенного вычисления функции  $q_1(\mathbf{y}) = \mathbf{E}\gamma(q(\xi)|\mathbf{y})$  из (15.1) методом Монте-Карло.

АЛГОРИТМ 15.2. Реализуем  $n$  независимых выборочных значений  $\{\boldsymbol{\eta}_i\}$  случайного вектора  $\boldsymbol{\eta}$  согласно плотности  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})$ . Для каждого  $\boldsymbol{\eta}_i$  получаем  $K(\boldsymbol{\eta}_i)$  независимых реализаций  $\boldsymbol{\gamma}_{i,k}$  случайного вектора  $\boldsymbol{\gamma}$  согласно плотности  $f_{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{z}|\boldsymbol{\eta}_i)$ . Приблизленно вычисляем интеграл (1.4) по формуле

$$I = \mathbf{E}\zeta^{(K)} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{K(\boldsymbol{\eta}_i)} \sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\eta}_i)} q(\boldsymbol{\eta}_i, \boldsymbol{\gamma}_{i,k}), \quad \text{где } \zeta^{(K)} = \frac{1}{K(\boldsymbol{\eta})} \sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\eta})} q(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma}_k) \quad (15.4)$$

и  $\boldsymbol{\gamma}_k$  – независимые одинаково распределенные (как  $\boldsymbol{\gamma}$ ) случайные векторы.

Алгоритм 15.2 называется *методом расщепления* (см., например, [1]). Заметим, что если  $K(\boldsymbol{\eta}) \equiv 1$  (т.е. «расщепления» как такового не происходит), то алгоритм 15.2 превращается в алгоритм (1.5) (здесь  $\zeta^{(K)} = \zeta$ ), при этом значения  $\boldsymbol{\xi}_i = (\boldsymbol{\eta}_i, \boldsymbol{\gamma}_i)$  реализуются согласно алгоритму 5.6 (см. подразд. 5.4): значение  $\boldsymbol{\eta}_i$  моделируется согласно плотности  $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})$ , а  $\boldsymbol{\gamma}_i$  – согласно условной плотности  $f_{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{z}|\boldsymbol{\eta}_i)$ .

Равенство  $I = \mathbf{E}\zeta^{(K)}$  из соотношения (15.4) можно обосновать следующим образом. Рассмотрим вектор  $\vec{\boldsymbol{\gamma}} = (\boldsymbol{\gamma}_1, \dots, \boldsymbol{\gamma}_{K(\boldsymbol{\eta})})$ . Применяя формулу полного математического ожидания, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\zeta^{(K)} &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}} \mathbf{E}_{\vec{\boldsymbol{\gamma}}}(\zeta^{(K)}|\boldsymbol{\eta}) = \mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}} \left( \frac{\mathbf{E}_{\vec{\boldsymbol{\gamma}}} \left( \sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\eta})} q(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma}_k) \mid \boldsymbol{\eta} \right)}{K(\boldsymbol{\eta})} \right) = \\ &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}} \left( \frac{\mathbf{E}_{\boldsymbol{\gamma}}(q(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma}) \mid \boldsymbol{\eta}) K(\boldsymbol{\eta})}{K(\boldsymbol{\eta})} \right) = \mathbf{E}_{\boldsymbol{\eta}} \mathbf{E}_{\boldsymbol{\gamma}}(q(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma}) \mid \boldsymbol{\eta}) = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi}) = I. \end{aligned}$$

В работе [1] приведены соображения о выборе параметра расщепления  $K$ , дающего меньшую трудоемкость (1.9) алгоритма 15.2 по сравнению со стандартным алгоритмом (1.5). В этом же учебнике приведены соображения об использовании многократного расщепления и приведен пример эффективного применения метода расщепления в задаче о переносе частиц.

## 16. Метод расслоенной выборки (выборка по группам)

**16.1. Выборка по группам.** Рассмотрим представление (1.4) 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

$$p_1 + \dots + p_M = 1, \quad I_1 + \dots + I_M = I \quad \text{и} \quad I_m = \mathbf{E}(p_m q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})),$$

где случайный вектор  $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$  распределен в  $X_m$  согласно плотности  $f_m(\mathbf{x})$ .

**АЛГОРИТМ 16.1.** Приблизительно вычислением значения  $I_m$  согласно стандартному алгоритму (1.5) с числом испытаний  $n_m$

$$I_m \approx \frac{p_m}{n_m} \sum_{i_m=1}^{n_m} q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}) \quad \text{и полагаем} \quad I \approx \bar{\zeta}_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \frac{p_m}{n_m} \sum_{i_m=1}^{n_m} q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}), \quad (16.1)$$

здесь  $n = n_1 + \dots + n_M$ .

Алгоритм 16.1 определяет *метод расслоенной выборки* или *выборку по группам* (см., например, [1, 16]). Этот алгоритм отличается при  $M = 2$  от метода интегрирования по части области из разд. 13, т. к. последний предполагает, что интеграл  $I_2$  известен (в то время как в алгоритме 16.1 этот интеграл вычисляется приближенно по выборке  $\{\boldsymbol{\xi}_{i_2}^{(2)}\}$ ).

**16.2. Минимизация дисперсии метода расслоенной выборки.**

Сравним дисперсию  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n = \mathbf{D}\zeta/n$  стандартного метода (1.5) вычисления интеграла  $I$  (здесь случайные точки  $\boldsymbol{\xi}$  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 груп-



пам – суммарное число испытаний)  $n$  и разбиение области интегрирования  $X = X_1 \cup \dots \cup X_M$ . По аналогии с формулой (2.1) имеем

$$\mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \left( \frac{p_m}{n_m} \right)^2 \sum_{i_m=1}^{n_m} \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}) = \sum_{m=1}^M \frac{p_m^2 \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})}{n_m}, \quad (16.2)$$

где

$$\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) = \frac{1}{p_m} \int_{X_m} q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left( \frac{I_m}{p_m} \right)^2; \quad (16.3)$$

здесь использована независимость случайных точек  $\{\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}\}$ .

УТВЕРЖДЕНИЕ 16.1. *Минимум величины  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)}$  равен*

$$d_n^2 = \frac{1}{n} \left( \sum_{m=1}^M p_m \sqrt{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})} \right)^2. \quad (16.4)$$

Эта величина не превосходит  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_n$  и реализуется при

$$n_m = np_m \sqrt{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})} / \sum_{m'=1}^M p_{m'} \sqrt{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m')})}. \quad (16.5)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Величина  $d_n^2$  из (16.4) представима в виде

$$d_n^2 = \left( \sum_{m=1}^M p_m \sqrt{\frac{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})}{n_m}} \times \sqrt{\frac{n_m}{n}} \right)^2.$$

Используя неравенство Коши–Буняковского, получаем

$$d_n^2 \leq \sum_{m=1}^M \frac{p_m^2 \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})}{n_m} \times \sum_{m=1}^M \frac{n_m}{n} = \sum_{m=1}^M \frac{p_m^2 \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})}{n_m},$$

где справа стоит выражение (16.2). Несложно проверить, что при подстановке равенства (16.5) в формулу (16.2) получается соотношение (16.4).

Далее, умножая (16.3) на  $p_m$  и суммируя полученные результаты по  $m$ , имеем

$$\sum_{m=1}^M p_m \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) = \int_X q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \sum_{m=1}^M \frac{I_m^2}{p_m}.$$

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

$$n_m = n p_m. \quad (16.6)$$

Таким образом,  $d_n^2 \leq \mathbf{D}\bar{\zeta}_n^{(M)}|_{n_m=n p_m} \leq \mathbf{D}\bar{\zeta}_n$ . Утверждение 16.1 доказано.

В реальных задачах дисперсии  $\{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})\}$ , как правило, неизвестны и выбор  $\{n_m\}$  по формуле (16.5) невозможен. Однако в процессе доказательства утверждения 16.1 мы показали, что метод расслоенной выборки дает уменьшение дисперсии по сравнению со стандартным алгоритмом (1.5) уже при выполнении условия (16.6). На практике вероятности  $\{p_m\}$ , как правило, известны, и выбор чисел испытаний  $\{n_m\}$  при применении расслоенной выборки происходит по формуле (16.6) (в математической статистике такая выборка называется *типической*). Например, при  $X = Q_d$  и  $f(\mathbf{x}) \equiv 1$  для разбиения (9.7) можно взять все  $n_m$  равными  $n/M$  (позабывшись о том, чтобы это число было целым).

Утверждение 16.1 показывает, что расслоенная выборка по идее близка к выборке по важности (см. разд. 2, 10): здесь также предлагается выбирать больше точек в более «важных» областях, однако выбор регулируется не специальной плотностью, а указанием количества точек в различных областях.

**16.3. 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 (1.5).

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

$$\mathbf{D}\bar{\zeta}_{10} = \frac{1}{10} \left( \int_0^1 e^{2x} dx - \left( \int_0^1 e^x dx \right)^2 \right) = \frac{\frac{e^2}{2} - \frac{1}{2} - (e-1)^2}{10} \approx 0.02421.$$

Теперь разобьем  $(0, 1)$  на два интервала  $(0, 1/2)$  и  $(1/2; 1)$  (т. е. 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 (16.2), 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 (16.5), 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 (в четыре раза) меньше, чем  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_{10}$ . Если же воспользоваться формулами (16.6) и взять  $n_1 = n_2 = 5$ , то

$$\mathbf{D}\bar{\zeta}_{10}^{(M)} = \frac{1}{20} \left( \mathbf{D} \exp \xi^{(1)} + \mathbf{D} \exp \xi^{(2)} \right) \approx 0.006493,$$

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  $\mathbf{D}\bar{\zeta}_{10}$ .

## 17. Оптимальные кубатурные формулы

в  $C^{(1, \dots, 1)}(L, \dots, L; Q_d)$  и  $C^2(L; Q_d)$

**17.1. Оценки с оптимальной скоростью сходимости для  $g(\mathbf{x}) \in C^{(1, \dots, 1)}(L, \dots, L; Q_d)$ .** 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 (1.6) при  $n \rightarrow \infty$ ) алгоритмы численного интегрирования [2, 7]. Приведем соответствующие рассуждения в случае вычисления интеграла по единичному  $d$ -мерному кубу

$$I = \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_0^1 \dots \int_0^1 g(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) dx^{(1)} \dots dx^{(d)}. \quad (17.1)$$

Выберем в качестве функции  $f(\mathbf{x})$  плотность равномерного распределения в  $Q_d$ , т. е.  $f(\mathbf{x}) \equiv 1$  при  $\mathbf{x} \in Q_d$ ; при этом функции  $g(\mathbf{x})$  и  $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})/f(\mathbf{x})$  совпадают.

Положим  $n = M = \mu^d$  и разобьем исходную область интегрирования на равные кубы

$$X_m = \{\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) : (j_m^{(i)} - 1)/\mu \leq x^{(i)} \leq j_m^{(i)}/\mu\}; \quad (17.2)$$

здесь  $i = 1, \dots, d$ ,  $j_m^{(i)} = 1, \dots, \mu$  (см. также формулу (9.7)). В этом случае все вероятности  $p_m$  одинаковы и равны  $1/\mu^d = 1/n$ , а плотности  $f_m(\mathbf{x}) \equiv \mu^d$  являются плотностями равномерного распределения в  $X_m$ .

**АЛГОРИТМ 17.1.** Реализуем по одной случайной точке  $\xi_m$  в каждом кубе  $X_m$  вида (17.2) и вычисляем приближение интеграла (17.1) согласно формуле

$$I \approx \bar{\theta}_n^{(M)} = \frac{1}{\mu^d} \sum_{j_m^{(1)}, \dots, j_m^{(d)}=1}^{\mu} g(\xi_m) = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^M g(\xi_m). \quad (17.3)$$

Для оценки (17.3) выполнено соотношение (16.6) и, согласно рассуждениям из доказательства утверждения 16.1, выполнено  $\mathbf{D}\bar{\theta}_n^{(M)} \leq \mathbf{D}\bar{\zeta}_n$ .

Уточним оценку дисперсии в предположении, что подынтегральная функция  $g(\mathbf{x})$  принадлежит классу  $C^{(1,\dots,1)}(L, \dots, L; Q_d)$  (соответствующее определение дано выше в подразд. 9.4).

Из соотношений (16.2) и (17.3) следует равенство

$$\mathbf{D}\bar{\theta}_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \frac{\mathbf{D}(g(\boldsymbol{\xi}_m))}{n^2} = \sum_{m=1}^M \frac{\mathbf{E}(g(\boldsymbol{\xi}_m) - g_m)^2}{n^2}, \quad (17.4)$$

где  $g_m = \mathbf{E}g(\boldsymbol{\xi}_m) = \mu^d \int_{X_m} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ . Из теоремы о среднем следует, что для каждого  $m$  найдется точка  $\mathbf{x}_m \in X_m$ , такая, что  $\int_{X_m} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = g(\mathbf{x}_m)/\mu^d$ . Следовательно,  $g_m = g(\mathbf{x}_m)$ .

