

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Антонов Антон Александрович

Расслоение и метод квази-Монте-Карло

01.01.07 — вычислительная математика

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор
Ермаков С.М.

Санкт-Петербург – 2015

Оглавление

| | |
|---|-----------|
| Введение | 4 |
| 1 Теоретические основы метода Qint | 12 |
| 1.1 Обзор методов Монте-Карло и квази-Монте-Карло | 12 |
| 1.1.1 Две постановки задачи численного интегрирования | 12 |
| 1.1.2 Традиционный метод Монте-Карло | 13 |
| 1.1.3 Расслоенная выборка | 14 |
| 1.1.4 Случайные квадратурные формулы | 17 |
| 1.1.5 Метод квази-Монте-Карло | 18 |
| 1.1.6 Числовые сети и последовательности | 21 |
| 1.1.7 Последовательность Холтона | 22 |
| 1.1.8 Последовательность Соболя | 23 |
| 1.1.9 Рандомизированный метод квази-Монте-Карло | 25 |
| 1.2 Квадратура Qint | 27 |
| 1.2.1 Обобщённая система Хаара | 28 |
| 1.2.2 Построение квадратуры Qint и анализ дисперсии | 30 |
| 1.2.3 Некоторые результаты для теории случайных квадратурных формул | 35 |
| 2 Практическое применение метода Qint | 42 |
| 2.1 Эквивалентные формулировки дисперсии Qint | 42 |
| 2.2 Процедура Qint с повторами | 45 |
| 2.3 Оценивание дисперсии | 49 |
| 2.4 Некоторые аспекты реализации алгоритма Qint | 54 |
| 2.5 Результаты численных экспериментов | 60 |
| 2.5.1 Произведение кубических полиномов | 61 |
| 2.5.2 Плотность нормального распределения | 62 |
| 2.5.3 Функция „Морокофф-Кафлиш №1“ | 64 |
| 2.5.4 Кусочно-линейная функция | 66 |
| 2.5.5 Выводы о практическом применении Qint | 67 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 3 | Расслоение и метод квази-Монте-Карло в различных задачах | 75 |
| 3.1 | О смещении рандомизированного квази-Монте-Карло | 75 |
| 3.2 | Алгоритм гибридной битовой рандомизации | 80 |
| 3.3 | Гибридная битовая рандомизация в задаче численного интегрирования | 85 |
| 3.4 | Гибридная битовая рандомизация для метода „блужданий по сфере“ | 88 |
| | Заключение | 98 |
| | Список рисунков | 100 |
| | Список таблиц | 101 |
| | Список литературы | 102 |

Введение

Актуальность работы

Одной из наиболее распространённых и ключевых задач в вычислительной математике является задача приближённого вычисления определённого интеграла. Такого рода задачи могут возникать в различных академических исследованиях, но наиболее часто встречаются в прикладных областях. При этом они могут выступать как в качестве самостоятельных задач, так и являться важной промежуточной частью более сложных алгоритмов. В различных областях математики численное интегрирование активно используется для решения интегральных и интегродифференциальных уравнений.

Наиболее полно разработана теория численного интегрирования по подмножествам одномерной вещественной оси \mathbb{R} . Для решения таких задач разработано множество различных классов оптимальных в том или ином строгом смысле квадратурных формул и сложных алгоритмов (среди них методы с автоматическим подбором шага, статистические и адаптивные методы). Этих инструментов достаточно, чтобы решить большинство практических задач с заданной наперёд точностью за разумное машинное время.

Случай интегрирования по многомерным областям является гораздо более сложным и менее изученным. Несмотря на ряд имеющихся ключевых результатов, теория многомерного интегрирования содержит большое количество открытых вопросов. Это связано в первую очередь с тем, что при увеличении размерности вычислительная трудоёмкость классических методов быстро возрастает. Кроме того, область интегрирования может иметь гораздо более сложную конфигурацию, поэтому значительная часть исследований посвящена только тем задачам, область интегрирования которых имеет достаточно простую форму (гиперкуб, шар или симплекс). Задача сведения произвольной области к стандартной также весьма сложна и сопряжена, как правило, с наличием существенных накладных расходов в процессе вычислений.

Большинство имеющихся методов численного интегрирования можно отнести к трём основным группам: традиционные квадратурные (кубатурные при $s > 1$) формулы, методы Монте-Карло и теоретико-числовые методы (методы квази-Монте-Карло). Здесь и далее мы будем использовать термин „квадратурная формула“ независимо от того, какова размерность области интегрирования.

В теории многомерного численного интегрирования ключевым является следующий результат, полученный Бахваловым Н.С. Им установлено, что в размерности s на классе функций $C_s^m(A)$, имеющих ограниченные постоянной A частные производные до порядка m включитель-

но, сходимость любого детерминированного метода не может быть лучше, чем $\mathcal{O}\left(AN^{-m/s}\right)$ (где N – количество вычислений подынтегральной функции). Легко увидеть, что с ростом размерности этот порядок становится слишком медленным (нестрого говоря, при $m/s < \frac{1}{2}$ оптимальный метод начинает проигрывать в скорости сходимости методу Монте-Карло). Это обстоятельство дало толчок изучению недетерминированных методов интегрирования, то есть таких методов, где приближённое значение интеграла зависит от некоторого количества случайных величин. Необходимо понимать, что в таком случае детерминированная оценка погрешности квадратурной формулы заменяется на вероятностную, то есть имеющую место с некоторым наперёд заданным уровнем доверия. Такие методы получили значительное распространение и выделились в отдельную группу методов численного интегрирования под общим названием метод Монте-Карло.

Даже в простейшем случае метод Монте-Карло обладает рядом несомненных преимуществ. Это и крайняя простота реализации, и последовательный характер исполнения, обеспечивающий практически неограниченный параллелизм, и удобная схема апостериорного контроля погрешности. Важно подчеркнуть, что даже базовый метод Монте-Карло имеет в классе \mathcal{L}^2 сходимость порядка $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$, которая не зависит от размерности интеграла. Кроме того, существует обширный спектр приёмов уменьшения дисперсии, позволяющих эффективно ускорять сходимость метода.

Одним из наиболее известных и универсальных приёмов понижения дисперсии является введение зависимости в распределение узлов интегрирования. На этой идее основана теория случайных интерполяционно-квадратурных формул, разработанная Ермаковым С.М. и Золотухиным В.Г. В рамках этой теории узлы интегрирования рассматриваются как случайные величины с определённым совокупным распределением, а веса квадратурной формулы являются функцией узлов. Ермаковым С.М. и Грановским Б.Л. введено понятие допустимости таких процедур на классах функций и исследованы критерии такой допустимости.

Другим универсальным способом ускорения сходимости метода Монте-Карло является метод расслоенной выборки (stratified sampling). Он заключается в разбиении области интегрирования на несколько подобластей, интегрирование по которым в простейшем случае ведётся отдельно. При этом количество узлов в каждой конкретной подобласти зависит от её объёма, или, в более сложных случаях, от конфигурации разбиения в целом.

Бахваловым Н.С. получен ещё один важный результат относительно сходимости недетерминированных методов на классе $C_s^m(A)$. А именно, любой такой метод имеет вероятностный порядок сходимости не быстрее, чем $\mathcal{O}\left(AN^{-m/s-1/2}\right)$. Более того, такой метод построен им конструктивным образом и доказано, что представленная оценка неуллучшаема в плане порядка. Для класса \mathcal{L}^2 оптимальный порядок сходимости вероятностного метода равен $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$, то есть даже простейший метод Монте-Карло в этом случае неуллучшаем по порядку.

Несмотря на окончательный результат Бахвалова Н.С. относительно широкого класса $C_s^m(A)$, многими исследователями предпринимались попытки получить оценки сходимости методов интегрирования на других, более узких и более часто встречающихся на практике классах функций.

Так, в работах Коробова Н.М. рассматриваются классы H_s^α и E_s^α , для которых строятся параллелепипедальные сетки, для которых скорость сходимости весьма близка к оптимальной и отличается от неё лишь на множитель вида $\ln^\gamma N$, где γ не зависит от N . Построение такого рода сеток порождает ряд вспомогательных теоретико-числовых задач о выборе оптимальных коэффициентов. Похожих результатов достиг Соболев И.М. на классах S_p функций с быстро убывающими коэффициентами Фурье по системе Хаара. Им построена ЛП_τ-последовательность, обеспечивающая порядок сходимости, равный $o(N^{-1/p})$, где p не зависит от N . При построении такой последовательности также возникает задача о подборе оптимальных параметров (направляющих чисел), решаемая методами теории чисел.

Теоретико-числовые конструкции, предложенные Коробовым Н.М. и Соболевым И.М., выделяются, помимо прочего, специфическим поведением величины дискрепанса (discrepancy, отклонение) – функции, являющейся количественной характеристикой расположения набора точек в единичном гиперкубе. Таким образом, эти сетки и последовательности оказываются тесно связаны с понятием равномерной распределённости в смысле Вейля. В ряде случаев совокупность независимых реализаций случайной величины может быть заменена детерминированной (квазислучайной) структурой и привести к улучшенной сходимости. Так, в задаче численного интегрирования такая процедура может быть применена для любой интегрируемой по Риману подынтегральной функции, и при этом среднее по первым N узлам будет стремиться к истинному значению интеграла при $N \rightarrow \infty$. Такой приём в сочетании со структурами, имеющими определённую асимптотику дискрепанса, получил название метода квази-Монте-Карло.

В теории квази-Монте-Карло последовательность называется low-discrepancy, если асимптотика её дискрепанса является $\mathcal{O}\left(\frac{\ln^s N}{N}\right)$. В этом случае неравенство Коксмы-Хлавки, связывающее ошибку интегрирования с дискрепансом и вариацией подынтегральной функции (в смысле Харди-Краузе), обеспечивает скорость сходимости метода порядка $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1-\varepsilon}}\right)$ для сколь угодно малого $\varepsilon > 0$, что значительно лучше, чем порядок Монте-Карло. Первой известной low-discrepancy последовательностью является последовательность Холтона. Уже упомянутая последовательность Соболя И.М. обладает ещё и тем преимуществом, что для неё известен эффективный последовательный алгоритм Антонова И.А. и Салеева В.М. Более поздние конструкции, такие как последовательности Форе Х. и Нидеррейтера Х., являются обобщением последовательности Соболя. Другой известной low-discrepancy конструкцией является класс решёточных правил интегрирования (lattice rules).

Самым известным недостатком метода квази-Монте-Карло является невозможность апостериорного контроля остатка, поскольку все известные оценки сверху, такие как неравенство Коксмы-Хлавки и его обобщения, не являются конструктивными для практического применения. В связи с этим разработаны способы рандомизации квазислучайных последовательностей (например, скрэмблинг Оуэна А.), и в практических задачах оценка погрешности также носит вероятностный характер. Это обстоятельство порождает необходимость проводить некоторое количество повторений процедуры с различными независимыми рандомизациями. Вопрос о доста-

точном количестве таких повторений не разрешён окончательно, что также порождает некоторые ограничения в практическом использовании квази-Монте-Карло.

Вероятностные методы получили дальнейшее распространение в ряде других задач, для которых детерминированные алгоритмы оказывались слишком трудоёмкими. Одной из таких задач является задача численного решения уравнений математической физики. Так, для внутренней задачи Дирихле для оператора Лапласа, $\Delta u = 0$ в области G с краевым условием $u|_{\partial G} = g$, использование формул Грина и теоремы о среднем позволяет связать решение в точке с марковским процессом, обрывающимся на границе области. Этот результат позволяет свести задачу к сферическому процессу (процессу блуждания по сферам), траектории которого моделируются некоторое количество раз. Применение расслоения в этом алгоритме сопряжено с алгоритмическими и вычислительными трудностями, а надёжной адаптации квази-Монте-Карло в настоящий момент не существует. Это происходит в первую очередь потому, что последовательные точки в квазислучайных последовательностях формально не являются независимыми, что может приводить к катастрофическим последствиям даже в простейших схемах моделирования случайных процессов. В настоящее время предпринимаются попытки расширить границы применимости метода квази-Монте-Карло, но они ограничены лишь некоторыми частными случаями.

Степень разработанности темы

Количество литературы, посвящённой теоретическим и практическим вопросам численных методов интегрирования, огромно. Среди этих работ можно назвать большое количество книг и монографий (например, Крылов В.И. [1], Бахвалов Н.С. [2] и многие другие) и обзорных журнальных статей. Теория построения квадратурных формул, обладающих свойством точности для определённых классов функций, подробно описана в монографиях Соболева С.Л. [3], Мысовских И.П. [4].

Обзор метода Монте-Карло и известных приёмов понижения дисперсии можно найти в книгах Ермакова С.М. и Михайлова Г.А. [5], Ермакова С.М. [6], Кохрана В.Г. [7]. Приём расслоения хорошо известен и подробно изучен, однако дополнительный интерес вызывают свойства распределённости детерминированных последовательностей, имитирующих расслоение для разбиения на подмножества специального вида.

Основы теории случайных интерполяционно-квадратурных формул изложены в книге Ермакова С.М. [6]. Ключевыми в этой области являются работы Ермакова С.М. и Золотухина В.Г. [8], Ермакова С.М. [9, 10], Хэндскомба Д. [11]. Понятие допустимости случайной квадратуры введено и исследовано Ермаковым С.М. и Грановским Б.Л. [12], Ермаковым С.М. [13]. Случайные квадратурные формулы представляют собой гибкий инструмент для решения сложных задач интегрирования методом Монте-Карло, в связи с чем обнаружение новых и обобщение имеющихся результатов представляет несомненную ценность.

В теории метода квази-Монте-Карло в первую очередь необходимо выделить работы Соболя И.М. [14, 15], Холтона Дж. [16], Нидеррейтера Х. [17]. Стандартная вычислительная схема рандомизированного квази-Монте-Карло достаточно хорошо известна, но асимптотика дисперсии метода получена только при наличии существенных ограничений.

Цель и задачи диссертационной работы

Целью диссертационной работы является исследование связи между классическими методами понижения дисперсии и свойствами квазислучайных последовательностей, а также изучение вопроса о возможности адаптации конструкций квази-Монте-Карло для алгоритмов, не сводимых к вычислению определённого интеграла по многомерному гиперкубу. Для достижения означенной цели необходимо было решить следующие задачи.

- 1) Использовать аппарат случайных квадратурных формул для получения класса формул, точных для кусочно-постоянных функций. Обобщить результаты Ермакова С.М. в многомерном случае с использованием обобщённых функций Хаара.
- 2) Провести анализ дисперсии полученного класса формул и установить согласованность этого результата с оценкой сверху, сформулированной в общем виде Ермаковым С.М. и Золотухиным В.Г.
- 3) Проверить совместимость таких формул с квазислучайными последовательностями, в особенности с последовательностью Соболя. Представить новый метод оценки погрешности для метода квази-Монте-Карло.
- 4) Разработать численную схему, реализующую представленный подход. Исследовать свойства оценок, предложенных такой схемой. Провести ряд численных экспериментов и проверить их соответствие теоретическим результатам.
- 5) Выявить наличие связи между расслоением и (рандомизированным) квази-Монте-Карло в терминах асимптотики смещения и дисперсии в контексте задачи численного интегрирования и предложить адаптацию квази-Монте-Карло для задач, решаемых при помощи моделирования сферического процесса.

Научная новизна

Все результаты, полученные в диссертационной работе, являются новыми. А именно:

- 1) Впервые установлена тесная связь между методами Монте-Карло и квази-Монте-Карло посредством аппарата случайных квадратурных формул. Представлены новые результаты в теории случайных квадратурных формул, а имеющиеся результаты уточнены и дополнены.
- 2) В отличие от существующих методов квази-Монте-Карло, которые не предоставляют конструктивной оценки погрешности либо оценивают неизвестную дисперсию, в работе впервые разработан новый метод оценивания схем рандомизированного квази-Монте-Карло, дисперсия которого известна теоретически.
- 3) Предлагаемый метод рандомизации квазислучайных последовательностей и основанная на нём адаптация метода „блуждания по сферам“ предлагаются впервые.

- 4) Все иллюстрирующие численные примеры, представленные в диссертационной работе, разработаны автором.

Теоретическая и практическая значимость работы

Значимость диссертационной работы определяется тремя главными факторами.

Во-первых, исследован класс формул, который можно рассматривать как предельный на стыке стохастического и детерминированного подходов в задачах численного интегрирования. Такого рода формулы могут использоваться как в рамках традиционного метода Монте-Карло, являясь одним из методов понижения дисперсии, так и в сочетании с последовательностями метода квази-Монте-Карло, предоставляя конструктивный механизм оценки погрешности. Предлагаемая схема может быть применена к произвольной процедуре квази-Монте-Карло и не является особенно трудной ни с точки зрения дополнительных вычислительных расходов, ни с точки зрения интерпретации конечного результата. Такой подход может быть успешно применён в задачах, например, финансовой математики или вычислительной физики.

Во-вторых, дополненный новыми результатами аппарат случайных квадратурных формул может послужить инструментом для отыскания новых классов квадратурных формул, обладающих определёнными свойствами. Так, найдены достаточные условия для того, чтобы дисперсия таких формул была меньше, чем известная ранее верхняя граница. Кроме того, показано, что системы функций с попарно непересекающимися носителями не могут претендовать на пониженную таким способом дисперсию, что может послужить отправной точкой для дальнейших исследований систем с более сложной структурой.

В-третьих, новый метод рандомизации квазислучайных последовательностей может успешно конкурировать с существующими в задачах численного интегрирования. Кроме того, предлагаемая гибридная адаптация метода „блуждания по сферам“ сочетает в себе преимущества как Монте-Карло (смещение оценки имеет место, но оно не превосходит смещения базовой схемы), так и квази-Монте-Карло (значительное уменьшение дисперсии). Предлагаемая схема, по сути, даёт возможность использовать квазислучайные конструкции в таких задачах, где это традиционно считается невозможным или нецелесообразным.

Методология и методы исследования

В диссертационной работе использовались теория вероятностей, элементы математического и функционального анализа и вычислительных методов, теория методов Монте-Карло и квази-Монте-Карло и теория случайных квадратурных формул. В численных экспериментах широко использовались последовательности Соболя, рандомизированные при помощи процедуры скремблинга. Программирование велось на языках C++ и R с использованием модифицированной библиотеки HIntLib с открытым исходным кодом, а также ряда пакетов дополнений для R.

Положения, выносимые на защиту

- 1) Получен класс квадратурных формул, обладающих свойством точности для системы обобщённых функций Хаара. Проведён анализ дисперсии таких формул и показано, что такой подход является одним из методов гарантированного уменьшения дисперсии.

- 2) Представлен ряд утверждений, обобщающих и дополняющих известные результаты в рамках теории случайных квадратурных формул.
- 3) Проведена параллель между использованием полученного класса формул в рамках подходов Монте-Карло и квази-Монте-Карло. Предложена новая схема оценки погрешности в задачах численного интегрирования методом квази-Монте-Карло.
- 4) Разработан алгоритм, реализующий описанную схему. Исследованы свойства оценок, построенных этим алгоритмом. Приведены результаты работы алгоритма в широком спектре вычислительных задач и показана его эффективность.
- 5) Разработан альтернативный метод рандомизации квазислучайных последовательностей. Показано, что его использование, с одной стороны, значительно эффективнее, чем традиционное расслоение. С другой стороны, естественная параметризация предлагаемого метода позволяет сохранить асимптотику квази-Монте-Карло и превосходить существующие методы рандомизации в численных экспериментах.
- 6) На основе предлагаемого алгоритма рандомизации предложена адаптация метода „блуждания по сферам“ для решения внутренней задачи Дирихле для оператора Лапласа.

Степень достоверности и апробация результатов

Достоверность и обоснованность теоретических результатов диссертационной работы подтверждается их согласованностью с известными утверждениями в теории методов Монте-Карло и квази-Монте-Карло, в частности с фактами теории случайных квадратурных формул. Данные, полученные в ходе обширных вычислительных экспериментов, соответствуют полученным теоретическим результатам. Они приведены и подробно описаны в тексте диссертации.

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях:

- Ninth International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC-2010, Варшава, Польша);
- Seventh International Workshop on Simulation (IWS-2013, Римини, Италия);
- Ninth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods (IMACS-2013, Аннеси-ле-Вьё, Франция);
- Eleventh International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC-2014, Лювен, Бельгия).

Исследование по теме диссертационной работы выполнено при частичной поддержке грантов РФФИ №11-01-00769-а и №14-01-00271.

Публикации по теме диссертации

Основные результаты по теме диссертации изложены в 5 печатных изданиях, 3 [18–20] из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК. В [18] соискателем сформулированы и доказаны теоремы 1 и 2 о виде и дисперсии формулы, точной для обобщённой системы Хаара,

а также результаты численных экспериментов. В [20] соискателю принадлежит лемма 2.5, а также теоремы 2.6, 3.1 и 3.2. В обеих совместных работах соавтору – научному руководителю – принадлежит общая постановка задачи и план исследований.

Структура работы

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Она изложена на 106 страницах текста с 32 рисунками и 3 таблицами. Список литературы содержит 75 наименований.

Глава 1

Теоретические основы метода Qint

1.1 Обзор методов Монте-Карло и квази-Монте-Карло

1.1.1 Две постановки задачи численного интегрирования

Рассмотрим произвольное пространство $(\mathfrak{X}, \mathfrak{F}, \mu)$, где \mathfrak{X} – непустое множество, а \mathfrak{F} – σ -алгебра для подмножеств \mathfrak{X} с мерой μ на ней. Здесь и далее мера μ предполагается σ -конечной, и для удобства мы будем полагать $\mu(\mathfrak{X}) = 1$. Это ограничение несущественно¹, и все последующие результаты могут быть сформулированы для произвольной σ -конечной меры тривиальным образом.

Классической считается задача определения значения s -мерного интеграла

$$I = \int_{\mathfrak{X}} f(x) \mu(dx), \quad (1.1)$$

где функция $f : \mathfrak{X} \rightarrow \mathbb{R}$ интегрируема по мере μ . Далее все утверждения о функциях, определённых на пространстве \mathfrak{X} , подразумевают традиционную оговорку о множествах нулевой μ -меры, которая опущена для краткости.

Наиболее распространённым частным случаем такой задачи является такой случай, когда \mathfrak{X} есть единичный s -мерный гиперкуб $U_s = [0,1]^s$, \mathfrak{F} – борелевская σ -алгебра \mathfrak{B}_s на нём, а μ – мера Лебега, обозначаемая далее λ_s . Очевидно, что для любого s выполнено $\lambda_s(U_s) = 1$. Чтобы различать эти два случая, $(\mathfrak{X}, \mathfrak{F}, \mu)$ и $(U_s, \mathfrak{B}_s, \lambda_s)$, мы будем называть их *общей* и *частной постановкой*, соответственно.

Здесь и далее мы будем обозначать вектора жирным шрифтом $(\mathbf{x}, x_1, \dots, x_N)$, а их скалярные компоненты – обычным $(x = (x_1, \dots, x_s))$, с добавлением запятой в случае уже имеющегося нижнего индекса: $x_i = (x_{i,1}, \dots, x_{i,s})$.

Рассматриваемая задача численного интегрирования будет интересовать нас с точки зрения методов Монте-Карло и квази-Монте-Карло. Сравнению этих методов с классическими и совре-

¹ Любая сигма-конечная мера сводится к мере с искомым свойством при помощи нормировки на константу; см. Колмогоров А.Н. и Фомин С.В., [21], Ширяев А.Н. [22].

менными детерминированными методами посвящено достаточное количество литературы (среди которых особенно выделяется работа Шюрера Р. [23]). Этот вопрос достаточно сложен и требует дополнительного изучения, но он остаётся за рамками данного исследования.

1.1.2 Традиционный метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло (также именуемый далее традиционным или наивным Монте-Карло, в зарубежной литературе Monte Carlo, MC) широко используется в задачах, где размерность области интегрирования достаточно высока. Такие задачи возникают в различных разделах физики (например, физика элементарных частиц, термодинамика, оптика, статистическая физика), равно как и во многих других областях (биология, химия, медицина, эконометрика). Более подробное изложение метода можно найти в книгах Ермакова С.М. [6] и Соболя И.М. [24].

В рамках частной постановки задачи численного интегрирования простейшей оценкой интеграла I служит сумма

$$S_n^{MC} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\mathbf{x}_i), \quad (1.2)$$

где $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ – независимые случайные вектора, равномерно распределённые в U_s . Это несмещённая оценка интеграла, т.е. $\mathbb{E}(S_n) = I$. Кроме того, в соответствии с сильным законом больших чисел, оценка S_n сходится к истинному значению интеграла почти наверное:

$$S_n^{MC} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\text{п.н.}} I. \quad (1.3)$$

Обычно предполагается, что функция f интегрируема с квадратом, т.е. $f \in \mathcal{L}^2(U_s)$. В этом случае дисперсия функции $f(\mathbf{x})$ конечна:

$$\sigma_f^2 = \int_{U_s} (f(\mathbf{x}) - I)^2 d\mathbf{x} = \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2. \quad (1.4)$$

Дисперсия оценки (1.2) будет равна

$$\text{Var}(S_n^{MC}) = \int_{U_s} \dots \int_{U_s} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\mathbf{x}_i) - I \right)^2 d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_n = \frac{\sigma_f^2}{n}. \quad (1.5)$$

Выражение (1.5) может быть интерпретировано следующим образом: средняя ошибка интегрирования методом Монте-Карло равна σ_f/\sqrt{n} . Более подробно, в силу центральной предельной теоремы имеет место следующий доверительный интервал:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left(a \frac{\sigma_f}{\sqrt{n}} \leq S_n - I \leq b \frac{\sigma_f}{\sqrt{n}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b \exp \left(-\frac{y^2}{2} \right) dy. \quad (1.6)$$

На практике дисперсия подынтегральной функции σ_f^2 неизвестна, поэтому вместо неё для построения доверительного интервала (1.6) используется оценка

$$\hat{\sigma}_f^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(f(\mathbf{x}_i) - S_n^{MC} \right)^2, \quad (1.7)$$

обладающая свойством несмещённости: $\mathbb{E}(\hat{\sigma}^2(f)) = \sigma^2(f)$. Таким образом, дисперсия оценки Монте-Карло (1.2) на практике оценивается при помощи

$$\widehat{\text{Var}}(S_n^{MC}) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \left(f(\mathbf{x}_i) - S_n^{MC} \right)^2. \quad (1.8)$$

Когда говорят о том, что сходимость метода Монте-Карло равна $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$, имеют в виду вероятностный характер этой сходимости, устанавливаемый шириной доверительного интервала (1.6). В случае с классическими квадратурами вычислительной математики, напротив, сходимость подразумевается строго детерминированная. Так, например, для метода Симпсона в многомерном случае порядок ошибки составляет $\mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{2/s}}\right)$.

Принципиальное отличие метода Монте-Карло от классических состоит ещё и в том, что порядок убывания ошибки не зависит от размерности интеграла s . Это ведёт к тому, что с точки зрения асимптотики формула вида (1.2) превосходит классические квадратуры для достаточно небольших s , и этот разрыв только увеличивается с ростом размерности. Так, в сравнении с вышеупомянутой формулой Симпсона метод Монте-Карло предпочтителен в этом плане уже для $s \geq 5$.

1.1.3 Расслоенная выборка

Несмотря на то, что асимптотика убывания остатка для метода Монте-Карло не зависит от размерности интеграла, её порядок $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$ даёт достаточно медленную сходимость. Так, для увеличения точности интегрирования на один порядок необходимо увеличить количество вычислений подынтегральной функции f на два порядка, что далеко не всегда приемлемо. Существует целый спектр методов понижения дисперсии (обзор таких приёмов дан у Ермакова С.М. [6], Кохрана В.Г. [7]), каждый из которых ставит своей целью ускорить убывание остатка. Одним из наиболее известных таких методов является расслоение (расслоенная выборка, stratified sampling).

Рассмотрим разбиение U_s на d непересекающихся областей V_1, \dots, V_d , покрывающих весь гиперкуб U_s . Для каждой из этих областей проведём стандартное интегрирование методом Монте-Карло с использованием n_1, \dots, n_d точек соответственно, так что общее количество точек по-прежнему равно n : $n_1 + \dots + n_d = n$. Обозначим точки, принадлежащие V_j , за $\mathbf{x}_{j1}, \dots, \mathbf{x}_{jn_j}$, и

тогда общая оценка интеграла I будет выглядеть как

$$S_n^{strat} = \sum_{j=1}^d \frac{\lambda_s(V_j)}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} f(\mathbf{x}_{ji}). \quad (1.9)$$

В этом случае дисперсия оценки из σ_f^2/n превращается в

$$\text{Var}(S_n^{strat}) = \sum_{j=1}^d \frac{\lambda_s^2(V_j)}{n_j} \sigma_{f,V_j}^2, \quad (1.10)$$

где

$$\sigma_{f,V_j}^2 = \frac{1}{\lambda_s(V_j)} \int_{V_j} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{\lambda_s^2(V_j)} \left(\int_{V_j} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2. \quad (1.11)$$

Степень уменьшения получившейся дисперсии (1.10) зависит от разбиения и количества точек n_1, \dots, n_d в каждом из V_1, \dots, V_d .

Простейший вариант расслоения мы получим, если объёмы областей V_1, \dots, V_d равны между собой, и в каждой из них берётся одинаковое количество точек: $n_1 = \dots = n_d$. Обозначим это количество за n_0 , тогда для всех j имеем $\lambda_s(V_j) = 1/d$ и

$$S_{(d,n_0)}^{strat} = \frac{1}{dn_0} \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^{n_0} f(\mathbf{x}_{ji}). \quad (1.12)$$

Как мы можем заметить, оценка интеграла в точности та же, что и для наивного Монте-Карло (1.2). Дисперсия также примет простой вид:

$$\text{Var}(S_{(d,n_0)}^{strat}) = \frac{1}{d^2 n_0} \sum_{j=1}^d \sigma_{f,V_j}^2, \quad (1.13)$$

где

$$\sigma_{f,V_j}^2 = d \int_{V_j} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - d^2 \left(\int_{V_j} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2. \quad (1.14)$$

Как и для наивного Монте-Карло, на практике нужно строить оценки величин σ_{f,V_j}^2 . Это делается аналогично оценке (1.7):

$$\hat{\sigma}_{f,V_j}^2 = \frac{1}{n_j - 1} \sum_{i=1}^{n_j} \left(f(\mathbf{x}_{ji}) - \frac{1}{n_j} \sum_{k=1}^{n_j} f(\mathbf{x}_{jk}) \right)^2, \quad (1.15)$$

при этом, естественно, $\mathbb{E}(\hat{\sigma}_{f,V_j}^2) = \sigma_{f,V_j}^2$.

