УДК 519.676 На правах рукописи

КАБЛУКОВА Евгения Геннадьевна

АДАПТИВНЫЕ ДИСКРЕТНО-СТОХАСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

01.01.07 – вычислительная математика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск, 2008

Работа выполнена в Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск).

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук **Войтишек Антон Вацлавович**
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук **Васкевич Владимир Леонтьевич**
	кандидат физико-математических наук **Попов Анатолий Степанович**
Ведущая организация:	**Сибирский федеральный университет, г. Красноярск**

Защита состоится 15 января 2009 года в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 003.015.04 при Институте математики им. С. Л. Соболева СО РАН по адресу: г. Новосибирск, пр. Академика Коптюга, 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН.

Автореферат разослан 26 ноября 2008 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 003.015.04
кандидат физико-математических наук

В. Л. Мирошниченко

Общая характеристика работы

Актуальность темы. С развитием вычислительной техники возрастает интерес к численным методам решения прикладных задач. Часто оказывается целесообразным сведение (или постановка) задачи к интегральной форме, когда исследуемая функция представляет собой многократный интеграл, зависящий от параметра, или является решением интегрального уравнения. В последнем случае при оценке требуемых функционалов используются численные методы приближенного вычисления получаемых многократных интегралов на ЭВМ.

Для интегралов I малых размерностей с гладкими (в обычном или обобщенном смыслах) подынтегральными функциями и относительно простыми областями интегрирования развита *теория кубатурных формул*. Кубатурная формула в общем случае имеет вид

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

где $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ – заданные детерминированные (и, как правило, регулярные) узлы сетки в R^l, а $\{c_1, \dots, c_n\}$ – веса. Оптимальный выбор узлов и весов в (1) связан с минимизацией погрешности $\delta_n = |I - S_n|$ и основан (явно или неявно) на использовании аппроксимаций подынтегральной функции g. Главным достоинством кубатурных формул является возможность получения гарантированной и сравнительно быстрой сходимости δ_n к нулю при $n \to \infty$ для классов гладких подынтегральных функций g.

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 и к гладкости начальных данных (подынтегральной функции g 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 $l \gg 1$ и даже $l \to \infty$) достаточно эффективным оказывается *стандартный метод Монте-Карло*. Этот алгоритм основан на представлении

$$I = \int q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta \approx \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \zeta_j \quad \zeta = q(\boldsymbol{\xi}) = \frac{g(\boldsymbol{\xi})}{f(\boldsymbol{\xi})}; \qquad (2)$$

здесь l-мерный случайный вектор $\boldsymbol{\xi}$ распределен согласно плотности f. Этот алгоритм имеет следующие положительные свойства. Имеется возможность уменьшения трудоемкости алгоритма за счет удачного (согласованного с видом подынтегральной функции g) выбора весовой функции f (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. Эффективность алгоритма (2) относительно слабо зависит от роста размерности l и от отсутствия гладкости начальных данных. 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.

Эффективными могут оказаться и смешанные, комбинированные процедуры численного интегрирования, сочетающие в себе элементы кубатурных формул и метода Монте-Карло. Как правило, эти схемы содержат «детерминированную» составляющую, связанную с регулярной дискретизацией области X, а также «стохастическую» составляющую, связанную с применением метода Монте-Карло. Поэтому мы будем называть такие алгоритмы *дискретно-стохастическими*.

По-видимому, одна из первых численных схем подобного рода была представлена Н.С.Бахваловым в начале шестидесятых годов прошлого века. Исходной областью X являлся l-мерный единичный куб Q_l, 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). Представленный 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 δ_n при $n \to \infty$) в пространстве непрерывно дифференцируемых подынтегральных функций $C^1(Q_l)$. Для этого ему потребовалось получать оценки сверху и снизу для δ_n. Методология работ Н.С.Бахвалова явилась основой для интенсивного развития так называемой *теории сложности*. 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 оба множителя трудоемкости $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ метода Монте-Карло (здесь t – среднее время получения одного выборочного значения случайной величины ζ, а $\mathbf{D}\zeta$ – дисперсия этой величины). В ряде случаев удается получить эффективные дискретно-стохастические модификации алгоритма (2), 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.

Основные цели работы. Разработать и исследовать эффективные дискретно-стохастические алгоритмы численного интегрирования. Провести тестирование этих алгоритмов на основании построения стохастических систем функций и решения прикладных задач.

Методика исследований базируется на теории методов Монте-Карло и кубатурных формул. Использованы также элементы теории проекционно-сеточных методов.

Научная новизна работы. В диссертации получены следующие новые результаты, выносимые на защиту.

1. Проведен сравнительный анализ дискретно-стохастических методов понижения дисперсии (выборка по важности, выделение главной части, метод симметризации переменных, выборка по группам). Изучены предельные случаи, приводящие к оптимальным (с точки зрения теории сложности) кубатурным формулам.