В то же время для приращений  $\Delta^{(i)}$ ,  $i = 1, \dots, d$  имеем

$$\begin{aligned} & g(x^{(1)} + \Delta^{(1)}, \dots, x^{(d)} + \Delta^{(d)}) - g(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) = \\ & = (g(x^{(1)} + \Delta^{(1)}, \dots, x^{(d)} + \Delta^{(d)}) - g(x^{(1)} + \Delta^{(1)}, \dots, x^{(d-1)} + \Delta^{(d-1)}, x^{(d)})) + \\ & + (g(x^{(1)} + \Delta^{(1)}, \dots, x^{(d-1)} + \Delta^{(d-1)}, x^{(d)}) - g(x^{(1)} + \Delta^{(1)}, \dots, x^{(d-1)}, x^{(d)})) + \dots \\ & + (g(x^{(1)} + \Delta^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(d)}) - g(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что для  $g(\mathbf{x}) \in C^{(1,\dots,1)}(L, \dots, L; Q_d)$  выполнено

$$|g(x^{(1)} + \Delta^{(1)}, \dots, x^{(d)} + \Delta^{(d)}) - g(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})| \leq L(|\Delta^{(1)}| + \dots + |\Delta^{(d)}|).$$

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  $\mu^{-1}$ . Поэтому из последнего неравенства, с учетом соотношения  $\Delta^{(i)} < \mu^{-1}$ , имеем

$$|g(\boldsymbol{\xi}_m) - g(\mathbf{x}_m)| \leq Ld\mu^{-1} \quad \text{или} \quad |g(\boldsymbol{\xi}_m) - g_m| \leq Ld\mu^{-1}. \quad (17.5)$$

Используя очевидное неравенство  $|\int_Y z(\mathbf{y}) d\mathbf{y}| \leq \sup_{\mathbf{y} \in Y} |z(\mathbf{y})| \times \text{mes } Y$ , из соотношений (17.4), (17.5) и  $n = M$  получаем

$$\mathbf{D}\bar{\theta}_n^{(M)} \leq \sum_{m=1}^M \frac{\sup_{\mathbf{y}_m \in X_m} (g(\mathbf{y}_m) - g_m)^2}{n^2} \leq$$

$$\leq \sum_{m=1}^M \frac{(Ld\mu^{-1})^2}{n^2} = n n^{-2} L^2 d^2 n^{-2/d} = \frac{L^2 d^2}{n^{1+2/d}}.$$

По аналогии с рассуждениями подразд. 1.3 имеем

$$\mathbf{P} \left( \tilde{\delta}_n^{(M)} = \delta_n^{(M)} \Big|_{n=M} \leq B_\varepsilon \frac{\tilde{\sigma}^{(M)}}{\sqrt{n}} \leq B_\varepsilon \frac{Ld}{n^{1/2+1/d}} \right) \geq 1 - \varepsilon.$$

Здесь  $\tilde{\sigma}^{(M)} = \sqrt{n \mathbf{D} \bar{\theta}_n^{(M)}}$ , причем справедливо неравенство  $\tilde{\sigma}^{(M)} \leq Ld/n^{1/d}$ . Полученный порядок  $t = 1/2 + 1/d$  является для погрешности  $\tilde{\delta}_n^{(M)} \sim n^{-t}$  наилучшим. Это дает следующая

**ЛЕММА 17.1** [2, 7]. *Существуют положительные константы  $H(\mathbf{r}, \mathbf{L})$  и  $P$ , удовлетворяющие следующему соотношению. Для любого натурального  $M$  и любой расслоенной выборки  $\bar{\zeta}_n^{(M)}$  вида (16.1) из алгоритма 16.1 найдется функция  $g(\mathbf{x}) \in C^{\mathbf{r}}(\mathbf{L}; Q_d)$ , для которой*

$$\delta_n^{(M)}(\mathbf{r}, \mathbf{L}) = |\bar{\zeta}_n^{(M)} - I| > \frac{H(\mathbf{r}, \mathbf{L})}{n^{r+1/2}} \quad (17.6)$$

с вероятностью  $P$ ; здесь  $\mathbf{r} = (r^{(1)}, \dots, r^{(d)})$ ,  $\mathbf{L} = (L^{(1)}, \dots, L^{(d)})$ ,  $1/r = 1/r_1 + \dots + 1/r_d$ .

Для рассматриваемого множества функций имеем  $\mathbf{r} = (1, \dots, 1)$ ,  $\mathbf{L} = (L, \dots, L)$  и  $r = 1/d$ . Следовательно, согласно соотношению (17.6), для класса  $C^{(1, \dots, 1)}(L, \dots, L; Q_d)$  получаем  $\tilde{\delta}_n^{(M)} > \tilde{H}/n^{1/2+1/d}$ . Таким образом, для оценки (17.3) нашлись константы  $H_1(P)$  и  $H_2(P)$ , для которых с заданной вероятностью  $P$  выполнено двойное неравенство

$$\frac{H_1(P)}{n^{1/2+1/d}} < \tilde{\delta}_n^{(M)} \leq \frac{H_2(P)}{n^{1/2+1/d}},$$

что означает оптимальность алгоритма 17.1 по порядку  $t$  вероятностной погрешности  $\tilde{\delta}_n^{(M)} \sim n^{-t}$ .

**17.2. Оценки с оптимальной скоростью сходимости для  $g(\mathbf{x}) \in C^2(L; Q_d)$ .** Предположим, что подынтегральная функция  $g(\mathbf{x})$  принадлежит классу  $C^2(L, Q_d) \subset C^{(2, \dots, 2)}(L, \dots, L; Q_d)$  функций, имеющих непрерывные смешанные производные второго порядка, ограниченные в совокупности общей константой  $L$ . Этот случай интересен тем, что в соответствующем оптимальном алгоритме используется метод противоположной переменной по случайному направлению (см. далее разд. 18).

АЛГОРИТМ 17.2. Реализуем по одной случайной точке  $\xi_m$  в каждом кубе  $X_m$  вида (17.2). Строим точку  $\xi_{m,sim}$ , симметричную  $\xi_m$  относительно центра куба  $X_m$ . Вычисляем приближение интеграла (17.1) согласно формуле

$$I \approx \bar{\Theta}_n^{(M)} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left( \frac{g(\xi_m) + g(\xi_{m,sim})}{2} \right) = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^M (g(\xi_m) + g(\xi_{m,sim})); \quad (17.7)$$

здесь  $n = 2M = 2\mu^d$ .

Точки  $\xi_m$  и  $\xi_{m,sim}$  распределены равномерно в  $X_m$ , поэтому

$$\mathbf{E} \left( \frac{g(\xi_m)}{\mu^d} \right) = \mathbf{E} \left( \frac{g(\xi_{m,sim})}{\mu^d} \right) = \mathbf{E} \left( \frac{g(\xi_m) + g(\xi_{m,sim})}{n} \right) = \int_{X_m} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

и, следовательно,  $\mathbf{E} \bar{\Theta}_n^{(M)} = I$ . В силу того, что пары  $(\xi_m, \xi_{m,sim})$  независимы для разных  $m$ , имеем

$$\mathbf{D} \bar{\Theta}_n^{(M)} = \frac{1}{n^2} \sum_{m=1}^M \mathbf{D} (g(\xi_m) + g(\xi_{m,sim})). \quad (17.8)$$

Обозначим через  $\mathbf{x}_m$  центр куба  $X_m$ . Вычитая постоянную под знаком дисперсии, получаем равенство

$$\mathbf{D} (g(\xi_m) + g(\xi_{m,sim})) = \mathbf{D} (g(\xi_m) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\xi_{m,sim})). \quad (17.9)$$

При фиксированной точке  $\xi_m = (\xi_m^{(1)}, \dots, \xi_m^{(d)}) \in X_m$  введем в рассмотрение функцию

$$h(t) = g \left( \frac{j_m^{(1)} - 1/2}{\mu} + \left( \xi_m^{(1)} - \frac{j_m^{(1)} - 1/2}{\mu} \right) t, \dots, \right. \\ \left. \frac{j_m^{(d)} - 1/2}{\mu} + \left( \xi_m^{(d)} - \frac{j_m^{(d)} - 1/2}{\mu} t \right) \right).$$

Очевидно, что  $h(1) = g(\xi_m)$ ,  $h(0) = g(\mathbf{x}_m)$ ,  $h(-1) = g(\xi_{m,sim})$ . В теории численного дифференцирования (см., например, [2]) хорошо известно представление

$$g(\xi_m) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\xi_{m,sim}) = h(1) - 2h(0) + h(-1) = h''(\theta), \quad |\theta| \leq 1.$$

Непосредственным дифференцированием получаем

$$h''(t) = \sum_{i,j=1}^d g_{x_i x_j} \left( \frac{j_m^{(1)} - 1/2}{\mu} + \left( \xi_m^{(1)} - \frac{j_m^{(1)} - 1/2}{\mu} \right) t, \dots, \right. \\ \left. \frac{j_m^{(d)} - 1/2}{\mu} + \left( \xi_m^{(d)} - \frac{j_m^{(d)} - 1/2}{\mu} \right) t \right) \times \\ \times \left( \xi_m^{(i)} - \frac{j_m^{(i)} - 1/2}{\mu} \right) \times \left( \xi_m^{(j)} - \frac{j_m^{(j)} - 1/2}{\mu} \right).$$

Так как  $(\xi_m^{(1)}, \dots, \xi_m^{(d)}) \in X_m$ , то  $|\xi_m^{(i)} - (j_m^{(i)} - 1/2)/\mu| \leq 1/(2\mu)$ . Учитывая, что  $g(\mathbf{x}) \in C^2(L; Q_d)$ , получаем

$$|h''(t)| \leq \frac{Ld^2}{4\mu^2} \text{ при } |t| \leq 1 \text{ и } |g(\xi_m) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\xi_{m,sim})| \leq \frac{Ld^2}{4\mu^2}. \quad (17.10)$$

Из соотношения (17.9) имеем

$$\mathbf{D}(g(\xi_m) + g(\xi_{m,sim})) \leq \mathbf{E}(g(\xi_m) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\xi_{m,sim}))^2 \leq \left( \frac{Ld^2}{4\mu^2} \right)^2.$$

Подставив эту оценку в соотношение (17.8) и вспоминая, что  $n = 2M = 2\mu^d$ , получаем

$$\mathbf{D}\bar{\Theta}_n^{(M)} \leq \frac{1}{n^2} \times M \times \left( \frac{Ld^2}{4\mu^2} \right)^2 = \frac{(Ld^2)^2 2^{4/d}}{32n^{1+4/d}}.$$

По аналогии с рассуждениями раздела 1.3 имеем

$$\mathbf{P} \left( \hat{\delta}_n^{(M)} = \delta_n^{(M)} \Big|_{n=2M} \leq B_\varepsilon \frac{\hat{\sigma}^{(M)}}{\sqrt{n/2}} \leq B_\varepsilon \frac{Ld^2 2^{1/2+2/d}}{8n^{1/2+2/d}} \right) \geq 1 - \varepsilon.$$

Здесь  $\hat{\sigma}^{(M)} = \sqrt{(n/2) \mathbf{D}\bar{\Theta}_n^{(M)}}$ , причем справедливо неравенство  $\hat{\sigma}^{(M)} \leq Ld^2 2^{2/d} / (8n^{2/d})$ . Из леммы 17.1 следует, что полученный порядок  $t = 1/2 + 2/d$  является для погрешности  $\hat{\delta}_n^{(M)} \sim n^{-t}$  неулучшаемым (ведь в соотношении (17.6) для случая  $\mathbf{r} = (2, \dots, 2)$  число  $r$  равно  $r = 2/d$ ).



Заметим, что алгоритмы 17.1 и 17.2 допускают несколько названий. Во-первых, это частные случаи *алгоритма расслоенной выборки* (см. алгоритм 16.1) 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 (17.2), и с выбором одной или двух случайных точек в каждом малом кубе можно отнести алгоритмы 17.1 и 17.2 к *дискретно-стохастическим алгоритмам численного интегрирования*. В-третьих, алгоритмы 17.1 и 17.2 являются частными случаями *случайных кубатурных формул* (см. далее разд. 21).

Отметим, что результаты, представленные в данном разделе и полученные в начале шестидесятых годов двадцатого века Н. С. Бахваловым (см., в частности, работу [7]), вызвали большой научный резонанс и привели к бурному развитию (главным образом, в западноевропейских научных школах) *теории сложности численных алгоритмов* [8]. 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.