В упрощённом варианте расслоения для практического применения имеем несмещённую оценку дисперсии (1.13):

$$\widehat{\text{Var}}(S_{(d,n_0)}^{strat}) = \frac{1}{d^2 n_0 (n_0 - 1)} \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^n \left(f(\mathbf{x}_{ji}) - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(\mathbf{x}_{jk}) \right)^2. \quad (1.16)$$

В случае, если разбиение V_1, \dots, V_d выбрано удачно, дисперсия расслоенной выборки (1.10) (или (1.13) в упрощённом случае) будет значительно меньше, чем дисперсия (1.5) наивного МС. В противном случае, однако, дисперсия может даже увеличиться. Гарантированное уменьшение дисперсии достигается в некоторых частных случаях (наиболее известен случай, при котором доля точек в каждой области пропорциональна её объёму, см. Ермаков С.М. [6], Гельфанд И.М., Фролов А.С. и Ченцов Н.Н. [25]). Важно также отметить, что уменьшение дисперсии может быть двояким: речь может идти как об улучшении асимптотики убывания дисперсии, так и об уменьшении постоянной при сохранении асимптотики наивного Монте-Карло.

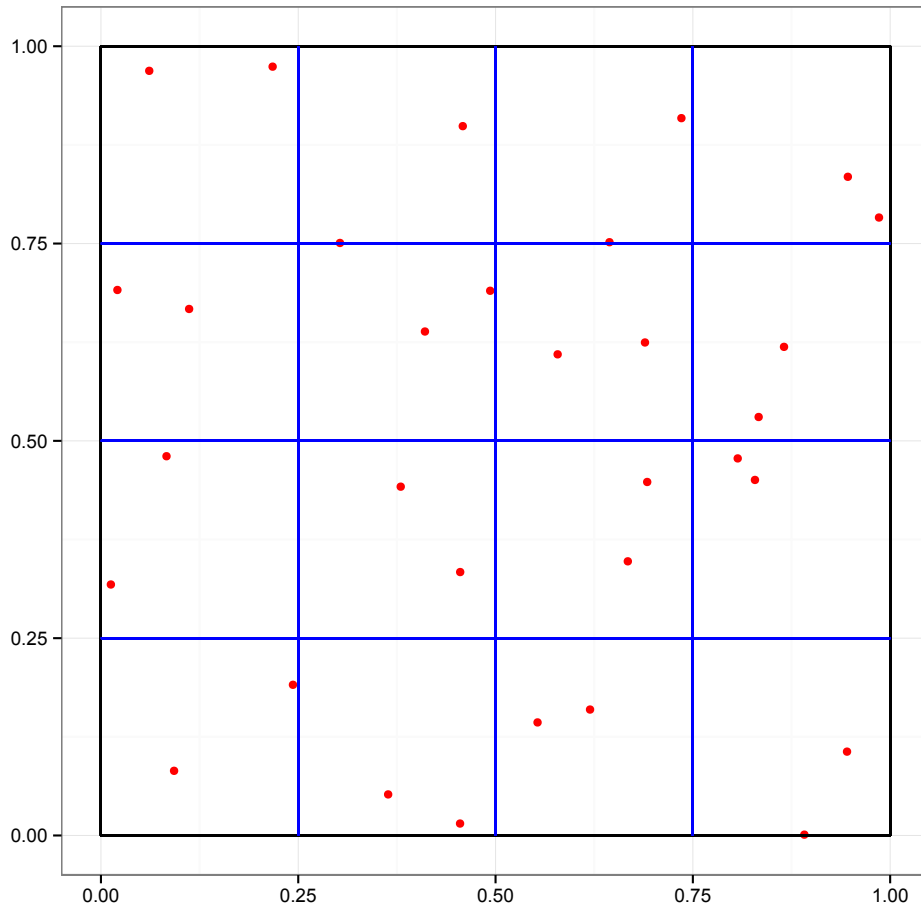


Рисунок 1.1: Расслоенная выборка

На рисунке 1.1 представлена расслоенная выборка из 32 точек. Расслоение проводится по шестнадцати квадратам равного объёма, в каждый из которых попадает ровно по две точки.

1.1.4 Случайные квадратурные формулы

Использование случайных квадратурных формул является одним из универсальных приёмов уменьшения дисперсии. Эта техника разработана, в первую очередь, Ермаковым С.М. и Золотухиным В.Г. [8], Ермаковым С.М. [9, 10, 13], Ермаковым С.М. и Грановским Б.Л. [12] с дополнениями Хэндскомба Д. [11]. Теория случайных квадратур обладает мощным вычислительным потенциалом и гибкостью, особенно в тех случаях, когда известна некоторая информация о подынтегральной функции (например, какая ортонормированная система может являться её хорошим приближением). Мы будем использовать аппарат случайных квадратур для получения формулы с определёнными необходимыми нам свойствами, которая ляжет в основу предлагаемого метода Qint. Приведём основные результаты из книги Ермакова С.М. [6] в несколько упрощённой форме для удобства изложения. В частности, мы рассматриваем только частную постановку задачи численного интегрирования.

Случайной квадратурной формулой мы будем называть формулу вида

$$S_n^{ref} = \sum_{i=1}^n A_i f(\mathbf{x}_i) \approx \int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (1.17)$$

где коэффициенты $A_i = A_i(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ суть заданные функции случайных величин \mathbf{x}_i .

Далее мы будем использовать следующие обозначения. Пусть $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ – произвольное семейство функций, а $Q = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ – набор точек в U_s . В таком случае $\Delta(Q)$ обозначает определитель альтернантной матрицы

$$\Delta(Q) = \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{x}_1) & \varphi_2(\mathbf{x}_1) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_1) \\ \varphi_1(\mathbf{x}_2) & \varphi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{x}_n) & \varphi_2(\mathbf{x}_n) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_n) \end{vmatrix}, \quad (1.18)$$

а $\Delta_f(Q)$ – определитель похожей матрицы, полученной заменой функции φ_1 на f :

$$\Delta_f(Q) = \begin{vmatrix} f(\mathbf{x}_1) & \varphi_2(\mathbf{x}_1) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_1) \\ f(\mathbf{x}_2) & \varphi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f(\mathbf{x}_n) & \varphi_2(\mathbf{x}_n) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_n) \end{vmatrix}. \quad (1.19)$$

Мы будем называть систему $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ *регулярной*, если $\lambda_s(Q : \Delta(Q) = 0)$.

Следующий результат является центральным для теории случайных квадратур (теорема 4.1, Ермаков С.М., [6]).

Теорема 1. Пусть система $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ состоит из линейно независимых для почти всех \mathbf{x} и ортогональных функций, причём первая из них тождественно равна единице: $\varphi_1 \equiv 1$. Рассмотрим

случайную квадратурную формулу, задаваемую

$$S_n^{rcf} = \frac{\Delta_f(Q)}{\Delta(Q)}. \quad (1.20)$$

Возьмём в качестве плотности совместного распределения узлов $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ функцию

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \frac{\Delta^2(Q)}{n!}. \quad (1.21)$$

В этом случае S_n^{rcf} является несмещённой оценкой интеграла I .

Дополнительно отметим, что квадратурная сумма S_n^{rcf} в этом случае точна для всего семейства $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$. В самом деле, для функции φ_1 сумма постоянна и равна единице, значение интеграла также равно единице. Для любой из $\varphi_2, \dots, \varphi_n$ в силу ортогональности значение интеграла равно нулю, в ноль обращается и квадратурная сумма, поскольку определитель $\Delta_{\varphi_i}(Q)$ содержит два одинаковых столбца.

Приведём также следующий важный результат о дисперсии формулы, рассматриваемой в теореме 1 (теорема 4.2, Ермаков С.М., [6]).

Теорема 2. Если система $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ является ортонормированной, то в предположениях теоремы 1 справедливо неравенство

$$\text{Var}(S_n^{rcf}) \leq \int_{U_s} \left(f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n (f, \varphi_i) \varphi_i(\mathbf{x}) \right)^2 d\mathbf{x}. \quad (1.22)$$

Если при этом система $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ регулярна, то (1.22) обращается в строгое равенство.

Теорема 1 даёт возможность строить такие случайные квадратуры, которые точны для наперёд заданного семейства функций, хорошо приближающих подынтегральную функцию f . Чем лучше такое приближение, тем меньше будет дисперсия формулы, что гарантируется теоремой 2.

1.1.5 Метод квази-Монте-Карло

Метод квази-Монте-Карло² (quasi-Monte Carlo, QMC) получил широкое распространение в трудных с точки зрения вычислительной сложности задачах. Такого рода задачи возникают, например, в стохастической финансовой математике или при рендеринге трёхмерных сцен со сложными моделями освещённости. Использование метода Монте-Карло даже с учётом понижения дисперсии может оказаться неприемлемым в силу достаточно медленной сходимости порядка $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$. Основное преимущество квази-Монте-Карло заключается в том, что он имеет сходимость, близкую к $\mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)$.

² В русскоязычной литературе нет устоявшегося написания метода; мы будем использовать вариант, наиболее соответствующий нормам русского языка (в частности, именно такое написание рекомендовано справочником Розенталя Д.Э. [26]).

Оценкой искомой величины I при использовании квази-Монте-Карло является среднее значение функции f для некоторой детерминированной последовательности $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$:

$$S_n^{QMC} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\mathbf{x}_i), \quad (1.23)$$

что в точности совпадает с оценкой (1.2) наивного Монте-Карло с той лишь разницей, что (1.23) не содержит случайных величин. В связи с этим набор $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ часто называют *квазислучайной последовательностью*.

Одним из самых значимых результатов для теории квази-Монте-Карло является неравенство Коксмы-Хлавки (Koksma-Hlawka inequality), связывающее ошибку интегрирования с величиной дискрепанса³ (discrepancy).

Определение 1. *Дискрепансом* набора $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ называется величина

$$D_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \sup_{B \in W} \left| \frac{\#\{\mathbf{x}_i : \mathbf{x}_i \in B\}}{n} - \lambda_s(B) \right|, \quad (1.24)$$

где $\#\{\mathbf{x}_i : \mathbf{x}_i \in B\}$ обозначает количество точек из набора, попавших в множество B , а W определяется как объединение всевозможных множеств вида

$$\prod_{k=1}^s [a_k, b_k) = \{\mathbf{y} \in U_s : a_k \leq \mathbf{y}_k < b_k\}. \quad (1.25)$$

Определение 2. *Стар-дискрепансом* набора $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ называется величина

$$D_n^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \sup_{B \in W^*} \left| \frac{\#\{\mathbf{x}_i : \mathbf{x}_i \in B\}}{n} - \lambda_s(B) \right|, \quad (1.26)$$

где W – объединение множеств вида

$$\prod_{k=1}^s [0, c_k) = \{\mathbf{y} \in U_s : 0 \leq \mathbf{y}_k < c_k\}. \quad (1.27)$$

Теорема 3 (Неравенство Коксмы-Хлавки). Пусть $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ – произвольный набор точек в гиперкубе U_s . Тогда для ошибки интегрирования выполнено

$$\left| \int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\mathbf{x}_i) \right| \leq V(f) D_n^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n), \quad (1.28)$$

³ В работах Соболя И.М. (например, [27]) близкий по сути термин носит название отклонения. Мы будем использовать прямую транслитерацию для того, чтобы избежать смысловой коллизии с понятием стандартного отклонения.

где $V(f)$ – вариация функции f в смысле Харди-Краузе⁴. Кроме того, это неравенство является точным в следующем смысле: для любого набора $\{x_1, \dots, x_n\}$ и для любого $\varepsilon > 0$ существует такая функция g , что $V(g) = 1$ и

$$\left| \int_{U_s} g(x) dx - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(x_i) \right| > D_n^*(x_1, \dots, x_n) - \varepsilon. \quad (1.29)$$

Интерпретация этого фундаментального неравенства состоит в том, что верхняя граница для ошибки интегрирования распадается на произведение двух множителей, первый из которых зависит только от свойств подынтегральной функции, а второй – только от того, насколько равномерно U_s покрывается элементами последовательности x_1, \dots, x_n . При этом асимптотика убывания остатка полностью определяется величиной стар-дискрепанса D_n^* , поэтому вопрос о применимости метода квази-Монте-Карло во многом сводится к вопросу отыскания и исследования оптимальных последовательностей.

Более современный взгляд (например, Хиккернелл Ф., [28], Дик Дж. и Пиллишхаммер Ф., [29]) на неравенство Коксмы-Хлавки преподносится с точки зрения функционального анализа. Если рассмотреть некоторое гильбертово пространство, состоящее из вещественнозначных функций на U_s , то остаток квадратурной формулы является линейным функционалом. Если он ограничен, то аналог неравенства Коксмы-Хлавки можно получить как неравенство нормы этого функционала. Такой подход обширно применяется для получения обобщённых характеристик наборов точек (\mathcal{L}_p -дискрепанс и другие) и результатов для различных классов функций.

Как отмечается многими авторами, неравенство (1.28) не может служить основой для конструктивной оценки ошибки интегрирования в практических приложениях. С одной стороны, определение стар-дискрепанса произвольного набора есть NP -сложная задача (Гневух М. и др., [30]). С другой стороны, оценка вариации Харди-Краузе также представляет собой сложную вычислительную задачу. Более того, для некоторых практических задач $V(f) = \infty$ (примеры можно найти у Лемьё К. в [31]). В связи с этим в практических приложениях практически всегда используется рандомизированный вариант квази-Монте-Карло, о котором речь пойдёт далее.

Существует достаточно большое количество квазислучайных последовательностей, обладающих минимально известным порядком убывания дискрепанса

$$\mathcal{O}\left(\frac{(\ln n)^s}{n}\right). \quad (1.30)$$

Такие последовательности имеют название *low-discrepancy последовательностей*; среди них самыми широко распространёнными являются последовательности Холтона Дж. (Halton sequence, [16]), Соболя И.М. (Sobol sequence, [15]), Форе Х. (Faure sequence, [32]) и Нидеррейтера Х. (Niederreiter sequence, [33]).

⁴ Строгое определение вариации в смысле Харди-Краузе может быть найдено у Нидеррейтера Х. в [17].

Помимо вышеуказанных частных конструкций, существуют и более общие категории low-discrepancy наборов. В частности, алгоритмы построения таких наборов могут быть двух разных типов:

- Закрытого типа: строится *конечный* n -точечный набор, определяемый значением n и пересчитываемый заново для разных n .
- Открытого типа: используются первые n точек из бесконечной последовательности, поэтому для оценки с увеличенным n можно использовать полученные ранее значения.

Числовые сети и последовательности, рассматриваемые далее, являются алгоритмами закрытого и открытого типа, соответственно. Необходимо отметить, что существует и другой популярный раздел квази-Монте-Карло: решёточные правила (lattice rules). Истоками этого направления являются работы Коробова Н.М. (например, книга [34]), более новые результаты указаны в работе Слоана И. и Джоуи С., [35]. Сравнение современных алгоритмов построения решёточных правил и числовых сетей и последовательностей проведено в статье Ньюенса Д. и Куулса Р. [36]. Далее нас будут интересовать только числовые сети и последовательности, которые мы обсудим подробнее.

1.1.6 Числовые сети и последовательности

Основная идея квази-Монте-Карло состоит в том, чтобы получить хорошо распределённые (в некотором смысле) наборы точек в гиперкубе $U_s = [0,1]^s$. Идея построения (t,m,s) -сети заключается в размещении точек таким образом, чтобы их количество было пропорционально объёму подмножеств гиперкуба определённого вида.

Определение 3. Пусть $t \geq 0, m \geq 1, s \geq 1, b \geq 2$ – натуральные числа, при этом $t \leq m$. (t,m,s) -сетью по основанию b называется такой набор P из b^m точек, что произвольное элементарное подмножество вида

$$\prod_{j=1}^s \left[\frac{a_j}{b^{d_j}}, \frac{a_j + 1}{b^{d_j}} \right) \quad (1.31)$$

для любых натуральных $d_j \geq 0, 0 \leq a_j < b^{d_j}$, где $d_1 + \dots + d_s = m - t$, содержит в точности b^t точек из P .

Отметим один тривиальный факт, непосредственно вытекающий из определения: любая (t,m,s) -сеть автоматически является $(t+1,m,s)$ -сетью. В частности, любой набор из b^m точек представляет собой (m,m,s) -сеть. В связи с этим для фиксированных b, m и s возникает вопрос об отыскании такой сети, чтобы параметр t был минимально возможным. В этом контексте t также часто носит название *параметра качества*.

Аналогичная идея стоит и за понятием (t,s) -последовательности.

Определение 4. Пусть $t \geq 0, s \geq 1, b \geq 2$ – натуральные числа. (t, s) -последовательностью по основанию b называется такой бесконечный набор $Q = (q_1, q_2, \dots)$, что для любых натуральных $m > t$ и $l \geq 0$ произвольный отрезок, состоящий из b^m точек набора Q , вида

$$q_{lb^m}, \dots, q_{(l+1)b^m-1} \quad (1.32)$$

является (t, m, s) -сетью по основанию b .

Вышеупомянутое рассуждение о минимизации параметра t также справедливо и для (t, s) -последовательностей. Для практических задач рекомендуется выбирать такие сети и последовательности, у которых параметр качества является наименьшим из возможных. Такие оптимальные параметры указаны в онлайн базе данных MinT (Шюрер Р. и Шмидт У., [37]). Там же приводятся конструктивные методы построения таких квазислучайных наборов.

1.1.7 Последовательность Холтона

Последовательность Холтона, построенная Холтоном Дж. в [16], стала одной из первых квазислучайных последовательностей, для которой теоретически получено свойство low-discrepancy. Чтобы ввести определение точек Холтона, для произвольного целого неотрицательного n рассмотрим его b -ичное разложение вида

$$n = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(n) b^j, \quad (1.33)$$

которое для произвольного целого основания $b \geq 2$ всегда единственно с учётом двух требований: во-первых, $a_j(n) \in \{0, 1, \dots, b-1\}$, во-вторых, для достаточно большого j_0 все $a_j(n) = 0$ при $j > j_0$ (то есть разложение не содержит бесконечного числа ненулевых слагаемых). Теперь пусть функция $\phi_b(n)$ определена как

$$\phi_b(n) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(n) b^{-j-1}. \quad (1.34)$$

Такое преобразование $\phi_b(n)$ действует на число n , отображая его в отрезок $[0, 1]$.

Пусть для данной размерности s зафиксированы взаимно простые основания b_1, \dots, b_s . Последовательность Холтона по основаниям b_1, \dots, b_s определяется как (x_1, x_2, \dots) , где

$$x_n = (\phi_{b_1}(n), \dots, \phi_{b_s}(n)). \quad (1.35)$$

Точки Холтона обладают тем преимуществом, что алгоритм их построения крайне прост. Однако с ростом размерности s при наличии достаточно близких оснований b_l и b_m становится всё более актуальной проблема сильной положительной коррелированности между парами координат с номерами l и m . Существует несколько различных приёмов, направленных на борьбу

бу с этим эффектом, основанных на перемешивании координат или пропуске некоторых точек последовательности.

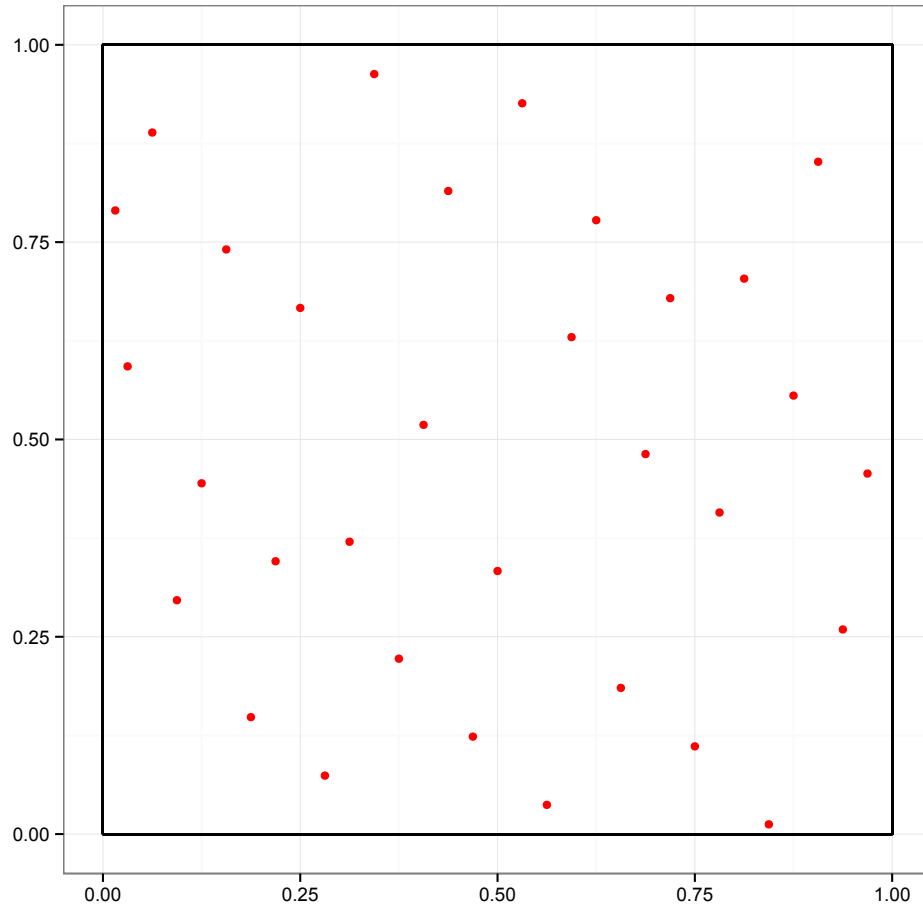


Рисунок 1.2: Точки Холтона

На рисунке 1.2 изображены первые 32 точки двумерной последовательности Холтона по основаниям $b_1 = 2, b_2 = 3$. Довольно легко увидеть, что точки Холтона не образуют (t,s) -последовательность, поэтому на практике в методе квази-Монте-Карло более широкое распространение имеет последовательность Соболя.

1.1.8 Последовательность Соболя

Последовательность Соболя, построенная Соболем И.М. в [15], является первой известной конструкцией, которая является (t,s) -последовательностью в смысле определения 4. Она определяется следующим образом: пусть $p_1, \dots, p_s \in \mathbb{F}_2(x)$ – примитивные многочлены, упорядоченные в порядке неубывания степеней. Так, для $1 \leq i \leq s$ пусть

$$p_i(x) = x^{e_i} + a_{1,i}x^{e_i-1} + \dots + a_{e_i-1,i}x + 1. \quad (1.36)$$

Возьмём произвольные нечётные натуральные числа $m_{1,i}, \dots, m_{e_i,i}$, такие что $m_{k,i} < 2^k$ для $1 \leq k \leq e_i$. Для всех $k > e_i$ числа $m_{k,i}$ определяются рекурсивно при помощи побитового оператора XOR (исключающего или), обозначаемого \oplus :

$$m_{k,i} = 2a_{1,i}m_{k-1,i} \oplus 2^2a_{2,i}m_{k-2,i} \oplus \dots \oplus 2^{e_i-1}a_{e_i-1,i}m_{k-e_i+1,i} \oplus 2^{e_i}m_{k-e_i,i} \oplus m_{k-e_i,i}. \quad (1.37)$$

Далее, определим *направляющие числа* $v_{k,i}$ как

$$v_{k,i} = \frac{m_{k,i}}{2^k}. \quad (1.38)$$

Наконец, для произвольного $n \in \mathbb{N}_0$, имеющего двоичное разложение $n = n_0 + 2n_1 + \dots + 2^{r-1}n_{r-1}$, i -тая соболевская координата n -ной точки последовательности имеет вид

$$x_{n,i} = n_0v_{1,i} \oplus n_1v_{2,i} \oplus \dots \oplus n_{r-1}v_{r,i}. \quad (1.39)$$

Таким образом, последовательность Соболя определяется как совокупность (x_0, x_1, \dots) , где $\mathbf{x}_n = (x_{n,1}, \dots, x_{n,s})$.

Широко известен эффективный приём, предложенный Антоновым И.А. и Салеевым В.М. в [38]. А именно, для последовательной генерации точек Соболя можно воспользоваться кодами Грея $G(n) = n \oplus \lfloor n/2 \rfloor$. Учитывая тот факт, что коды Грея для чисел n и $n+1$ всегда отличаются только одним битом (пусть он имеет номер k), достаточно положить

$$x_{n+1,i} = x_{n,i} \oplus v_{k,i}. \quad (1.40)$$

Как видно из алгоритма построения последовательности Соболя, ключевое значение имеют направляющие числа $\{v_{k,i}\}$. Поиск оптимальных (с точки зрения качества конечной последовательности) наборов направляющих чисел представляет собой отдельную задачу. Самим Соболевым И.М. предложены такие наборы до размерности $s = 51$, работа Джоуи С. и Куо Ф. [39] предоставляет таблицы для размерностей вплоть до $s = 21201$.

Рисунок 1.3 представляет 32 точки из последовательности Соболя и свойства их распределённости. Все отмеченные прямоугольники имеют левый нижний угол в точке $(0,0)$ и, являясь элементарными множествами в смысле определения 3, содержат ровно по одной точке.

Как известно, последовательность Соболя не является оптимальной в смысле минимально возможного t (см. Дик и Нидеррейтер [40]). Вообще говоря, всё дальнейшее изложение справедливо относительно произвольной (t,s) -последовательности, но мы будем использовать именно последовательность Соболя по трём причинам. Во-первых, потому что последовательность Соболя изначально базируется на системах Хаара, и распределённость точек по бинарным отрезкам изучена самим Соболевым И.М. в [15]. Во-вторых, описанная выше алгоритмическая модификация Антонова И.А. и Салеева В.М. позволяет быстро получать подряд идущие точки из последовательности Соболя. И в-третьих, существует несколько эффективных реализаций соболевских

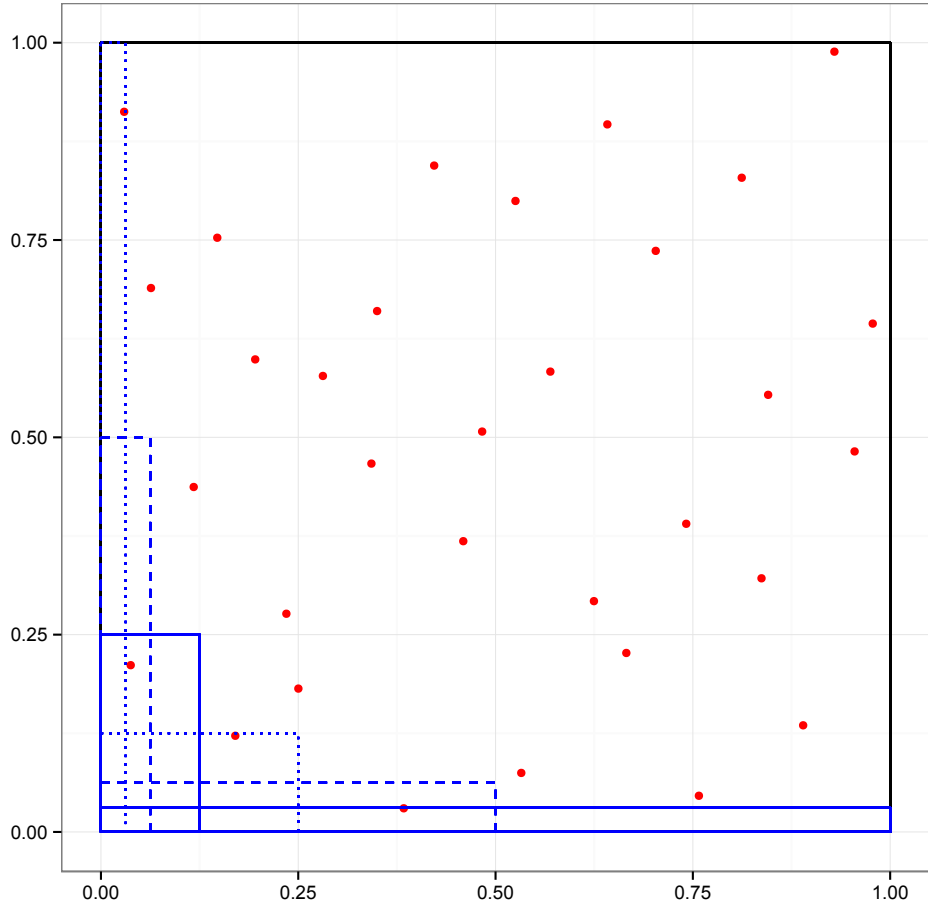


Рисунок 1.3: Точки Соболя как $(0,2)$ -последовательность по основанию 2

генераторов, распространяемых под свободными лицензиями. Одна из таких реализаций использована нами для реализации предлагаемого метода и получения всех численных результатов (описание алгоритма дано у Брэтли и Фокса в [41], реализация библиотеки HIntLib [42], [23] выполнена Шюрером Р.).

1.1.9 Рандомизированный метод квази-Монте-Карло

Как уже обсуждалось ранее, практическое применение квази-Монте-Карло ограничивается неконструктивностью оценки (1.28). В этом свете естественной представляется идея ввести рандомизацию в детерминированную процедуру квази-Монте-Карло с целью построения доверительного интервала по аналогии с методом Монте-Карло.

Рандомизированный квази-Монте-Карло (randomized quasi-Monte Carlo, RQMC) в простейшем случае состоит в следующем. Пусть $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_n\}$ – некий детерминированный low-discrepancy набор, из которого мы построим r независимых рандомизированных наборов $\tilde{\mathcal{X}}_1, \dots, \tilde{\mathcal{X}}_r$. Более строго, под рандомизацией мы будем подразумевать преобразование $\tilde{\mathcal{X}} = \Psi(\mathcal{X}, \xi)$, так что конечный набор $\tilde{\mathcal{X}}$ порождается случайной величиной ξ и обладает теми же квазислучайными свойствами, что и исходный набор \mathcal{X} . При это мы говорим, что ран-

домонизированные наборы $\tilde{\mathcal{X}}_1, \dots, \tilde{\mathcal{X}}_r$ независимы, если независимы порождающие их случайные величины ξ_1, \dots, ξ_r . Мы приводим примеры подходящих преобразований Ψ далее.