2. Разработан двусторонний геометрический метод Монте-Карло. Исследованы вопросы оптимизации этого метода для кусочно-постоянных мажорант и минорант подынтегральной функции.

3. Исследована эффективность дискретно-стохастических состоятельных оценок метода Монте-Карло: взвешенной равномерной выборки и оценки с поправочным множителем. Получены верхние оценки дисперсий и оценены затраты соответствующих дискретно-стохас-

тических численных схем.

4. Проведено сравнение численных алгоритмов аппроксимации решения интегрального уравнения второго рода на основе рандомизации конечных и бесконечных отрезков ряда Неймана. Исследованы возможности использования отрезков однородных цепей Маркова конечной и случайной длины, а также эффективных дискретно-стохастических методов численного интегрирования. Представлены примеры, подтверждающие целесообразность использования смещенных детерминированно-стохастических оценок решения.

5. Проведен сравнительный анализ известных аппроксимационных базисов с точки зрения использования их в алгоритмах численного статистического моделирования. Показана целесообразность использования приближений Стренга–Фикса и Бернштейна в дискретно-стохастических численных схемах.

6. Рассмотрены возможности применения траекторий спектральных (гауссовских и негауссовских) моделей случайных функций при тестировании численных алгоритмов интегрирования. Такой подход позволил добиться независимости тестирования, получить требуемые свойства подынтегральных функций (гладкость, «сложность» вычисления и др.), вывести аналитические выражения для средних погрешностей. Исследован вопрос о слабой сходимости используемых негауссовских численных моделей.

Практическая ценность работы. Разработанные в диссертации дискретно-стохастические алгоритмы численного интегрирования могут быть использованы при численном решении прикладных задач «умеренно большой» размерности (от трех до десяти).

Публикации. Основные результаты опубликованы в 24 работах, список которых помещен в конце автореферата. Работы [А1–А5, Б1, В1, В3, В5, В6, В9, Г1, Г3, Г7, Г8] написаны автором совместно с А. В. Войтишеком и Т. Е. Булгаковой. С согласия А. В. Войтишека и Т. Е. Булгаковой совместно полученные в этих работах результаты частично включены в представляемую диссертационную работу. Кроме того, имеется ряд трудов, написанных автором индивидуально и с соавторами-студентами (О. С. Герасимовой, Н. В. Лощиной, А. И. Ефремовым, С. В. Бусыгиным); в последнем случае автор диссертации являлся научным руководителем соответствующих исследований [Б2, В2, В4, В7, В8, Г2, Г4–Г6]. Полученные в этих статьях и тезисах результаты также включены в диссертационную работу.

Апробация работы. Результаты, изложенные в диссертации, были представлены в докладах на международной конференции по вычислительной математике в Новосибирске (июнь 2002 года) [В5]; на Международной конференции по Монте-Карло и квази-Монте-Карло методам (Ульм, Германия, август 2006 года) [Г3]; на международных семинарах-совещаниях «Кубатурные формулы и их приложения»: в Красноярске (сентябрь 1999 года) [В1], в Уфе (июль 2001 года) [В3], в Красноярске (август 2003 года) [А3, В6], в Улан-Удэ (август 2005 года) [А4, В8], в Уфе (июнь 2007 года) [Г7, Г8]; на конференциях молодых ученых Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (март 2001 года [В2], март 2002 года [В4], апрель 2004 года [В7]); на Международных студенческих конференциях «Студент и научно-технический прогресс» (Новосибирск, НГУ; апрель 2003 года [Г1], апрель 2004 года [Г2], апрель 2007 года [Г4–Г6]) и неоднократно на семинаре отдела статистического моделирования в физике ИВМиМГ СО РАН.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, содержащих 9 разделов, заключения, списка литературы из 58 наименований. Объем работы – 80 машинописных страниц.

Краткое содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, дано краткое описание рассматриваемых в диссертации вычислительных конструкций, описаны цель, структура и апробация диссертации.

В *разделе 1.1* **первой главы** изучены возможности применения приближений

$$g(\mathbf{x}) \approx L_M g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{M} w_i \chi_i(\mathbf{x}), \tag{3}$$

на компактном множестве $X \subset R^l$ в методах Монте-Карло. В формуле (3) $L_M g$ обозначает аппроксимацию (или интерполяцию) функции g на сетке $Y^{(M)} = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_M\}$. Базисные функции $\Xi^{(M)} = \{\chi_1, \dots, \chi_M\}$ и коэффициенты $W^{(M)} = \{w_1, \dots, w_M\}$ определенным образом связаны с узлами сетки $Y^{(M)}$. Отмечено, что приближения вида (3) могут использоваться при моделировании случайных величин (в частности, при применении гистограмм, полигонов частот и других приближений вероятностных плотностей; при построении мажорант и минорант в двустороннем методе исключения), в численном интегрировании и при построении функциональных оценок метода Монте-Карло. В перечисленных приложениях функции базиса $\Xi^{(M)}$ должны удовлетворять следующим требованиям:

а) базисные функции $\chi_i(\mathbf{x})$ и коэффициенты $\{w_i\}$ неотрицательны;

б) выборочные значения согласно вероятностным плотностям, пропорциональным $\{\chi_i(\mathbf{x})\}$, эффективно численно реализуемы;

в) функция $g(\mathbf{x})$ близка к функции $L_M g(\mathbf{x})$ в некоторой функциональной норме;

г) аппроксимация (3) устойчива.