## 18. Метод сложной многомерной симметризации

**18.1. Метод противоположной переменной (одномерный случай).** Пусть требуется приближенно вычислить однократный интеграл  $I_0 = \int_a^b g(x) dx$  по конечному интервалу  $a < x < b$ . Рассмотрим стандартный алгоритм метода Монте-Карло (алгоритм 1.1) с плотностью  $f(x) \equiv 1/(b-a)$ ;  $x \in (a, b)$ :

$$I_0 = \mathbf{E}\zeta^{(0)} \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \zeta_j^{(0)}, \quad \text{где } \zeta_j^{(0)} = (b-a)g(a + (b-a)\alpha_j) \quad (18.1)$$

и  $\alpha_j$  – реализации стандартного случайного числа (т. е. случайной величины  $\alpha$ , равномерно распределенной в интервале  $(0, 1)$ ). Рассмотрим теперь *симметризованную функцию*  $g^{(1)}(x) = (g(x) + g(a+b-x))/2$  и

заметим, что

$$I_0 = \int_a^b g^{(1)}(x) dx = \mathbf{E}\zeta^{(1)} \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \zeta_j^{(1)}, \quad \text{где } \zeta_j^{(1)} = (b-a)g^{(1)}(a+(b-a)\alpha_j). \quad (18.2)$$

Алгоритм (18.2) с оценкой  $\zeta^{(1)}$  (вместо  $\zeta^{(0)}$  из (18.1)) называется *методом противоположной переменной* или *методом симметризации подынтегральной функции* (в англоязычной литературе для этого приема используется термин «*antithetic variates*»); см., например, [1, 16]. Несложно показать, что  $\mathbf{D}\zeta^{(1)} \leq \mathbf{D}\zeta^{(0)}$  [1, 16]. Однако для расчета одного значения  $\zeta^{(1)}$  надо вычислить два значения функции  $g(x)$ . Поэтому трудоемкость  $S^{(1)}$  метода противоположной переменной (18.2) будет меньше трудоемкости алгоритма (18.1) 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 [1, 16].

Для уменьшения дисперсии расчетов можно также использовать *сложную симметризацию*, при которой интервал  $(a, b)$  разбивается на конечное число частей  $M$  и для каждой из них используется метод противоположной переменной.

**18.2. Многомерная сложная симметризация: оценка дисперсии, трудоемкость.** Пусть требуется приближенно вычислить интеграл  $I = \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  по  $d$ -мерному единичному кубу  $X = Q_d$ . Рассмотрим симметризованную функцию

$$g^{(1)}(\mathbf{x}) = (g(\mathbf{x}) + g(\mathbf{e} - \mathbf{x}))/2, \quad \text{где } \mathbf{e} = (1, \dots, 1),$$

и оценки  $\zeta^{(0)} = g(\boldsymbol{\alpha})$  и  $\zeta^{(1)} = g^{(1)}(\boldsymbol{\alpha})$ ; здесь точка  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(d)})$  равномерно распределена в кубе  $Q_d$ . Учитывая, что  $\int_{Q_d} g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{Q_d} g^2(\mathbf{e} - \mathbf{x}) d\mathbf{x}$ , имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\zeta^{(0)} - \mathbf{D}\zeta^{(1)} &= \int_{Q_d} g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{4} \int_{Q_d} (g^2(\mathbf{x}) + 2g(\mathbf{x})g(\mathbf{e} - \mathbf{x}) + g^2(\mathbf{e} - \mathbf{x})) d\mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{4} \int_{Q_d} (g^2(\mathbf{x}) - 2g(\mathbf{x})g(\mathbf{e} - \mathbf{x}) + g^2(\mathbf{e} - \mathbf{x})) d\mathbf{x} = \frac{1}{4} \int_{Q_d} (g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{e} - \mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \geq 0, \end{aligned}$$

т. е. многомерный вариант метода симметризации дает уменьшение дисперсии. Показать численную эффективность (т. е. уменьшение дисперсии более, чем в два раза) в многомерном случае удается только численно.

Многомерный аналог сложной симметризации строится следующим образом [9, 25]. Каждое ребро куба  $Q_d$  делится на  $\mu$  равных частей, а сам куб – на  $M = \mu^d$  подкубов  $X_m$  вида (17.2) (см. также формулу (9.7)). Разыгрываем точку  $\alpha$  и в каждом  $X_m$  берем по две точки  $\hat{\xi}_m = (\mathbf{j}_m - \mathbf{e} + \alpha)/\mu$  и  $\hat{\xi}_{m,sim} = (\mathbf{j}_m - \alpha)/\mu$ , где  $\mathbf{j}_m = (j_m^{(1)}, \dots, j_m^{(l)})$ , причем  $j_m^{(i)}$  – целые числа. Точки  $\hat{\xi}_m$  и  $\hat{\xi}_{m,sim}$  симметричны относительно центра куба  $X_m$ . Кроме того, точка  $\hat{\xi}_{m_1}$  может быть получена из  $\hat{\xi}_{m_2}$  с помощью целого числа сдвигов вдоль координат на  $h = 1/\mu$ . Рассмотрим оценку

$$\hat{\Theta}^{(M)} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \eta_m; \quad \eta_m = \frac{g(\hat{\xi}_m) + g(\hat{\xi}_{m,sim})}{2}. \quad (18.3)$$

Сравнивая соотношения (17.7) и (18.3), отметим, что оценку (18.3) можно рассматривать как модификацию метода зависимых испытаний для оптимальной кубатурной формулы Н. С. Бахвалова для  $g(\mathbf{x}) \in C^2(L; Q_d)$ . По аналогии с рассуждениями из подразд. 17.2 изучим дисперсию оценки (18.3) для достаточно больших  $\mu$  и  $M$ .

**УТВЕРЖДЕНИЕ 18.1.** *Если  $g(\mathbf{x}) \in C^2(L; Q_d)$ , то для дисперсии оценки (18.3) выполнено неравенство*

$$\mathbf{D}\hat{\Theta}^{(M)} \leq \frac{L^2 d^4}{64M^{4/d}}. \quad (18.4)$$

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Заметим, что

$$\mathbf{D}\hat{\Theta}^{(M)} = \frac{1}{M^2} \mathbf{E} \left( \sum_{m=1}^M (\eta_m - \mathbf{E}\eta_m) \right)^2 = \frac{1}{M^2} \sum_{m_1, m_2=1}^M \text{cov}(\eta_{m_1}, \eta_{m_2}).$$

Используя неравенство Шварца, получаем

$$\mathbf{D}\hat{\Theta}^{(M)} \leq \frac{1}{M^2} \sum_{m_1, m_2=1}^M \sqrt{\mathbf{D}\eta_{m_1}} \sqrt{\mathbf{D}\eta_{m_2}} = \frac{1}{M^2} \left( \sum_{m=1}^M \sqrt{\mathbf{D}\eta_m} \right)^2. \quad (18.5)$$

Далее, повторяя слово в слово рассуждения подразд. 17.2 (см. формулы (17.8)–(17.10)), получаем

$$\mathbf{D}\eta_m \leq \frac{\mathbf{E} \left( g(\hat{\xi}_m) - 2g(\mathbf{x}_m) + g(\hat{\xi}_{m,sim}) \right)^2}{4} \leq \left( \frac{Ld^2}{8\mu^2} \right)^2;$$

здесь  $\mathbf{x}_m = (\mathbf{j}_m - \mathbf{e}/2)/\mu$  – центр куба  $X_m$ . Подставив эту оценку в соотношение (18.5), с учетом того, что  $M = \mu^d$ , получаем неравенство (18.4). Утверждение 18.1 доказано.

Учитывая неравенство (18.4) и то обстоятельство, что среднее время  $t$  реализации одного выборочного значения оценки (18.3) пропорционально величине  $2M$ , можно предположить следующую зависимость трудоемкости  $\hat{S}^{(M)}$  соответствующего метода Монте-Карло

$$I \approx \tilde{\Theta}_n^{(M)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \hat{\Theta}_i^{(M)}$$

от параметров  $M$  и  $d$ :  $\hat{S}^{(M)} \sim Hd^4M^{1-4/d}$ . Из последнего соотношения следует, что для размерностей  $d < 4$  увеличение  $M$  и  $\mu$  приводит к уменьшению трудоемкости метода сложной симметризации, а для  $d > 4$ , напротив, приводит к увеличению трудоемкости. Нам удалось подтвердить это обстоятельство с помощью тестовых расчетов, проведенных, в том числе, с использованием функций тестовой системы (4.1), (4.3).

## 19. Дискретно-стохастическая версия метода равномерной выборки

**19.1. Лемма о состоятельных оценках.** В ряде случаев удается уменьшить величину трудоемкости (1.9) алгоритма 1.1 с помощью следующей леммы.

ЛЕММА 19.1 [26]. Пусть  $\{\eta_i^{(1)}, \dots, \eta_i^{(s)}, i = 1, \dots, n\}$  – выборка из  $s$ -мерного распределения с конечными средними значениями  $\mathbf{E}\eta_i^{(k)} = \mathbf{E}\eta^{(k)}$  ( $k = 1, \dots, s$ ) и положительно определенной ковариационной матрицей  $\{K^{(k,m)}; k, m = 1, \dots, s\}$ . Пусть также  $\Phi(y^{(1)}, \dots, y^{(s)})$  – функция, имеющая первые производные  $\partial\Phi/\partial y^{(k)} = \Phi^{(k)}$  ( $k = 1, \dots, s$ ) во всех точках некоторой окрестности точки  $\mathbf{y}_0 = (\mathbf{E}\eta^{(1)}, \dots, \mathbf{E}\eta^{(s)})$  и  $\Phi_0^{(k)} = \Phi^{(k)}(\mathbf{y}_0)$ . Тогда если по крайней мере одна из величин  $\Phi_0^{(k)}$  ( $k = 1, \dots, s$ ) не равна нулю, то распределение случайной величины

$$\check{\zeta}_n = \Phi\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta_i^{(1)}, \dots, \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta_i^{(s)}\right) \quad (19.1)$$

при больших  $n$  является асимптотически нормальным со средним  $\mathbf{E}\check{\zeta}_n \approx \Phi(\mathbf{y}_0)$  и дисперсией  $\mathbf{D}\check{\zeta}_n \approx (1/n) \sum_{k,m=1}^s K^{(k,m)} \Phi_0^{(k)} \Phi_0^{(m)}$ .

Стандартному алгоритму (1.5) соответствует случай  $s = 1$  и  $\Phi(y) = y$ . Если  $\Phi(\mathbf{y}_0) = I$ , то лемму 19.1 можно рассматривать как обоснование возможности построения и применения *состоятельных оценок*  $\check{\zeta}_n$ , для которых требуется сходимость  $\check{\zeta}_n \rightarrow I$  при  $n \rightarrow \infty$  по вероятности (*слабая состоятельность*) или почти всюду (*сильная состоятельность*) [26]. Здесь, вообще говоря, условие несмещенности  $\mathbf{E}\check{\zeta}_n = I$  может не выполняться. В разделах 19 и 20 рассмотрены примеры эффективного использования состоятельных оценок вида (19.1).

**19.2. Взвешенная равномерная выборка.** В работе [15] (см. также монографию [16]) предложена следующая модификация стандартного алгоритма 1.1. Рассмотрим задачу вычисления интеграла по  $d$ -мерному единичному кубу:

$$I = \int_{Q_d} q(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) dx, \quad (19.2)$$

причем плотность  $f(\mathbf{x})$  выбрана по принципу выборки по важности:  $f(\mathbf{x}) \approx H|g(\mathbf{x})|$  – см. соотношение (2.5) (в дальнейшем рассмотрим дискретно-стохастическую версию выборки по важности из разд. 10), для которого величина  $\mathbf{D}\zeta$  из (1.9) относительно невелика. Однако в этом случае моделирование случайного вектора  $\boldsymbol{\xi}$  согласно плотности  $f(\mathbf{x})$  (см. алгоритм (1.5)) часто оказывается более трудоемким по сравнению с моделированием вектора  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(d)})$ , равномерно распределенного в кубе  $Q_d$  (т. е. величина  $t$  из (1.9) достаточно велика).

В качестве приближения интеграла (19.2) возьмем величину

$$I \approx \zeta_n^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^n g(\boldsymbol{\alpha}_i) / \sum_{i=1}^n f(\boldsymbol{\alpha}_i). \quad (19.3)$$

Здесь требуется моделировать только равномерно распределенный вектор  $\boldsymbol{\alpha}$ , поэтому величина  $t$  (и в целом вся трудоемкость  $S$  из (1.9)) может существенно уменьшиться.