Для удобства мы будем пользоваться обозначением $\sum f(\mathcal{X})$, подразумевая под ним сумму значений функции f во всех точках, входящих в набор \mathcal{X} . Для каждого из рандомизированных наборов построим квази-Монте-Карло оценку, аналогичную (1.23):

$$S_{j,n}^{RQMC} = \frac{1}{n} \sum f(\tilde{\mathcal{X}}_j), \quad (1.41)$$

а в качестве общей рандомизированного квази-Монте-Карло оценки возьмём их среднее:

$$S_{rn}^{RQMC} = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r S_{j,n}^{RQMC}. \quad (1.42)$$

Если мы выберем преобразование Ψ таким образом, что каждая из оценок $S_{j,n}^{RQMC}$ обладает свойством несмещённости ($\forall j \mathbb{E}(S_{j,n}^{RQMC}) = I$), то и общая оценка также будет несмещённой: $\mathbb{E}(S_{rn}^{RQMC}) = I$.

Относительно дисперсий (1.41) и (1.42) можно сказать, что они связаны выражением

$$\text{Var}(S_{rn}^{RQMC}) = \frac{\text{Var}(S_{j,n}^{RQMC})}{r}, \quad (1.43)$$

что справедливо для любого j в силу независимости рандомизаций. Если в случае дисперсии наивного Монте-Карло в числителе (1.5) стоит дисперсия подынтегральной функции (1.4), что выполнялось в силу независимости всех n векторов, то в случае рандомизированного квази-Монте-Карло величина $\text{Var}(S_{j,n}^{RQMC})$, вообще говоря, не равна σ_f^2 . Это происходит потому, что в рамках одного набора $\tilde{\mathcal{X}}_j$ n входящих в него векторов независимыми в общем случае не являются, потому что они порождены рандомизацией Ψ над детерминированным набором \mathcal{X} .

Мы можем контролировать точность оценки (1.42) при помощи доверительного интервала, построенного на основе следующей оценки дисперсии:

$$\widehat{\text{Var}}(S_{rn}^{RQMC}) = \frac{1}{r(r-1)} \sum_{j=1}^r \left(S_{j,n}^{RQMC} - S_{rn}^{RQMC} \right)^2. \quad (1.44)$$

Легко показать, что оценка (1.44) является несмещённой оценкой для дисперсии (1.43).

Желательно, чтобы метод рандомизации Ψ не нарушал low-discrepancy свойств исходного набора \mathcal{X} . Так, например, если исходное множество \mathcal{X} является (t, m, s) -сетью или (t, s) -последовательностью, то естественно стараться подобрать Ψ таким образом, чтобы $\tilde{\mathcal{X}}$ также являлось (t, m, s) -сетью или (t, s) -последовательностью, соответственно⁵.

Одним из наиболее распространённых способов рандомизации для (t, m, s) -сетей предложен Оуэном А. в [43], [44]. С одной стороны, он достаточно прост с алгоритмической точки зрения,

⁵ В случае, когда речь идёт о свойствах рандомизированных наборов $\tilde{\mathcal{X}}$, подразумевается их выполнение с вероятностью 1.

с другой – обладает некоторыми важными теоретическими свойствами, что делает его удачным выбором для последующих численных экспериментов.

Определение 5. Рассмотрим процедуру *скрэмблинга* (*scrambling*) для произвольной точки гиперкуба $\mathbf{x} \in U_s$. Пусть каждая координата этой точки $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_s)$ имеет b -ичное представление вида $x_i = \sum_{k=1}^{\infty} a_{ik} b^{-k}$, где $a_{ik} \in \{0, 1, \dots, b-1\}$. На шаге k алгоритма рассмотрим случайную перестановку $\pi_{ja_{j1} \dots a_{jk-1}}$ чисел $\{0, 1, \dots, b-1\}$, независимую от любых ранее используемых и определим $\tilde{a}_{ik} = \pi_{ja_{j1} \dots a_{jk-1}} a_{ik}$. Точка $\tilde{\mathbf{x}}$ после скрэмблинга определяется как $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_s)$, где $\tilde{x}_i = \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{a}_{ik} b^{-k}$.

Пусть $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ есть некоторая (t, m, s) -сеть по основанию b (например, отрезок последовательности Соболя при некоторых n и $b = 2$). Рандомизированная сеть $\{\tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_n\}$ является результатом применения к каждой точке одной и той же процедуры скрэмблинга, описанной определением 5. Для такой рандомизации Оуэном доказано несколько важных утверждений. Во-первых, скрэмблинг сохраняет параметры сети, то есть (t, m, s) -сеть останется (t, m, s) -сетью с вероятностью 1. Во-вторых, для частного случая $t = 0$ дисперсия оценки интеграла ограничена сверху:

$$\text{Var} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\tilde{\mathbf{x}}_i) \right) \leq \frac{2.72\sigma^2}{n}. \quad (1.45)$$

В-третьих, для произвольного $t \geq 0$ и $b = 2$ (случай последовательности Соболя) справедлива другая граница дисперсии:

$$\text{Var} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\tilde{\mathbf{x}}_i) \right) \leq 2^t 3^d \frac{\sigma^2}{n}. \quad (1.46)$$

Важным для рандомизированного квази-Монте-Карло является вопрос о выборе достаточно-го числа рандомизаций r . В качестве ответа на последний вопрос приведём следующий результат Оуэна А. из [45] для алгоритма скрэмблинга: если для функции f выполнен ряд условий на смешанные частные производные порядка s , то порядок убывания дисперсии рандомизированного квази-Монте-Карло равен $O(\frac{\ln^{s-1} n}{rn^3})$, что асимптотически лучше порядка наивного Монте-Карло $O(\frac{1}{rn})$. Таким образом, с точки зрения асимптотики выгоднее увеличивать количество точек n в рамках одной рандомизации, что в ситуации с фиксированным количеством вычислений функции f ведёт к сокращению r . С другой стороны, для маленьких r оценка (1.44) окажется недостоверной, и поэтому обычно для практических задач рекомендуется брать $r \geq 10$ (см. Лемьё К. [31]). Стоит отметить, однако, что это сугубо практическая рекомендация, и вопрос о выборе r не имеет окончательного ответа.

1.2 Квадратура Qint

Метод квази-Монте-Карло обладает естественной интерпретацией в терминах разложения подынтегральной функции в ряды по кусочно-постоянным функциям. Так, многие авторы свя-

зывают остаток интегрирования с семействами функций Хаара (Соболев И.М., [14]) и Уолша (Лемьё К., [31], Дик Дж. и Пиллихшаммер Ф., [29]), который определяется асимптотическим поведением коэффициентов такого разложения. В связи с этим возникает идея построения такой случайной квадратурной формулы, которая была бы точна для первых n функций из семейств Хаара. Мы надеемся при этом, что нам удастся провести параллели между использованием подобной формулы и квазислучайными low-discrepancy наборами: (t, m, s) -сетями и (t, s) -последовательностями.

1.2.1 Обобщённая система Хаара

Система функций Хаара, построенная Хааром А. в [46], является базисом в пространстве $\mathcal{L}^2[0,1]$. Мы приведём определение этой системы и обобщим его на многомерный случай. Похожая идея обобщённой системы Хаара, но с другим подходом к определению, озвучена Энтакером К. в [47].

По аналогии с определениями, приведёнными Соболевым И.М. в [14], введём обозначение

$$l_i^k = \left(\frac{i-1}{2^k}, \frac{i}{2^k} \right),$$

где $i \in 1, \dots, 2^k$, $k \in \mathbb{N}_0$.

Определение 6. Для произвольного натурального r рассмотрим его разложение в виде $r = 2^k + i$, где $i \in 1, \dots, 2^k$, $k \in \mathbb{N}_0$. *Функция Хаара* с номером r задаётся следующим образом:

$$\chi_1(x) = 1, \quad \chi_r(x) = \begin{cases} 2^{\frac{k}{2}}, & x \in l_{2i-1}^{k+1}; \\ -2^{\frac{k}{2}}, & x \in l_{2i}^{k+1}; \\ 0, & x \in [0,1] \setminus \bar{l}_i^k \end{cases} \quad (1.47)$$

где \bar{l}_i^k – замыкание l_i^k . При этом все функции непрерывны справа в нуле и непрерывны слева в единице, а во внутренних точках разрыва функции Хаара определяются как полусумма пределов слева и справа.

Система Хаара (1.47) является ортонормированной в $\mathcal{L}^2[0,1]$. Помимо этого, Шаудер Дж. [48] показал, что система Хаара является базисом для всех пространств $\mathcal{L}^p[0,1]$ для $1 \leq p < \infty$. Другие важные свойства системы подробно описаны в книге Соболя И.М. [14], и обзорной статье Голубова Б.И. [49]. Введём понятие обобщённой системы Хаара, состоящей из функций, определённых не на единичном отрезке, а на множестве \mathfrak{X} .

Определение 7. Рассмотрим общую постановку задачи численного интегрирования $(\mathfrak{X}, \mathfrak{F}, \mu)$. Пусть n – произвольное натуральное число, и пусть определено некоторое разбиение \mathfrak{X} на n

непересекающихся связных подмножеств равной меры:

$$\mathfrak{X} = \mathfrak{X}_1 \cup \mathfrak{X}_2 \cup \dots \cup \mathfrak{X}_n, \quad \forall i \mu(\mathfrak{X}_i) = \frac{1}{n}, \quad \forall i \neq j \mathfrak{X}_i \cap \mathfrak{X}_j = \emptyset. \quad (1.48)$$

Мы будем называть такое разбиение (\mathfrak{X}, n) -разбиением.

Определение 8. Пусть, как и ранее, $r = 2^k + i$, где $i \in 1, \dots, 2^k$, $k \in \mathbb{N}_0$. Пусть $n = 2^\nu$ для некоторого $\nu \in \mathbb{N}_0$ и задано $(\mathfrak{X}, 2^\nu)$ -разбиение. Определим *двоичные подмножества* $\mathfrak{l}_{ki}, \mathfrak{l}_{ki}^+, \mathfrak{l}_{ki}^-$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathfrak{l}_{ki}^+ &= \mathfrak{X}_{(i-1)2^{\nu-k}+1} \cup \dots \cup \mathfrak{X}_{i2^{\nu-k}-2^{\nu-k-1}}; \\ \mathfrak{l}_{ki}^- &= \mathfrak{X}_{i2^{\nu-k}-2^{\nu-k-1}+1} \cup \dots \cup \mathfrak{X}_{i2^{\nu-k}}; \\ \mathfrak{l}_{ki} &= \mathfrak{X}_{(i-1)2^{\nu-k}+1} \cup \dots \cup \mathfrak{X}_{i2^{\nu-k}}. \end{aligned}$$

Тогда *обобщённая функция Хаара* с номером $r \leq n$ задаётся как

$$\chi_1(\mathbf{x}) = 1, \quad \chi_r(\mathbf{x}) = \begin{cases} 2^{\frac{k}{2}}, & \mathbf{x} \in \mathfrak{l}_{ki}^+; \\ -2^{\frac{k}{2}}, & \mathbf{x} \in \mathfrak{l}_{ki}^-; \\ 0, & \mathbf{x} \in \mathfrak{X} \setminus \mathfrak{l}_{ki}. \end{cases} \quad (1.49)$$

Легко убедиться, что в одномерном случае $\mathfrak{X} = [0, 1]$ и при разбиении $\mathfrak{X}_1 = [0, \frac{1}{2^\nu})$, \dots , $\mathfrak{X}_i = [\frac{i-1}{2^\nu}, \frac{i}{2^\nu})$, \dots , $\mathfrak{X}_n = [\frac{2^\nu-1}{2^\nu}, 1]$ обобщённая система функций Хаара (1.49) совпадает с классической системой Хаара (1.47) за исключением точек разрыва, что не играет принципиального значения в контексте частной постановки задачи численного интегрирования, потому что речь идёт о множестве нулевой меры.

Естественно ожидать сохранения свойства ортонормированности для обобщённой системы Хаара.

Лемма 1. *Обобщённая система Хаара является ортонормированной в $\mathcal{L}^2(\mathfrak{X})$, т.е.*

- 1) $\forall r \int_{\mathfrak{X}} \chi_r^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) = 1,$
- 2) $\forall r \neq t \int_{\mathfrak{X}} \chi_r(\mathbf{x}) \chi_t(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) = 0.$

Доказательство. Для фиксированного номера r количество таких подмножеств из имеющегося $(\mathfrak{X}, 2^\nu)$ -разбиения, где функция Хаара не обращается в ноль, легко определить из индексов \mathfrak{l}_{ki} : оно равно $i2^{\nu-k} - ((i-1)2^{\nu-k} + 1) + 1 = 2^{\nu-k}$. Тогда

$$\int_{\mathfrak{X}} \chi_r^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) = \int_{\mathfrak{l}_{ki}} 2^k \mu(d\mathbf{x}) = 2^k 2^{\nu-k} \mu(\mathfrak{X}_1) = 2^k 2^{\nu-k} 2^{-\nu} = 1.$$

Теперь пусть разложения для r и t задаются $r = 2^k + i$ и $t = 2^m + j$. Тогда

$$\int_{\mathfrak{X}} \chi_r(\mathbf{x}) \chi_t(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) = \int_{\bar{l}_{ki} \cap \bar{l}_{mj}} \chi_r(\mathbf{x}) \chi_t(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) = J_{rt}$$

В случае, когда $\bar{l}_{ki} \cap \bar{l}_{mj} = \emptyset$, равенство нулю выполнено. В противном случае,

$$J_{rt} = 2^{\frac{k+m}{2}} \left(\mu(l_{ki}^+ \cap l_{mj}^+) + \mu(l_{ki}^- \cap l_{mj}^-) - \mu(l_{ki}^+ \cap l_{mj}^-) - \mu(l_{ki}^- \cap l_{mj}^+) \right).$$

Пусть для определённости $r < t$. Если $\bar{l}_{ki} \cap \bar{l}_{mj} \neq \emptyset$, то, в силу определения 8, либо $\bar{l}_{mj} \subset l_{ki}^+$, и тогда $\mu(l_{ki}^+ \cap l_{mj}^+) = \mu(l_{ki}^+ \cap l_{mj}^-)$, $\mu(l_{ki}^- \cap l_{mj}^-) = \mu(l_{ki}^- \cap l_{mj}^+) = 0$, либо $\bar{l}_{mj} \subset l_{ki}^-$, и тогда $\mu(l_{ki}^- \cap l_{mj}^-) = \mu(l_{ki}^- \cap l_{mj}^+) = \mu(l_{ki}^+ \cap l_{mj}^+)$, $\mu(l_{ki}^+ \cap l_{mj}^-) = \mu(l_{ki}^+ \cap l_{mj}^+) = 0$. В обоих случаях сумма четырёх слагаемых обращается в ноль. ■

1.2.2 Построение квадратуры Qint и анализ дисперсии

Вводимую далее квадратурную формулу будем рассматривать в рамках частной постановки задачи численного интегрирования. Пусть $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ есть (U_s, n) -разбиение единичного гиперкуба, определённое для фиксированного $n = 2^\nu$, $\nu \in \mathbb{N}_0$. В таком случае определена обобщённая система Хаара $\{\chi_i\}_{i=1}^n$ в соответствии с (1.49).

Для удобства дальнейшего изложения введём понятие латинского множества. Определим \mathcal{U}_s^n как прямое произведение n гиперкубов U_s :

$$\mathcal{U}_s^n = \underbrace{U_s \times U_s \times \dots \times U_s}_{n \text{ раз}}. \quad (1.50)$$

Определение 9. Пусть $\pi = (i_1, i_2, \dots, i_n)$ – некоторая перестановка $(1, 2, \dots, n)$. Латинским множеством $Lat(\pi)$, задаваемым перестановкой (i_1, i_2, \dots, i_n) мы будем называть подмножество \mathcal{U}_s^n , определяемое следующим условием:

$$(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \in Lat(i_1, i_2, \dots, i_n) \Leftrightarrow \forall j \in \{1, 2, \dots, n\} \mathbf{x}_j \in \mathfrak{X}_{i_j}. \quad (1.51)$$

Полным латинским множеством Lat_n назовём подмножество \mathcal{U}_s^n , являющееся объединением латинских множеств, задаваемых всевозможными перестановками длины n :

$$Lat_n = \bigcup_{(i_1, i_2, \dots, i_n)} Lat(i_1, i_2, \dots, i_n). \quad (1.52)$$

Латинское множество отражает ту же идею, что и элементарные подмножества (1.31) в определениях (t, m, s) -сетей и (t, s) -последовательностей. В самом деле, элемент $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \in \mathcal{U}_s^n$ принадлежит какому-либо латинскому множеству в том и только в том случае, если в каждом из $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ содержится ровно одна из n точек $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$.

Применим теорему 1 к семейству обобщённых функций Хаара (1.49).

Теорема 4. *Случайная квадратурная формула, точная для первых n обобщённых функций Хаара, имеет вид*

$$S_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\mathbf{x}_i), \quad (1.53)$$

где $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ – случайные точки из U_s с совместным распределением, задаваемым плотностью

$$\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \begin{cases} \frac{n^n}{n!}, & (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \in Lat_n; \\ 0, & (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \notin Lat_n. \end{cases} \quad (1.54)$$

Доказательство.

Лемма 1 позволяет применить теорему 1 непосредственно. Для установления точного вида самой формулы и плотности распределения узлов необходимо только получить выражения $\Delta(Q)$ и $\Delta_f(Q)$.

Пусть $\pi = (i_1, i_2, \dots, i_n)$ есть перестановка $(1, 2, \dots, n)$. Как известно, чётность перестановки ε_π однозначно определяется количеством инверсий в ней. Слагаемое в $\Delta(Q)$, отвечающее перестановке π , есть $(-1)^{\varepsilon_\pi} \chi_1(\mathbf{x}_{i_1}) \chi_2(\mathbf{x}_{i_2}) \dots \chi_n(\mathbf{x}_{i_n})$. Из всех произведений такого рода ненулевыми являются только такие, у которых все узлы \mathbf{x}_i расположены в разных подмножествах. Действительно, если хотя бы две точки попадают в одно и то же подмножество \mathfrak{X}_k , то, в силу того, что для любого i функция $\chi_i(\mathbf{x})$ постоянна $\forall \mathbf{x} \in \mathfrak{X}_k$, определитель $\Delta(Q)$ имеет две одинаковые строки, и, следовательно, равен нулю. Это означает, что формула корректно определена только на полном латинском множестве Lat_n .

Далее, $\Delta_f(Q)$ также есть сумма произведений вида $(-1)^{\varepsilon_\pi} f(\mathbf{x}_{i_1}) \chi_2(\mathbf{x}_{i_2}) \dots \chi_n(\mathbf{x}_{i_n})$ по всем перестановкам π . Если $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \in Lat_n$, то

$$\begin{aligned} \Delta_f(Q) &= (-1)^{\varepsilon_\pi} \cdot C_n \cdot (f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + \dots + f(\mathbf{x}_n)) \cdot C_z, \\ \Delta(Q) &= (-1)^{\varepsilon_\pi} \cdot C_n \cdot (1 + 1 + \dots + 1) \cdot C_z, \end{aligned}$$

где $C_n \neq 0$ – постоянная вида $\chi_2(\mathbf{x}_{i_2}) \dots \chi_n(\mathbf{x}_{i_n})$ (она одинакова для всех перестановок π , опять же, в силу кусочной постоянности $\chi_i(\mathbf{x})$), а $C_z > 0$ – количество таких произведений, генерируемых всевозможными перестановками. Важно отметить, что $C_z \neq 0$: пусть две перестановки π_1 и π_2 отличаются одной транспозицией, тогда они имеют разные знаки ($\varepsilon_{\pi_1} \varepsilon_{\pi_2} = -1$), но и соответствующие миноры, входящие в $\Delta_f(Q)$ и $\Delta(Q)$, также отличаются знаком; так, слагаемые от двух разных перестановок не могут обратить друг друга в ноль. В действительности обе постоянные C_n и C_z могут быть точно установлены, но это излишне, поскольку они не входят в вид формулы, сокращаясь при делении.

В итоге, квадратурная формула имеет вид

$$S_n = \frac{\Delta_f(Q)}{\Delta(Q)} = \frac{1}{n} (f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + \dots + f(\mathbf{x}_n)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\mathbf{x}_i). \quad (1.55)$$

Что касается плотности совместного распределения узлов, то она постоянна на Lat_n . Константу можно легко определить из условия нормировки плотности: объём множества Lat_n равен $\frac{n!}{n^n}$, поэтому константа в плотности является обратной величиной:

$$\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \begin{cases} \frac{n^n}{n!}, & (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \in Lat_n, \\ 0, & (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \notin Lat_n \end{cases} \quad (1.56)$$

■

Теорема 1 автоматически гарантирует несмещённость формулы (1.53). Для полноты изложения мы приведём и прямое доказательство этого факта.

Лемма 2. *Случайная квадратурная формула (1.53) с плотностью (1.54) является несмещённой оценкой интеграла I для произвольной подынтегральной функции $f \in \mathcal{L}_1(U_s)$.*

Доказательство. Действительно,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(S_n) &= \int_{\mathcal{U}_s^n} S_n \cdot \frac{n^n}{n!} \cdot \mathbb{1}_{Lat_n}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \dots \mu(d\mathbf{x}_n) = \\ &= \frac{1}{n} \left(\int_{U_s} f(\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_1) + \dots + \int_{U_s} f(\mathbf{x}_N) \mu(d\mathbf{x}_N) \right) = \int_{U_s} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}). \end{aligned}$$

■

Теперь, когда свойство несмещённости установлено, ключевым становится вопрос о дисперсии формулы (1.53). Сначала установим, является ли рассматриваемая система функций регулярной.

Лемма 3. *Система обобщенных функций Хаара $\{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n\}$ не является регулярной.*

Доказательство. Для доказательства достаточно указать множество ненулевого объёма, на котором определитель $\Delta(Q)$ обращается в ноль. В качестве примера такого множества может выступать $\mathfrak{X}_1 \times \mathfrak{X}_1 \times \dots \times \mathfrak{X}_1$: его объём равен $\frac{1}{n^n}$, а $\Delta(Q)$ состоит из одинаковых строк. В действительности, нами уже установлено, что $\lambda_s(\Delta(Q) \neq 0) = \frac{n!}{n^n}$, что меньше единицы ($\lambda_s(\mathcal{U}_s^n) = 1$) для любого $n > 1$.

■

Факт отсутствия регулярности означает, что мы не сможем воспользоваться теоремой 2 для установления точной дисперсии формулы (1.53). Тем не менее, мы воспользуемся явным видом самой формулы и плотности распределения её узлов (1.54) и посчитаем дисперсию напрямую.

Теорема 5. Дисперсия формулы (1.53) равна

$$\text{Var}(S_n) = \frac{1}{n} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{n} \left(\int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 - \frac{1}{n} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2, \quad (1.57)$$

где $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ и $\alpha_k = \int_{\mathfrak{X}_k} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$.

Доказательство. Вычислим дисперсию непосредственно по определению:

$$\text{Var}(S_n) = \int_{\mathfrak{X}^n} S_n^2 d\varphi - \left(\int_{\mathfrak{X}^n} S_n d\varphi \right)^2 = I_A - I_B. \quad (1.58)$$

Интегралы I_A и I_B рассмотрим отдельно. Относительно интеграла I_A выполнена следующая цепочка равенств:

$$\begin{aligned} I_A &= \frac{1}{n^2} \int_{\mathfrak{X}^n} (f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + \dots + f(\mathbf{x}_n))^2 d\varphi = \\ &= \frac{n^{n-2}}{n!} \left\{ \int_{\mathfrak{X}^n} n \cdot f^2(\mathbf{x}_1) \mathbb{1}_{\text{Lat}(i_1, i_2, \dots, i_n)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \dots \mu(d\mathbf{x}_n) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{i < j} \int_{\mathfrak{X}^n} f(\mathbf{x}_i) f(\mathbf{x}_j) \mathbb{1}_{\text{Lat}(i_1, i_2, \dots, i_n)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \dots \mu(d\mathbf{x}_n) \right\} \\ &= \frac{n^{n-2}}{n!} \left\{ n \cdot \int_{\mathfrak{X}^n} f^2(\mathbf{x}_1) \mathbb{1}_{\text{Lat}(i_1, i_2, \dots, i_n)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \dots \mu(d\mathbf{x}_n) + \right. \\ &\quad \left. + n(n-1) \cdot \sum_{i < j} \int_{\mathfrak{X}^n} f(\mathbf{x}_i) f(\mathbf{x}_j) \mathbb{1}_{\text{Lat}(i_1, i_2, \dots, i_n)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \dots \mu(d\mathbf{x}_n) \right\} = \\ &= \frac{n^{n-2}}{n!} [n \cdot I_C + n(n-1) \cdot I_D]. \end{aligned}$$

Нам удалось свести вычисление интеграла I_A к вычислению более простых интегралов I_C и I_D . Рассмотрим I_C :

$$I_C = \int_{\mathfrak{X}^n} f^2(\mathbf{x}_1) \mathbb{1}_{\text{Lat}(i_1, i_2, \dots, i_n)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \dots \mu(d\mathbf{x}_n) = \frac{(n-1)!}{n^{n-1}} \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}).$$

В свою очередь, для I_D справедливо

$$\begin{aligned}
I_D &= \int_{\mathfrak{X}^n} f(\mathbf{x}_1) f(\mathbf{x}_2) \mathbb{1}_{Lat(i_1, i_2, \dots, i_n)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \dots \mu(d\mathbf{x}_n) = \\
&= \frac{(n-2)!}{n^{n-2}} \int_{\mathfrak{X}_1 \neq \mathfrak{X}_2} f(\mathbf{x}_1) f(\mathbf{x}_2) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) = \\
&= \frac{(n-2)!}{n^{n-2}} \left\{ \int_{\mathfrak{X}^2} f(\mathbf{x}_1) f(\mathbf{x}_2) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) - \int_{\mathfrak{X}_1 = \mathfrak{X}_2} f(\mathbf{x}_1) f(\mathbf{x}_2) \mu(d\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_2) \right\} = \\
&= \frac{(n-2)!}{n^{n-2}} \left\{ \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 - \sum_{i=1}^n \int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}_1) \mu(d\mathbf{x}_1) \int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}_2) \mu(d\mathbf{x}_2) \right\} = \\
&= \frac{(n-2)!}{n^{n-2}} \left\{ \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 - \sum_{i=1}^n \left(\int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Таким образом, мы получили выражение для интеграла I_A :

$$\begin{aligned}
I_A &= \frac{n^{n-2}}{n!} [n \cdot I_C + n(n-1) \cdot I_D] = \\
&= \frac{n^{n-2}}{n!} \left[\frac{n!}{n^{n-1}} \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) + \frac{n!}{n^{n-2}} \left\{ \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 - \sum_{i=1}^n \left(\int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 \right\} \right] = \\
&= \frac{1}{n} \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) + \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 - \sum_{i=1}^n \left(\int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2.
\end{aligned}$$

Интеграл I_B определяется тривиально в силу несмещённости формулы:

$$I_B = \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2.$$

Наконец,

$$\begin{aligned}
\text{Var}(S_n) &= I_A - I_B = \frac{1}{n} \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n \left(\int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 = \\
&= \frac{1}{n} \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) - \frac{1}{n} \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 + \\
&+ \frac{1}{n} \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 - \sum_{i=1}^n \left(\int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2 = \\
&= \text{Var}(S_n^{MC}) + \frac{1}{n} \left((\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n)^2 - \alpha_1^2 - \alpha_2^2 - \dots - \alpha_n^2 \right) = \\
&= \text{Var}(S_n^{MC}) - \frac{1}{n} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2,
\end{aligned}$$

где

$$\text{Var}(S_n^{MC}) = \frac{1}{n} \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) - \frac{1}{n} \left(\int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}) \right)^2$$

есть дисперсия традиционного Монте-Карло, а $\alpha_i = \int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x})$, $i = 1, 2, \dots, n$. ■

Следствие. Дисперсия формулы (1.53) не превосходит дисперсии наивного Монте-Карло (1.5):

$$\text{Var}(S_n) = \text{Var}(S_n^{MC}) - A, \quad (1.59)$$

где

$$A = A(n) = \frac{1}{n} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2. \quad (1.60)$$

Далее мы будем называть формулу (1.53), обладающую вышеупомянутыми свойствами точности, несмещённости и имеющую дисперсию (1.57), *формулой Qint* или *процедурой Qint*.

1.2.3 Некоторые результаты для теории случайных квадратурных формул

В этом подразделе мы остановимся на новых фактах, которые дополняют теорию случайных квадратурных формул. Как уже отмечалось, теорема 2 указывает, что в случае регулярных систем неравенство для дисперсии (1.22) обращается в равенство. С другой стороны, для некоторых нерегулярных систем истинная дисперсия меньше (например, для обобщённой системы Хаара справедливо выражение (1.57) из теоремы 5). Логично попытаться провести черту между классами нерегулярных систем, для которых дисперсия меньше, чем оценка сверху (1.22), и для которых истинная дисперсия в точности задаётся (1.22).

До конца этой главы мы возвращаем общую постановку задачи: \mathfrak{X} – произвольное непустое множество, μ – σ -конечная мера, $\mu(\mathfrak{X}) = 1$. Кроме того, здесь n обозначает любое натуральное число, большее 1. Введём разбиение \mathfrak{X} на n непересекающихся подмножеств, при этом

необязательно равной меры: $\mathfrak{X} = \bigcup_{i=1}^n \mathfrak{X}_i$. Для краткости мы будем использовать обозначение $\mu^n(d\mathbf{Q}) = \mu(dx_1) \dots \mu(dx_n)$, взятое из книги Ермакова С.М. [6]. Приводимые далее результаты частично изложены в статье автора и Ермакова С.М. [20].