В разделе 1.1 проведен анализ классических аппроксимационных базисов с точки зрения сформулированных требований. Показано, что наиболее удачной для использования в дискретно-стохастических численных процедурах является конечно-элементная аппроксимация Стренга–Фикса. Отмечена также возможность применения (в одномерном случае) базисных функций Бернштейна.

В *разделе 1.2* более подробно исследована возможность применения приближений (3) в алгоритмах численного интегрирования. Сначала рассмотрена дискретно-стохастическая версия алгоритма *выборки по важности*, в котором плотность f из (2) имеет вид

$$f(\mathbf{x}) = CL_M|g(\mathbf{x})|, \tag{4}$$

где C – нормирующая константа. Получена зависимость дисперсии соответствующей оценки метода Монте-Карло от шага h сетки $Y^{(M)}$. Изучен прием «подъема» подынтегральной функции. Получено выражение для оптимального шага сетки h, минимизирующего трудоемкость алгоритма выборки по важности с плотностью (4). Изучена зависимость средней дисперсии дискретно-стохастической версии выборки по важности от параметров A и K в случае использования функций из стохастической тестовой системы (см. далее описание главы 3 и формулу (16)).

Аналогичные оценки и выражения получены для дискретно-стохастической версии метода *выделения главной части*, основанной на соотношениях

$$I = I_0 + \int_X (g(\mathbf{x}) - g_0(\mathbf{x}))\, d\mathbf{x} \approx I_0 + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\big(q(\boldsymbol{\xi}_j) - q_0(\boldsymbol{\xi}_j)\big); \tag{5}$$

$$g_0(\mathbf{x}) = L_M g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{M} g(\mathbf{y}_i)\, \chi_i(\mathbf{x}),$$

где $q_0(\boldsymbol{\xi}) = g_0(\boldsymbol{\xi})/f(\boldsymbol{\xi})$. При сравнении дискретно-стохастические алгоритмы выборки по важности и выделения главной части особо отмечено, что порядки уменьшения дисперсии по шагу сетки h одинаковы, а реализация алгоритма (5), как правило, проще (в частности, для ограниченных областей интегрирования X целесообразно использовать плотность f равномерного распределения).

К дискретно-стохастическим схемам численного интегрирования приводят также предельные случаи *метода сложной многомерной симметризации*, который строится следующим образом. Каждое ребро области интегрирования – единичного куба Q_l – делится на μ равных частей, а сам куб – на $M = \mu^l$ подкубов X_m вида

$$X_m = \left\{\mathbf{x} = \left(x^{(1)}, \ldots, x^{(l)}\right) : (j_m^{(i)} - 1)/\mu \le x^{(i)} \le j_m^{(i)}/\mu\right\};$$

$i = 1, \ldots, l$, $j_m^{(i)} = 1, \ldots, \mu$. Разыгрывается равномерно распределенная в Q_l точка $\boldsymbol{\alpha}$ и в каждом X_m берется по две точки $\boldsymbol{\xi}_m = (\mathbf{j}_m - \mathbf{e} + \boldsymbol{\alpha})/\mu$ и $\boldsymbol{\xi}_{m,sim} = (\mathbf{j}_m - \boldsymbol{\alpha})/\mu$, где $\mathbf{j}_m = \left(j_m^{(1)}, \ldots, j_m^{(l)}\right)$, причем $j_m^{(i)}$ – целые числа, и $\mathbf{e} = (1, \ldots, 1)$ – единичный вектор. Точки $\boldsymbol{\xi}_m$ и $\boldsymbol{\xi}_{m,sim}$ симметричны относительно центра куба X_m. Кроме того, точка $\boldsymbol{\xi}_{m_1}$ может быть получена из $\boldsymbol{\xi}_{m_2}$ с помощью целого числа сдвигов вдоль координат на $h = 1/\mu$. Рассмотрим оценку

$$\Theta^{(M)} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} w_m; \quad w_m = \frac{g(\boldsymbol{\xi}_m) + g(\boldsymbol{\xi}_{m,sim})}{2}. \tag{6}$$

В разделе 1.2 получено выражение для трудоемкости алгоритма метода Монте-Карло с оценкой (6) и теоретически и численно показано, что сложная симметризация может дать выигрыш лишь для размерностей, меньших четырех (как и для простейших кубатурных формул типа формулы прямоугольников). Отмечено также, что оценку (6) можно рассматривать как «метод зависимых испытаний» для *выборки по группам*, а точнее, алгоритма Бахвалова, оптимального (в смысле теории сложности) в пространстве $C^2(Q_l)$, в котором выбор точек $\boldsymbol{\xi}_m$ и $\boldsymbol{\xi}_{m,sim}$ происходит в каждом подмножестве X_m. Преимущества и недостатки (связанные с выбором большого числа случайных точек) этого алгоритма подтверждены в численных экспериментах, в том числе, с использованием тестовых функций вида (16).