Оценку (19.3) можно рассматривать как пример использования величины (19.1). Здесь  $\eta^{(1)} = g(\boldsymbol{\alpha})$ ,  $\eta^{(2)} = f(\boldsymbol{\alpha})$  и  $\Phi(y^{(1)}, y^{(2)}) = y^{(1)}/y^{(2)}$ . Лемма 19.1 обосновывает состоятельность оценки (19.3), т. к.  $\mathbf{E}\eta^{(1)} = I$  и  $\mathbf{E}\eta^{(2)} = 1$ . В силу того, что

$$\frac{\partial \Phi(y^{(1)}, y^{(2)})}{\partial y^{(1)}} = \frac{1}{y^{(2)}} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \Phi(y^{(1)}, y^{(2)})}{\partial y^{(2)}} = -\frac{y^{(1)}}{(y^{(2)})^2},$$

из леммы 19.1 получаем, что для достаточно больших  $n$  выполнено соотношение

$$\mathbf{D}\zeta_n^{(\alpha)} \approx \frac{1}{n} \left[ \int_{Q_d} g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left( \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 - 2 \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \times \right. \\ \left. \times \left( \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right) + \left( \int_{Q_d} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - 1 \right) \left( \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 \right]$$

или

$$\mathbf{D}\zeta_n^{(\alpha)} \approx D^{(\alpha)} = \frac{1}{n} \int_{Q_d} (g(\mathbf{x}) - I f(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}. \quad (19.4)$$

В [16] показано, что математическое ожидание оценки  $\zeta_n^{(\alpha)}$  равно

$$\mathbf{E}\zeta_n^{(\alpha)} = I + O\left(\sqrt{\mathbf{D}\zeta_n^{(\alpha)}/n}\right). \quad (19.5)$$

**19.3. Использование аппроксимации Стренга–Фикса.** Следуя разд. 10, в качестве плотности выберем нормированное приближение Стренга–Фикса (см. [20, 21], а также разд. 7) неотрицательной подынтегральной функции  $g(\mathbf{x})$  на равномерной сетке

$$\{\mathbf{x}_i = (j_i^{(1)}h, \dots, j_i^{(d)}h); i = 1, \dots, M; j_k^{(i)} = 0, 1, \dots, \mu\}$$

здесь  $M = (\mu + 1)^d$ ,  $h = 1/\mu$  вида

$$f(\mathbf{x}) = \frac{L_M g(\mathbf{x})}{\tilde{I}} = \frac{1}{\tilde{I}} \sum_{i=1}^M w_i(\mathbf{g}) \chi_i(\mathbf{x}), \quad (19.6)$$

$$\chi_i(\mathbf{x}) = \beta^{(r)}\left(x^{(1)}/h - j_i^{(1)}\right) \times \dots \times \beta^{(r)}\left(x^{(d)}/h - j_i^{(d)}\right),$$

где  $\tilde{I} = \int_{Q_d} L_M g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  – нормирующая константа;  $w_i(\mathbf{g}) = w_i(g(\mathbf{x}_1), \dots, g(\mathbf{x}_M))$  – некоторые коэффициенты, зависящие от значений подынтегральной функции в узлах  $\{\mathbf{x}_i\}$ , а  $\beta^{(r)}(x)$  –  $B$ -сплайн  $r$ -го порядка.

Введем обозначение  $\Delta(\mathbf{x}) = L_M g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x})$ . Из леммы 7.2 следует, что для  $g(\mathbf{x}) \in C^{r+1}(Q_d)$  найдутся коэффициенты  $\{w_i(\mathbf{g})\}$ , такие, что

$$\sup_{\mathbf{x} \in Q_d} |\Delta(\mathbf{x})| = \|g - L_M g\|_{C^0(Q_d)} \leq H_0 \mu^{-r-1} \|g\|_{C^{r+1}(Q_d)} = \rho_r(\mu).$$

Учитывая, что  $\text{mes } Q_d = 1$ , имеем

$$|\tilde{I} - I| = \left| \int_{Q_d} (L_M g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \right| \leq \rho_r(\mu).$$

Перепишем оценку (19.3) в виде

$$\tilde{\zeta}_n^{(\alpha)} = \tilde{I} \sum_{i=1}^n g(\alpha_i) / \sum_{i=1}^n L_M g(\alpha_i); \quad (19.7)$$

**19.4. Зависимость дисперсии от шага сетки.** Выясним, как зависит дисперсия  $\mathbf{D}\tilde{\zeta}_n^{(\alpha)}$  (а значит, и соответствующее смещение (19.5)) от параметра  $\mu$ .

УТВЕРЖДЕНИЕ 19.1. *Существует такое натуральное  $N$ , что для  $n > N$  выполнено неравенство*

$$\mathbf{D}\tilde{\zeta}_n^{(\alpha)} \leq \frac{2\rho_r^2(\mu)}{n\tilde{I}^2} \left( \int_{Q_d} g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + I^2 \right). \quad (19.8)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Неравенство (19.8) следует из приближенно-го равенства (19.4) и цепочки неравенств

$$\begin{aligned} \tilde{D}^{(\alpha)} &= \frac{1}{n} \int_{Q_d} \left( g(\mathbf{x}) - \frac{I L_M g(\mathbf{x})}{\tilde{I}} \right)^2 d\mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{n\tilde{I}^2} \int_{Q_d} (\tilde{I}g(\mathbf{x}) - I L_M g(\mathbf{x}) - I \Delta(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \leq \frac{2(\tilde{I} - I)^2}{n\tilde{I}^2} \int_{Q_d} g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \\ &+ \frac{2I^2}{n\tilde{I}^2} \int_{Q_d} \Delta^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \leq \frac{2\rho_r^2(\mu)}{n\tilde{I}^2} \left( \int_{Q_d} g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + I^2 \right). \end{aligned} \quad (19.9)$$

Здесь использовано очевидное неравенство  $(a - b)^2 \leq 2(a^2 + b^2)$ . Величина  $\tilde{D}^{(\alpha)}$  из (19.9) обозначает константу  $D^{(\alpha)}$  из (19.4) для случая, когда плотность  $f(\mathbf{x})$  имеет вид (19.6). Утверждение 19.1 доказано.

Заметим, что выборочная дисперсия алгоритма выборки по важности (1.5), (19.6) так же, как и в соотношении (19.8), оценивается сверху величиной, пропорциональной  $\rho_r^2(\mu)/n$  (см. разд. 10), т. е. можно считать, что выборочные дисперсии алгоритма выборки по важности и взвешенной равномерной выборки одинаково (по порядку) зависят от шага сетки  $h$  и числа испытаний  $n$  (а выигрыш по времени реализации выборочных значений для оценки (19.7) очевиден).

**19.5. Построение доверительных границ и оптимизация оценок  $\zeta_n^{(\alpha)}$  и  $\tilde{\zeta}_n^{(\alpha)}$ .** На основании леммы 19.1 можно построить доверительные границы для погрешности  $\delta_n^{(\alpha)} = |\zeta_n^{(\alpha)} - I|$  оценки (19.3). Действительно, из этой леммы следует, что случайная величина  $\zeta_n^{(\alpha)}$  для больших  $n$  имеет распределение, близкое к нормальному, с математическим ожиданием  $I$  и дисперсией  $D^{(\alpha)}$ . Следовательно, для больших  $n$  выполнено приближенное равенство  $\mathbf{P}(\delta_n^{(\alpha)} \leq G\sqrt{D^{(\alpha)}}) \approx \mathbf{P}(|\gamma| \leq G)$ , где  $G$  – положительная константа, а  $\gamma \in N(0, 1)$  – стандартная нормальная случайная величина. Отсюда для любого  $\varepsilon > 0$  найдутся константа  $G_\varepsilon$  и натуральное число  $N_0$ , такие, что для всех  $n > N_0$  выполнено неравенство

$$\mathbf{P}\left(\delta_n^{(\alpha)} \leq G_\varepsilon \sqrt{\frac{B^{(\alpha)}}{n}}\right) > 1 - \varepsilon; \quad B^{(\alpha)} = \int_{Q_d} (g(\mathbf{x}) - If(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}. \quad (19.10)$$

На основании соотношений (19.8), (19.10) можно провести оптимизацию оценки (19.7) по параметру  $\mu$  (при фиксированном уровне погрешности  $\delta$ ). Затраты на реализацию этой оценки примерно равны  $\tilde{s}^{(\alpha)} = T(\mu) + n(t_1 + t_2)$ , где  $T(\mu)$  – время на предварительное вычисление величины  $\tilde{I}$ ,  $t_1$  – среднее время вычисления величины  $L_M g(\alpha_i)$ , а  $t_2$  – среднее время для вычисления величины  $g(\alpha_i)$  (затраты на сложение этих величин, на умножение на  $\tilde{I}$  и на одно деление в (19.7) считаем малыми и не учитываем). Считая, что верхняя граница из соотношения (19.10) воспроизводит реальное поведение погрешности  $\delta_n^{(\alpha)}$ , получаем, что при фиксированном  $\delta$  величина затрат  $\tilde{s}^{(\alpha)}$  имеет вид

$$\tilde{s}^{(\alpha)} = T(\mu) + \frac{\tilde{B}^{(\alpha)}(\mu)G^2}{\delta^2}(t_1 + t_2) \quad (19.11)$$

где  $\tilde{B}^{(\alpha)}(\mu)$  – величина из (19.10) при условии, что плотность  $f(\mathbf{x})$  выбирается по формуле (19.6). Заметим, что получение точных аналитических зависимостей величин  $T$  и  $\tilde{B}^{(\alpha)}$  от  $\mu$  затруднено (здесь многое зависит от конкретной реализации оценки (19.7) на ЭВМ). Однако анализ баланса (19.11) приводит к выводу о наличии оптимального значения  $\mu$  и об увеличении этого значения с уменьшением  $\delta$ . Этот вывод подтвержден в тестовых экспериментах [9, 17].

Отметим также, что при относительно больших размерностях  $d$  и значениях числа делений по каждой координате  $\mu$  возникают проблемы (по предварительным затратам, по использованию оперативной памяти ЭВМ) при построении функции  $L_M g(\mathbf{x})$ . Таким образом, с ростом



кратности интеграла эффективность применения как самого метода выборки по важности из разд. 10, так и его модификации (19.7) падает.

## 20. Дискретно-стохастическая версия метода Монте-Карло с поправочным множителем

**20.1. Оценка с поправочным множителем.** Рассмотрим еще одну модификацию алгоритма (1.5), связанную с применением леммы 19.1. Пусть требуется вычислить интеграл (1.4) с заданной плотностью вероятностей  $f(\mathbf{x})$ , определенной в  $X$ , и  $\xi_1, \dots, \xi_n$  – независимые реализации случайного вектора  $\xi$ , распределенного согласно плотности  $f(\mathbf{x})$ . Введем вспомогательную функцию  $H(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in X$ , и рассмотрим случайную величину

$$\zeta_n^{(H)} = \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q(\xi_i) \right) \times \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n H(\xi_i) \right). \quad (20.1)$$

Если в формуле (19.1) положить  $\eta^{(1)} = q(\xi)$ ,  $\eta^{(2)} = H(\xi)$  и  $\Phi(y^{(1)}, y^{(2)}) = y^{(1)} \times y^{(2)}$ , то получится оценка  $\zeta_n = \zeta_n^{(H)}$  из соотношения (20.1). Следующее утверждение уточняет характер сходимости математического ожидания и дисперсии оценки (20.1) к предельным значениям, определяемым леммой 19.1.

**ЛЕММА 20.1** [16]. *Если функции  $q(\mathbf{x})$  и  $H(\mathbf{x})$  принадлежат пространству  $L_2(X; f)$  и  $\mathbf{E}H(\xi) = 1$ , то имеем*

$$\mathbf{E}\zeta_n^{(H)} = I - \frac{1}{n} \int_X q(\mathbf{x})(1 - H(\mathbf{x}))f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (20.2)$$

$$\mathbf{D}\zeta_n^{(H)} = D^{(H)} + O\left(\frac{1}{n^2}\right); \quad D^{(H)} = \frac{1}{n} \int_X (q(\mathbf{x}) - I(2 - H(\mathbf{x})))^2 f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (20.3)$$

В лемме 20.1 через  $L_2(X; f)$  обозначено пространство функций  $y(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in X$ , для которых конечен интеграл  $\int_X y^2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ .

Из соотношения (20.2) видно, что оценка (20.1) будет несмещенной для любой функции  $q(\mathbf{x})$  тогда и только тогда, когда  $H(\mathbf{x}) \equiv 1$  (при этом оценка (20.1) совпадает со стандартной оценкой  $\bar{\zeta}_n$  из (1.5)). Однако для каждой конкретной функции  $q(\mathbf{x})$  существует бесконечно много таких  $H(\mathbf{x})$ , для которых  $\int_X q(\mathbf{x})(1 - H(\mathbf{x}))f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$ .

Из соотношения (20.3) следует, что если

$$H(\mathbf{x}) = 2 - \frac{q(\mathbf{x})}{I}, \quad (20.4)$$

то главный член выражения для  $\mathbf{D}\zeta_n^{(H)}$  обращается в нуль и

$$\mathbf{D}\zeta_n^{(H)} = O(1/n^2). \quad (20.5)$$

Таким образом, подходящий выбор поправочного множителя  $H(\mathbf{x})$  может привести к существенному уменьшению трудоемкости (1.9) метода Монте-Карло. При выполнении (20.4) смещение не обращается в нуль и, согласно (20.2), равно

$$\begin{aligned} I - \mathbf{E}\zeta_n^{(H)} &= \frac{1}{n} \int_X q(\mathbf{x}) \left( 1 - 2 + \frac{q(\mathbf{x})}{I} \right) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{nI} \left( \int_X q^2(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I \int_X q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right) = \frac{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi})}{nI}. \end{aligned} \quad (20.6)$$

Получить соотношения (20.5) и (20.6) на практике не удастся, так как оптимальный выбор функции  $H(\mathbf{x})$  вида (20.4) невозможен (величина  $I$  неизвестна). Можно попытаться использовать дискретные приближения оптимального поправочного множителя.