Определим функцию-индикатор для произвольного множества Y :

$$\mathbb{1}_Y(\mathbf{y}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{y} \in Y, \\ 0, & \mathbf{y} \notin Y. \end{cases} \quad (1.61)$$

Определение 10. Для фиксированного разбиения $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ назовём произвольную ортонормированную систему $\{w_i\}_{i=1}^n$ *системой со скользящим носителем*, если

- 1) для $i = 1, 2, \dots, n$ выполнено $\text{supp}(w_i) = \mathfrak{X}_i$;
- 2) система $\{w_i\}_{i=1}^n$ линейно независима с константой $\mathbb{1}_{\mathfrak{X}}$.

Теорема 6. Пусть $\{w_i\}_{i=1}^n$ – произвольная система со скользящим носителем. Тогда случайная квадратная формула, точная для $\{w_i\}_{i=1}^n$ и построенная в соответствии с теоремой 1, имеет дисперсию, совпадающую с оценкой сверху (1.22).

Доказательство. План доказательства состоит из двух шагов: во-первых, мы применим теорему 1 к набору из $n + 1$ функций, $\{\mathbb{1}_{\mathfrak{X}}, w_1, \dots, w_n\}$; во-вторых, мы посчитаем точную дисперсию полученной формулы и сравним её с верхней границей, предоставленной теоремой 2.

Сама формула и плотность распределения узлов зависят от распределения $n + 1$ узлов по n подмножествам. В точности как и для формулы Qint, многие комбинации приводят к нулю в определителях $\Delta(Q)$ и $\Delta_f(Q)$, и поэтому для них формула определена не будет. Нам необходимо рассмотреть только такие случаи, когда все подмножества \mathfrak{X}_i получают ровно по одной точке, кроме одного подмножества, которое получает две. Общий объём множества, где формула корректно определена, составляет $\mu\{\Delta(Q) \neq 0\} = \frac{(n+1)!}{2n^n}$. В силу симметрии относительно нумерации $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}$, по сути необходимо исследовать единственный случай (обозначим это условие за T): $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathfrak{X}_1$, $\mathbf{x}_{i+1} \in \mathfrak{X}_i$ для всех $i > 2$.

Тогда

$$\Delta(Q) = \begin{vmatrix} 1 & w_1(\mathbf{x}_1) & 0 & \dots & 0 \\ 1 & w_1(\mathbf{x}_2) & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & w_2(\mathbf{x}_3) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & w_n(\mathbf{x}_{n+1}) \end{vmatrix} = (w_1(\mathbf{x}_2) - w_1(\mathbf{x}_1)) \prod_{i=2}^n w_i(\mathbf{x}_{i+1}),$$

и, аналогично,

$$\Delta_f(Q) = (f(\mathbf{x}_1)w_1(\mathbf{x}_2) - f(\mathbf{x}_2)w_1(\mathbf{x}_1)) \prod_{i=2}^n w_i(\mathbf{x}_{i+1}).$$

Формула для условия T может быть записана в виде $\tilde{S}_{n+1} = \frac{\Delta_f(Q)}{\Delta(Q)}$, а плотность распределения узлов – $\tilde{W} = \frac{(\Delta(Q))^2}{(n+1)!}$. Эти выражения носят формальный характер и могут быть значительно упрощены, но мы не будем этого делать, потому что нас интересует только дисперсия такой формулы, которую мы можем установить и без такого упрощения.

Обратимся к выражению дисперсии, получив сначала выражение для математического ожидания квадрата формулы (подсчёт во многом совпадает с доказательством теоремы 5):

$$\begin{aligned} \int_T \tilde{S}_{n+1}^2(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}) \tilde{W}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}) \mu^{n+1}(d\mathbf{Q}) &= \\ &= \frac{1}{(n+1)!} \int_T (f(\mathbf{x}_1)w_1(\mathbf{x}_2) - f(\mathbf{x}_2)w_1(\mathbf{x}_1))^2 \prod_{i=2}^n w_i^2(\mathbf{x}_{i+1}) \mu^{n+1}(d\mathbf{Q}) = \\ &= \frac{2}{(n+1)!} \int_{\mathfrak{X}_1} \int_{\mathfrak{X}_1} (f^2(\mathbf{x}_1)w_1^2(\mathbf{x}_2) - f(\mathbf{x}_1)f(\mathbf{x}_2)w_1(\mathbf{x}_1)w_1(\mathbf{x}_2)) \mu(d\mathbf{x}_1)\mu(d\mathbf{x}_2) = \\ &= \frac{2}{(n+1)!} \left(\int_{\mathfrak{X}_1} f^2(\mathbf{x})\mu(d\mathbf{x}) - \langle f, w_1 \rangle^2 \right), \end{aligned}$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle$ обозначает скалярное произведение в \mathcal{L}^2 : $\langle f, g \rangle = \int_{\mathfrak{X}} f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})\mu(d\mathbf{x})$.

Проводя суммирование по всем $\frac{n(n+1)!}{2}$ случаям, аналогичным T , получаем

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\tilde{S}_{n+1}^2) &= \frac{1}{2}n(n+1)! \frac{1}{n} \frac{2}{(n+1)!} \left(\int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x})\mu(d\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n \langle f, w_i \rangle^2 \right) = \\ &= \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x})\mu(d\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n \langle f, w_i \rangle^2. \end{aligned}$$

Наконец, дисперсия равна

$$\text{Var}(\tilde{S}_{n+1}) = \mathbb{E}(\tilde{S}_{n+1}^2) - \mathbb{E}(\tilde{S}_{n+1})^2 = \int_{\mathfrak{X}} f^2(\mathbf{x})\mu(d\mathbf{x}) - \langle f, \mathbb{1}_{\mathfrak{X}} \rangle^2 - \sum_{i=1}^n \langle f, w_i \rangle^2,$$

что в точности совпадает с оценкой по теореме 2. ■

Полученный результат интересен ещё и в контексте таких разбиений, когда все подмножества имеют одинаковую меру: $\mu(\mathfrak{X}_i) = \frac{1}{n}$ (именно такого рода разбиения мы рассматривали для построения обобщённой системы Хаара и процедуры Qint). В этом случае для формулы (1.53) справедливо $\mu\{\Delta(Q) \neq 0\} = \frac{n!}{n^n}$, и эта величина быстро стремится к нулю с ростом n . С другой стороны, для любой регулярной системы по определению выполнено $\mu\{\Delta(Q) \neq 0\} = 1$. Будет ли иметь место уменьшение дисперсии для некоторого промежуточного случая? Ответ на этого вопрос в общем виде неизвестен, однако предыдущая теорема указывает на то, что Хаар-подобных систем, скорее всего, не очень много. В самом деле, для систем со скользящим

носителем

$$1 > \mu\{\Delta(Q) \neq 0\} = \frac{(n+1)!}{2n^n} > \frac{n!}{n^n},$$

причём порядок убывания почти такой же, как для формулы Qint, а уменьшение дисперсии уже не имеет места (теорема 6). Описание класса нерегулярных систем, обладающих свойством дополнительного уменьшения дисперсии, является важным шагом в дальнейшем усовершенствовании теории случайных квадратур. Следующая теорема дополняет известную теорему 2 и может служить отправной точкой в этом исследовании.

Теорема 7. Рассмотрим ортонормированную систему $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ на множестве \mathfrak{X} . Пусть Θ и Θ_{-1} – такие подмножества \mathfrak{X} , где $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ и $\{\varphi_i\}_{i=2}^n$ линейно зависимы, соответственно. Мы предполагаем, что Θ и Θ_{-1} суть максимально широкие множества с такими свойствами; при этом очевидно, что $\Theta_{-1} \subseteq \Theta \subseteq \mathfrak{X}$.

Дисперсия формулы S_n^{rcf} из теоремы 1 зависит от следующих условий:

1) если $\mu(\Theta) = 0$, то система регулярна, и

$$\text{Var}(S_n^{rcf}) = \int_{U_s} \left(f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n (f, \varphi_i) \varphi_i(\mathbf{x}) \right)^2 d\mathbf{x}; \quad (1.62)$$

2) если $0 < \mu(\Theta) < \mu(\mathfrak{X})$, то система нерегулярна, и

(a) если $\mu(\Theta_{-1}) = \mu(\Theta)$, то

$$\text{Var}(S_n^{rcf}) = \int_{U_s} \left(f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n (f, \varphi_i) \varphi_i(\mathbf{x}) \right)^2 d\mathbf{x}; \quad (1.63)$$

(b) если $\mu(\Theta_{-1}) < \mu(\Theta)$, то, вообще говоря, истинная дисперсия формулы может быть меньше:

$$\text{Var}(S_n^{rcf}) \leq \int_{U_s} \left(f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n (f, \varphi_i) \varphi_i(\mathbf{x}) \right)^2 d\mathbf{x}. \quad (1.64)$$

Доказательство. Доказательство в целом повторяет доказательство теоремы 2, приведённое Ермаковым С.М. в [6]. Уточнения требует только последний переход в выражении для дисперсии:

$$\begin{aligned} \text{Var}(S_n^{rcf}) &= \frac{1}{n!} \int_{\Delta(Q) \neq 0} S_n^2 \Delta^2(Q) \mu^n(d\mathbf{Q}) - \langle f, \varphi_1 \rangle^2 \leq \\ &\leq \frac{1}{n!} \int_{\mathfrak{X}^n} \Delta_f^2(Q) \mu^n(d\mathbf{Q}) - \langle f, \varphi_1 \rangle^2. \end{aligned}$$

Этот переход в оригинальном доказательстве не содержит условий, при которых неравенство обращается в строгое равенство. Однако такое возможно, причём в двух случаях. Во-первых, если $\mu\{\Delta(Q) = 0\} = 0$. Во-вторых, когда $\Delta_f(Q) = 0$ всюду на множестве $\{\Delta(Q) = 0\}$. Первый

случай соответствует формальному определению регулярной системы. Второй означает, что $\forall f$ выполнено $\Delta_f(Q) = 0$ на Θ , что может быть истинно только тогда, когда $\varphi_2, \dots, \varphi_n$ являются линейно зависимыми почти всюду на Θ . Из этого можно сделать вывод о том, что Θ и Θ_{-1} различаются не более, чем на величину нулевой μ -меры, т.е. $\mu(\Theta_{-1}) = \mu(\Theta)$. ■

Проиллюстрируем утверждение теоремы 7 на простом примере. Рассмотрим ортонормированную систему из двух функций на единичном отрезке $\mathfrak{X} = U_1 = [0, 1]$ с мерой Лебега на нём. Первую функцию возьмём постоянной, $\varphi_1(x) = 1$. Вторую функцию зададим в виде

$$\varphi_2(x) = \begin{cases} c, & x \in [0, t), \\ \psi(x), & x \in [t, 1]. \end{cases} \quad (1.65)$$

Здесь c – некоторая константа, $t \in (0, 1)$ – фиксированная точка, а ψ – функция, линейно независимая с φ_1 на отрезке $[t, 1]$ (например, полином порядка больше единицы). В этих условиях⁶ $\Theta = [0, t)$, а $\Theta_{-1} = [0, 1]$. Посчитаем дисперсию случайной квадратурной формулы и убедимся, что она меньше, чем теоретическая оценка сверху, как утверждает теорема 7.

Применим теорему 1 к системе $\{\varphi_1, \varphi_2\}$. $\Delta(Q)$ есть определитель 2×2 :

$$\Delta(Q) = \begin{cases} 0, & x_1, x_2 \in [0, t), \\ \psi(x_2) - c, & x_1 \in [0, t), x_2 \in [t, 1], (\text{условие А}), \\ c - \psi(x_1), & x_1 \in [t, 1], x_2 \in [0, t), (\text{условие В}), \\ \psi(x_2) - \psi(x_1), & x_1, x_2 \in [t, 1], (\text{условие С}). \end{cases} \quad (1.66)$$

Истинная дисперсия равна

$$\begin{aligned} \text{Var}_{act} &= \frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^1 \Delta_f^2(Q) dx_1 dx_2 - \left(\int_0^1 f(y) dy \right)^2 = \\ &= \frac{1}{2} (J_A + J_B + J_C) - \left(\int_0^1 f(y) dy \right)^2, \end{aligned}$$

где J_A, J_B и J_C суть подынтегралы, определяемые условиями А, В и С соответственно. J_A и J_B симметричны относительно замены между x_1 и x_2 , следовательно $J_A = J_B$, поэтому посчитаем только J_A и J_C . Для краткости будем опускать переменную интегрирования.

⁶ Если $\psi(t) = c$, то, строго говоря, $\Theta = [0, t]$, но для дальнейшего рассуждения это не принципиально.

Итак,

$$\begin{aligned} J_A &= \int_0^t \int_t^1 (\psi(x_2)f(x_1) - cf(x_2))^2 dx_1 dx_2 = \\ &= \int_0^t f^2 \int_t^1 \psi^2 + \int_t^1 f^2 \int_0^t c^2 - 2 \int_0^t cf \int_t^1 f\psi; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_C &= \int_t^1 \int_t^1 (\psi(x_2)f(x_1) - \psi(x_1)f(x_2))^2 dx_1 dx_2 = \\ &= 2 \int_t^1 f^2 \int_t^1 \psi^2 - 2 \left(\int_t^1 f\psi \right)^2. \end{aligned}$$

Наконец,

$$\begin{aligned} \text{Var}_{act} &= J_A + \frac{J_C}{2} - \left(\int_0^1 f(y)dy \right)^2 = \\ &= \int_0^1 f^2 - \left(\int_0^1 f \right)^2 - \left(\int_0^1 f\varphi_2 \right)^2 - \int_0^t f^2 \int_0^t c^2 + \left(\int_0^t cf \right)^2 = \\ &= \text{Var}_{th} - \int_0^t f^2 \int_0^t c^2 + \left(\int_0^t cf \right)^2, \end{aligned}$$

и, в соответствии с неравенством Коши-Буняковского,

$$\int_0^t f^2 \int_0^t c^2 \geq \left(\int_0^t cf \right)^2. \quad (1.67)$$

Таким образом, $\text{Var}_{act} < \text{Var}_{th}$ для любой функции f , не постоянной всюду на $[0, t)$, что совпадает с утверждением теоремы 7. Стоит отметить, что степень дополнительного уменьшения дисперсии зависит лишь от поведения функции f на отрезке $[0, t)$.

Подведём итоги первой главы работы. Центральным результатом здесь является теорема 4 о классе случайных квадратурных формул, точных для системы обобщённых функций Хаара. Эта теорема конструктивным образом указывает вид формулы и плотности распределения её узлов. Другой важный результат – теорема о дисперсии 5, дающая потенциальную возможность апостериорного контроля погрешности, которая будет исследована далее.

Кроме этого, удалось получить ряд теоретических результатов, относящихся к теории случайных квадратурных формул. Так, теорема 6 исследует класс Хаар-подобных систем, приходя

к выводу о том, что обобщённая система Хаара является важным нехарактерным случаем, для которого имеет место дополнительное уменьшение дисперсии по сравнению с общей оценкой сверху, установленной Ермаковым С.М. и Золотухиным В.Г. Вывод о том, что принципиальное значение имеет кусочно-постоянное поведение функций Хаара, подтверждается обобщением теоремы о верхней границе дисперсии для произвольной случайно-интерполяционной квадратной формулы (теорема 7). Справедливость этого результата демонстрируется на простом примере.

Глава 2

Практическое применение метода Qint

2.1 Эквивалентные формулировки дисперсии Qint

В предыдущей главе мы ввели понятие обобщённой системы Хаара, $\{\chi_i\}_{i=1}^n$. Помимо всего прочего, эта система примечательна тем, что она приводит к дополнительному уменьшению дисперсии описанной ранее процедуры Qint (1.53). Более того, как установлено теоремой 7, системы такого рода довольно редки. Мы рассмотрим ещё одну такую систему и с её помощью построим несколько эквивалентных выражений для дисперсии (1.57) формулы Qint.

Определение 11. Рассмотрим некоторое (U_s, n) -разбиение для фиксированного натурального n . Обобщённой системой индикаторов будем называть ортонормированную систему $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$, состоящую из функций

$$\varepsilon_i = \sqrt{n} \mathbb{1}_{\mathfrak{X}_i}. \quad (2.1)$$

Ортонормированность такой системы не вызывает сомнений, поскольку для разных индексов i и j носители функций ε_i и ε_j не пересекаются, а нормировка гарантируется множителем \sqrt{n} .

Отметим два важных свойства обобщённой системы индикаторов, которые не позволяли использовать её ранее. Во-первых, для обобщённой системы Хаара выполнено $\chi_1 = \mathbb{1}_{U_s}$, что позволяло построить формулу Qint, обладающую свойством несмещённости для интеграла. Функция $\mathbb{1}_{U_s}$ не входит в систему $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$, поэтому прямое применение теоремы 1 не представлялось целесообразным. Во-вторых, обобщённая система индикаторов не является системой со скользящим носителем, поскольку она линейно зависима с той же $\mathbb{1}_{U_s}$, а значит, к ней неприменима теорема 6.

Обе системы (Хаара и индикаторов) кусочно-постоянны на $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$, что приводит нас к следующей лемме.

Лемма 4. Существует матрица перехода H от системы $\{\chi_i\}_{i=1}^n$ к системе $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$, обладающая такими свойствами:

- 1) $H(\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n)^T = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)^T$;
- 2) H ортогональна, т.е. $H^T = H^{-1}$;

3) строки и столбцы H попарно ортогональны;

4) $\forall j$ верно $\sum_i H_{ij}^2 = 1$;

5) $\forall i$ верно $\sum_j H_{ij}^2 = 1$.

Доказательство. Построим матрицу обратного перехода: от обобщённой системы индикаторов к обобщённой системе Хаара. Мы докажем, что эта матрица обратима и обладает свойствами 2)–5). Это будет означать, что мы построили матрицу H^{-1} ; искомая матрица H будет к ней обратной: $(H^{-1})^{-1} = H$.

Первая обобщённая функция Хаара представляет собой постоянную, $\chi_1(x) = 1$, тогда первый ряд матрицы H^{-1} есть $(1, 1, \dots, 1)/\sqrt{n}$. Для произвольного ряда с номером i положим

$$H_{it}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \cdot \begin{cases} 2^{\frac{k-1}{2}}, & \frac{t}{2^k} \in l_{2i-1}^{k+1}; \\ -2^{\frac{k-1}{2}}, & \frac{t}{2^k} \in l_{2i}^{k+1}; \\ 0, & \frac{t}{2^k} \notin l_{2i}^{k+1}, \frac{t}{2^k} \notin l_{2i-1}^{k+1}, \end{cases}$$

где k, i, l_{2i-1}^{k+1} и l_{2i}^{k+1} взяты из определения обобщённой системы Хаара (1.49). Например, для $\nu = 3$ имеем $n = 2^3 = 8$ функций, и матрица H^{-1} выглядит как

$$H^{-1} = \frac{1}{\sqrt{8}} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -2 \end{pmatrix}.$$

Как отмечено ранее, обе системы $\{\chi_i\}_{i=1}^n$ и $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$ ортонормированы и могут рассматриваться как базисы пространства функций, кусочно-постоянных на $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$. Таким образом, матрица перехода H^{-1} между ними автоматически обратима и удовлетворяет соотношениям 2)–5), равно как и обратная к ней матрица H . ■

Лемма 4 позволяет говорить об эквивалентности систем $\{\chi_i\}_{i=1}^n$ и $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$ в следующем смысле. Пусть \varkappa_i и e_i суть коэффициенты Фурье подынтегральной функции f разложения по этим системам: $\varkappa_i = \langle f, \chi_i \rangle$, $e_i = \langle f, \varepsilon_i \rangle$. Тогда справедлива следующая теорема.

Теорема 8. Формула Qint (1.53) точна для обобщённой системы Хаара и для обобщённой системы индикаторов. Дисперсия формулы может быть представлена в виде

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(S_n) &= \frac{1}{n} \left(\int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right) - \sum_{i=1}^n \left(\int_{\mathfrak{x}_i} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = \\
 &= \frac{1}{n} \left(\|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n e_i^2 \right) = \\
 &= \frac{1}{n} \left(\|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n \varkappa_i^2 \right) = \\
 &= \frac{1}{n} \left\| f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(\mathbf{x}) \right\|_2^2.
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Доказательство. Из определения (2.1) непосредственно следует, что

$$\int_{\mathfrak{x}_i} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{n}} \int_{U_s} f(\mathbf{x}) \varepsilon_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

следовательно

$$\left(\int_{\mathfrak{x}_i} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = \frac{1}{n} e_i^2,$$

откуда

$$\text{Var}(S_n) = \frac{1}{n} \left(\|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n e_i^2 \right).$$

Необходимо показать, что $\sum_{i=1}^n \varkappa_i^2 = \sum_{i=1}^n e_i^2$. В самом деле,

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^n e_i^2 &= \sum_{i=1}^n \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) \varepsilon_i^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\
 &= \sum_{i=1}^n \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) \left(\sum_{j=1}^n H_{ij} \chi_j(\mathbf{x}) \right)^2 d\mathbf{x} = \\
 &= \sum_{i=1}^n \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) \left(\sum_{j=1}^n H_{ij}^2 \chi_j^2(\mathbf{x}) + 2 \sum_{k=1}^n \sum_{l=k+1}^n H_{ik} H_{jl} \chi_k(\mathbf{x}) \chi_l(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} = L.
 \end{aligned}$$

В силу того, что обобщенная система Хаара ортонормирована, общий интеграл от двойной суммы равен нулю, и, с использованием свойства 4) из леммы 4,

$$\begin{aligned} L &= \sum_{i=1}^n \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) \sum_{j=1}^n H_{ij}^2 \chi_j^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n H_{ij}^2 \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) \chi_j^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^n H_{ij}^2 \right) \varkappa_j^2 = \sum_{j=1}^n \varkappa_j^2. \end{aligned}$$

Осталось доказать, что

$$\|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n \varkappa_i^2 = \left\| f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(\mathbf{x}) \right\|_2^2. \quad (2.3)$$

Вообще говоря, такое представление выполнено для любой ортонормированной системы. Действительно,

$$\begin{aligned} \left\| f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(\mathbf{x}) \right\|_2^2 &= \int_{U_s} \left(f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(\mathbf{x}) \right)^2 d\mathbf{x} = \\ &= \int_{U_s} \left(f^2(\mathbf{x}) - 2f(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(\mathbf{x}) + \left(\sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(\mathbf{x}) \right)^2 \right) d\mathbf{x} = \\ &= \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - 2 \sum_{i=1}^n \varkappa_i \int_{U_s} f(\mathbf{x}) \chi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \sum_{i=1}^n \varkappa_i^2 = \\ &= \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \sum_{i=1}^n \varkappa_i^2 = \|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n \varkappa_i^2. \end{aligned}$$

■

Представления дисперсии, полученные в результате доказательства теоремы 8, представляются более удобными для практического применения по сравнению с изначальным выражением дисперсии из теоремы 5. На их основе нами далее будет построено несколько вариантов оценивания дисперсии для численных экспериментов.

2.2 Процедура Qint с повторами

Докажем вспомогательное утверждение, которое будет нам необходимо в дальнейшем.

Лемма 5. Пусть v_1, \dots, v_n – произвольные вещественные числа. Тогда

$$\sum_{i < j} (v_i - v_j)^2 + \left(\sum_{i=1}^n v_i \right)^2 = n \sum_{i=1}^n v_i^2. \quad (2.4)$$

Доказательство. Действительно,

$$\sum_{i < j} (v_i - v_j)^2 = (n-1) \sum_{i=1}^n v_i^2 - 2 \sum_{i < j} v_i v_j,$$

в то время как

$$\left(\sum_{i=1}^n v_i \right)^2 = \sum_{i=1}^n v_i^2 + 2 \sum_{i < j} v_i v_j.$$

Суммируя эти два равенства, мы получим утверждение леммы. ■

Рассмотрим естественное обобщение формулы Qint. Пусть m – число повторов процедуры Qint, в каждой из которых содержится n точек (или, что то же самое, число подмножеств куба равно n). При этом разбиение куба на подмножества $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ одинаково для всех повторов. Введём естественную нумерацию узлов: пронумеруем их при помощи двойной индексации таким образом, чтобы строки (первый индекс) соответствовали одному повтору процедуры, а столбцы (второй индекс) – номеру подмножества.

$$\begin{array}{ccccccc} \mathbf{x}_{1,1} & \mathbf{x}_{1,2} & \dots & \mathbf{x}_{1,n} & \longrightarrow & \text{повтор 1} & \\ \mathbf{x}_{2,1} & \mathbf{x}_{2,2} & \dots & \mathbf{x}_{2,n} & \longrightarrow & \text{повтор 2} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & & & \\ \mathbf{x}_{m,1} & \mathbf{x}_{m,2} & \dots & \mathbf{x}_{m,n} & \longrightarrow & \text{повтор m} & \\ \downarrow & \downarrow & & \downarrow & & & \\ \in \mathfrak{X}_1 & \in \mathfrak{X}_2 & \dots & \in \mathfrak{X}_n & & & \end{array} \quad (2.5)$$

Обозначим $N = mn$. Повторы мы будем брать независимыми друг от друга; под этим мы подразумеваем попарную независимость любых двух узлов, содержащихся в разных повторах. В рамках этого предположения и с учётом предлагаемой нумерации справедлива следующая теорема.

Теорема 9. *Обобщённая формула Qint, представленная в виде*

$$S_{(m,n)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n f(\mathbf{x}_{k,l}), \quad (2.6)$$

где каждый из m независимых повторов представляет собой процедуру Qint, описанную теоремой 4, обладает свойствами точности для обобщённой системы Хаара и несмещённости для $f \in \mathcal{L}_2(U_s)$. Её дисперсия равна

$$\text{Var}(S_{(m,n)}) = \frac{1}{N} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{N} \left(\int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 - \frac{1}{N} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2, \quad (2.7)$$

где $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ и $\alpha_i = \int_{\mathbf{x}_i} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$. Эта дисперсия не превосходит дисперсии наивного Монте-Карло с N узлами:

$$\text{Var}(S_{(m,n)}) = \text{Var}(S_N^{MC}) - A, \quad (2.8)$$

где

$$A = A(N) = \frac{1}{N} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2. \quad (2.9)$$

Кроме того, для дисперсии справедливо следующее эквивалентное выражение

$$\text{Var}(S_{(m,n)}) = \frac{1}{N} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{m} \sum_{j=1}^n \alpha_j^2. \quad (2.10)$$

Доказательство. Несмещённость оценки интеграла (2.6) очевидна в силу независимости повторов. Действительно, общая оценка представляет собой среднее m повторов квадратуры Qint, при этом каждый из повторов обладает свойством несмещённости (лемма 2).

Дисперсия вида (2.7) также получается тривиальным образом из дисперсии Qint (теорема 5 из ровно тех же соображений несмещённости. В самом деле, мы имеем дело с m независимыми реализациями случайной величины со средним, равным I , и дисперсией (1.57)

$$\text{Var}(S_n) = \frac{1}{n} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{n} \left(\int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 - \frac{1}{n} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2. \quad (2.11)$$

В этом случае $S_{(m,n)}$ будет иметь дисперсию в m раз меньше, то есть в точности

$$\text{Var}(S_{(m,n)}) = \frac{1}{N} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{N} \left(\int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 - \frac{1}{N} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2. \quad (2.12)$$

Для доказательства эквивалентной формы дисперсии достаточно показать, что

$$\frac{1}{N} \left(\int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 + \frac{1}{N} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2 = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^n \alpha_j^2. \quad (2.13)$$

Этот факт следует непосредственно из леммы 5 с учётом того, что $N = mn$ и

$$\left(\int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^n \int_{\mathbf{x}_i} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \right)^2. \quad (2.14)$$

■

Представленная в таком виде процедура есть не что иное Qint с повторами, как один из частных случаев расслоения вида (1.9). Для того, чтобы убедиться в этом, мы покажем эквивалентность дисперсий для обеих оценок.

Лемма 6. Пусть для формулы (1.12) выполнено $d = n$ и разбиение на множества V_1, \dots, V_d совпадает с разбиением $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$. Если при этом количество точек n_0 в каждом из подмножеств есть количество повторов m для обобщённой формулы Qint, то выражения для дисперсий (1.13) и (2.7) равны.

Доказательство. В самом деле, дисперсия расслоения, определяемая (1.13) и (1.14), в условиях $V_1 = \mathfrak{X}_1, \dots, V_n = \mathfrak{X}_n$ принимает вид

$$\begin{aligned} \text{Var}(S_{(n,m)}^{\text{strat}}) &= \frac{1}{n^2 m} \sum_{j=1}^n \sigma_{f, V_j}^2 = \frac{1}{nm} \sum_{j=1}^n \left(\int_{V_j} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - n \left(\int_{V_j} f(\mathbf{x}) \right)^2 \right) = \\ &= \frac{1}{nm} \sum_{j=1}^n \int_{\mathfrak{X}_j} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{m} \sum_{j=1}^n \left(\int_{\mathfrak{X}_j} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{N} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{m} \sum_{j=1}^n \alpha_j^2. \end{aligned}$$

Последнее выражение есть не что иное, как $\text{Var}(S_{(m,n)})$, в соответствии с (2.10). ■

Предыдущий результат означает, что мы могли бы получить формулу Qint с повторами в обход теории случайных квадратур. Тем не менее, выбранный нами путь является оправданным выбором по нескольким причинам:

- в силу теоремы 1 мы получили свойство точности для обобщённых систем Хаара и индикаторов (теоремы 4 и 8, соответственно);
- система Хаара оказалась одним из редких случаев нерегулярных систем, когда истинная дисперсия меньше, чем оценка сверху (теорема 2);
- предыдущее наблюдение приводит к ряду уточнений в теории случайных квадратурных формул (теоремы 6, 7);
- нами установлено несколько эквивалентных выражений для дисперсии процедуры Qint (теорема 8), что позволит нам построить несколько практических оценок и исследовать их свойства;
- нами показана тесная связь теории случайных квадратур и классических методов понижения дисперсии.

Практическое применение метода расслоенной выборки сопряжено с дополнительными накладными расходами на моделирование. Так, даже в простейшем случае, при последовательном моделировании точек $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ для имеющегося (U_s, n) -разбиения $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ необходимо, во-первых, выбирать подмножество случайным образом из тех, в которых ещё не было точек, во-вторых, иметь эффективный способ моделирования для каждого из подмножеств.