В *разделе 1.3* рассмотрен *геометрический метод Монте-Карло*, который строится следующим образом. Пусть для функции q из (2) выполнено соотношение $0 \le q(\mathbf{x}) < \psi_{up}(\mathbf{x})$. Введем дополнительную координату $x^{(l+1)}$ и в $(l{+}1)$-мерном пространстве $\big(x^{(1)}, \ldots, x^{(l)}, x^{(l+1)}\big)$ рассмотрим область $G = \{(\mathbf{x}, x^{(l+1)}) : \mathbf{x} \in X; 0 < x^{(l+1)} < \psi_{up}(\mathbf{x})\}$, а в ней – случайную точку $\tilde{\boldsymbol{\xi}} = \big(\tilde{\xi}^{(1)}, \ldots, \tilde{\xi}^{(l)}, \tilde{\xi}^{(l+1)}\big)$, распределенную согласно плотности $\tilde{f}\big(x^{(1)}, \ldots, x^{(l)}, x^{(l+1)}\big) = \tilde{f}\big(\mathbf{x}, x^{(l+1)}\big) = f(\mathbf{x})/\psi_{up}(\mathbf{x})$. Заметим, что в этом случае вектор $\boldsymbol{\xi} = \big(\tilde{\xi}^{(1)}, \ldots, \tilde{\xi}^{(l)}\big)$ распределен согласно плотности f в X, а компонента $\tilde{\xi}^{(l+1)}$ условно равномерно распределена в интервале $(0, \psi_{up}(\boldsymbol{\xi}))$. Алгоритм состоит в реализации n значений $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_j = \big(\boldsymbol{\xi}_j, \tilde{\xi}_j^{(l+1)}\big)$, $j = 1, \ldots, n$, $(l+1)$-мерного случайного вектора $\tilde{\boldsymbol{\xi}}$ и в построении оценки вида

$$I \approx \hat{\theta}_n = (1/n) \sum_{j=1}^{n} \psi_{up}(\boldsymbol{\xi}_j) \chi_{\tilde{G}}\big(\boldsymbol{\xi}_j, \hat{\xi}_j^{(l+1)}\big),$$

где $\chi_{\tilde{G}}$ – индикатор множества

$$\tilde{G} = \big\{\big(\mathbf{x}, x^{(l+1)}\big) :\ \mathbf{x} \in X,\ 0 \le x^{(l+1)} \le q(\mathbf{x})\big\}.$$

При вычислении значения $\chi_{\tilde{G}}\big(\boldsymbol{\xi}_j, \hat{\xi}_j^{(l+1)}\big)$ требуется проверять неравенство

$$\tilde{\xi}_j^{(l+1)} \le q(\boldsymbol{\xi}_j). \tag{7}$$

В разделе 1.3 показано, что за исключением «экзотических» случаев, для которых удается реализовать экономичные способы проверки неравенства (7), геометрический метод является неэффективной модификацией стандартного алгоритма (2). Здесь же рассмотрена дискретно-стохастическая версия *двустороннего геометрического метода* и показано, что этот алгоритм весьма эффективен в случае, когда вычисление значений функции $q(\mathbf{x})$ трудоемко. Идея двустороннего метода состоит в построении легко вычислимых (например, кусочно-постоянных) приближений «снизу» и «сверху» для функции $q(\mathbf{x})$: $\psi_{low}(\mathbf{x}) \le q(\mathbf{x}) \le \psi_{up}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in X$. При реализации проверки типа (7) сначала сравниваются значения $\tilde{\xi}_j^{(l+1)}$ и $\psi_{low}(\boldsymbol{\xi}_j)$.

Если функции $\psi_{low}(\mathbf{x})$, $q(\mathbf{x})$ и $\psi_{up}(\mathbf{x})$ близки, то трудоемкая проверка неравенства (7) происходит достаточно редко, и можно достичь существенного уменьшения общей трудоемкости алгоритма. В разделе 1.3 предложены приближенные алгоритмы построения функций $\psi_{low}(\mathbf{x})$ и $\psi_{up}(\mathbf{x})$ и в простейшем случае интегрирования по единичному кубу Q_l найдены оптимальные значения для соответствующего шага сетки. Теоретические выводы подтверждены тестовыми расчетами, в том числе, с использованием функций (16).