**20.2. Приближение оптимального множителя. Зависимость смещения и дисперсии от шага сетки.** Для простоты вновь рассмотрим задачу вычисления интеграла (19.2) по  $d$ -мерному единичному кубу, причем  $f(\mathbf{x}) \equiv 1$ . Тогда  $q(\mathbf{x}) \equiv g(\mathbf{x})$  и  $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\alpha}$ . Возьмем

$$H(\mathbf{x}) = 2 - \frac{L_M g(\mathbf{x})}{\tilde{I}}, \quad (20.7)$$

где  $L_M g(\mathbf{x})$  – приближение Стренга–Фикса из (19.6). Получим зависимости смещения и дисперсии оценки  $\tilde{\zeta}_n^{(H)}$ , полученной по формулам (20.1) и (20.7), от шага сетки  $h = 1/\mu$ .

**УТВЕРЖДЕНИЕ 20.1.** 1). *Справедливо неравенство*

$$\left| I - \mathbf{E}\tilde{\zeta}_n^{(H)} \right| \leq \frac{\mathbf{D}g(\boldsymbol{\alpha}) + 2|I|\rho_r(\mu)}{n|\tilde{I}|}. \quad (20.8)$$

2). *Существует такое натуральное  $N$ , что для  $n > N$  выполнено неравенство*

$$\mathbf{D}\tilde{\zeta}_n^{(H)} \leq \frac{2\rho_r^2(\mu)}{n\tilde{I}^2} \left( \int_{Q_d} g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + I^2 \right). \quad (20.9)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. По аналогии с выкладками (20.6) имеем

$$\begin{aligned} \left| I - \mathbf{E}\tilde{\zeta}_n^{(H)} \right| &= \frac{1}{n} \left| \int_{Q_d} g(\mathbf{x}) \left( \frac{g(\mathbf{x}) + \Delta(\mathbf{x})}{\tilde{I}} - 1 \right) d\mathbf{x} \right| = \\ &= \frac{1}{n|\tilde{I}|} \left| \int_{Q_d} \left( (g^2(\mathbf{x}) - I^2) + g(\mathbf{x})\Delta(\mathbf{x}) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (I^2 - g(\mathbf{x})\tilde{I}) \right) d\mathbf{x} \right| \leq \frac{\mathbf{D}g(\boldsymbol{\alpha}) + 2|I|\rho_r(\mu)}{n|\tilde{I}|}, \end{aligned}$$

т. е. неравенство (20.8) верно. В свою очередь, неравенство (20.9) следует из приближенного равенства (20.3) и того обстоятельства, что при подстановке соотношения (20.7) в выражение для  $D^{(H)}$  получается величина  $\tilde{D}^{(\alpha)}$  из (19.9), и, таким образом, можно просто повторить соответствующий фрагмент из доказательства утверждения 19.1. Утверждение 20.1 доказано.

Сравнивая соотношения (19.5) и (20.8), отметим, что, в отличие от метода взвешенной равномерной выборки, смещение алгоритма с поправочным множителем содержит компоненту вида (20.6), не зависящую от параметра  $\mu$ . Эта особенность оценки  $\tilde{\zeta}_n^{(H)}$  подтверждена в тестовых расчетах [9, 17].

Замеченное выше совпадение правых частей неравенств (19.8) и (20.9) означает, что дисперсии дискретно-стохастических версий взвешенной равномерной выборки (19.7) и алгоритма (20.1) с «почти оптимальным» поправочным множителем (20.7) примерно одинаково зависят от  $\mu$  и  $n$ .

**20.3. Построение доверительных границ и оптимизация оценок  $\zeta_n^{(H)}$  и  $\tilde{\zeta}_n^{(H)}$ .** Имеется также аналогия между оценками (19.3) и (20.1) в рассуждениях о получении доверительных границ погрешности  $\delta_n^{(H)} = |\zeta_n^{(H)} - I|$  и о выборе оптимального  $\mu$ . Здесь лемма 19.1 позволяет утверждать, что случайная величина  $\zeta_n^{(H)}$  для больших  $n$  имеет распределение, близкое к нормальному, с математическим ожиданием  $I$  и дисперсией  $D^{(H)}$ . Следовательно, для больших  $n$  выполнено приближенное равенство  $\mathbf{P}(\delta_n^{(H)} \leq G\sqrt{D^{(H)}}) \approx \mathbf{P}(|\gamma| \leq G)$ , где  $G$  – положительная константа, а  $\gamma \in N(0, 1)$  – стандартная нормальная случайная величина. Отсюда для любого  $\varepsilon > 0$  найдутся константа  $G_\varepsilon$  и натураль-

ное число  $N_0$  такие, что для всех  $n > N_0$  выполнено неравенство

$$\mathbf{P} \left( \delta_n^{(H)} \leq G_\varepsilon \sqrt{\frac{B^{(H)}}{n}} \right) > 1 - \varepsilon; \quad B^{(H)} = \int_X (q(\mathbf{x}) - I(2 - H(\mathbf{x})))^2 f(\mathbf{x}) dx. \quad (20.10)$$

Несложно также получить аналог соотношения (19.11) для дискретно-стохастической оценки  $\tilde{\zeta}_n^{(H)}$ , полученной по формулам (20.1), (20.7). Затраты на реализацию этой оценки примерно равны  $\tilde{s}^{(H)} = T(\mu) + n(t_1 + t_2)$ , где  $T(\mu)$  – время на предварительное вычисление величины  $\tilde{I}$ ,  $t_1$  – среднее время вычисления величины  $L_M g(\alpha_i)$ , а  $t_2$  – среднее время для вычисления величины  $g(\alpha_i)$  (затраты на прибавление двойки и деление на  $\tilde{I}$  в (20.7), на сложение величин  $g(\alpha_i)$ ,  $H(\alpha_i)$  и на одно умножение в (20.1) считаем малыми и не учитываем). Считая, что верхняя граница из соотношения (20.10) воспроизводит реальное поведение погрешности  $\delta_n^{(H)}$ , получаем, что при фиксированном  $\delta$  величина затрат  $\tilde{s}^{(H)}$  имеет вид

$$\tilde{s}^{(H)} = T(\mu) + \frac{\tilde{B}^{(H)}(\mu)G^2}{\delta^2}(t_1 + t_2) \quad (20.11)$$

где  $\tilde{B}^{(H)}(\mu)$  – величина из (20.10) при условии, что поправочный множитель выбирается по формуле (20.7). Получение точных аналитических зависимостей величин  $T$  и  $\tilde{B}^{(H)}$  от  $\mu$  затруднено (здесь многое зависит от конкретной реализации оценки (20.1) на ЭВМ). По аналогии с соотношением (19.11), анализ баланса (20.11) приводит к выводу о наличии оптимального значения  $\mu$  и об увеличении этого значения с уменьшением  $\delta$ . Этот вывод подтвержден в тестовых экспериментах [9, 17].

Отметим также, что при относительно больших размерностях  $d$  и значениях числа делений по каждой координате  $\mu$  возникают проблемы по предварительному вычислению величины  $\tilde{I}$  и по использованию оперативной памяти ЭВМ для многократного вычисления значений функции  $L_M g(\mathbf{x})$ . Таким образом, с ростом кратности интеграла эффективность применения модификации (20.1) падает.

Для оценок  $\tilde{\zeta}_n^{(\alpha)}$  и  $\tilde{\zeta}_n^{(H)}$ , безусловно, справедливы выводы работы [27], в которой рассмотрены методы уменьшения дисперсии (в том числе, взвешенная равномерная выборка и метод с поправочным множителем), связанные с выбором функции  $a(\mathbf{x})$ , «сходной» с подынтегральной функцией  $g(\mathbf{x})$ ; это означает что коэффициент корреляции  $\tilde{\rho} = \rho(g(\xi), a(\xi))$  между величинами  $g(\xi)$  и  $a(\xi)$  близок к единице. В [27] получены «универсальные» нижние границы дисперсий для различных

модификаций стандартного метода Монте-Карло (1.5) в терминах величины  $\tilde{\rho}$ .

В нашем случае  $a(\mathbf{x}) = L_M g(\mathbf{x})$ . Это означает, что мы рассматриваем близость функций  $g(\mathbf{x})$  и  $a(\mathbf{x})$  в обычном – «детерминированном» смысле. Вычисление соответствующей величины  $\tilde{\rho}$  здесь представляет собой задачу, эквивалентную по сложности исходной задаче вычисления интеграла (1.4), что затрудняет прямое использование полученных в [27] результатов.

## 21. Случайные кубатурные формулы

**21.1. Основы теории кубатурных формул.** Как указано в предисловии, стандартный алгоритм метода Монте-Карло (см. соотношения (0.2) и (1.5)) можно рассматривать с позиций общей теории кубатурных формул [2, 6], в которой для приближенного вычисления интеграла

$$I = \int_X q(\mathbf{x}) \tilde{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad X \subseteq R^d, \quad (21.1)$$

используется выражение вида

$$I \approx \sum_{i=1}^n C_i q(\mathbf{x}_i). \quad (21.2)$$

Здесь коэффициенты  $\{C_i\}$  называются *весами*, а точки  $\{\mathbf{x}_i \in X\}$  – *узлами кубатурной формулы* (21.2). Фиксированная *весовая функция*  $\tilde{f}(\mathbf{x})$  из (21.1) 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 – как в соотношении (1.4)).

Имеется большое количество подходов, связанных с построением и оптимизацией кубатурных формул. В частности, при построении *кубатурных формул Ньютона–Котеса* [2] 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 (21.2) была точна на множестве многочленов  $\{P_m(\mathbf{x})\}$  наиболее высокой степени  $m$  (точность означает здесь замену приближенного равенства (21.2) 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 1.1 – дает кубатурную формулу (21.2) 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 кубатурной формулы  $\{\mathbf{x}_i\}$ .

В разделе 1 было отмечено, что для малых размерностей  $d$  задач вычисления интеграла (21.1) и для гладких подынтегральных функций  $q(\mathbf{x})$  уже простейшие кубатурные формулы (21.2) имеют более высокую скорость сходимости погрешности  $\delta_n = |I - \sum_{i=1}^n C_i q(\mathbf{x}_i)|$  к нулю при  $n \rightarrow \infty$ .

Продemonстрируем это для случая  $d = 1$  (в этом случае формулы (21.2) называют *квадратурными*),  $X = Q_1 = [0, 1]$  и  $\tilde{f}(\mathbf{x}) \equiv 1$ . Рассмотрим простейшую формулу прямоугольников

$$\int_0^1 q(x) dx \approx \sum_{i=1}^n h q(x_i), \quad h = 1/n, \quad x_i = \frac{i - 1/2}{n} \quad (21.3)$$

(см. также формулу (1.7)). Интересно отметить, что эта формула является оптимальной и как формула Ньютона–Котеса, и как формула Гаусса, и как формула Чебышева.

ЛЕММА 21.1 [2]. Если  $q(x) \in C^2(L; Q_1)$ , то погрешность  $\delta_n$  квадратурной формулы (21.3) оценивается сверху величиной  $L/(24n^2)$ .

Напомним, что класс  $C^2(L; Q_1)$  является частным случаем введенного в разд. 9 множества  $C^{\mathbf{r}}(\mathbf{L}; Q_d)$ . Это означает, в частности, что вторая производная функции  $q(x)$  кусочно-непрерывна и ограничена по модулю константой  $L$  на  $[0, 1]$ .

Однако с ростом размерности  $d$  и для классов негладких функций  $q(\mathbf{x})$  преимущество «детерминированных» кубатурных формул (21.2) перед стохастическими исчезает. Покажем это на примере функций из  $C^{\mathbf{r}}(\mathbf{L}; Q_d)$ . Имеет место следующее

ЛЕММА 21.2 [2]. При условии отделенности весовой функции от нуля:  $\tilde{f}(x) \geq T > 0$ , справедливо соотношение

$$\inf_{C_i, \mathbf{x}_i} \sup_{q \in C^{\mathbf{r}}(\mathbf{L}; Q_d)} \delta_n \geq D(\mathbf{r}, \mathbf{L}; Q_d) T n^{-r}, \quad \text{где } D(\mathbf{r}, \mathbf{L}; Q_d) > 0,$$

$$\mathbf{r} = (r^{(1)}, \dots, r^{(d)}), \quad \mathbf{L} = (L^{(1)}, \dots, L^{(d)}), \quad 1/r = 1/r^{(1)} + \dots + 1/r^{(d)}.$$

Например, для  $q(x) \in C^{(1, \dots, 1)}(L, \dots, L; Q_d)$  выполнено  $\delta_n > H n^{-1/d}$  и уже для  $d \geq 2$  метод Монте-Карло (алгоритм 1.1) сравним с «детерминированной» кубатурной формулой (21.2).