С другой стороны, последовательность Соболя, будучи (t, s) -последовательностью в смысле определения 4, обладает замечательными свойствами распределённости по элементарным подмножествам гиперкуба U_s . Если (U_s, n) -разбиение взято таким образом, что каждое из $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ состоит из одинакового количества элементарных подмножеств вида (1.31), то любые n подряд идущих точек из последовательности Соболя распределены именно так, как предписывает процедура Qint. Что касается процедуры Qint с повторами, то здесь можно поступить точно так же, как это делается для рандомизированного квази-Монте-Карло, а именно взять m независимых рандомизаций набора из n точек Соболя. Именно такой подход будет использоваться нами для последующих численных экспериментов.

Иными словами, мы можем рассматривать процедуру Qint с повторами как принципиально новый способ оценивания дисперсии рандомизированного квази-Монте-Карло. Вместо того, чтобы производить моделирование расслоенной выборки в соответствии с распределением (1.54), мы можем использовать рандомизированную (t, s) -последовательность, которая гарантированно обладает свойством равномерного распределения по $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$. Более того, теоретическая дисперсия рандомизированного квази-Монте-Карло в общем виде неизвестна (Оуэном А. в [45] доказана асимптотика только для одного узкого класса функций), а дисперсия Qint (2.7) известна и конструктивна, что позволяет строить рассматриваемые далее оценки (2.15), (2.19), (2.23), удобные для практического применения.

2.3 Оценивание дисперсии

Для построения оценки дисперсии, применимой для численных экспериментов, можно воспользоваться равенством (2.7). Такой подход рассматривался в работе [18]. А именно,

$$\widehat{\text{Var}}_1 = \widehat{\text{Var}}_{MC} - \hat{A}, \quad (2.15)$$

где

$$\hat{A} = \sum_{i < j} (\hat{\alpha}_i - \hat{\alpha}_j)^2 \quad (2.16)$$

и

$$\hat{\alpha}_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^m f(\mathbf{x}_{k,i}). \quad (2.17)$$

При этом каждый из подынтегралов α_i оценивается по m точкам, поскольку из каждого повтора ровно одна точка попадает в подмножество \mathcal{X}_i . Докажем ряд утверждений о такой оценке.

Лемма 7. $\hat{\alpha}_i$ – несмещённая оценка α_i .

Доказательство. Рассмотрим узел $\mathbf{x}_{k,i}$ для некоторых фиксированных k и i . Его распределение в рамках k -го повтора задаётся совместным распределением $\mathbf{x}_{k,1}, \dots, \mathbf{x}_{k,n}$, описываемым

плотностью (1.54). В соответствии с этим распределением,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}f(\mathbf{x}_{k,i}) &= \frac{n^n}{n!} \int_{\mathcal{U}_s^n} f(\mathbf{x}_{k,i}) \mathbb{1}_{Lat_n}(\mathbf{x}_{k,1}, \dots, \mathbf{x}_{k,n}) d\mathbf{x}_{k,1} \dots d\mathbf{x}_{k,n} = \\ &= \frac{n^n}{n!} \frac{n!}{n^{n-1}} \int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}_{k,i}) d\mathbf{x}_{k,i} = n \int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{x}).\end{aligned}$$

Поскольку повторы независимы,

$$\mathbb{E}\hat{\alpha}_i = \frac{1}{N} (\mathbb{E}f(\mathbf{x}_{1,i}) + \dots + \mathbb{E}f(\mathbf{x}_{m,i})) = \int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \alpha_i.$$

■

Наряду с обозначением α_i , введём коэффициенты β_i :

$$\beta_i = \int_{\mathfrak{X}_i} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Тогда верна следующая лемма.

Лемма 8. Для математического ожидания квадрата оценки $\hat{\alpha}_i$ выполнено

$$\mathbb{E}\hat{\alpha}_i^2 = \frac{m-1}{m} \alpha_i^2 + \frac{1}{N} \beta_i. \quad (2.18)$$

Доказательство. Пользуясь независимостью двух различных повторов,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\hat{\alpha}_i^2 &= \frac{1}{N^2} \mathbb{E} \left(\sum_{k=1}^m f(\mathbf{x}_{k,i}) \right)^2 = \frac{1}{N^2} \mathbb{E} \left(\sum_{k=1}^m f^2(\mathbf{x}_{k,i}) + 2 \sum_{k_1 < k_2} f(\mathbf{x}_{k_1,i}) f(\mathbf{x}_{k_2,i}) \right) = \\ &= \frac{1}{N^2} \left(m \mathbb{E}f^2(\mathbf{x}_{1,i}) + m(m-1) \mathbb{E}f(\mathbf{x}_{1,i}) f(\mathbf{x}_{2,i}) \right) = \\ &= \frac{1}{Nn} \left(n \int_{\mathfrak{X}_i} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + (m-1)n^2 \left(\int_{\mathfrak{X}_i} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 \right) = \\ &= \frac{1}{N} \beta_i + \frac{m-1}{m} \alpha_i^2.\end{aligned}$$

■

Как свидетельствуют результаты из [18], оценка вида (2.15) может быть успешно использована для оценки дисперсии процедуры Qint. Однако в работе автора [19] для практических вычислений использовалась другая оценка, основанная на равенстве (2.10):

$$\widehat{\text{Var}}_2 = \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,l}) - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i^2, \quad (2.19)$$

где

$$\hat{\alpha}_i = \sqrt{\frac{m}{m-1}} \hat{\alpha}_i = \frac{1}{n\sqrt{m(m-1)}} \sum_{k=1}^m f(\mathbf{x}_{k,i}). \quad (2.20)$$

Оценки $\hat{\alpha}_i$ и $\hat{\alpha}_i$ связаны тривиальным образом, поэтому из предыдущей леммы автоматически следует, что

$$\mathbb{E}\hat{\alpha}_i^2 = \alpha_i^2 + \frac{1}{n(m-1)}\beta_i. \quad (2.21)$$

Установим точное смещение рассматриваемой оценки дисперсии.

Лемма 9. Для математического ожидания оценки $\widehat{\text{Var}}_2$ выполнено

$$\mathbb{E}\widehat{\text{Var}}_2 = \text{Var}(S_{(m,n)}) - \frac{1}{N(m-1)} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.22)$$

Доказательство. Из доказательства теоремы 1.57 о дисперсии Qint мы знаем, что в рамках одного повтора (при фиксированном l)

$$\mathbb{E} \sum_{k=1}^m f^2(\mathbf{x}_{k,l}) = m \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\widehat{\text{Var}}_2 &= \frac{1}{N^2} \mathbb{E} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,l}) - \frac{1}{m} \mathbb{E} \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i^2 = \\ &= \frac{1}{N} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^n \left(\alpha_i^2 + \frac{1}{n(m-1)} \beta_i \right) = \\ &= \frac{1}{N} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{m} \left(\int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 - \frac{1}{N(m-1)} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= \text{Var}(S_{(m,n)}) - \frac{1}{N(m-1)} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

■

Следствие. $\widehat{\text{Var}}_2$ является асимптотически несмещённой оценкой дисперсии обобщённой формулы Qint.

Оценка (2.19) представляется нам более предпочтительной по сравнению с (2.15), поскольку её смещение нам известно из следующей леммы. Последняя также обладает свойством асимптотической несмещённости (это легко показать, но мы не будем этого делать, поскольку не будем использовать её в численных экспериментах), но её смещение имеет более сложную форму.

Стоит отдельно отметить тот факт, что порядок убывания смещения не является одинаковым по m и n (он равен $\frac{1}{m(m-1)}$ и $\frac{1}{n}$, соответственно, то есть убывает быстрее при увеличении количества повторов).

Наконец, мы можем рассмотреть и несмещённый вариант оценки дисперсии, который тривиальным образом получается из оценки $\widehat{\text{Var}}_2$:

$$\widehat{\text{Var}}_3 = \frac{m}{N^2(m-1)} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,l}) - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i^2. \quad (2.23)$$

Далее мы будем использовать только оценку вида (2.19): с одной стороны, с практической точки зрения существенных различий между использованием оценок (2.19) и (2.23) выявлено не было; с другой, оценка (2.19) уже использовалась автором в работе [19].

Из теорем 8 и 9 мы можем сделать вывод о скорости убывания дисперсии обобщённой процедуры Qint по количеству разбиений n и повторов m . В самом деле,

$$\text{Var}(S_{(m,n)}) = \frac{1}{mn} \left(\|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n \varkappa_i^2 \right), \quad (2.24)$$

где $\{\varkappa_i\}_{i=1}^n$ суть коэффициенты Фурье-Хаара подынтегральной функции f . Таким образом, дисперсия убывает по m как $\mathcal{O}(\frac{1}{m})$ независимо от свойств f . По n порядок убывания, вообще говоря, есть $\mathcal{O}(\frac{h(n)}{n})$, где $h(n)$ – порядок убывания остатка ряда из квадратов коэффициентов Фурье-Хаара.

Необходимо упомянуть известные результаты о скорости сходимости по системе Фурье-Хаара. Так, в одномерном случае система, построенная самим Хааром А. в [46], является базисом в пространствах непрерывных функций $C(0,1)$ и $\mathcal{L}^p(0,1)$ для $p \geq 1$ (Хаар А., [46], Фабер Г., [50], Шаудер Дж., [48]). Отметим, что оригинальное определение Хаара отличается в точках разрыва от определения (1.47), данного Соболевым И.М. в [14].

Важно отметить выполнение равенства Парсеваля для произвольной функции $f \in L^2(0,1)$:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \varkappa_i^2 = \int_0^1 f^2(x) dx. \quad (2.25)$$

Скорость сходимости этого ряда представляет ключевой интерес для оценивания дисперсии квадратуры Qint.

В работах Ульянова П.Л. [51], [52] приведены оценки, относящиеся к поведению коэффициентов Фурье-Хаара для функций из различных классов. В частности, для непрерывных функций и $k > 1$ справедливо

$$|\varkappa_k| \leq \frac{1}{\sqrt{2k}} \omega\left(\frac{1}{k}, f\right), \quad (2.26)$$

где функция

$$\omega(\delta, f) = \sup_{\substack{|y-z| \leq \delta \\ 0 \leq y \leq 1 \\ 0 \leq z \leq 1}} |f(y) - f(z)|, \quad (2.27)$$

определённая для $0 < \delta \leq 1$, называется *модулем непрерывности* f . Похожим образом определяется *интегральный модуль непрерывности* f для функций из $\mathcal{L}^p(0,1)$:

$$\omega_p(\delta, f) = \sup_{0 < h \leq \delta} \left(\int_0^{1-h} |f(t+h) - f(t)|^p dt \right)^{1/p}, \quad (2.28)$$

также для $0 < \delta \leq 1$ и $1 \leq p < \infty$.

Для сходимости рядов Фурье-Хаара известен важный результат Сёкефальви-Надя Б. [53]: если $f \in C(0,1)$, то

$$\left\| f(x) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(x) \right\|_C \leq 12 \omega \left(\frac{1}{n}, f \right). \quad (2.29)$$

Ульянов П.Л. в [52] устанавливает аналогичный результат для семейства пространств $\mathcal{L}^p(0,1)$, $1 \leq p < \infty$: при $n \geq 1$ выполнено

$$\left\| f(x) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(x) \right\|_p \leq 24 \omega_p \left(\frac{1}{n}, f \right). \quad (2.30)$$

Константы в правых частях (2.29) и (2.30) могут быть улучшены, но с точки зрения порядка неравенства являются точными.

Обобщение системы Хаара на многомерный случай и исследование сходимости рядов Фурье-Хаара предпринималось многими авторами, в том числе Соболев И.М. [14], [24], Голубовым Б.И. [54], Хеллекалем П. [55], Энтакером К. [56], [57]. Необходимо отметить, что изучение многомерного случая оказывается гораздо более трудной задачей. Наиболее полно исследован случай $s = 2$, однако даже здесь существуют значительные пробелы, и далеко не все ключевые результаты из одномерной теории могут быть обобщены.

В качестве иллюстрирующего примера рассмотрим простейшую функцию вида $f(x) = x^3 + 3/4$. Для её приближения частичной суммой Хаара, очевидно, выполнено как соотношение (2.29), так и (2.30). Таким образом, для оценки порядка убывания дисперсии квадратуры Qint достаточно оценить порядок модулей непрерывности $\omega(\frac{1}{n}, f)$ или $\omega_p(\frac{1}{n}, f)$. Так,

$$\begin{aligned} \omega\left(\frac{1}{n}, f\right) &= \sup_{\substack{|y-z| \leq \frac{1}{n} \\ 0 \leq y \leq 1 \\ 0 \leq z \leq 1}} |f(y) - f(z)| = \sup_{\substack{|y-z| \leq \frac{1}{n} \\ 0 \leq y \leq 1 \\ 0 \leq z \leq 1}} |y^3 - z^3| = \\ &= \sup_{0 \leq y \leq 1 - \frac{1}{n}} \left| \left(y + \frac{1}{n}\right)^3 - y^3 \right| = \sup_{0 \leq y \leq 1 - \frac{1}{n}} \left(\frac{1}{n^3} + \frac{3y}{n^2} + \frac{3y^2}{n} \right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right). \end{aligned}$$

Аналогично для интегрального модуля непрерывности и $p = 2$:

$$\begin{aligned}
\omega_2\left(\frac{1}{n}, f\right) &= \sup_{0 \leq h \leq \frac{1}{n}} \left(\int_0^{1-h} |f(t+h) - f(t)|^2 dt \right)^{1/2} = \sup_{0 \leq h \leq \frac{1}{n}} \left(\int_0^{1-h} ((t+h)^3 - t^3)^2 dt \right)^{1/2} = \\
&= \sup_{0 \leq h \leq \frac{1}{n}} \left(\int_0^{1-h} (h^3 + 3th^2 + 3t^2h)^2 dt \right)^{1/2} = \sup_{0 \leq h \leq \frac{1}{n}} h \left(\int_0^{1-h} (h^2 + 3th + 3t^2)^2 dt \right)^{1/2} = \\
&= \frac{1}{n} \sup_{0 \leq h \leq \frac{1}{n}} \left(\int_0^{1-h} (h^2 + 3th + 3t^2)^2 dt \right)^{1/2} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right).
\end{aligned}$$

Воспользуемся одним из результатов теоремы 8 и свяжем дисперсию Qint с модулем непрерывности:

$$\begin{aligned}
\text{Var}(S_n) &= \frac{1}{n} \left\| f(x) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(x) \right\|_2^2 = \frac{1}{n} \int_0^1 \left(f(x) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(x) \right)^2 dx \leq \\
&\leq \frac{1}{n} \sup_{0 \leq x \leq 1} \left(f(x) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(x) \right)^2 = \frac{144}{n} \omega^2\left(\frac{1}{n}, f\right).
\end{aligned}$$

К такому же (в смысле порядка) результату можно прийти и через интегральный модуль непрерывности:

$$\text{Var}(S_n) = \frac{1}{n} \left\| f(x) - \sum_{i=1}^n \varkappa_i \chi_i(x) \right\|_2^2 \leq \frac{576}{n} \omega_2^2\left(\frac{1}{n}, f\right).$$

Следовательно, для рассматриваемой функции f (напомним, ранее получено $\omega\left(\frac{1}{n}, f\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)$ и $\omega_2\left(\frac{1}{n}, f\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)$) справедливо

$$\text{Var}(S_n) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^3}\right). \quad (2.31)$$

Как известно, для наивного Монте-Карло имеем стандартное отклонение порядка $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$. Для рандомизированного квази-Монте-Карло точный порядок назвать затруднительно, но он, по-видимому, близок к $\mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{1-\varepsilon}}\right)$. Для рассматриваемого частного случая установлена оценка порядка $\mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{3/2}}\right)$, что лучше обоих базовых методов. Выполнение на практике соотношения (2.31) будет продемонстрировано далее.

2.4 Некоторые аспекты реализации алгоритма Qint

Прежде чем перейти к представлению результатов численных экспериментов, мы обсудим некоторые важные аспекты предлагаемого алгоритма. К настоящему моменту нами уже установлены следующие факты.

- 1) Случайная квадратурная n -точечная формула вида (1.53) с распределением узлов, задаваемым плотностью (1.54), является точной для обобщённых систем Хаара (1.49) и индикаторов (2.1), а также несмещённой оценкой интеграла I .
- 2) Дисперсия этой формулы устанавливается (1.57) или рядом эквивалентных выражений (2.2).
- 3) Обобщённая формула с m повторами (2.6) имеет дисперсию (2.7) и (2.10).
- 4) Оценка дисперсии вида (2.19) является асимптотически несмещённой.

Количество повторов m и количество точек в одном повторе n являются параметрами обобщённой процедуры Qint. При этом общее количество вычислений функции равно их произведению $N = mn$. Если N – некоторое фиксированное число, то возникает вопрос об оптимальном соотношении между параметрами m и n . Для ответа на этот вопрос докажем ряд свойств обобщённой процедуры Qint в случае, когда m и n суть степени двойки.

Теорема 10. Пусть $m = 2^p$, $n = 2^q$ для некоторых положительных целых p и q и имеется некоторое фиксированное $(U_s, 2^q)$ -разбиение $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_{2^q}$. Пусть $\tilde{\mathfrak{X}}_1, \dots, \tilde{\mathfrak{X}}_{2^{q+1}}$ есть некоторое новое $(U_s, 2^{q+1})$ -разбиение, такое что для произвольного $i = 1, \dots, 2^q$ выполнено

$$\mathfrak{X}_i = \tilde{\mathfrak{X}}_i \cup \tilde{\mathfrak{X}}_{i+2^q}.$$

В этом случае верны два утверждения:

- 1) для дисперсии обобщённой процедуры (2.10) выполнено

$$\text{Var}(S_{(2^{p-1}, 2^{q+1})}) \leq \text{Var}(S_{(2^p, 2^q)}) \leq \text{Var}(S_N^{MC}); \quad (2.32)$$

- 2) для оценки дисперсии (2.19) выполнено

$$\widehat{\text{Var}}_2(S_{(2^{p-1}, 2^{q+1})}) \leq \widehat{\text{Var}}_2(S_{(2^p, 2^q)}) \leq \widehat{\text{Var}}(S_N^{MC}). \quad (2.33)$$

Доказательство. Воспользуемся одним из эквивалентных выражений дисперсии Qint с повторами (2.10):

$$\text{Var}(S_{(m,n)}) = \frac{1}{N} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^n \alpha_i^2.$$

Достаточно доказать, что

$$\frac{1}{2^p} \sum_{i=1}^{2^q} \alpha_i^2 \leq \frac{1}{2^{p-1}} \sum_{i=1}^{2^{q+1}} \tilde{\alpha}_i^2$$

при том, что для всех $i = 1, \dots, 2^q$ выполнено условие $\alpha_i = \tilde{\alpha}_i + \tilde{\alpha}_{i+2^q}$. Последнее верно в силу того, что разбиения согласованы, т.е. $\mathfrak{X}_i = \tilde{\mathfrak{X}}_i \cup \tilde{\mathfrak{X}}_{i+2^q}$. Для доказательства рассмотрим цепочку

переходов между неравенствами:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2^p} \sum_{i=1}^{2^q} \alpha_i^2 &\leq \frac{1}{2^{p-1}} \sum_{i=1}^{2^{q+1}} \tilde{\alpha}_i^2; \\
\sum_{i=1}^{2^q} (\tilde{\alpha}_i + \tilde{\alpha}_{i+2^q})^2 &\leq 2 \sum_{i=1}^{2^{q+1}} \tilde{\alpha}_i^2; \\
\sum_{i=1}^{2^q} 2\tilde{\alpha}_i \tilde{\alpha}_{i+2^q} &\leq \sum_{i=1}^{2^q} (\tilde{\alpha}_i^2 + \tilde{\alpha}_{i+2^q}^2); \\
0 &\leq \sum_{i=1}^{2^q} (\tilde{\alpha}_i^2 - \tilde{\alpha}_{i+2^q}^2)^2.
\end{aligned}$$

Что касается второй части неравенства (сравнение с Монте-Карло), то это следует автоматически из следствия к теореме 5, причём для всех допустимых значений параметров m и n .

Теперь докажем аналогичные соотношения не для самой дисперсии Qint, а для её оценки. Установим вид оценки дисперсии $\widehat{\text{Var}}_2$, определяемой (2.19):

$$\widehat{\text{Var}}_2 = \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,i}) - \frac{1}{N^2(m-1)} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{k=1}^m f(\mathbf{x}_{k,i}) \right)^2.$$

Первая сумма никак не меняется при переходе от $\widehat{\text{Var}}_2(S_{(2^{p-1}, 2^{q+1})})$, к $\widehat{\text{Var}}_2(S_{(2^p, 2^q)})$, поэтому достаточно сравнить только вторую сумму.

По сути, речь идёт об одном и том же наборе точек, но агрегация значений в этих точках происходит по-разному. По аналогии с представлением (2.5) в случае $(2^p, 2^q)$ больше повторов („высокая“ матрица узлов), а в случае $(2^{p-1}, 2^{q+1})$ больше множеств („длинная“ матрица узлов):

$$\begin{array}{ccccccc}
\mathbf{x}_{1,1} & \mathbf{x}_{1,2} & \dots & \mathbf{x}_{1,2^q} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{x}_{1,2^{q+1}} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\mathbf{x}_{2^{p-1},1} & \mathbf{x}_{2^{p-1},2} & \dots & \mathbf{x}_{2^{p-1},2^q} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{x}_{2^{p-1},2^{q+1}} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\mathbf{x}_{2^p,1} & \mathbf{x}_{2^p,2} & \dots & \mathbf{x}_{2^p,2^q} & \dots & \dots & \dots & \dots
\end{array} \tag{2.34}$$

Обозначим $y_i = \sum_{k=1}^{2^{p-1}} f(\mathbf{x}_{k,i})$, для $i = 1, \dots, 2^{q+1}$ и $z_i = \sum_{k=1}^{2^p} f(\mathbf{x}_{k,i})$ для $i = 1, \dots, 2^q$. В рамках схемы (2.34) достаточно показать, что для всех допустимых i при условии согласованности $z_i = y_i + y_{i+2^q}$ выполнено

$$\frac{1}{2^p - 1} z_i^2 \leq \frac{1}{2^{p-1} - 1} (y_i^2 + y_{i+2^q}^2).$$

Этот факт следует из цепочки неравенств, которая выполнена для $p \geq 1$:

$$\begin{aligned} (2^{p-1} - 1)(y_i^2 + y_{i+2^q}^2 + 2y_i y_{i+2^q}) &\leq (2^p - 1)(y_i^2 + y_{i+2^q}^2); \\ 2(2^{p-1} - 1)y_i y_{i+2^q} &\leq 2^{p-1}(y_i^2 + y_{i+2^q}^2); \\ 0 &\leq (2^{p-1} - 1)(y_i - y_{i+2^q})^2 + y_i^2 + y_{i+2^q}^2. \end{aligned}$$

Для доказательства $\widehat{\text{Var}}_2(S_{(m,n)}) \leq \widehat{\text{Var}}(S_N^{MC})$ для любых возможных¹ n и m необходимо показать, что

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,i}) - \frac{1}{N^2(m-1)} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{k=1}^m f(\mathbf{x}_{k,i}) \right)^2 &\leq \\ \frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,i}) - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^m f(\mathbf{x}_{k,i}) \right)^2 \right). \end{aligned}$$

Для краткости обозначим $v_i = \sum_{k=1}^m f(\mathbf{x}_{k,i})$, тогда доказываемое утверждение есть

$$\frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,i}) - \frac{1}{N^2(m-1)} \sum_{i=1}^n v_i^2 \leq \frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,i}) - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^n v_i \right)^2 \right).$$

Тривиальным образом это сводится к неравенству

$$\frac{\left(\sum_{i=1}^n v_i \right)^2}{N-1} - \frac{\sum_{i=1}^n v_i^2}{m-1} \leq \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n f^2(\mathbf{x}_{k,i}).$$

Правая часть всегда неотрицательна. Докажем, что левая часть всегда неположительна. В самом деле, пользуясь леммой 5,

$$(mn-1) \sum_{i=1}^n v_i^2 \geq \frac{mn-1}{n} \left(\sum_{i=1}^n v_i \right)^2 = \left(m - \frac{1}{n} \right) \left(\sum_{i=1}^n v_i \right)^2 \geq (m-1) \left(\sum_{i=1}^n v_i \right)^2,$$

что доказывает исходное утверждение. ■

Подведём итог рассуждению о двойственности параметров m и n . Итак, при выборе комбинации (m,n) нужно иметь в виду следующие свойства.

– При увеличении m

- увеличивается количество точек, по которым строится каждая из оценок $\hat{\alpha}_i$;
- смещение оценки дисперсии $\widehat{\text{Var}}_2$ убывает быстрее, чем при увеличении n ;

¹ Здесь мы не будем пользоваться тем, что n и m представимы как 2^p и 2^q , то есть мы фактически докажем эту часть утверждения в общем виде.

– При увеличении n

- дисперсия $\text{Var}(S_{(m,n)})$ убывает быстрее, чем при увеличении m ;
- оценка дисперсии $\widehat{\text{Var}}_2$ также убывает быстрее, чем при увеличении m .

Все предыдущие рассуждения и теоретические факты были нами получены без непосредственной спецификации выбираемого разбиения $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$. Единственное наложенное нами ограничение заключалось в том, что объём каждого из подмножеств должен быть одинаков. Ещё один факт относительно монотонности дисперсии (теорема 10) установлен нами в дополнительных предположениях о количестве подмножеств $n = 2^q$ и „последовательной вложенности“ при переходе от q к $q + 1$. Однако форма разбиений может по-прежнему быть какой угодно, что является несомненным преимуществом алгоритма Qint. Например, легко представить такое разбиение, которое учитывает некоторую априорную информацию о подынтегральной функции. Так, если заранее известна некоторая подобласть области интегрирования, которая хорошо приближается константой, то можно строить подмножества $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ с учётом этой информации, и мы вправе ожидать улучшение скорости убывания дисперсии.

В рассматриваемых далее численных экспериментах мы не будем предполагать наличие априорных знаний о подынтегральных функциях. Поэтому нашей задачей будет построить некоторое универсальное разбиение. Во-первых, оно должно быть совместимо с определением (t, s) -последовательностей (определение 4) в том смысле, что если для фиксированного n каждое из множеств разбиения будет состоять из элементарных множеств, то это гарантирует попадание одинакового количества точек в каждое из $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$. Во-вторых, алгоритм разбиения должен быть таким, чтобы соблюдалась „вложенность“ $(U_s, 2^q)$ -разбиения в $(U_s, 2^{q+1})$ -разбиение, тогда будет справедливо утверждение теоремы 10. В-третьих, разбиение должно быть достаточно простым с алгоритмической точки зрения, то есть таким, чтобы задача определения индекса подмножества для произвольной точки $x \in U_s$ была бы не очень вычислительно затратной.

В работе автора и Ермакова С.М. [18], которая содержит первые численные результаты работы алгоритма Qint, предложено разбиение, определяемое только первой координатой x . Такое разбиение удовлетворяет всем вышеперечисленным требованиям, но, как было выяснено позднее, не является оптимальным. В самом деле, $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ представляют собой гиперпараллелепипеды, у которых с ростом n уменьшается только одна грань. Такой алгоритм разбиения, по-видимому, хорошо подходит для функций, которые сильно изменяются только по первой координате. Более универсальным оказывается алгоритм разбиения, предложенный автором в [19], именно его мы будем использовать во всех последующих численных экспериментах.

Предлагаемый метод построения $(U_s, 2^q)$ -разбиений гиперкуба мы будем называть *правилом бинарного рассеечения*. Определим шаги этого правила по индукции. Для $q = 0$ ситуация тривиальна: $\mathcal{X}_1 = U_s$ задаёт $(U_s, 1)$ -разбиение. Для $q = 1$ рассечём гиперкуб плоскостью, задаваемой уравнением $x_1 = 0.5$, и тогда $(U_s, 2)$ -разбиение будет состоять из множеств $\mathcal{X}_1 = [0, 0.5] \times [0, 1] \times \dots \times [0, 1]$, $\mathcal{X}_2 = [0.5, 1] \times [0, 1] \times \dots \times [0, 1]$. Теперь для $q = 2, \dots, s$

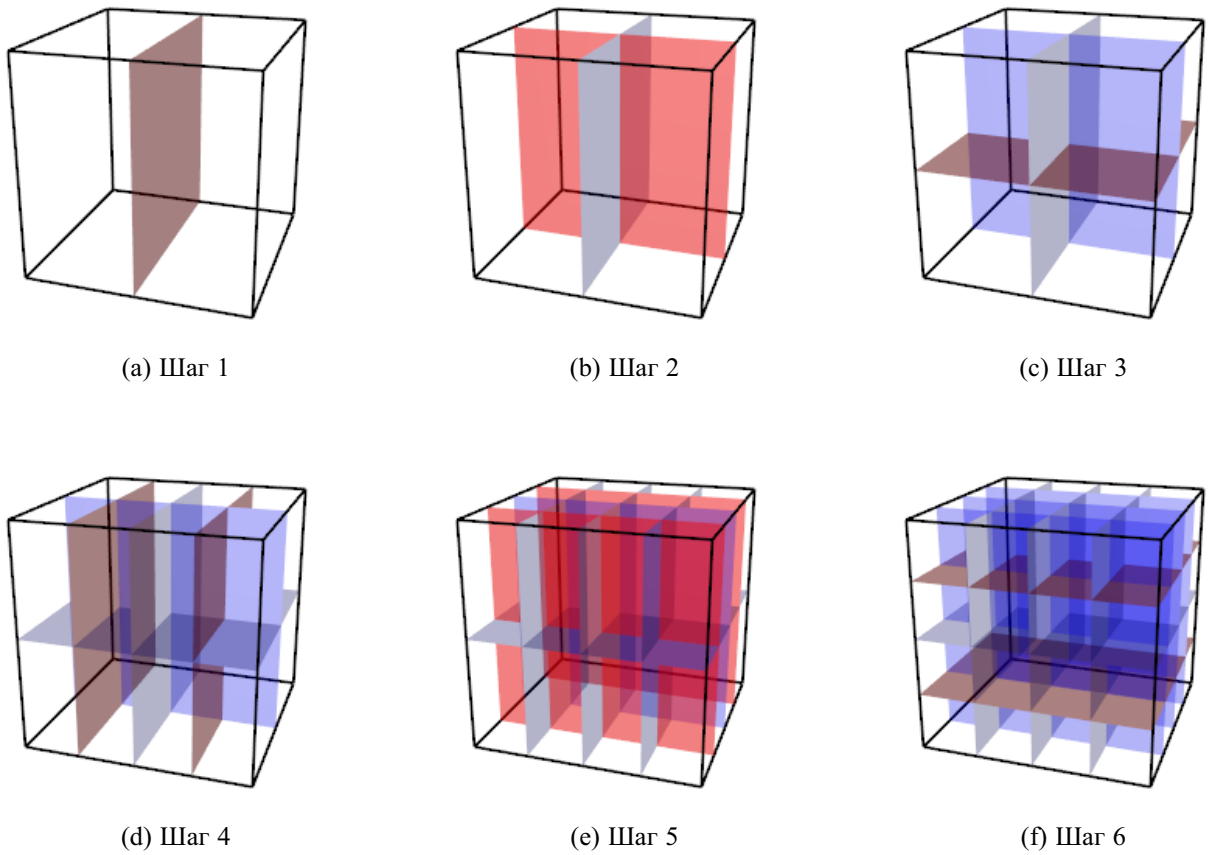


Рисунок 2.1: Первые шесть шагов правила бинарного расщепления, $s = 3$

мы можем построить каждое последующее разбиение из предыдущего, проводя дополнительное расщепление плоскостью $x_q = 0.5$.