В первых двух разделах **второй главы** рассмотрены возможности применения леммы о комбинациях усредненных выборочных сумм для построения эффективных состоятельных оценок численного интегрирования.

В *разделе 2.1* рассмотрена модификация дискретно-стохастической версии выборки по важности (2), (4) для случая интегрирования по единичному кубу Q_l – *взвешенная равномерная выборка*:

$$I \approx \theta_n^{(1)} = \sum_{i=1}^{n} q(\boldsymbol{\alpha}_i) f(\boldsymbol{\alpha}_i) \Big/ \sum_{i=1}^{n} f(\boldsymbol{\alpha}_i) = \tilde{I} \sum_{i=1}^{n} g(\boldsymbol{\alpha}_i) \Big/ \sum_{i=1}^{n} L_M g(\boldsymbol{\alpha}_i), \quad (8)$$

где $\tilde{I} = \int_{Q_l} L_M g(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}$. Здесь требуется моделировать равномерно распределенный вектор $\boldsymbol{\alpha}$ вместо $\boldsymbol{\xi}$, что дает существенное уменьшение трудоемкости алгоритма (2). Оценка (8) является состоятельной со смещением $\mathbf{E}\theta_n^{(1)} = I + O\left(\sqrt{\mathbf{D}\theta_n^{(1)}/n}\right)$. Главный член дисперсии для $n \gg 1$ имеет вид $\mathbf{D}\theta_n^{(1)} \approx (1/n) \int_{Q_l} \left(q(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) - I f(\mathbf{x})\right)^2 \, d\mathbf{x}$. Получена зависимость дисперсии $\mathbf{D}\theta_n^{(1)}$ от шага сетки $h = 1/\mu$:

$$\mathbf{D}\theta_n^{(1)} \leq \frac{2 d_\mu^2}{n \tilde{I}^2} \left(\int_{Q_l} g^2(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} + I^2 \right); \quad d_\mu = \| g - L_M g \|_{C^0(Q_l)}. \quad (9)$$

Построены доверительные границы погрешности:

$$\mathbf{P}\left(\delta_n^{(1)} \leq \gamma_\varepsilon \sqrt{C_1/n} \right) > 1 - \varepsilon; \quad C_1 = \int_{Q_l} \left(g(\mathbf{x}) - I f(\mathbf{x}) \right)^2 \, d\mathbf{x}.$$

Исследована функция затрат

$$\tilde{s}^{(1)} = T(\mu) + \frac{\tilde{C}_1(\mu)\gamma^2}{\delta^2}(t_1 + t_2), \quad (10)$$

где $T(\mu)$ – время на предварительное вычисление величины $\tilde{I}$, t_1 – среднее время вычисления величины $L_M g(\boldsymbol{\alpha}_i)$, а t_2 – среднее время для вычисления величины $g(\boldsymbol{\alpha}_i)$ (затраты на сложение этих величин, на умножение на $\tilde{I}$ и на одно деление в (8) считались малыми и не учитывались); $\tilde{C}_1(\mu)$ – величина C_1 при условии, что плотность f выбирается по формуле (4). Анализ выражения (10) привел к выводу о наличии оптимального значения μ и увеличении этого значения с уменьшением δ. Например, при использовании в качестве $L_M g$ кусочно-постоянного приближения имеем $t_1 \approx t_2$, а время вычисления $\tilde{I}$ равно $\mu^l t_1$, и тогда

$$\mu_{opt} = \left(\frac{4H}{l\delta^2}\right)^{1/(l+2)} = \left(\frac{8\|g\|_{C^1(Q_l)}\left(\int_{Q_l} g^2(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} + I^2\right)}{l\delta^2\tilde{I}^2}\right)^{1/(l+2)}.$$

Другой пример эффективного применения леммы о состоятельных оценках представлен *в разделе 2.2*. Рассмотрен *метод Монте-Карло с поправочным множителем*:

$$\theta_n^{(2)} = \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n q(\boldsymbol{\xi}_i)\right)\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n H(\boldsymbol{\xi}_i)\right), \tag{11}$$

где $\mathbf{E}H(\boldsymbol{\xi}) = 1$. Смещение оценки (11) определяется выражением $\mathbf{E}\theta_n^{(2)} = I - (1/n)\int_X q(\mathbf{x})(1 - H(\mathbf{x}))f(\mathbf{x})\,d\mathbf{x}$. Главный член дисперсии для $n \gg 1$ имеет вид $\mathbf{D}\theta_n^{(2)} \approx (1/n)\int_X \big(q(\mathbf{x}) - I(2 - H(\mathbf{x}))\big)^2 f(\mathbf{x})\,d\mathbf{x}$. Если взять $H(\mathbf{x}) = 2 - q(\mathbf{x})/I$, то $\mathbf{D}\theta_n^{(2)} = O(1/n^2)$, и можно добиться существенного уменьшения трудоемкости алгоритма (2).