**21.2. Рандомизация кубатурных формул.** Рассуждения из раздела 17 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 17.1, 17.2 из этих подразделов, как и сам стандартный алгоритм 1.1, являются вариантами *случайной кубатурной формулы*

$$I \approx \sum_{i=1}^N \kappa_i q(\xi_i). \quad (21.4)$$

Здесь  $\{\kappa_i\}$ ,  $N$  – скалярные, а  $\{\xi_i\}$  – векторные случайные величины. В алгоритмах 1.1, 17.1, 17.2 случайными являются узлы  $\{\xi_i\}$ , 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 согласно распределению  $\pi = \{p_1, p_2, \dots\}$ ;  $p_n = \mathbf{P}(N = n)$ . Например, для интегрирования на отрезке  $[0, 1]$  можно построить по заданному  $N = n$  формулу прямоугольников (21.3) с  $n$  узлами, либо более сложные формулы такого типа (формулы трапеций, Симпсона и т.п). Выбирая в соответствии с заданным распределением  $\pi$  выборочные значения  $n_1, \dots, n_M$ , оцениваем интеграл  $I$  с помощью среднего арифметического

$$I \approx \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{1}{n_m} \sum_{i=1}^{n_m} q(\mathbf{x}_i^{(m)}).$$

Примером одновременного использования случайных весов  $\{\kappa_i\}$  и случайных узлов  $\{\xi_i\}$  может служить методика, представленная далее в подразд. 21.3.

**21.3. Интерполяционные кубатурные формулы со случайными узлами.** Рассмотрим гильбертово пространство  $L_2(X; f)$  интегрируемых с квадратом с весом  $f(\mathbf{x})$  функций со скалярным произведением  $(q_1, q_2) = \int_X q_1(\mathbf{x})q_2(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ .

Интерполяционная квадратурная формула – это приближение интеграла, полученное путем интегрирования какой-либо интерполяционной формулы для функции  $q(\mathbf{x})$ . Примером таких формул являются формулы Ньютона–Котеса, упомянутые в подразд. 21.1 (при построении этих формул используется полиномиальная интерполяция функции  $q(\mathbf{x})$ ).





В ряде случаев целесообразно рандомизировать формулу (21.7), используя вместо  $X^{(n)}$  случайный вектор  $\tilde{\chi}$ , распределенный согласно плотности

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = H \Delta^2(X^{(n)}) f(\mathbf{x}_1) \times \dots \times f(\mathbf{x}_n).$$

Несложно показать, что нормирующая константа  $H$  равна  $1/n!$ , и, кроме того, выполнено равенство (*формула Ермакова–Золотухина*)

$$I = \mathbf{E}\tilde{\zeta}_n, \quad \tilde{\zeta}_n = \frac{\Delta(\tilde{q}, \tilde{\chi})}{\Delta(\tilde{\chi})}.$$

Случайная величина  $\tilde{\zeta}_n$  представляет собой случайную кубатурную формулу (21.4) со случайными узлами и случайными коэффициентами. Преимущество этой формулы состоит в возможности уточнения формулы (21.7) путем осреднения нескольких реализаций величины  $\tilde{\zeta}_n$ . Дисперсия величины  $\tilde{\zeta}_n$  оценивается сверху величиной

$$\mathbf{D}\tilde{\zeta}_n \leq \int_X \left( q(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n (q, \varphi_i) \varphi_i(\mathbf{x}) \right)^2 f(\mathbf{x}) dx.$$

## 22. Рандомизация метода последовательных приближений

### 22.1. Итерационный процесс с интегральным оператором $K$ .

Рассмотрим задачу приближенного вычисления функционала  $I_h = (\varphi, h)$  (см. формулу (3.1)) от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода  $\varphi = K\varphi + f$  (см. формулу (3.2)) с точки зрения теории итерационных процессов (см., например, [28]). Если оператор  $K$  является сжимающим в банаховом пространстве  $B(X)$  с нормой  $\|f\|_B$  (конкретнее, полагаем  $\|K\|_B \leq q < 1$ ), то решение  $\varphi(x)$  уравнения (3.2) является пределом при  $m \rightarrow \infty$  итерационного процесса:

$$z_{m+1} = f + Kz_m, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

с начальным элементом  $z_0(x) = f(x)$ ; при этом справедливо неравенство [28]:

$$\|\varphi - z_m\|_B \leq \frac{q^m}{1-q} \|z_1 - z_0\|_B. \quad (22.1)$$

В качестве  $B(X)$  возьмем пространство непрерывных функций  $C(X)$  с нормой  $\|f\|_{C(X)} = \sup_{x \in X} |f(x)|$ , где  $X$  – компакт из  $R^l$ .

**22.2. Приближения функционала.** В качестве альтернативы алгоритму 3.1, в котором использована оценка по столкновениям (3.12) для вычисления функционала

$$I_h = \sum_{m=0}^{\infty} \int \dots \int f(y^{(0)}) k(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \dots \times k(y^{(m-1)}, y^{(m)}) h(y^{(m)}) dy^{(0)} \dots dy^{(m)} \quad (22.2)$$

(см. также формулы (3.5), (3.6)) рассмотрим стандартный подход метода последовательных приближений. Зададим некоторое  $s < \infty$  и возьмем приближение

$$I_h \approx I_h^{(s)} = \sum_{m=0}^s (K^m f, h). \quad (22.3)$$

Заметим, что

$$|I_h - I_h^{(s)}| \leq \max_{x \in X} |h(x)| \times \|\varphi - z_s\|_{C(X)}, \quad z_s(x) = \sum_{m=0}^s K^m f(x).$$

В свою очередь, из неравенства (22.1) следует, что

$$\|\varphi - z_s\|_{C(X)} \leq \frac{q^s}{1-q} \|Kf - f\|_{C(X)}.$$

Величину  $s$  следует выбирать таким образом, чтобы было выполнено неравенство

$$\max_{x \in X} |h(x)| \times \frac{q^s}{1-q} \|Kf - f\|_{C(X)} < \tilde{\varepsilon}_s^{(1)}. \quad (22.4)$$

В свою очередь, для приближения интегралов из суммы  $I_h^{(s)}$ , имеющих максимальную кратность  $d = l(s+1)$ , можно построить серию кубатурных формул  $F_{h, n_1}^{(d)}$  с числом узлов  $n_1$ , обеспечивающим выполнение неравенства  $|I_h^{(s)} - F_{h, n_1}^{(d)}| < \tilde{\varepsilon}_s^{(2)}$ . Положительные константы  $\tilde{\varepsilon}_s^{(1)}$  и  $\tilde{\varepsilon}_s^{(2)}$  в сумме должны составлять величину допустимой погрешности  $\tilde{\varepsilon}_s$ .

Достаточно содержательной (и непростой) является задача оптимального согласованного выбора параметров  $s$  и  $n_1$ . Трудности, в частности, связаны с оценкой величин  $q$  и  $\|Kf - f\|_{C(X)}$  в левой части неравенства (22.4). Кроме того, требуется учитывать суммарную трудоемкость  $S(s, n_1)$  получаемого алгоритма. Здесь применим подход, используемый при оптимизации дискретно-стохастических алгоритмов глобальной аппроксимации функций [3, 5]: из уравнения

$$\tilde{\varepsilon}_s^{(1)} + \tilde{\varepsilon}_s^{(2)}(n_1) = \tilde{\varepsilon}_s$$

выражаем  $n_1$  через  $s$  и подставляем полученное выражение  $n_1 = \psi(s)$  в формулу для  $S$ . Далее исследуем функцию одного переменного  $S(s, \psi(s))$  на минимум, находя  $s = s_{min}$ . При проведении практических расчетов полагаем  $s \approx s_{min}$ ,  $n_1 \approx \psi(s_{min})$ . Пример соответствующего рассуждения для конкретной тестовой задачи приведен далее в подразд. 22.6.

Для малых  $\tilde{\varepsilon}_s$  и  $\tilde{\varepsilon}_s^{(1)}$  величина  $d$  может быть достаточно большой, поэтому в качестве  $F_{h, n_1}^{(d)}$  следует выбирать простейшую стохастическую кубатурную формулу (т. е. метод Монте-Карло). При этом возникает проблема разумного выбора плотности соответствующего  $d$ -мерного случайного вектора. Согласно методу выборки по важности (см. разд. 2), наименьшая дисперсия получается для плотности

$$p(\mathbf{y}) = C \left| \sum_{m=0}^s \left( f(y^{(0)})h(y^{(0)}) + \sum_{j=0}^{m-1} f(y^{(0)})k(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times k(y^{(1)}, y^{(2)}) \times \dots \times k(y^{(j)}, y^{(j+1)})h(y^{(j+1)}) \right) \right|, \quad (22.5)$$

где  $\mathbf{y} = (y^{(0)}, y^{(1)}, \dots, y^{(s)})$  и  $C$  – соответствующая нормирующая константа. Выражение (22.5) является, как правило, достаточно громоздким, не дающим возможность построить эффективный алгоритм получения выборочных значений случайного вектора  $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(s)})$  согласно плотности  $p(\mathbf{y})$ .

Отметим, что если требуется вычислить лишь одно слагаемое  $(K^m f, h)$  суммы (22.3), то использование плотности

$$p(y^{(0)}, y^{(1)}, \dots, y^{(m)}) = C f(y^{(0)})k(y^{(0)}, y^{(1)}) \dots k(y^{(m-1)}, y^{(m)})h(y^{(m)})$$

(здесь  $f(y) \geq 0$ ,  $k(y', y) \geq 0$ ,  $h(y) \geq 0$ ) может дать эффективный алгоритм метода Монте-Карло (см. далее тестовые примеры из подразд. 22.3, 22.5).

**22.3. Тестовая задача.** Мы провели численное сравнение подходов, описанных в подразд. 22.2, на примере решения следующего тестового интегрального уравнения второго рода из [1], соответствующего анизотропному рассеянию при переносе излучения.

Рассмотрим одномерную модель переноса малых частиц. Частицы двигаются из точки  $x = 0$  в положительном направлении оси  $x$  случайными пробегами, длины которых распределены с плотностью  $e^{-x}$ ,

$x > 0$ . В конце пробега с вероятностью  $p$  частица поглощается (т. е. ее траектория обрывается), а с вероятностью  $q = 1 - p$  совершает очередной пробег  $\xi^{(m-1)} \rightarrow \xi^{(m)}$ . Поставим задачу оценки вероятности  $P(H)$  вылета частицы за точку  $x = H$ .

Переходная функция для цепи столкновений определяется выражением  $p(y, x) = q \exp(-(x - y))\chi(x - y)$ , где  $\chi(w) = 1$  при  $w \geq 0$  и  $\chi(w) = 0$  при  $w < 0$ . Плотность начального состояния  $\xi^{(0)}$  равна  $\pi(x) = \exp(-x)$ ,  $x > 0$ . Для функции плотности столкновений  $\varphi(x)$  можно записать уравнение

$$\varphi(x) = q \int_0^x e^{-(x-y)} \varphi(y) dy + e^{-x}, \quad x > 0, \quad (22.6)$$

точное решение которого равно  $\varphi(x) = e^{-px}$ . Рассмотрим локальную оценку (см., например, [1]), идея построения которой заключается в рассмотрении первого слагаемого в правой части уравнения (22.6) как функционала вида (3.1), зависящего от параметра  $x$ . Учтем также, что в данной ситуации происходит прямое моделирование ( $f(x) = \pi(x)$ ,  $k(y, x) = p(y, x)$ ). В этом случае локальная оценка имеет вид

$$P(H) = \varphi(H) = \mathbf{E}\zeta^{(H)} + e^{-H} \approx \frac{\zeta_1^{(H)} + \dots + \zeta_n^{(H)}}{n} + e^{-H}, \quad (22.7)$$

$$\zeta^{(H)} = \sum_{m=0}^N q \exp(-(H - \xi^{(m)}))\chi(H - \xi^{(m)}).$$

В качестве  $\xi^{(N)}$  выбирается либо точка поглощения, для которой  $\xi^{(N)} < H$ , либо первая точка для которой выполнено неравенство  $\xi^{(N)} > H$ . Функция  $h(y)$ , определяющая вычисляемый функционал

$$I_h = (\varphi, h) = P(H) - e^{-H} = \mathbf{E}\zeta^{(H)}, \quad (22.8)$$

равна  $h(y) = q \exp(-(H - y))\chi(H - y)$ .