Опишем переход от $(U_s, q - 1)$ -разбиения к (U_s, q) -разбиению для $q > s$.

- 1) Если q имеет остаток 1 от деления на s (то есть представимо в виде $ks + 1$, $k \in \mathbb{N}_0$), мы смотрим на расщепление, проведённое s шагов назад. Оно проведено по первой координате несколькими плоскостями: $x_1 = a_1, x_1 = a_2, \dots, x_1 = a_l$. Пусть числа a_1, a_2, \dots, a_l упорядочены по возрастанию. Новое расщепление зададим плоскостями $x_1 = \frac{a_1}{2}, x_1 = a_1, x_1 = \frac{a_2 - a_1}{2}, x_1 = a_2, \dots, x_1 = a_l, x_1 = \frac{1 - a_l}{2}$. Иными словами, каждый из отрезков $[0, a_1], [a_1, a_2], \dots, [a_l, 1]$ получает дополнительное расщепление пополам.
- 2) В противном случае применяем расщепление для шага $q - 1$, но по следующей координате. Номер этой координаты равен остатку от деления q на s (за тем лишь исключением, когда он равен 0, тогда расщепление проводится по последней координате, x_s).

Правило бинарного расщепления для случая $s = 3$ проиллюстрировано рисунком 2.1, где изображены первые 6 шагов.

Как уже было отмечено, оценивание дисперсии для рандомизированного квази-Монте-Карло проводится на основе некоторого числа повторений. Каждое такое повторение представляет со-

бой один и тот же квазислучайный набор, рандомизированный по-новому. Это необходимо, поскольку для одного повтора сколько-нибудь надежная процедура оценки дисперсии неизвестна, и в этом смысле необходимость проводить повторы является несомненным недостатком квази-Монте-Карло. Отметим, что и наивный Монте-Карло, и Qint такого недостатка лишены; более того, Qint задумывался как способ борьбы именно с необходимостью „лишних“ повторов. Вместе с тем, Qint можно использовать в сочетании с повторами, аналогичными квази-Монте-Карло. На данном этапе нам кажется, что сравнение с квази-Монте-Карло необходимо проводить именно так, повторяя процедуру Qint столько же раз, сколько повторяется квази-Монте-Карло. Это количество мы будем именовать числом *внешних повторов*. Таким образом, мы будем сравнивать Qint с наивным Монте-Карло без внешних повторов, а с рандомизированным квази-Монте-Карло – с внешними повторами, число которых будет равно 16 (этого достаточно в соответствии с практическими рекомендациями, указанными Лемье К. [31]). Дополнительно отметим, что вопрос о количестве внешних повторов и их целесообразности в целом не разрешён окончательно: как показывает практика, оценки $\hat{\alpha}_i$ обладают устойчивостью и при меньшем количестве внешних повторов, что является ещё одним потенциальным улучшением метода Qint.

2.5 Результаты численных экспериментов

Все численные результаты будут представлены в виде графиков, где по оси x отложено общее количество вычислений подынтегральной функции, а по оси y – оценка стандартного отклонения, полученная тем или иным рассматриваемым методом (наивный Монте-Карло, рандомизированный квази-Монте-Карло или Qint). Сразу стоит отметить, что все сравниваемые схемы являются несмещёнными, поэтому нас не будет интересовать среднее (его математическое ожидание равно искомому значению интеграла, I ; забегая вперёд, во всех экспериментах для всех методов значение I попадает в доверительный интервал с уровнем доверия 99%), а только стандартное отклонение.

Для каждого из методов в этих координатах будем называть его *траекторией* последовательно соединённые точки, отвечающие разному количеству вычислений функции. Траектории одного и того же метода будут обозначаться одним цветом. Обе оси логарифмические, поэтому можно легко определять скорость убывания стандартного отклонения для той или иной траектории, и, соответственно, метода: её можно оценить как $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^\alpha}\right)$, если траектория параллельна прямой вида $y = -\alpha x + c$. Построение такого рода профилей является стандартной процедурой, позволяющей визуально оценивать скорость сходимости различных алгоритмов (см., например, Оуэн А. [45]).

Для метода Qint мы будем рассматривать семейство траекторий вида „Qint_ q “. Для каждой из таких траекторий фиксирован параметр q (он связан с n , числом разбиений), а с увеличением количества вычислений функции наращивается параметр p (он связан с m , числом точек в каждом разбиении). Минимально возможный параметр q равен нулю: это означает, что разбиение вырождается в случай $\mathcal{X}_1 = U_s$. Таким образом, процедура оценивания дисперсии в точности

совпадает с процедурой Монте-Карло, поэтому мы ожидаем, что траектория Монте-Карло и траектория „Qint_0“ будут совпадать.

Наконец, мы будем выделять траекторию „Best Qint“. Она, напротив, соответствует фиксированному p и увеличивающемуся q . Более того, значение $p = 2$ фиксировано для всех последующих функций и вариаций экспериментов. Это значит, что в каждое из подмножеств $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ попадает по 4 точки. Такой выбор обеспечивает достаточное усреднение для оценивания величин $\{\hat{\alpha}_i\}_{i=1}^n$. Мы могли бы рассмотреть и другие фиксированные p , но нам достаточно траектории „Best Qint“ для оценки скорости убывания дисперсии метода.

Все результаты последующих численных экспериментов получены автором с использованием языка C++ [58] и открытой библиотеки HIntLib за авторством Шюрера Р. [42]. Обработка результатов и получение иллюстраций проводилось с использованием языка R [59] и ряда пакетов дополнений, в особенности randtoolbox [60] и ggplot2 [61]. Код программы, при помощи которой проведены расчёты, распространяется автором диссертации под свободной лицензией GPL (старше версии 2) и доступен в репозитории на сервисе GitHub [62].

2.5.1 Произведение кубических полиномов

Для построения первого примера рассмотрим простейший кубический полином $x^3 + 0.75$. В качестве подынтегральной функции будем использовать произведение таких полиномов по каждой из размерностей:

$$f_1(\mathbf{x}) = \prod_{t=1}^s (x_t^3 + 0.75). \quad (2.35)$$

Значение интеграла от функции f_1 не зависит от размерности s и равно единице:

$$I_1 = \int_{U_s} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \prod_{t=1}^s \left(\frac{x_t^4}{4} + \frac{3}{4} \right) \Big|_{x_t=0}^1 = 1. \quad (2.36)$$

Поведение стандартного отклонения квадратуры Qint для функции f_1 в одномерном случае описано нами в предыдущей главе. Так, соотношение (2.31), полученное через оценивание модуля непрерывности (или, что равнозначно в плане порядка, интегрального модуля непрерывности для $p = 2$), предполагает, что скорость убывания не может быть медленнее, чем $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{3/2}}\right)$.

Результат численного эксперимента для функции f_1 в одномерном случае приведён на иллюстрациях 2.2 и 2.3 (без внешних повторов и с внешними повторами, соответственно).

Отметим несколько важных особенностей полученного результата. Во-первых, для каждого фиксированного q (траектории, обозначенные „Qint_0“, „Qint_1“ и так далее) порядок убывания стандартного отклонения ровно такой же, как для наивного Монте-Карло, $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1/2}}\right)$. Это свойство вполне естественно и было отмечено нами в предыдущей главе. Во-вторых, перебор всевозможных параметров q влияет только на константу (не на порядок убывания), причём чем больше q , тем эта константа меньше. Этому вопросу мы также уделяли внимание: такое свойство выполнено в соответствии с теоремой 10. Кроме того, для $q = 0$ (траектория „Qint_0“) имеем в

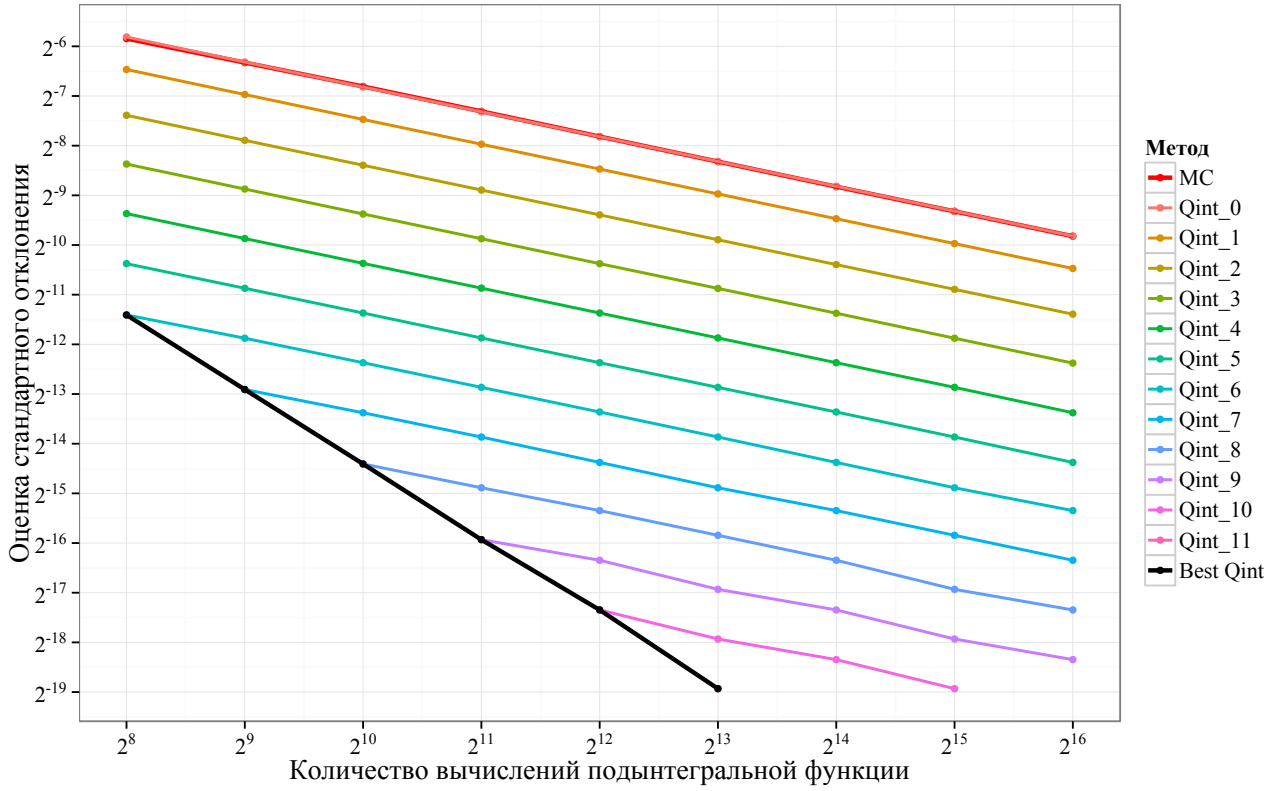


Рисунок 2.2: Произведение кубических полиномов, $s = 1$, без внешних повторов

точности ту же самую оценку, что и для наивного Монте-Карло (траектория „MC“), что также предсказывалось ранее. В-третьих, и что наиболее важно, для фиксированного m (траектория „Best Quint“) скорость убывания оценки стандартного отклонения совпадает с теоретическим предсказанием, $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{3/2}}\right)$. Улучшенный порядок сходимости (по сравнению как с Монте-Карло, $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1/2}}\right)$, так и с квази-Монте-Карло, $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1-\varepsilon}}\right)$) хорошо виден на иллюстрации 2.3.

Многомерный случай ($s = 15$) представлен иллюстрациями 2.4 и 2.5.

С ростом размерности преимущество от использования Quint падает, но остаётся существенным. Несмотря на то, что траектория „Best Quint“ не перекрывает траекторию квази-Монте-Карло, она тем не менее сокращает разрыв между наивным Монте-Карло и квази-Монте-Карло примерно вдвое, причём равномерно по количеству вычислений функции.

2.5.2 Плотность нормального распределения

Следующая предлагаемая тестовая функция является адаптацией функции „Gaussian“ из сборника „TESTPACK“ Генца А. [63]. Она определяется как

$$f_2(\mathbf{x}) = \prod_{t=1}^s \frac{1}{c} p(\mathbf{x}_t; \mu, \sigma), \quad (2.37)$$

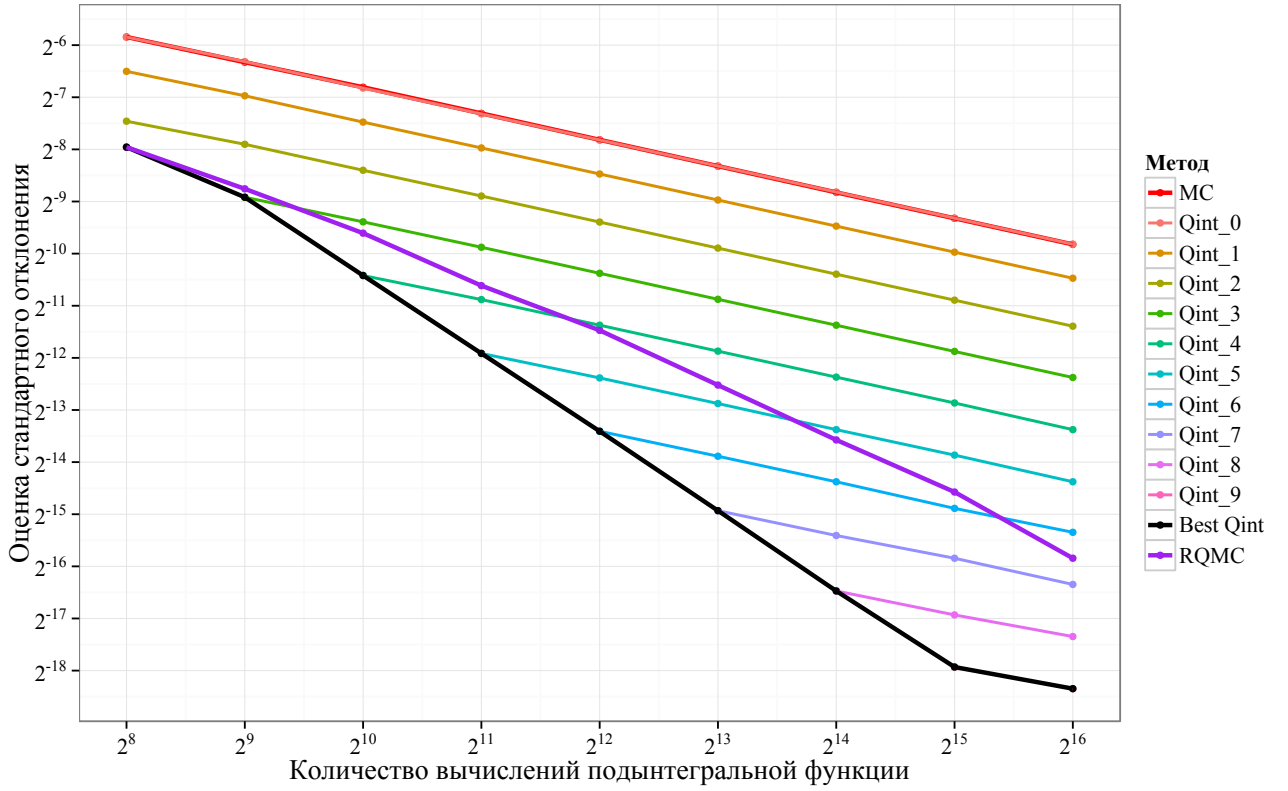


Рисунок 2.3: Произведение кубических полиномов, $s = 1$, 16 внешних повторов

где $p(\mathbf{x}_t; \mu, \sigma)$ есть плотность нормального распределения с параметрами μ и σ :

$$p(y; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}}. \quad (2.38)$$

В нашем случае мы фиксируем параметры $\mu = 0.5$ (функция симметрична относительно середины отрезка $[0,1]$), $\sigma = 1$, а константа c подбирается таким образом, чтобы значение интеграла $I_2 = \int_{U_s} f_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ было равно единице. Её можно вычислить как

$$F(1; \mu, \sigma) - F(0; \mu, \sigma) \approx 0.383,$$

где $F(z; \mu, \sigma) = \int_{-\infty}^z p(y; \mu, \sigma) dy$ – функция нормального распределения с теми же параметрами.

Продemonстрируем работу алгоритма для низких размерностей (случаи $s = 2, 3, 4$ представлены иллюстрациями 2.6, 2.7 и 2.8, соответственно). Отметим одну интересную деталь. Траектории оценок стандартного отклонения монотонны по параметру q , что наблюдалось нами и ранее и предсказано теоретически. Однако в тех случаях, когда q кратно размерности s , более явно выражена разница между траекториями, определяемыми параметрами $q - 1$ и q . Так, например, для размерности $s = 3$ разница между траекториями „Qint_6“ и „Qint_7“ примерно такая же, как для пары „Qint_7“ и „Qint_8“, но примерно в два раза меньше, чем для „Qint_8“ и „Qint_9“.

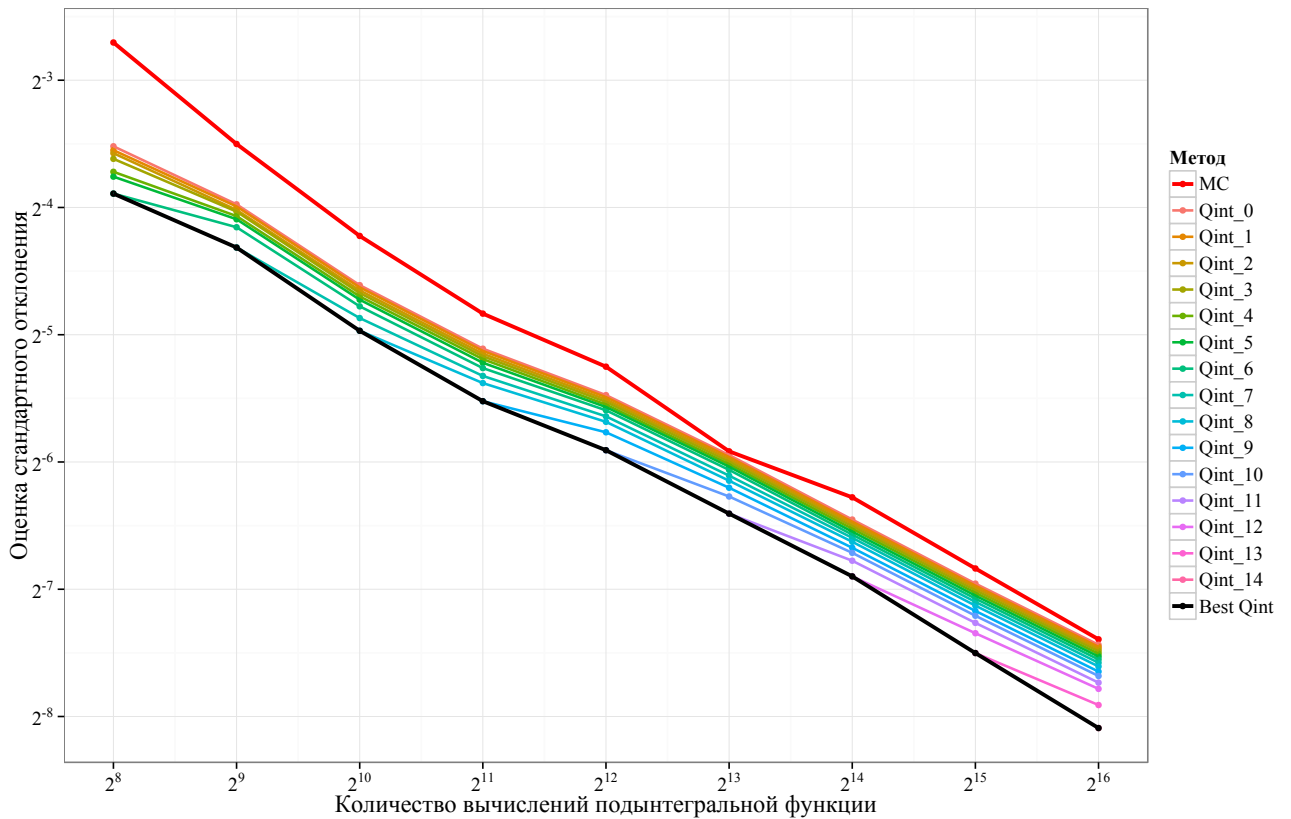


Рисунок 2.4: Произведение кубических полиномов, $s = 15$, без внешних повторов

То же самое справедливо и для других наборов параметров и других размерностей, поэтому траектории разделяются на характерные группы по s траекторий в каждой.

Обратимся к случаю высокой размерности: иллюстрации 2.9 и 2.10 соответствуют $s = 20$ без внешних повторов и с внешними повторами, соответственно. Известно, что для высоких размерностей и гладких функций, таких как f_2 , квази-Монте-Карло демонстрирует очень хорошие результаты по сравнению с наивным Монте-Карло. Именно такую ситуацию мы можем наблюдать на иллюстрации 2.10.

В этом свете неудивительно то, что улучшение метода Qint по сравнению с Монте-Карло не выглядит значительным. Отметим ещё и следующее обстоятельство: гладкие функции, как правило, плохо приближаются рядами Хаара. Это означает, что остаток ряда Хаара убывает недостаточно быстро, чтобы улучшить порядок сходимости Qint на сколь угодно значимую величину, которая была бы видна в экспериментальных условиях. Впрочем, это не отменяет того факта, что константа сходимости всё равно улучшена (траектория „Best Qint“ расположена существенно ниже траектории Монте-Карло).

2.5.3 Функция „Морокофф-Кафлиш №1“

Тестовая функция f_3 является классической для численных экспериментов в области квази-Монте-Карло. Она взята из работы Морокоффа У. и Кафлиша Р. [64] и определяется как

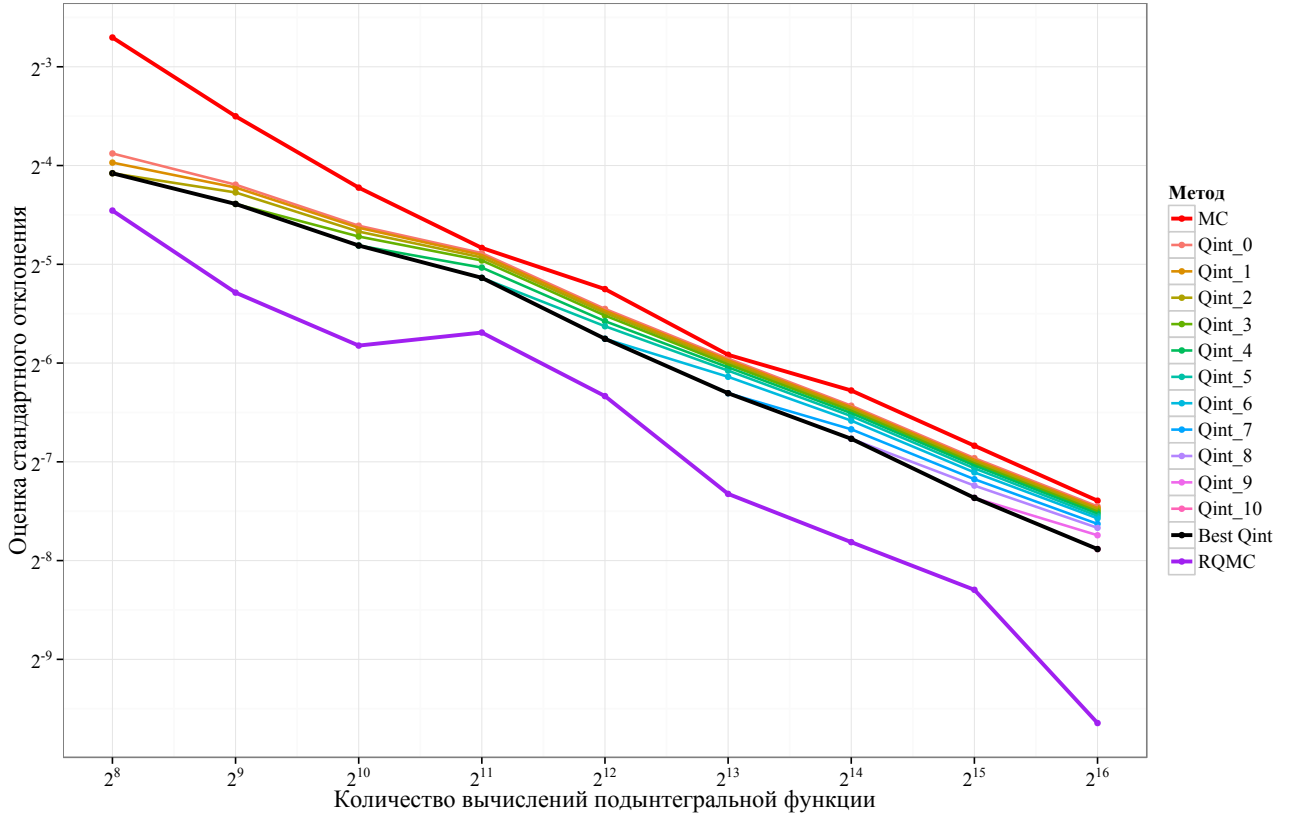


Рисунок 2.5: Произведение кубических полиномов, $s = 15, 16$ внешних повторов

$$f_3(\mathbf{x}) = \left(1 + \frac{1}{s}\right)^s \prod_{t=1}^s (x_t)^{\frac{1}{s}}. \quad (2.39)$$

Функция уже нормирована таким образом, чтобы значение интеграла было равно единице: $I_3 = 1$.

В размерности $s = 1$ (иллюстрация 2.11) результат вычислений очень похож на случай рассматриваемой ранее функции f_1 . В частности, порядок сходимости стандартного отклонения близок к $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{3/2}}\right)$, присутствует ярко выраженная монотонность по q .

Для случая $s = 2$ (иллюстрация 2.12) сходимость Qint такая же, как и у квази-Монте-Карло, и присутствует группировка траекторий по парам. В этом смысле результат для f_3 объединяет в себе характерные особенности Qint, наблюдаемые ранее для f_1 и f_2 .

В высоких размерностях, таких как $s = 30$ (иллюстрации 2.13, 2.14), разница в сходимости для траекторий „Best Qint“ и наивного Монте-Карло экспериментально обнаруживается только в константе. Она наверняка присутствует и в порядке сходимости, но подтвердить это в масштабах проводимых вычислений не представляется возможным.

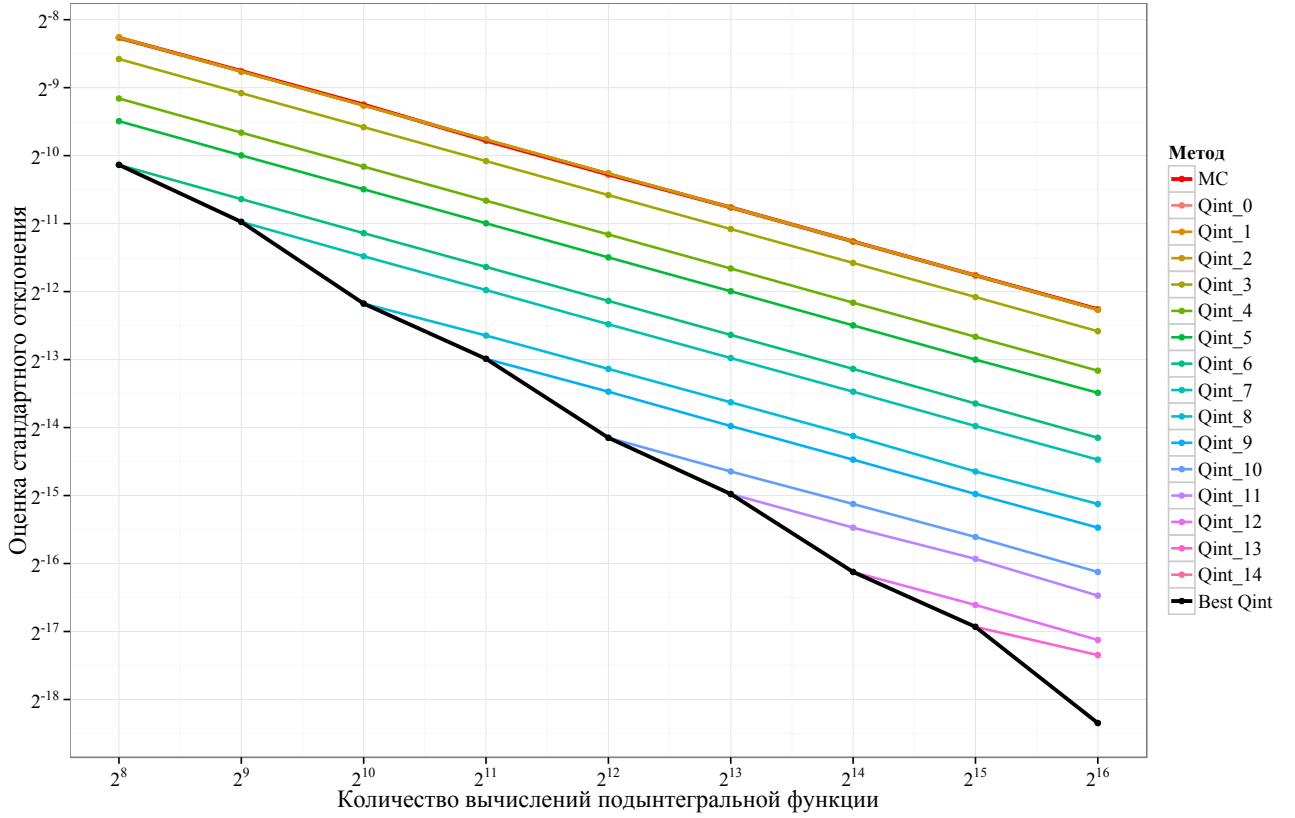


Рисунок 2.6: Плотность нормального распределения, $s = 2$, без внешних повторов

2.5.4 Кусочно-линейная функция

Последней тестовой функцией рассмотрим кусочно-линейную функцию f_4 :

$$f_4(\mathbf{x}) = \prod_{t=1}^s h_t(x_t), \quad (2.40)$$

где

$$h_t(x) = 2 \cdot \begin{cases} 0, & x \leq 0.5 - c_t, \\ \frac{10+t}{t}x - \frac{5}{t}, & x \in (0.5 - c_t, 0.5 + c_t], \\ 1, & x > 0.5 + c_t, \end{cases} \quad (2.41)$$

а для каждого $t = 1, \dots, s$ определены постоянные $c_t = \frac{t}{2t+10}$. Они подобраны таким образом, чтобы значение интеграла было равно его размерности: $I_4 = s$. Функции $h_t(x)$ устроены так, что при малых t они близки к одномерной первой функции Хаара $\chi_1(x)$, а при больших – к линейной функции $f(x) = x$.