Оптимальный выбор функции $H(\mathbf{x})$ невозможен (величина I неизвестна). В диссертации предложено использовать дискретные приближения оптимального поправочного множителя. Рассмотрен алгоритм (2) в случае интегрирования по единичному кубу Q_l с плотностью равномерного распределения $f(\mathbf{x}) \equiv 1$; здесь $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$. Возьмем $H(\mathbf{x}) = 2 - L_M g(\mathbf{x})/\tilde{I}$, где $L_M g$ – приближение Стренга–Фикса из (3). Для этого случая получена зависимость смещения оценки (11) от шага сетки $h = 1/\mu$. Соответствующая граница для дисперсии $\mathbf{D}\theta_n^{(2)}$ совпала с правой частью неравенства (9). Похожими на случай применения дискретно-стохастической версии взвешенной равномерной выборки получились доверительные границы погрешности и вид функции затрат (см. формулу (10)). Теоретические выводы разделов

2.1 и 2.2 подтверждены тестовыми расчетами, в том числе, с использованием функций (16).

В разделе 2.3 рассмотрены различные варианты оценок функционала $I_h = (\varphi, h)$ от решения интегрального уравнения второго рода $\varphi = K\varphi + f$. Отмечено, что вместо рандомизации полного ряда Неймана с помощью аппарата обрывающихся с вероятностью единица цепей Маркова можно приближать конечный отрезок ряда. При этом соответствующая оценка функционала I_h получается смещенной. На тестовых примерах показано преимущество использования смещенных оценок, которое связано, в частности, с отсутствием необходимости розыгрыша поглощения на каждом шаге моделирования соответствующей цепи Маркова. Более того, при приближении конечных отрезков ряда Неймана обнаружилась возможность использования эффективных дискретно-стохастических методов численного интегрирования. Показано, что методика оптимизации рассматриваемых смещенных оценок во многом сходна с методикой оптимизации дискретно-стохастических алгоритмов глобального приближения функций, представленных в интегральной форме.

В **третьей главе** рассмотрены вопросы тестирования алгоритмов численного интегрирования. В качестве тестовых подынтегральных функций предложено использовать траектории численных моделей случайных полей (см. далее описание разделов 3.2 и 3.3). В связи с этим в *разделе 3.1* рассмотрены преобразования рандомизированной спектральной модели однородного гауссовского случайного поля

$$\xi_K(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{K} a_k \big[\gamma_k^{(1)} \cos(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{x}) + \gamma_k^{(2)} \sin(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{x})\big], \quad \boldsymbol{\lambda}_k \sim f(\boldsymbol{\lambda})/p_k, \tag{12}$$

где $f(\boldsymbol{\lambda})$ – соответствующая спектральная плотность, $p_k = \int_{\Lambda_k} f(\boldsymbol{\lambda})\, d\boldsymbol{\lambda}$, а $\gamma_k^{(i)}$, $i = 1, 2$ – независимые в совокупности стандартные нормальные величины. В тестовых вычислениях использовалась модель (12) с ограниченным спектром, для которой

$$X = (0,1)^l,\ K = m^l,\ f(\boldsymbol{\lambda}) = \big\{1/A^l \text{ при } \boldsymbol{\lambda} \in (0, A)^l;\ 0 \text{ иначе}\big\},$$

$$\Lambda_k = \Lambda_{k_1 \ldots k_l} = \big[k_1 h, (k_1+1)h\big) \times \ldots \times \big[k_l h, (k_l+1)h\big), \quad a_k = \sqrt{p_k} = 1/\sqrt{K}, \tag{13}$$

здесь $h = A/m,\ k_i = 0, \ldots, m-1$ и $p_k = 1/K$.

Первый тип изученных преобразований был связан с рассмотрением неслучайных функций от значений поля (12):

$$\Xi_K^{(\psi)}(\mathbf{x}) = \psi\big(\xi_K(\mathbf{x})\big). \tag{14}$$

Отмечена возможность воспроизведения произвольных негауссовских одномерных распределений F с помощью *метода обратной функции распределения*, для которого $\psi(y) = F^{-1}(\Phi(y))$; здесь Φ – функция распределения стандартной нормальной случайной величины. Изучены случаи монотонных и кусочно-монотонных дифференцируемых функций ψ, приведены соответствующие примеры. Рассмотрен вопрос о функциональной сходимости последовательности (14) и доказано

УТВЕРЖДЕНИЕ 3.1. *Если последовательность случайных функций $\{\xi_K,\ \ K = 1, 2, \ldots\}$ слабо сходится к случайной функции ξ_0 при $K \to \infty$, а функция ψ (неслучайная) равномерно непрерывна на $(-\infty, +\infty)$, то последовательность $\big\{\Xi_K = \psi(\xi_K)\big\}$ слабо сходится в $C(X)$ к полю $\psi(\xi_0)$.*

Второй тип преобразований был связан с комбинациями поля (12) со случайными величинами η известного распределения:

$$\zeta_K(\mathbf{x}) = g\left(\xi_K(\mathbf{x}), \eta\right). \tag{15}$$

Например, для суммы $\xi_K(\mathbf{x})$ и η получаются свертки соответствующих распределений. Изучены также численные реализации случайных функций, представимых в виде сумм независимых случайных функций.