Рассмотрим также метод последовательных приближений (22.3) для подсчета вероятности  $P(H)$ . Погрешность такого приближения в метрике  $C[0, H]$  можно оценить следующим образом:

$$\varepsilon_s^{(1)} = \|I_h - I_h^{(s)}\|_{C[0, H]} = \left\| \left( \sum_{m=s+1}^{\infty} K^m f, h \right) \right\|_{C[0, H]} \leq$$

$$\leq \left\| \sum_{m=s+1}^{\infty} K^m f \right\|_{C[0,H]} \|h\|_{C[0,H]}.$$

Вычислим

$$\begin{aligned} K^m f(x) &= \int \dots \int q^m e^{-y^{(0)}} e^{-(y^{(1)}-y^{(0)})} \times \dots \times e^{x-y^{(m-1)}} \chi(y^{(1)} - y^{(0)}) \times \dots \times \\ &\quad \times \chi(x - y^{(m-1)}) dy^{(0)} \dots dy^{(m-1)} = \frac{q^m x^m}{m!} e^{-x}. \end{aligned}$$

Далее имеем

$$\left\| \sum_{m=s+1}^{\infty} K^m f \right\|_{C[0,h]} = \max_{x \in [0,H]} \left| e^{-x} \sum_{m=s+1}^{\infty} \frac{q^m x^m}{m!} \right| \leq \max_{x \in [0,H]} \frac{e^{-x} q^{s+1} e^{q\delta} x^{s+1}}{(s+1)!},$$

где  $\delta \in [0, x]$ . Здесь использовано то обстоятельство, что выражение  $\sum_{m=s+1}^{\infty} q^m x^m / m!$  является остатком разложения Тейлора формулы  $e^{qx}$ . Следовательно,

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{m=s+1}^{\infty} K^m f \right\|_{C[0,H]} &\leq \frac{q^{s+1} H^{s+1}}{(s+1)!}; \quad \|h\|_{C[0,H]} = \max_{x \in [0,H]} |q e^{-(H-x)}| = q \\ \text{и } \varepsilon_s^{(1)} &\leq \frac{q^{s+2} H^{s+1}}{(s+1)!}. \end{aligned} \quad (22.9)$$

Выражения  $(K^m f, h)$  представляют собой интегралы увеличивающейся (с ростом  $m$ ) размерности. Для их приближенного вычисления можно применить алгоритм выборки по важности из разд. 10. При этом необходимое количество интегралов  $s$  в сумме (22.3) можно найти исходя из требуемой погрешности, преобразовав неравенство для  $\varepsilon_s^{(1)}$  в равенство и воспользовавшись формулой Стирлинга:

$$\varepsilon_s^{(1)} = \frac{q^{s+2} (eH)^{s+1}}{\sqrt{2\pi(s+1)} (s+1)^{s+1}}$$

Отметим, что такая оценка числа слагаемых является завышенной. Минимальное количество слагаемых можно найти, исходя из известного точного решения уравнения (22.6):

$$\varepsilon_s^{(1)} \leq \left| e^{-pH} - e^{-H} \sum_{m=0}^s \frac{q^m H^m}{m!} \right|.$$

**22.4. Результаты численных экспериментов.** В проведенных нами численных экспериментах (см. [9]) для приближения интегралов выбирались плотности, являющиеся кусочно-постоянными приближениями подинтегральных функций, с числом  $\mu$  промежутков постоянства вдоль одной координаты, не большим десяти. В частности, для интегралов малой размерности ( $i \leq 6$ ) выбиралось  $\mu = 10$ , для интегралов большей кратности  $\mu < 10$ . Проведенные расчеты позволяют сделать следующий вывод. В модели переноса частиц с анизотропным рассеянием алгоритм, связанный с использованием локальной оценки для подсчета вероятности  $P(H)$ , уступает по трудоемкости методу последовательных приближений лишь в случае малой вероятности  $P(H)$  выхода за границу  $H$  и малых значений вероятности рассеяния  $q < 0.5$ , т. е. при вычислении небольшого количества интегралов ( $s \leq 10$ ). Для  $q \geq 0.5$  трудоемкость локальной оценки меньше. Отметим, что если требуется вычислить лишь одно слагаемое  $(K^m f, h)$  суммы (22.3), то использование метода выборки по важности может быть весьма эффективным.

**22.5. Использование другого функционала.** Следует заметить, что функционал (22.8) дает не самую убедительную иллюстрацию преимуществ метода последовательных приближений (22.3) из-за отсутствия «длинных» траекторий  $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)}$  в оценке (22.7) (ведь вылет за  $H$  обрывает траекторию). Более показательные результаты дает выбор функции  $h(y)$ , распределенной вдоль всей положительной полуоси, например,

$$h(y) = e^{-By}, \quad y > 0 \quad (22.10)$$

(однако при этом теряется «физический смысл» функционала  $I_h$ ). Для приближения соответствующего функционала (22.2) здесь можно использовать оценку  $\zeta^{(s)} = \sum_{m=0}^s h(\xi^{(m)})$ , причем отрезок цепи Маркова  $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(s)}$  получался с помощью прямого моделирования. Проведенные в работе [9] расчеты показали, что для функционала (3.1) с функцией (22.10) метод последовательных приближений является более эффективным, чем стандартный алгоритм с оценкой по столкновениям.

По аналогии с рассуждениями при получении соотношения (22.9) можно рассмотреть погрешность  $\varepsilon_s^{(1)}$  для функционала  $I_h$  с функцией (22.10). Вычислим

$$(K^m f, h) = \int_0^{+\infty} \dots \int_0^{+\infty} q^m e^{-y^{(0)}} e^{-(y^{(1)}-y^{(0)})} \times \dots \times e^{-(y^{(m)}-y^{(m-1)})} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \chi(y^{(1)} - y^{(0)}) \times \dots \times \chi(y^{(m)} - y^{(m-1)}) e^{-By^{(m)}} dy^{(0)} \dots dy^{(m-1)} dy^{(m)} = \\
& = q^m \int_0^{+\infty} e^{-y^{(m)}(B+1)} \left( \int_0^{y^{(m)}} \frac{(y^{(m-1)})^{m-1}}{(m-1)!} dy^{(m-1)} \right) dy^{(m)} = \\
& = \frac{q^m}{m!} \int_0^{+\infty} e^{-y^{(m)}(B+1)} (y^{(m)})^m dy^{(m)} = \frac{q^m}{(B+1)^{m+1}}.
\end{aligned}$$

Здесь использовано известное свойство гамма-функции:

$$\Gamma(i+1) = \int_0^{\infty} w^i e^{-w} dw = i!.$$

Используя формулу суммы членов бесконечно убывающей геометрической прогрессии, имеем

$$\varepsilon_s^{(1)} = \|I_h - I_h^{(s)}\|_C = \left\| \left( \sum_{i=s+1}^{\infty} K^i f, h \right) \right\|_C = \left( \frac{q}{B+1} \right)^{s+1} \times \frac{1}{B+1-q}.$$

Общую погрешность  $\varepsilon_s$  алгоритма (22.3) перепишем в виде суммы

$$\varepsilon_s = \varepsilon_s^{(1)} + \varepsilon_s^{(2)} \approx \left( \frac{q}{B+1} \right)^{s+1} \times \frac{1}{B+1-q} + \frac{D(s)}{\sqrt{n_1}},$$

где  $D(s) = \sqrt{\mathbf{D}\xi^{(s)}}$ . При проведении численных экспериментов в работе [9] были рассмотрены следующие предельные случаи.

1). При  $s \rightarrow \infty$  было подтверждено, что погрешность  $\varepsilon_s$  ведет себя, как погрешность для метода Монте-Карло без обрыва.

2). При  $n_1 \rightarrow \infty$  было подтверждено, что погрешность  $\varepsilon_s$  зависит только от  $s$  (т. е.  $\varepsilon_s = \varepsilon_s^{(1)}$ ).

**22.6. Согласованный выбор параметров.** Продемонстрируем на рассматриваемом тестовом примере работу сформулированной выше процедуры согласованного выбора параметров  $s$  и  $n_1$  в алгоритме (22.3). Заметим, что трудоемкость этого алгоритма пропорциональна величине  $\tilde{S} = s \times n_1$ . Задаем уровень погрешности  $\tilde{\varepsilon}_s$  и рассматриваем равенство

$$\tilde{\varepsilon}_s = \tilde{\varepsilon}_s^{(1)} + \tilde{\varepsilon}_s^{(2)} = \left( \frac{q}{B+1} \right)^{s+1} \times \frac{1}{B+1-q} + \frac{D(s)}{\sqrt{n_1}}. \quad (22.11)$$

Полагаем  $D(s) \approx D = \text{const}$ , т. к. при малом значении  $\tilde{\varepsilon}_s$  выполнено

$$\mathbf{D}\zeta^{(s)} \approx \mathbf{D}\zeta \left( 1 - \left( \frac{q}{2B+1} \right)^{s+1} \right).$$

Выражая  $n_1$  через  $s$  из соотношения (22.11), имеем

$$\tilde{S}(s) = D^2 s \left/ \left( \tilde{\varepsilon}_s - \left( \frac{q}{B+1} \right)^{s+1} \frac{1}{B+1-q} \right)^2 \right. . \quad (22.12)$$

Последняя функция численно исследовалась на минимум по  $s$ . Поиск минимума сводится к решению уравнения

$$\tilde{\varepsilon}_s - \left( \frac{q}{B+1} \right)^{s+1} \times \frac{1}{B+1-q} + 2 \left( \frac{q}{B+1} \right)^{s+1} \times \frac{s}{B+1-q} \ln \left( \frac{q}{B+1} \right) = 0;$$

это условие равенства нулю производной функции (22.12). В частности, в работе [9] для  $\tilde{\varepsilon}_s = 0.01$ ,  $q = 0.999$ ,  $B = 0.5$  и  $D = 2.1$  установлено, что минимум функции  $\tilde{S}(s)$  достигается примерно при  $s = 19$ . Заметим также, что для  $s = 19$  получилось совпадение теоретического и практического результатов (т. е. при  $s = 19$  для получения заданного уровня погрешности потребовалось минимальное время счета).

## 23. Вычисление винеровских интегралов

**23.1. Винеровский интеграл.** Методы Монте-Карло применимы при вычислении некоторых континуальных интегралов. В частности, в целом ряде задач требуется вычислять так называемые *винеровские интегралы* [29]:

$$I_F = \int_{C[0,T]} F(y) d_w y = \mathbf{E}F(w(t)), \quad (23.1)$$

где  $w(t)$  – сепарабельный винеровский процесс (или одномерное броуновское движение),  $t \in [0, T]$ ,  $C[0, T]$  – пространство всех непрерывных на отрезке  $[0, T]$  функций  $y(t)$ , удовлетворяющих условию  $y(0) = 0$  (траектории сепарабельного винеровского процесса с вероятностью единица непрерывны), а  $F(y(t))$  – непрерывный ограниченный функционал на  $C[0, T]$ .

Конечномерные распределения винеровского процесса определяются совместными плотностями распределения величин  $w(t^{(1)}), \dots, w(t^{(K)})$  для различных  $K$  и  $0 < t^{(1)} < \dots < t^{(K)} \leq T$ , которые имеют вид

$$f_{t^{(1)}, \dots, t^{(K)}}(u^{(1)}, \dots, u^{(K)}) = \prod_{k=1}^K \left[ \frac{1}{(2\pi(t^{(k)} - t^{(k-1)}))^{1/2}} \times \right.$$



$$\times \exp \left( - \frac{(u^{(k)} - u^{(k-1)})^2}{2(t^{(k)} - t^{(k-1)})} \right) \Big], \quad (23.2)$$

где  $t^{(0)} = 0$  и  $u^{(0)} = 0$  [29]. Из формулы (23.2), в частности, следует, что  $w(t)$  – случайный процесс с независимыми гауссовскими приращениями такой, что

$$w(0) = 0, \quad \mathbf{E}(w(t) - w(s)) = 0, \quad \mathbf{D}(w(t) - w(s)) = t - s$$

для любых  $s, t \in [0, T]$ ,  $s \leq t$ .

**23.2. Моделирование траекторий винеровского процесса.** Рассмотрим следующее приближение интеграла (23.1):

$$I_F \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F(w_i(t)), \quad (23.3)$$

где  $w_1(t), \dots, w_n(t)$  – независимые траектории броуновского движения. Эти траектории реализуются приближенно согласно следующей процедуре. Вводится равномерная сетка

$$0 = \hat{t}^{(0)} < \hat{t}^{(1)} < \dots < \hat{t}^{(K-1)} < T^{(K)} = T, \quad \hat{t}^{(k)} = kT/K \quad (23.4)$$

и в качестве приближения траектории  $w_i$  используется ломаная

$$W_i^{(K)}(t) = \sum_{m=0}^{M-1} \sqrt{T/K} \gamma_i^{(m)} + \left( \frac{Kt}{T} - M \right) \sqrt{T/K} \gamma_i^{(M)}, \quad (23.5)$$

где  $\gamma_i^{(m)}$  – независимые значения стандартной нормальной случайной величины (для моделирования этих значений можно использовать формулу (4.2), см. также [1, 4]),  $M = [Kt/T]$  – целая часть числа  $Kt/T$ . При  $0 \leq t < T/K$  имеем  $W_i^{(K)}(t) = (Kt/T) \sqrt{T/K} \gamma_i^{(0)}$ . Построенная ломаная проходит через точки  $(kT/K, w_i(kT/K))$ . С вероятностью единица равномерно по  $t \in [0, T]$  имеем  $W_i^{(K)}(t) \rightarrow w_i(t)$  при  $K \rightarrow \infty$ .