Для малых размерностей ($s = 3$, иллюстрация 2.15, и $s = 5$, иллюстрация 2.16) мы обнаруживаем некий новый эффект, происходящий при $q = s$. Скачки в константе сходимости мы отмечали и ранее (например, для плотности нормального распределения), но здесь подобное явление имеет резко выраженный характер. За счёт такого сильного скачка траектория „Best Quint“ претерпевает в определённый момент ускоренную сходимость, и, хотя эта сходимость выдержи-

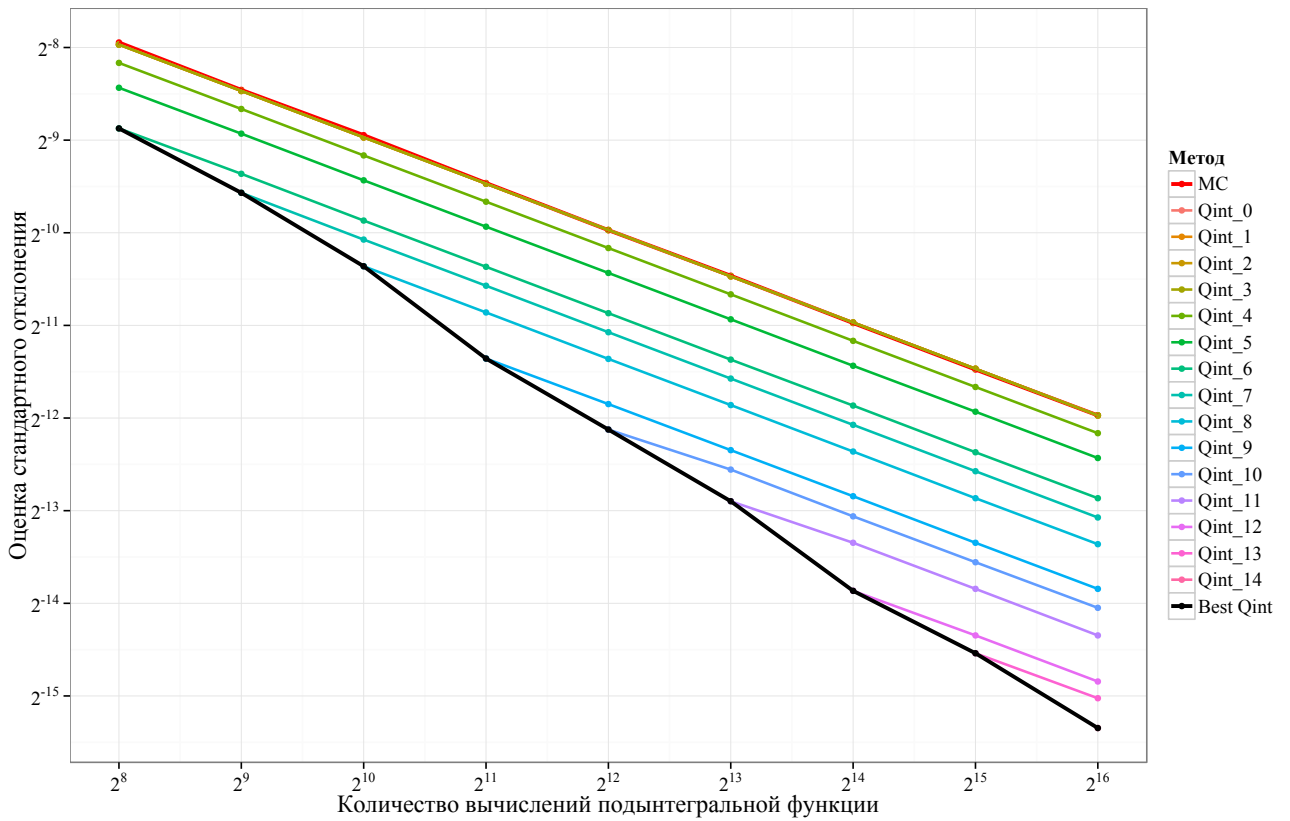


Рисунок 2.7: Плотность нормального распределения, $s = 3$, без внешних повторов

вается лишь на коротком промежутке, она приближается к сходимости квази-Монте-Карло, а в размерностях $s = 3$ и менее и превосходит последнюю.

Описанное свойство, по-видимому, специфично для выбранного метода разбиения гиперкуба. В самом деле, при использовании правила бинарного рассечения в момент $q = s$ разбиение на подмножества $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ впервые задействует все имеющиеся размерности².

Подобная картина сохраняется и для достаточно высоких размерностей. Так, результаты для $s = 10$ представлены иллюстрациями 2.17 и 2.18. Описываемый эффект скачка хорошо наблюдается для траектории „Qint_10“, но он уже не так явно выражен. Это происходит отчасти потому, что сказывается увеличение размерности, как мы уже отмечали для предыдущих примеров; отчасти потому, что функции $h_t(x)$ при растущем t всё хуже приближаются функциями Хаара.

2.5.5 Выводы о практическом применении Qint

Подведём итоги численных экспериментов и сформулируем некоторые общие выводы о предложенном методе и его конкретной реализации.

- В ходе вычислений проверены и подтверждены все предсказанные теоретические свойства, а именно:

² Напомним, что при $q = 1$ рассечение проводится только по первой координате, при $q = 2$ – по второй, и так далее, то есть все s размерностей исчерпываются при $q = s$.

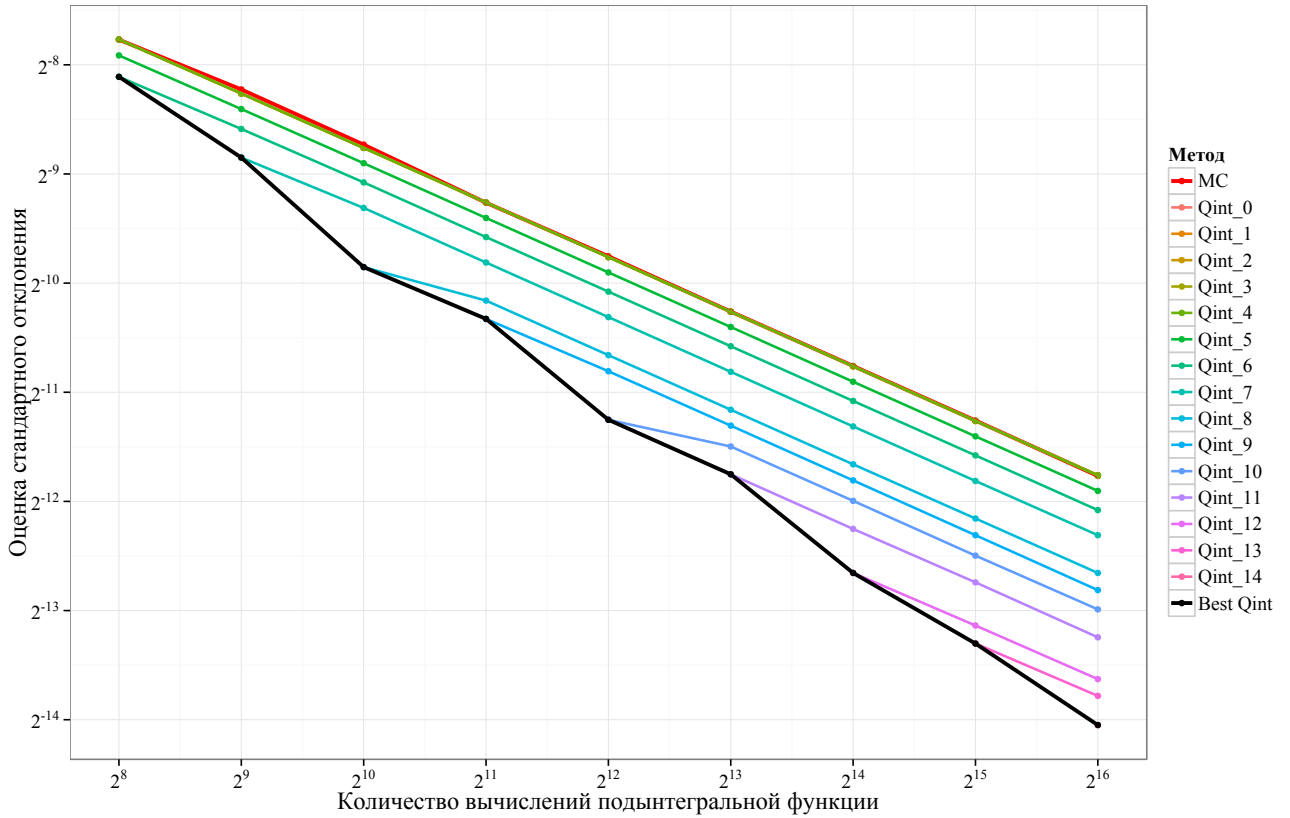


Рисунок 2.8: Плотность нормального распределения, $s = 4$, без внешних повторов

- Дисперсия Qint не превосходит дисперсии наивного Монте-Карло, совпадая с ней в случае $q = 0$.
- По количеству повторов m (при фиксированном n) скорость убывания дисперсии равна $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)$, то есть имеет такой же порядок, как и метод Монте-Карло. Константа сходимости монотонно убывает по q .
- По количеству разбиений n (при фиксированном m) скорость убывания дисперсии зависит от скорости сходимости ряда Фурье-Хаара, но эта скорость всегда быстрее, чем у Монте-Карло.
- Для низких размерностей ($s \leq 3$) скорость сходимости достигает $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{3/2}}\right)$, что быстрее по сравнению со стандартным квази-Монте-Карло. Преимущество по сравнению с наивным Монте-Карло явно выражено.
- Для высоких размерностей ($s \geq 10$) определить улучшение порядка затруднительно, но в некоторых случаях скорость сходимости близка к квази-Монте-Карло. Преимущество по сравнению с наивным Монте-Карло не такое существенное, но присутствует во всех рассматриваемых случаях.
- Правило бинарного рассечения хорошо подходит в качестве универсального способа разбиения гиперкуба. В некоторых случаях наблюдаются скачки в константе сходимости, ко-

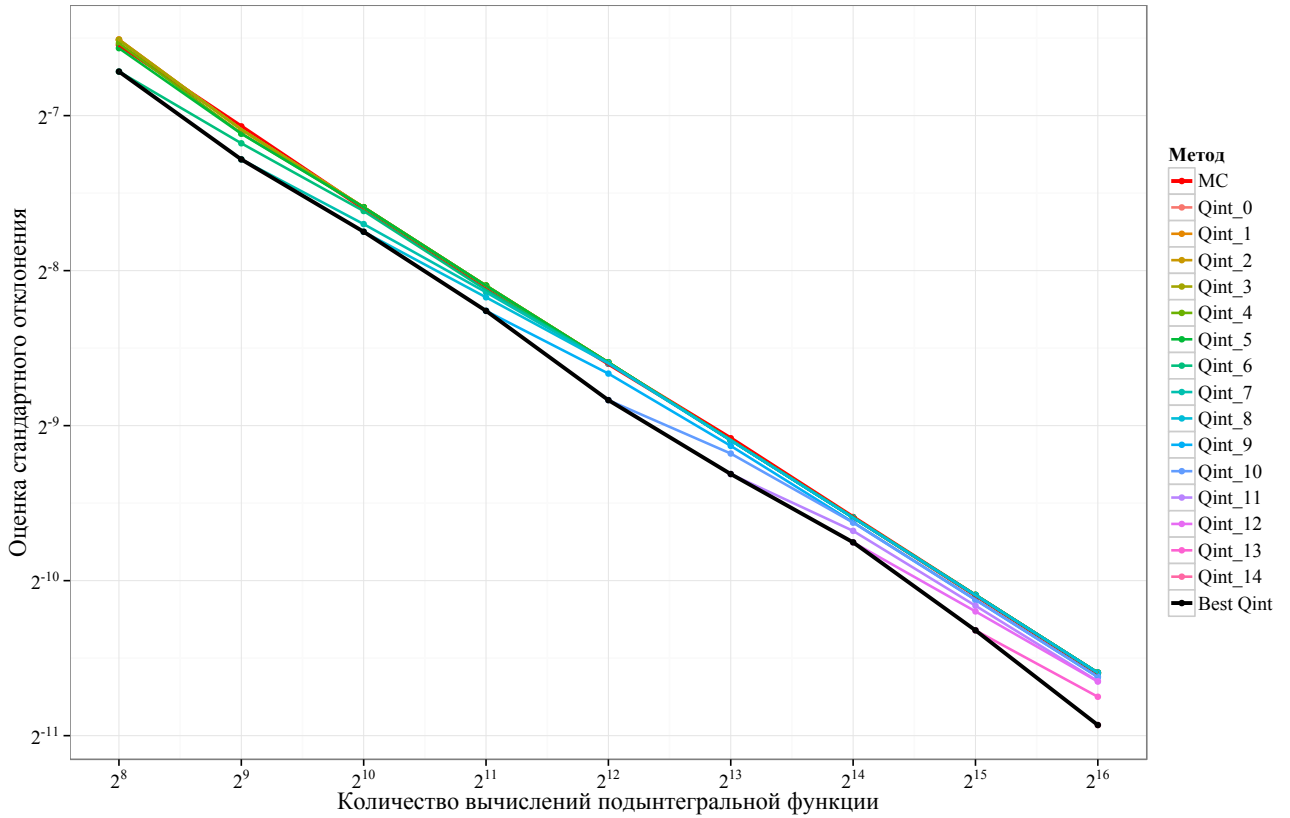


Рисунок 2.9: Плотность нормального распределения, $s = 20$, без внешних повторов

гда q ратно s , то есть в такие моменты, когда бинарное рассечение проводится равномерно по всем имеющимся размерностям.

Мы можем очертить круг вопросов, которые могли бы служить ориентиром для дальнейших исследований предлагаемой схемы. Во-первых, представляет интерес возможность построения иного алгоритма разбиения гиперкуба, при котором подмножества $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ имели бы более сложную форму. Это позволило бы снять существующее ограничение $n = 2^q$, которое может играть существенную роль в прикладных задачах. С этим вопросом тесно связана другая перспективная возможность: адаптивная схема Quint, которая строила бы оптимальное (в некотором строгом смысле) разбиение с учётом уже имеющейся информации о подынтегральной функции. Во-вторых, схема Quint совместима с любой (t, s) -последовательностью, а не только с точками Соболя. В этом свете предложенный метод может иметь очень широкое применение, например, в сочетании с последовательностями Нидеррейтера или Форте.

Наконец, принципиальное значение играет дальнейшее улучшение процедуры оценивания дисперсии. Известные квазислучайные последовательности (в их число входит и последовательность Соболя) обладают ещё и тем свойством, что проекции точек на координатные плоскости также обладают свойствами равномерной (в смысле дискрепанса) распределённости. Это свойство в настоящий момент не учитывается оценкой дисперсии Quint, но оно может иметь важное влияние на скорость сходимости квази-Монте-Карло. Возможно, выигрыш от перехода к квазислучайным последовательностям лишь частично улавливается процедурой Quint. Вполне веро-

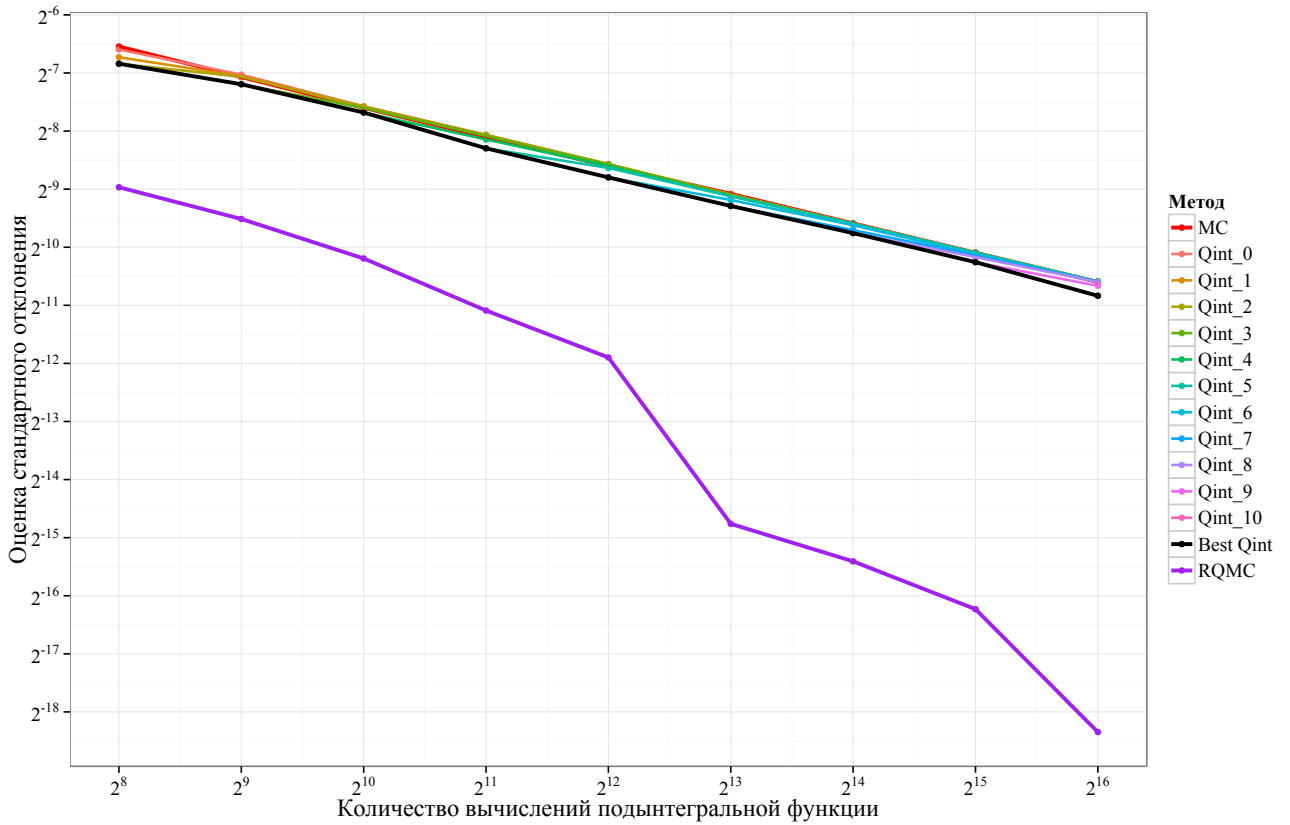


Рисунок 2.10: Плотность нормального распределения, $s = 20$, 16 внешних повторов

ятно, что рандомизированный квази-Монте-Карло обладает свойством точности для ещё какой-то системы функций. Отыскание такой системы (не являющейся линейно зависимой с системой Хаара) могло бы уточнить имеющуюся оценку.

Основные результаты второй главы диссертационной работы посвящены вопросам практического применения полученного ранее класса квадратурных формул, точных для семейства кусочно-постоянных функций Хаара. При помощи вспомогательной системы индикаторных функций удаётся получить несколько эквивалентных формулировок дисперсии схемы Quint (теорема 8), которые более удобны для построения апостериорных оценок. По аналогии с рандомизированным квази-Монте-Карло вводится обобщённая схема Quint, предполагающая m повторений схемы по n точек в каждой с условием независимости рандомизации между схемами. Вид обобщённой схемы и её дисперсия установлены теоремой 9. Проводится анализ сходимости по параметрам m и n .

На основе теоретических результатов об обобщённой схеме предлагается несколько способов оценивания дисперсии в практических задачах. Теорема 10 даёт представление о монотонности дисперсии обобщённой схемы и её оценки для частного случая $m = 2^p$, $n = 2^q$ с точки зрения баланса между p и q . Предлагается правило бинарного рассечения: последовательный алгоритм построения согласованных (U_s, q) -разбиений для произвольной размерности s . Предложенная схема применяется к нескольким тестовым задачам, проводится анализ эффективности Quint в разных размерностях.

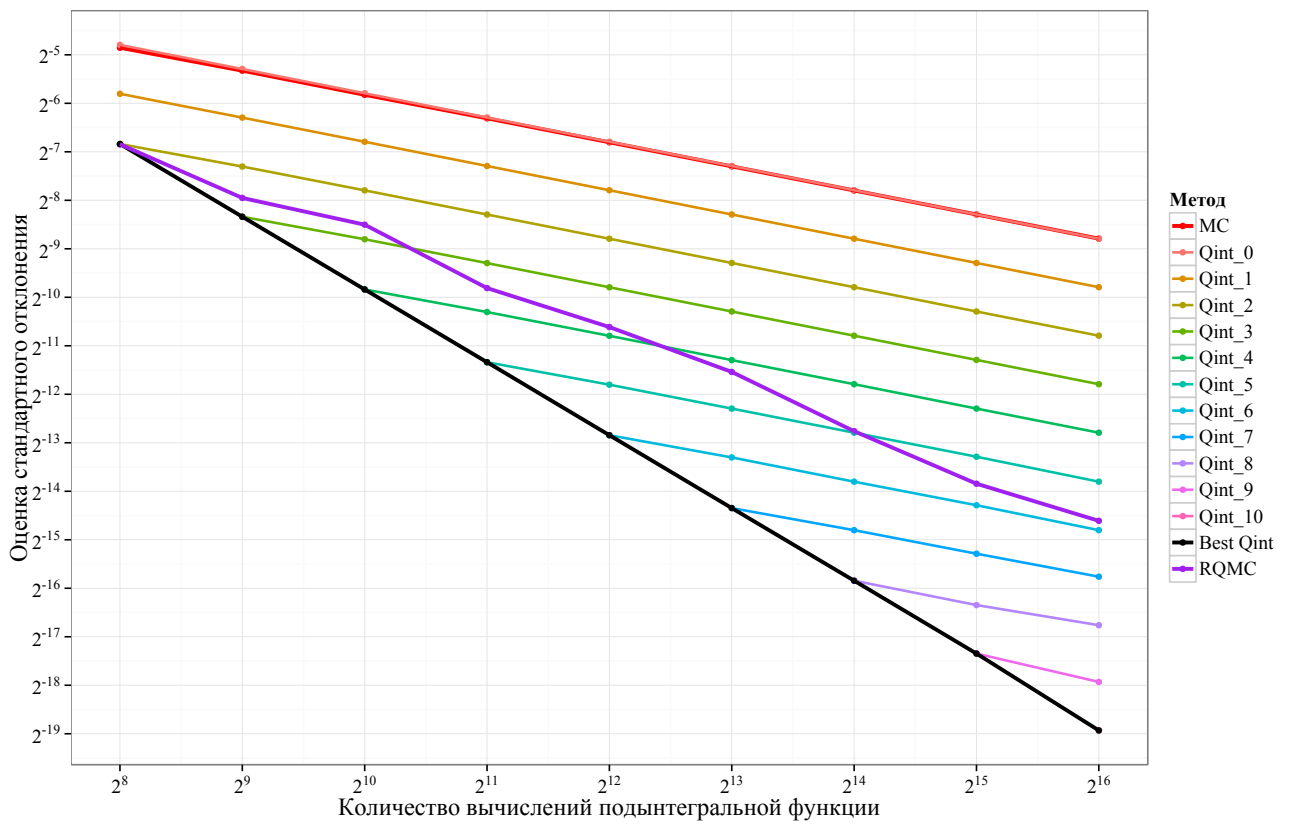


Рисунок 2.11: Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 1$, 16 внешних повторов

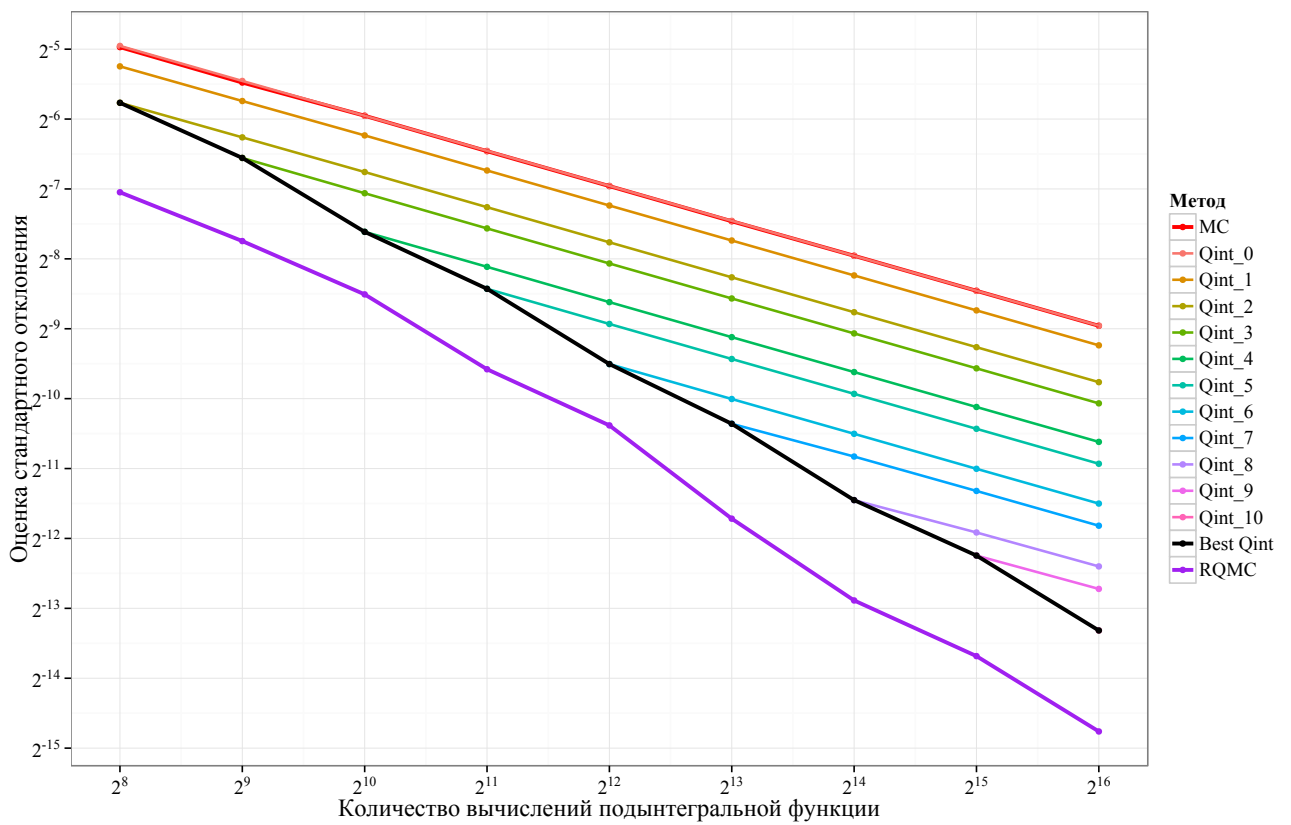


Рисунок 2.12: Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 2$, 16 внешних повторов