Модели (12)–(15) применены в *разделе 3.2* при построении тестовой системы функций, используемой далее для изучения свойств дискретно-стохастических алгоритмов численного интегрирования (1), (2). Сформулирован ряд требований к тестовой системе и показано, что эти требования выполнены для функций (12)–(15). Приведем краткий анализ этих требований.

1). Чтобы соблюсти «независимость» тестирования, нужно добиваться того, чтобы вид (график) подынтегральной функции g из (1) был случайным, заранее непредсказуемым. Если взять

$$g(\mathbf{x}) = A^l \xi_K(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in X, \tag{16}$$

то «случайность» получаемых подынтегральных функций очевидна, так как, например, в (12) используются реализации стандартных нормальных случайных величин $\{\gamma_k^{(j)},\ j = 1,2\}$, а также случайны точки $\{\boldsymbol{\lambda}_k\}$. Для расширения класса подынтегральных функций можно использовать описанные выше преобразования (14), (15).

2). Для рассмотрения случаев «сложных» подынтегральных функций g нужно, чтобы имелась возможность контролировать вычислительные затраты на получение одного значения функции. Варьировать эти затраты для функции (16) можно за счет изменения числа слагаемых (параметра K) в сумме (12).

3). Нужно, чтобы хотя бы в простейших ситуациях можно было проверить расчеты аналитически. Например, для функции (16) в одномерном случае ($l = 1$) имеем

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

4). В связи с тем, что сходимость многих кубатурных формул обусловлена требованиями вида $g \in B(X)$, должна присутствовать возможность контроля свойств подынтегральной функции g (в частности, свойств гладкости). Для простоты снова рассмотрим одномерный случай. Выражение для q-й производной случайной функции $A\xi_K(x)$ по x имеет вид:

$$g^{(q)}(x) = A\xi_K^{(q)}(x) = A\sum_{k=1}^{K} \left(\frac{-2\,\ln\alpha_{k,1}}{K}\right)^{1/2}\ \lambda_k^q\ \cos(\lambda_k x + 2\pi\alpha_{k,2} + q\pi/2). \tag{17}$$

При достаточно большом A в сумме (17) возникнут большие коэффициенты λ_k^q (во всяком случае, для k, близких к K – для модели с разбиением спектра), причем эти коэффициенты растут с ростом q степенным образом. Хотя формально функция (16) является бесконечно дифференцируемой по x, можно считать, что $g = A\xi_K \in C^r(X)$, если $\left|A\xi_K^{(q)}\right| \le Q$ для $q \le r$ и $\left|A\xi_K^{(q)}\right| > Q$ для $q > r$, где Q – заданное достаточно большое положительное число (т. е. на практике разумно полагать, что производная не существует, если ее значение по модулю превышает заданный уровень Q). Варьируя A и задавая Q, можно добиваться принадлежности функции $\varphi = A\xi_K$ пространству $C^r(X)$ для требуемого r.

Следующее требование рассмотрено в *разделе 3.3*.

5). Для изучения теоретической эффективности алгоритмов численного интегрирования нужно, чтобы имелась возможность *получать уточненные верхние границы для погрешностей используемых численных методов интегрирования с заданными множествами функций g и областей X.* Достаточно простой вид подынтегральных функций (12), (13) позволяет получать верхние границы средних погрешностей алгоритмов интегрирования. Это продемонстрировано на примере исследования простейших квадратурных формул. В качестве примера приведем

УТВЕРЖДЕНИЕ 3.2. *Если функция g имеет вид* (16), *то для средней погрешности* $\Delta_1 = \mathbf{E}\left|\sum_{i=1}^{M} g(x_i)H - \int_0^1 g(x)\,dx\right|$ *формулы прямоугольников*

$$I = \int_0^1 g(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{M} g(x_i)H, \ \ H = 1/M, \ \ x_i = (i-1)H + H/2$$

справедливо неравенство

$$\Delta_1 \leq \frac{\sqrt{\pi}H^2A^3\sqrt{K}}{144\sqrt{2}} \times \frac{(K+1)(2K+1)}{K^2}.$$

Проведено численное тестирование простейших квадратурных формул, подтвердившее характер зависимости погрешностей этих формул от параметров A и K. Следует особо отметить, что аналоги утверждения 3.2 доказаны в главе 1 для исследуемых дискретно-стохастических алгоритмов численного интегрирования.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 07-01-00024а).