**23.3. Вычисление многократных интегралов.** Интеграл (23.1) можно также приближенно вычислять другим способом. Зафиксируем разбиение (23.4) отрезка  $[0, T]$  и условимся заменять каждую непрерывную кривую  $u(t)$  ломаной типа (23.5):

$$U(t) = u((M-1)T/K) + (Kt/T - (M-1))(u(MT/K) - u((M-1)T/K)) \quad (23.6)$$

при  $t \in [(M-1)T/K; MT/K]$ . Обозначим значения функций  $u(t)$  и  $U(t)$  в узлах сетки (23.4) через  $u(kT/K) = U(kT/K) = u^{(k)}$ ;  $k = 0, 1, \dots, K$ . Значения функционала  $F(U(t))$  на ломаных (23.6) можно рассматривать как функцию  $K$  переменных  $\hat{F}(u^{(1)}, \dots, u^{(K)})$  (для  $i = 0$  имеем  $u^{(0)} = U(0 \times T/K) = 0$ ). Тогда из формулы (23.2) несложно получить, что

$$I_F = \lim_{K \rightarrow \infty} \left( \frac{K}{2\pi T} \right)^{K/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{F}(u^{(1)}, \dots, u^{(K)}) \times \\ \times \exp \left( -\frac{K}{2T} \sum_{i=1}^K (u^{(i)} - u^{(i-1)})^2 \right) du^{(1)} \dots du^{(K)}. \quad (23.7)$$

Соотношение (23.6) показывает, что имеется определенная связь между континуальными интегралами и интегралами бесконечной кратности (во всяком случае, для винеровского интеграла (23.1)). Для приближенного вычисления интеграла  $I_F$  можно вычислять многократные интегралы, стоящие справа в формуле (23.7), для достаточно большого  $K$ . При этом можно, в частности, использовать стандартный метод Монте-Карло (алгоритм 1.1) и его модификации. Однако подобные алгоритмы получаются, как правило, более трудоемкими, чем алгоритм, соответствующий формуле (23.3).

Наличие кусочно-линейных приближений (23.5) и (23.6) траектории  $w_i(t)$  и функции  $u(t)$  соответственно на сетке (23.4) позволяет отнести описанные здесь вычислительные схемы к дискретно-стохастическим численным методам.

## 24. Использование квазислучайных чисел

**24.1. Равномерное распределение последовательности.** Рассмотрим  $d$ -мерный единичный куб  $Q_d$ .

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 24.1** [30]. *Последовательность точек  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$  называется равномерно распределенной в  $Q_d$ , если соотношение*

$$\int_{Q_d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(\mathbf{x}_i)$$

*выполнено для любой функции  $g$ , интегрируемой в  $Q_d$  по Риману.*

ЛЕММА 24.1 [30]. Для того чтобы последовательность точек  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$  была равномерно распределенной в  $Q_d$ , необходимо и достаточно, чтобы для любой подобласти  $G \subseteq Q_d$  выполнялось равенство  $\lim_{n \rightarrow \infty} [S_n(G)/n] = V_G$ ; здесь  $V_G$  – объем области  $G$ , а  $S_n(G)$  – количество точек с номерами  $1 \leq i \leq n$  принадлежащих  $G$ .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 24.2 [30]. Отклонением группы точек  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  называется величина  $D_n = \sup_{\mathbf{x} \in Q_d} [S_n(P_{\mathbf{x}}) - nV_{P_{\mathbf{x}}}]$ , где  $P_{\mathbf{x}}$  – параллелепипед с диагональю  $O\mathbf{x}$  (здесь  $O$  – начало координат) и с ребрами, параллельными координатным осям.

ЛЕММА 24.2 [30]. Для того чтобы последовательность точек  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$  была равномерно распределенной в  $Q_d$ , необходимо и достаточно, чтобы для любой подобласти  $G \subseteq Q_d$  выполнялось равенство  $\lim_{n \rightarrow \infty} (D_n/n) = 0$ .

Чем быстрее убывает соотношение  $D_n/n$ , тем более равномерно распределена последовательность. Известно, что  $1/2 \leq D_n \leq n$  [16], но неясно, каков наилучший порядок роста  $D_n$  при  $n \rightarrow \infty$ . Достаточно подробно исследованы последовательности Холтона и Соболя (см. далее подразд. 24.2), для которых выполнено равенство  $D_n = O(\ln^d n)$  (эти последовательности являются наиболее популярными примерами т. н. квазислучайных чисел).

**24.2. Последовательности Холтона  $\{\mathbf{y}_i\}$  и Соболя  $\{\mathbf{z}_i\}$ .** Пусть  $r_1, \dots, r_d$  – попарно взаимно простые числа (на практике обычно берут первых  $d$  простых чисел:  $r_1 = 1, r_2 = 3, r_3 = 5, \dots$ ). Последовательностью Холтона называется последовательность точек в  $Q_d$  с координатами

$$\mathbf{y}_i = (p_{r_1}(i), \dots, p_{r_d}(i)).$$

Здесь  $p_r(i) = 0, a_1 a_2 \dots a_{m-1} a_m$  (это запись в  $r$ -ичной системе счисления) при  $i = a_m a_{m-1} \dots a_2 a_1$  (это также запись в  $r$ -ичной системе счисления).

Пусть в двоичной системе счисления  $i = e_m e_{m-1} \dots e_2 e_1$ . Для всех  $j = 1, \dots, d$  определим  $q_{i,j} = e_1 V_j^{(1)} * e_2 V_j^{(2)} * \dots * e_m V_j^{(m)}$ . Здесь знаком «\*» обозначена операция поразрядного сложения по модулю два в двоичной системе. Числа  $V_j^{(s)}$  берутся из специальных таблиц (подробности см. в [16, гл. 7]). ЛП<sub>7</sub>-последовательность Соболя образуют точки

$$\mathbf{z}_i = (q_{i,1}, \dots, q_{i,d}).$$

### 24.3. Об использовании квазислучайных чисел и дискретно-стохастических методов в приближенном интегрировании.

В книге [16] отмечена возможность совместного использования квазислучайных и псевдослучайных чисел для повышения эффективности алгоритмов метода Монте-Карло, применяемых для решения задач высокой размерности. Замечено также, что можно ожидать большего эффекта от применения квазислучайных чисел тогда, когда используются более совершенные (с точки зрения величины трудоемкости) алгоритмы метода Монте-Карло.

Имеется достаточно много публикаций, в которых приводятся результаты тестовых вычислений интегралов с использованием квазислучайных чисел. В случаях, когда размерность интегралов была относительно невелика ( $d \leq 10$ ) и подынтегральные функции  $g(\mathbf{x})$  были гладкими, получались значительные выигрыши по скорости сходимости к точному значению интеграла по сравнению с алгоритмом 1.1, в котором использовались случайные или псевдослучайные числа. Как уже отмечалось в разд. 1, именно для таких же размерностей  $d$  и функций  $g(\mathbf{x})$  оказываются эффективными и дискретно-стохастические методы, описанные в данном пособии (это показали проведенные нами многочисленные численные эксперименты, в том числе, с использованием стохастической тестовой системы из разд. 4) [3, 9]. При росте размерности задачи и «сложности» исходных данных (подынтегральной функции, области интегрирования) эффективность использования дискретно-стохастических модификаций и квазислучайных чисел заметно падает; в этих случаях используются «обычные» методы Монте-Карло со случайными или псевдослучайными числами.

Интересной (и пока не исследованной) остается проблема прямого сравнения эффективности использования квазислучайных чисел и описанных здесь дискретно-стохастических методов для интегралов «умеренных» размерностей  $3 \leq d \leq 10$ .

## Библиографический список

1. Михайлов Г. А., Войтишек А. В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Изд. центр «Академия», 2006.
2. Бахвалов Н. С. Численные методы. М.: Наука, 1975.
3. Войтишек А. В. Дискретно-стохастические численные методы (Диссертация на соискание уч. степени доктора физ.-матем. наук). Новосибирск, 2001.
4. Войтишек А. В. Дополнительные сведения о численном моделировании случайных элементов. Новосибирск: НГУ, 2007.
5. Войтишек А. В. Функциональные оценки метода Монте-Карло. Новосибирск: НГУ, 2007.
6. Соболев С. Л., Васкевич В. Л. Кубатурные формулы. Новосибирск: ИМ СО РАН, 1996.
7. Бахвалов Н. С. Об оптимальных оценках скорости сходимости квадратурных процессов и методов интегрирования типа Монте-Карло на классах функций // Численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений и квадратурные формулы. М.: Наука, 1964. С. 5–63.
8. Traub J. F., Wasilkowski G. W. and Wozniakowski H. Information-based Complexity. New York: Academic Press, 1988.
9. Каблукова Е. Г. Адаптивные дискретно-стохастические методы численного интегрирования (Диссертация на соискание уч. степени кандидата физ.-матем. наук). Новосибирск, 2008.
10. Боровков А. А. Теория вероятностей. М.: Наука, 1986.
11. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г., Булгакова Т. Е. Использование спектральных моделей случайных полей при исследовании алгоритмов численного интегрирования // Вычислительные технологии. 2004. Т. 9, специальный выпуск. С. 50–61.
12. Вентцель Е. С. Теория вероятностей. М.: Наука, 1962.
13. Деврой Л., Дерфи Л. Непараметрическое оценивание плотности ( $L_1$ ). М.: Мир, 1988.
14. Милосердов В. В. Дискретно-стохастические численные алгоритмы со сплайн-восполнениями (Диссертация на соискание уч. степени кандидата физ.-матем. наук). Новосибирск, 2006.
15. Handscomb D. C. Remarks on a Monte Carlo integration method // Numerical mathematics. 1964. V. 6. № 4. P. 261–268.
16. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.

17. Бусыгин С. В., Войтишек А. В., Каблукова Е. Г., Ефремов А. И. Дискретно-стохастические состоятельные оценки метода Монте-Карло // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2008. Т. 48, № 9. С. 1543–1555.
18. Бахвалов Н. С., Лапин А. В., Чижонков Е. В. Численные методы в задачах и упражнениях. М.: Высшая школа, 2000.
19. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. М.: Физматгиз, 1962.
20. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1977.
21. Марчук Г. И., Агошков В. И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981.
22. Дэйвид Г. Порядковые статистики. М.: Наука, 1979.
23. Войтишек А. В., Мясников А. П., Санеев Л. Э. Использование алгоритмов численного моделирования порядковых статистик // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2008. Т. 48, № 12. С. 2237–2246.
24. Войтишек А. В., Ухинов С. А. Использование существенной выборки в методе Монте-Карло // Сибирский журнал вычислительной математики. 2001. Т. 4, № 2. С. 111–122.
25. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г. Исследование метода сложной симметризации // Материалы IX Международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». Уфа: ИМВЦ УНЦ РАН, 2007. С. 23–32.
26. Боровков А. А. Математическая статистика. Оценка параметров, проверка гипотез. М.: Наука, 1984.
27. Горбачева Н. Б., Соболев И. М., Трикузов А. И. О множителях, уменьшающих дисперсию при вычислении интегралов методов Монте-Карло // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2001. Т. 41, № 9. С. 1310–1314.
28. Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ. М.: Наука, 1984.
29. Королюк В. С., Портенко Н. И., Скороход А. В., Турбин А. Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. М.: Наука, 1985.
30. Weyl H. Uber die Gleichverteilung von Zahlen mod Eins // Math. Annalen. 1916. V. 77, № 3. P. 313–352.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие .....	3
1. Вычисление интеграла методом Монте-Карло. Погрешность и трудоемкость метода Монте-Карло .....	6
2. Метод выборки по важности. Включение особенности в плотность .....	10
3. Вычисление бесконечных сумм интегралов методом Монте-Карло .....	13
4. Стохастическая тестовая система функций .....	17
5. Методы численного моделирования случайных векторов .....	20
6. Использование кусочно-полиномиальных приближений функций в методах Монте-Карло. Моделируемые базисы .....	31
7. Моделируемость аппроксимации Стренга–Фикса .....	36
8. Моделируемость аппроксимации Бернштейна .....	40
9. Двусторонний геометрический метод (дискретно-стохастическая версия) .....	42
10. Дискретно-стохастическая версия метода выборки по важности	48
11. Использование существенной выборки в методе Монте-Карло ..	51
12. Дискретно-стохастическая версия метода выделения главной части .....	54
13. Интегрирование по части области .....	55
14. Выборка по важности по части переменных .....	60
15. Метод математических ожиданий и метод расщепления (сравнение постановок задач) .....	62
16. Метод расслоенной выборки (выборка по группам) .....	64
17. Оптимальные кубатурные формулы в $C^{(1,\dots,1)}(L, \dots, L; Q_d)$ и $C^2(L; Q_d)$ .....	68
18. Метод сложной многомерной симметризации .....	73
19. Дискретно-стохастическая версия метода равномерной выборки .....	76
20. Дискретно-стохастическая версия метода Монте-Карло с поправочным множителем .....	81
21. Случайные кубатурные формулы .....	85

22. Рандомизация метода последовательных приближений .....	89
23. Вычисление винеровских интегралов .....	96
24. Использование квази-случайных чисел .....	98
Библиографический список .....	101