Публикации по теме диссертации

А. Статьи в журналах из Перечня ВАК

1. Voytishek A. V., Dyatlova (Kablukova) E. G., Mezentseva (Bulgakova) T. E. Transformation of the spectral models of the Gaussian random fields // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2000. V. 15, № 6. P. 507–519.

2. Voytishek A. V., Kablukova E. G. Usage of approximation functional basises in Monte Carlo methods // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2003. V. 18, № 6. P. 521–542.

3. 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.

4. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г., Герасимова О. С. Сравнение различных вариантов рандомизации метода последовательных приближений // Вычислительные технологии. 2006. Т. 11, спец. выпуск. С. 27–35.

5. 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.

Б. Статьи в рецензируемых зарубежных журналах

1. Voytishek A. V., Dyatlova (Kablukova) E. G., Mezentseva (Bulgakova) T. E. Geometrical Monte Carlo method and it's modifications // Monte Carlo Methods and Applications. 2000. V. 6, № 2. P. 131–139.

2. Kablukova E.G. Investigation of methods of numerical integration with optimal convergence speed // Monte Carlo Methods and Applications. 2005. V. 11, № 4. P. 397–406.

В. Статьи в сборниках

1. Войтишек А. В., Дятлова (Каблукова) Е. Г., Мезенцева (Булгакова) Т. Е. Геометрический метод Монте-Карло и его модификации // Материалы V международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». Красноярск: КГТУ, 2000. С. 46–54.

2. Каблукова Е. Г. Исследование адаптивных алгоритмов численного интегрирования // Материалы конференции молодых ученых. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН 2001. С. 94–103.

3. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г. Исследование адаптивных дискретно-стохастических алгоритмов численного интегрирования // Материалы VI международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». Уфа: ИМВЦ УНЦ, 2001. С. 46–52.

4. Каблукова Е. Г. Двусторонний геометрический метод Монте-Карло // Материалы конференции молодых ученых. Новосибирск: ИМВиМГ, 2002. С. 76–81.

5. Kablukova E. G., Shvets V. V., Voytishek A. V., Golovko N. G. Function approximations as probabilistic densities // Proceedings of the International Conference on Computational Mathematics. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2002. P. 211–215.

6. Булгакова Т. Е., Войтишек А. В., Каблукова Е. Г. Использование стохастической системы функций при исследовании алгоритмов численного интегрирования // Материалы VII Международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». Красноярск: КГТУ, 2003. С. 26–32.

7. Каблукова Е. Г. Исследование методов численного интегрирования с оптимальной скоростью сходимости // Труды конференции молодых уче-

ных. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2004. С. 67–77.

8. Каблукова Е. Г., Герасимова О. С. Исследование математической модели переноса частиц с анизотропным рассеянием // Материалы VIII международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». Улан-Удэ: ВСГТУ, 2005. С. 49–52.

9. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г. Исследование метода сложной симметризации // Труды 9-го Международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». Уфа: ИМВЦ УНЦ РАН, 2007. С. 61–75.

Г. Тезисы конференций

1. Каблукова Е. Г., Булгакова Т. Е. О некоторых применениях численной стохастической системы функций // Материалы XLI Международной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». Математика. Новосибирск: НГУ, 2003. С. 118–119.

2. Каблукова Е.Г. Исследование методов численного интегрирования с оптимальной скоростью сходимости // Материалы XLII Международной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». Математика. Новосибирск: НГУ, 2004. С. 126.

3. Voytishek A. V., Kablukova E. G., Gerasimova O. S. Randomization of the consistent approach method for solution of the integral equation of the second kind // Abstracts of the 7-th International Conference on Monte and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing. Ulm University (Germany), 2006. P. 143.

4. Лощина Н. В., Каблукова Е. Г. Асимптотика метода сложной симметризации // Материалы XLV Международной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». Математика. Новосибирск: НГУ, 2007. С. 204–205.

5. Ефремов А. И., Каблукова Е. Г. Дискретно-стохастический метод взвешенной равномерно выборки // Там же. С. 202–203.

6. Бусыгин С.В., Каблукова Е.Г. Дискретно-стохастический метод Монте-Карло с поправочным множителем // Там же. С. 201–202.

7. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г., Бусыгин С. В., Ефремов А. И. Использование дискретно-стохастических состоятельных оценок в численном интегрировании // Сборник материалов Уфимской международной математической конференции, посвященной памяти А.Ф.Леонтьева. Т. 1. Уфа: ИМВЦ УНЦ РАН, 2007. С. 50–51.

8. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г., Лощина Н. В. Исследование метода сложной симметризации // Там же. С. 52–53.

Каблукова Е.Г.

Лицензия ИД № 02202 от 30 июня 2000 г.
Подписано в печать 21 октября 2008 г.
Формат бумаги $60 \times 84^1/_{16}$ Объем 1,0 п. л. 0,9 уч.-изд. л.
Тираж 100 экз. Заказ №
ООО «Омега Принт», Новосибирск-90, пр. Лаврентьева, 6