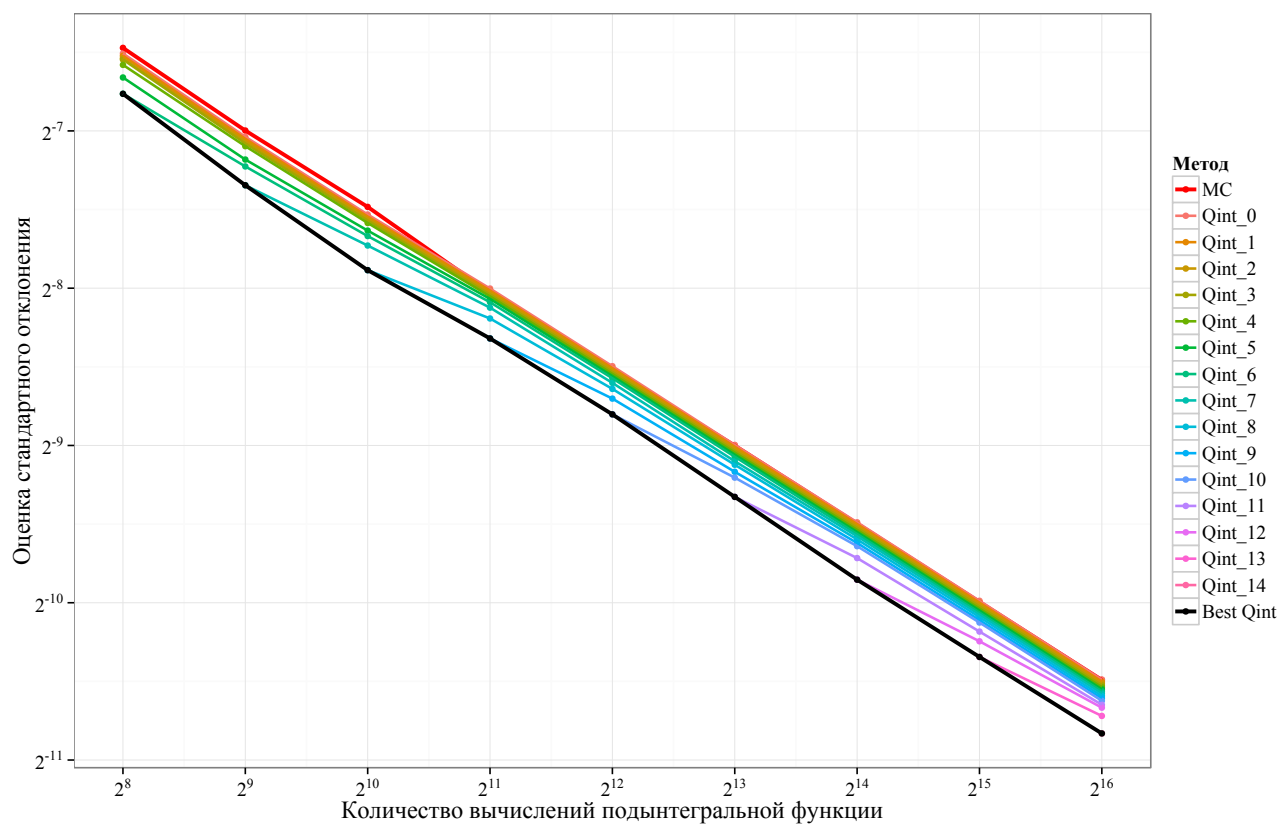


Рисунок 2.13: Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 30$, без внешних повторов

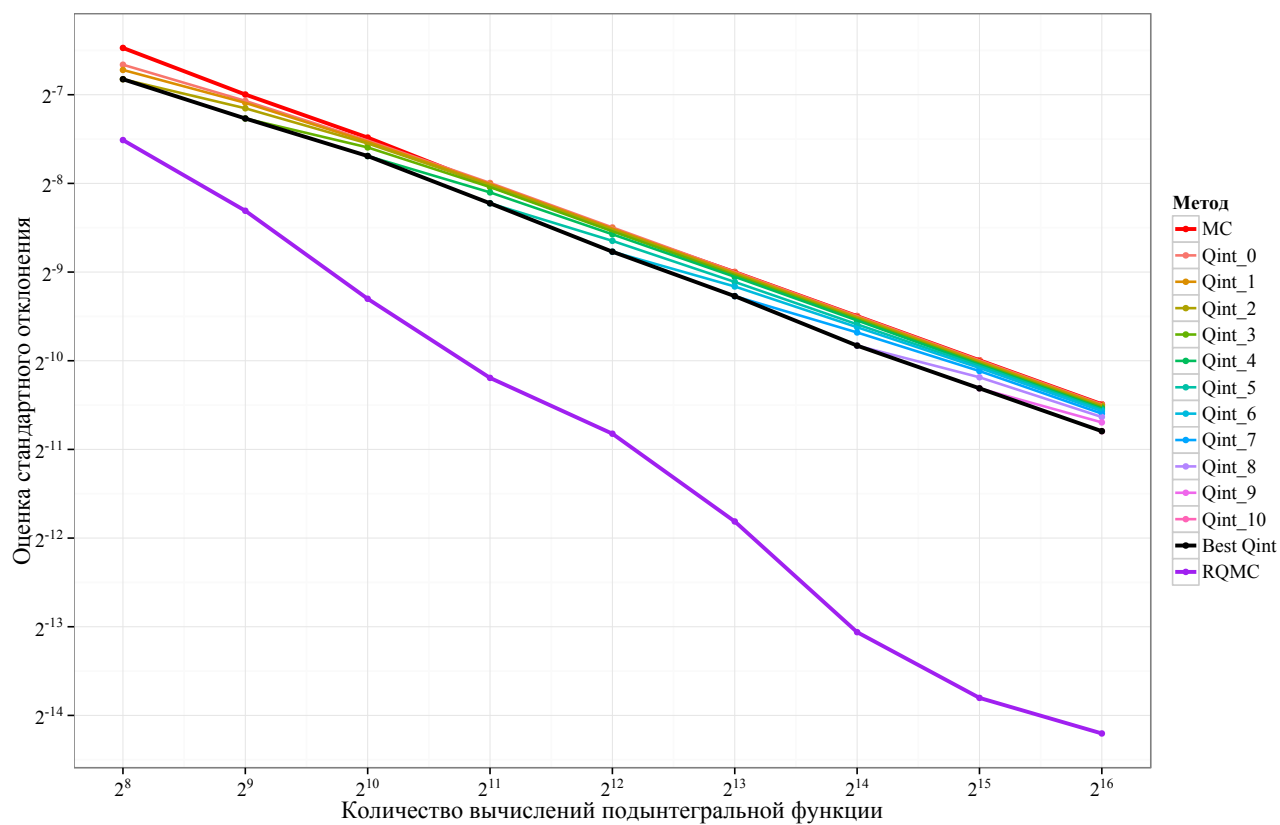
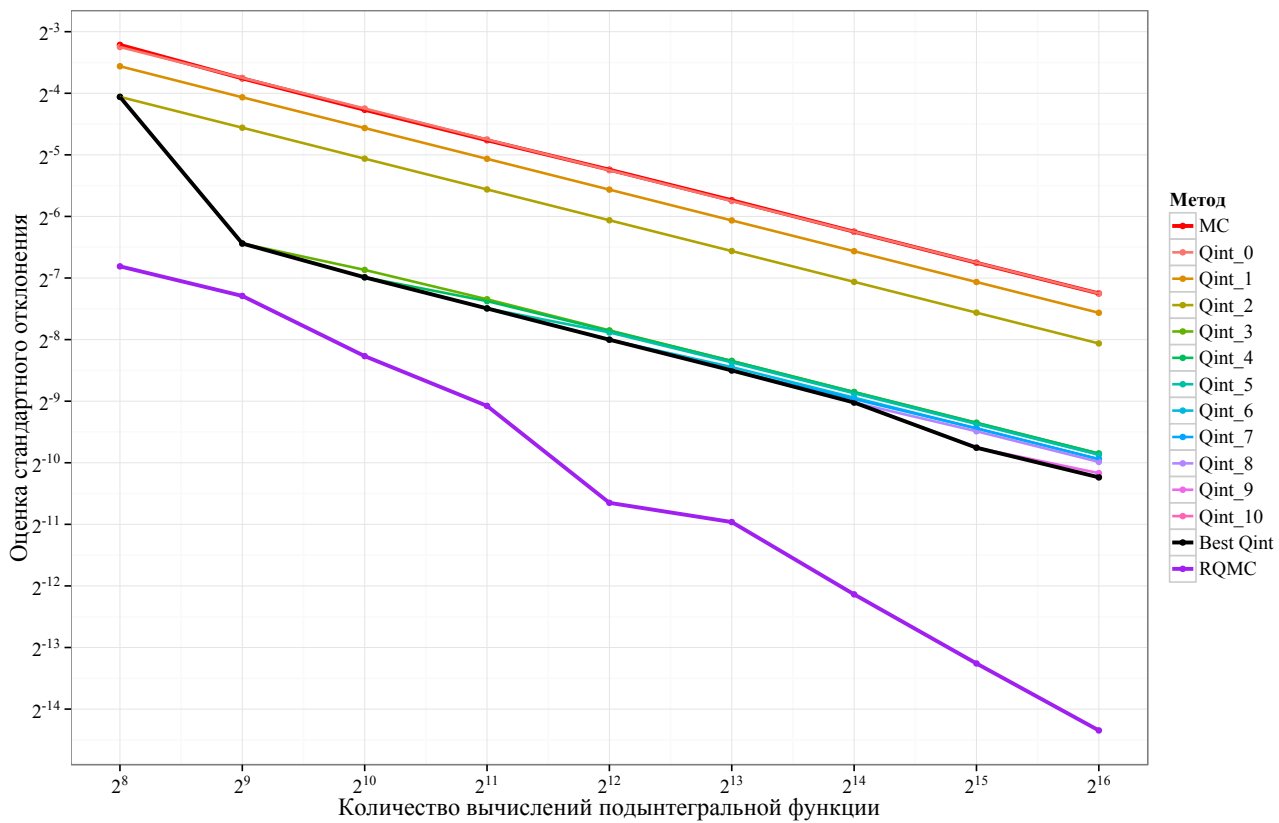
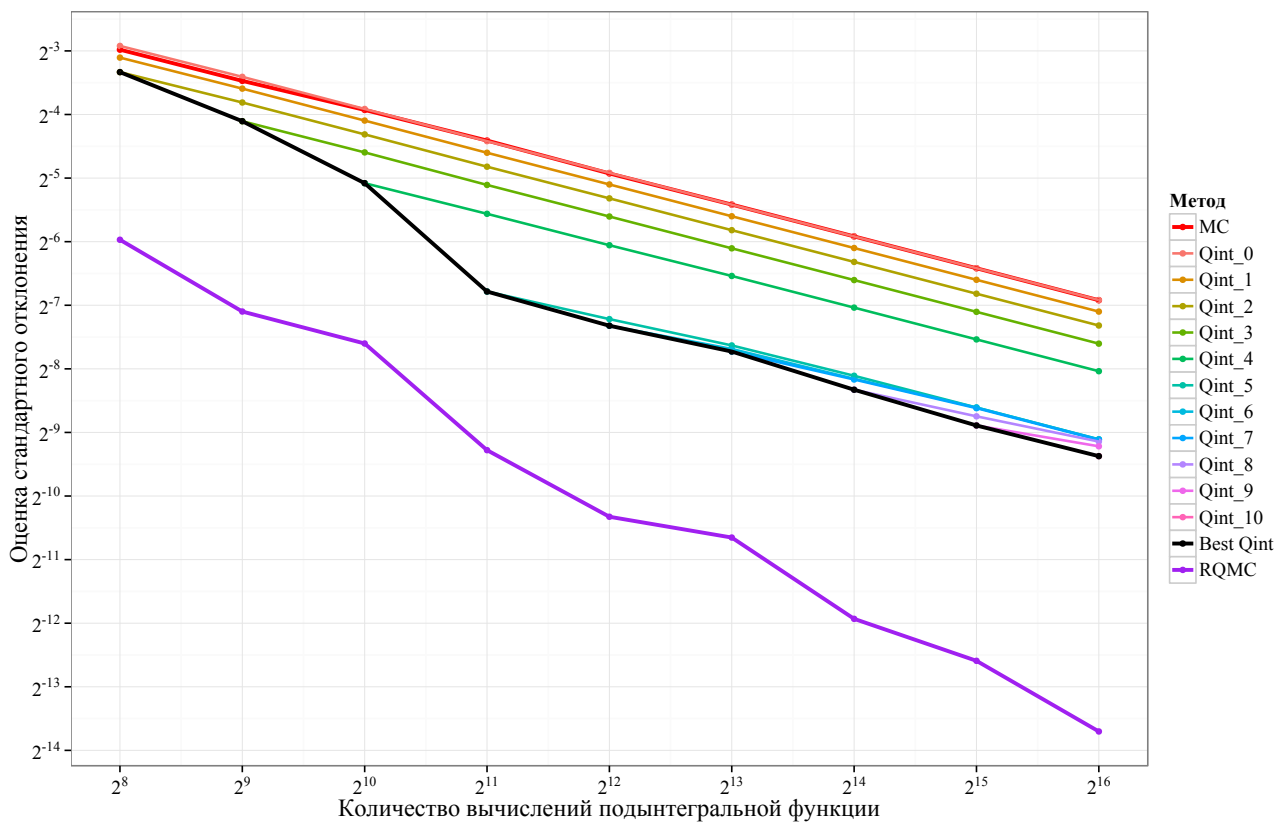
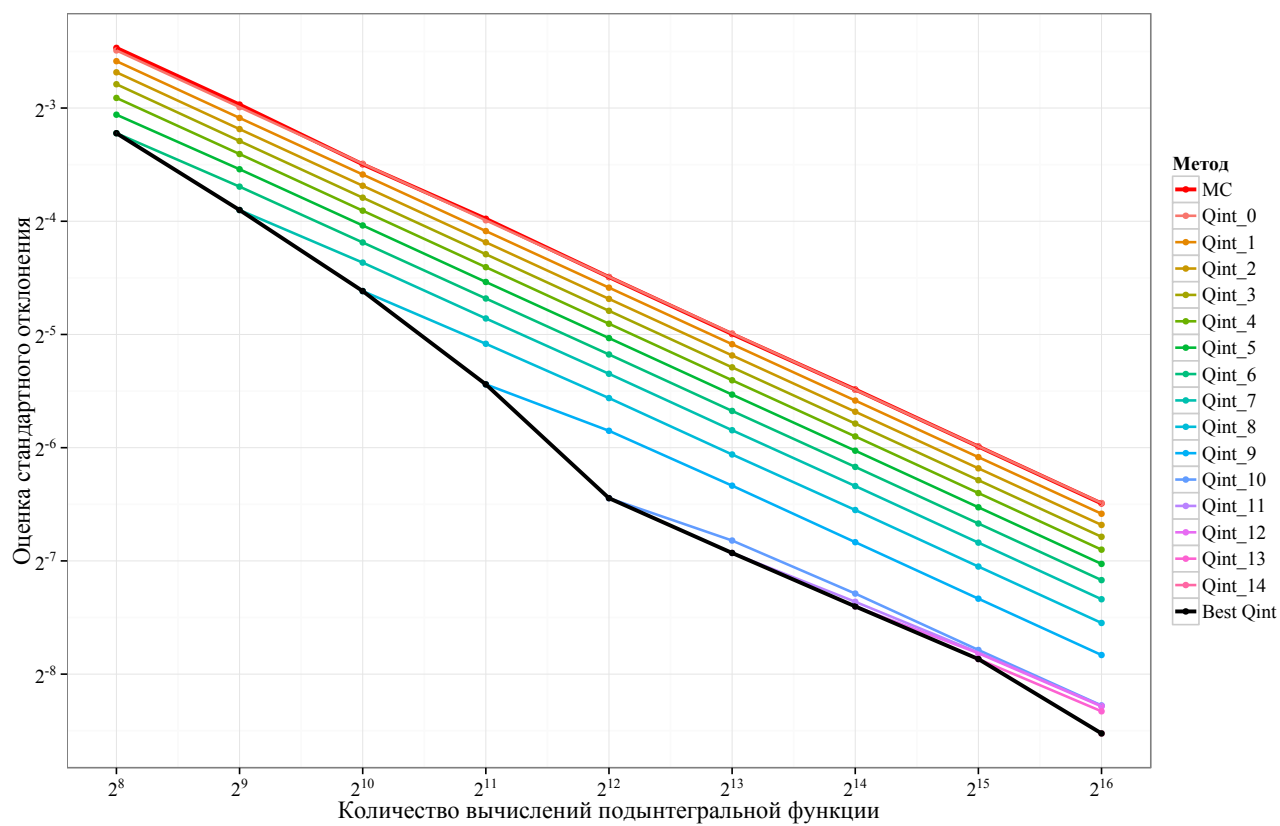
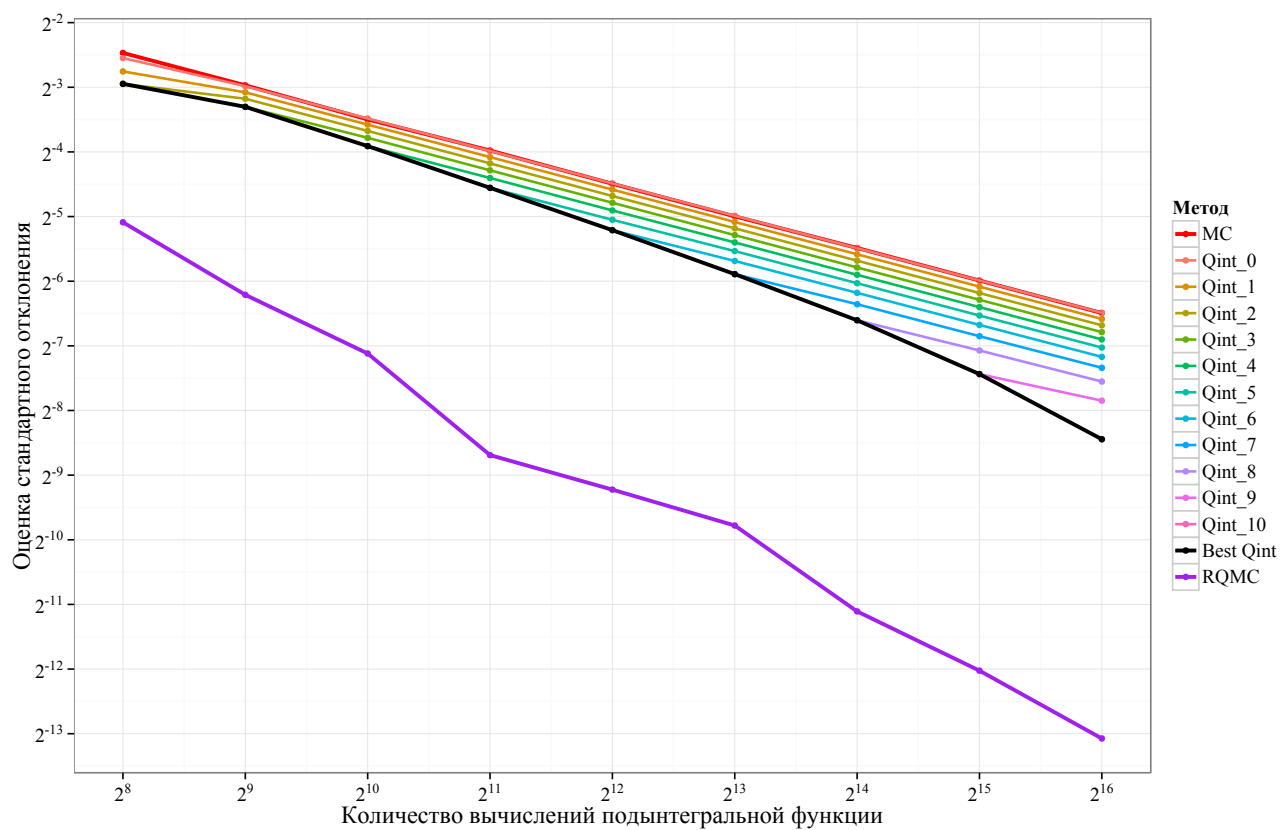


Рисунок 2.14: Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 30$, 16 внешних повторов

Рисунок 2.15: Кусочно-линейная функция, $s = 3$, 16 внешних повторовРисунок 2.16: Кусочно-линейная функция, $s = 5$, 16 внешних повторов

Рисунок 2.17: Кусочно-линейная функция, $s = 10$, без внешних повторовРисунок 2.18: Кусочно-линейная функция, $s = 10$, 16 внешних повторов

Глава 3

Расслоение и метод квази-Монте-Карло в различных задачах

Как нам удалось показать в предыдущих главах, расслоение в методе Монте-Карло и концепция равномерной распределённости для квазислучайных последовательностей имеют много общего. Более того, детерминированные low-discrepancy сети и последовательности можно в определённом смысле рассматривать как некий „предельный“ случай расслоения, притом настолько удачный, что в момент перехода к этому „пределу“ происходит качественный скачок в асимптотике дискрепанса, и, соответственно, дисперсии рандомизированного квази-Монте-Карло. Это рассуждение свидетельствует в пользу той идеи, что любое практическое расслоение в различных задачах, решаемых методом Монте-Карло, можно заменить на адаптированный квази-Монте-Карло, то есть последний приобретает смысл нового метода понижения дисперсии.

Всё вышесказанное рассматривалось нами только в рамках задачи численного интегрирования, которая является привычной средой для квази-Монте-Карло. Однако метод Монте-Карло имеет гораздо более широкую область применения, в которую, среди прочих, входят задачи моделирования распределений и траекторий процессов. Важным для дальнейшего развития метода квази-Монте-Карло является вопрос о его применимости в таких, более алгоритмически сложных задачах. В этой главе мы покажем, каким образом традиционные для Монте-Карло схемы могут быть изменены, чтобы использовать расслоение, и, далее, чтобы задействовать квазислучайные последовательности и их преимущества.

3.1 О смещении рандомизированного квази-Монте-Карло

Как уже отмечалось ранее, алгоритм Qint представляет собой новый подход к процедуре оценивания дисперсии рандомизированного квази-Монте-Карло. Легко наблюдать, что предлагаемый алгоритм может иметь несколько достаточно простых модификаций, расширяющих область его применения. Одной из таких модификаций является обобщение на случай основания $b > 2$: для произвольной (t, s) -последовательности по основанию b можно построить такую схему разбиения гиперкуба, чтобы обеспечивалось свойство равномерности распределения узлов.

Другой вопрос, который представляет интерес, может быть сформулирован следующим образом. Если количество подмножеств разбиения значительно превышает количество точек рандомизированной квазислучайной последовательности, то что можно утверждать о погрешности оценки? В численных экспериментах второй главы общее количество точек подбиралось таким образом, чтобы такая ситуация не имела места, но вопрос актуален в случае, когда допустимое количество вычислений подынтегральной функции меньше необходимого для равномерного покрытия.

Выберем произвольное натуральное основание $b \geq 2$ и разделим k -тое ребро единичного гиперкуба U_s на b^{n_k} равных частей, где n_k – натуральные числа. Через каждую точку такого деления проведём рассечение гиперкуба с помощью гиперплоскостей размерности $s - 1$, параллельных координатным гиперплоскостям, не содержащим данную точку¹. Мы получим рассечение гиперкуба на $L = \prod_{k=1}^s b^{n_k}$ гиперпараллелепипедов равного объёма, то есть (U_s, L) -разбиение.

Точки, в которых пересекается $s - 1$ взаимно перпендикулярных гиперплоскостей (включая грани гиперкуба U_s) образуют сетку, представимую для всех координат $k = 1, \dots, s$ в виде

$$p_k = \sum_{i=1}^{n_k} \frac{\gamma_i^k}{b^i}, \quad (3.1)$$

где $\gamma_i^k = 0, \dots, s - 1$ для всех допустимых i . Иными словами, p_k есть b -ичная дробь вида

$$p_k = (0.\gamma_1^k \gamma_2^k \dots \gamma_{n_k}^k)_b. \quad (3.2)$$

Вектор \vec{p} можно рассматривать как (векторный) номер той ячейки (U_s, L) -разбиения, для которой он указывает на вершину, имеющую все координаты минимальными из имеющихся для этого гиперпараллелепипеда. Так, например, на рисунке 3.1 представлен случай $b = 3$, $n_1 = 1$, $n_2 = 3$. Отмеченные ячейки соответствуют векторным номерам $(0,0)$, $(1,22)$ и $(2,10)$.

Пусть теперь $\alpha(p_k)$ суть не обязательно независимые равномерно распределённые на $(0,1)$ случайные величины. Тогда, очевидно, точка $\Xi(\vec{p})$ с координатами

$$\xi_k(\vec{p}) = p_k + \frac{\alpha(p_k)}{b^{n_k}} \quad (3.3)$$

будет равномерно распределена в ячейке сетки с номером \vec{p} .

Для приближения интеграла естественно использовать оценку вида (1.9), которая в этом случае может быть записана в виде

$$Q_N = \sum_{i=1}^L \frac{1}{Ln_i} \sum_{j=1}^{n_i} f(\mathbf{x}_{ij}), \quad (3.4)$$

¹Аналогичная процедура применялась для определения правила бинарного рассечения, проиллюстрированного рисунком 2.1.

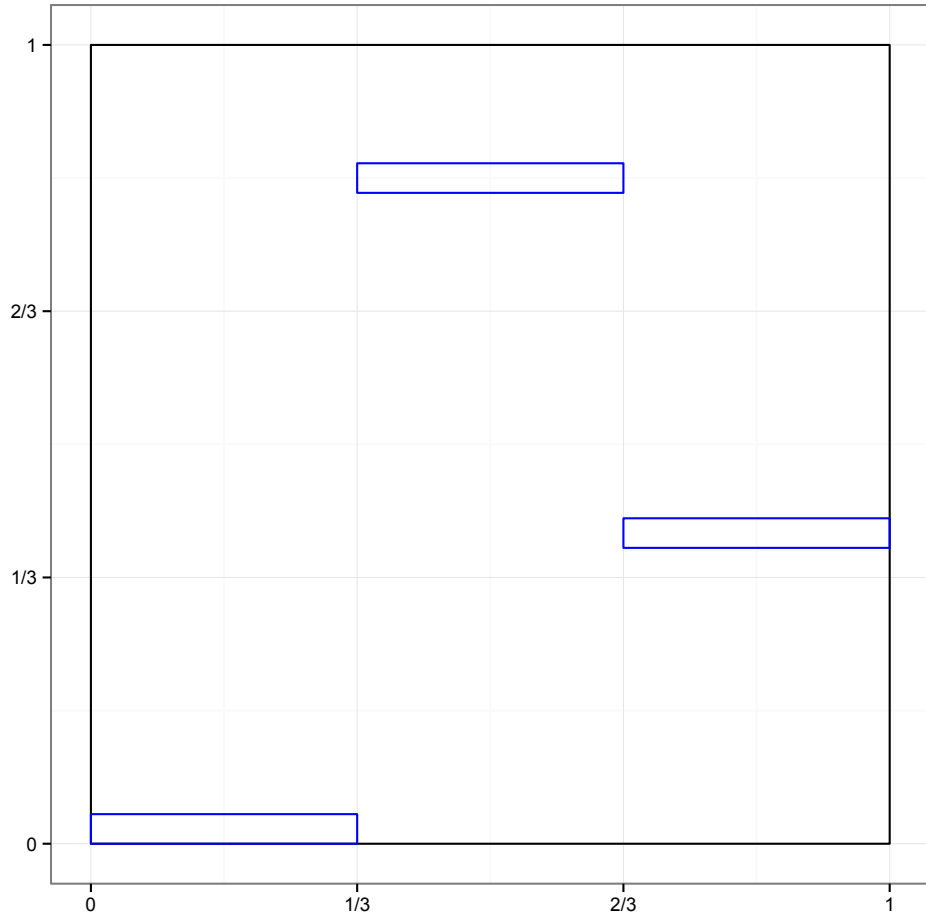


Рисунок 3.1: Пример неравномерного разбиения двоичного гиперкуба

где N обозначает общее количество узлов, входящих в такую оценку.

Для того, чтобы обеспечить несмещённость такой оценки и выполнение условия неубывания дисперсии для всех функций из $\mathcal{L}^2(U_s)$, обычно пользуются таким алгоритмом расслоения, который гарантирует некоторое пропорциональное размещение точек в каждой ячейке. Это вносит дополнительную алгоритмическую сложность: необходимо обеспечивать запоминание уже имеющегося распределения после генерации каждой последующей точки.

При сравнительно небольших значениях L можно использовать различные способы перечисления векторных номеров сетки. Случай $r = 2$ довольно подробно изучен нами в предыдущих главах. Показано, как последовательность Соболя может быть эффективно использована для выполнения необходимого условия распределения. Напомним, что правило бинарного рассеяния в методе Qint подобрано таким образом, чтобы это условие пропорциональности выполнялось автоматически для точек Соболя в силу определения (t,s) -последовательности 4.

Рассмотрим случай „мелкой“ сетки $L \gg N$ при достаточно больших L и N . Интерес представляет поведение последовательности оценок вида (3.4) с ростом N в зависимости от алгоритма выбора номеров \vec{p} ячеек сетки. Легко наблюдать, что если выбор номера \vec{p} осуществляется

случайным и равновероятным образом из совокупности номеров, то точка $\Xi(\vec{p})$ будет равномерно распределена в U_s , что приводит к простейшему методу Монте-Карло.

В общем же случае, если определён алгоритм выбора номеров \vec{p} , то для математического ожидания оценки Q_N справедливо равенство

$$\mathbb{E}(Q_N) = \sum_{i=1}^L \frac{1}{Ln_i} \sum_{k_i=1}^{n_i} \int_{\Delta_{\vec{p}(k_i)}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.5)$$

где $\Delta_{\vec{p}}$ обозначает ячейку с номером \vec{p} . Если дополнительно все $n_i = 1$, то имеем $L = N$ и

$$\mathbb{E}(Q_N) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \int_{\Delta_{\vec{p}}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.6)$$

где суммирование ведётся по всевозможным номерам \vec{p} .

При $N \neq L$ величина Q_N является, вообще говоря, смещённой оценкой интеграла, однако малое смещение оценки может быть обеспечено при значениях N , близких к L . Строгий результат может быть получен для модификации \tilde{Q}_N оценки Q_N

$$\tilde{Q}_N = \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} f(\mathbf{x}_{\vec{p}}), \quad (3.7)$$

где $\mathbf{x}_{\vec{p}} \in \Delta_{\vec{p}}$, а вся N -точечная совокупность $\{\mathbf{x}_{\vec{p}}\}_{\vec{p}}$ представляет собой рандомизированную low-discrepancy последовательность.

Рассмотрим вспомогательную функцию $\tilde{f}(\mathbf{x})$, определяемую как

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = \int_{\Delta_{\vec{p}}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.8)$$

при $\mathbf{x} \in \Delta_{\vec{p}}$. $\tilde{f}(\mathbf{x})$ есть ступенчатая функция, аппроксимирующая $f(\mathbf{x})$, которая будет близка к ней при достаточно больших n_k . При этом величина ошибки аппроксимации зависит от класса рассматриваемых функций.

Справедливо следующее утверждение.

Утверждение 1. Пусть функция \tilde{f} является функцией ограниченной вариации. При $L \gg N$ имеет место равенство

$$\left| \mathbb{E}(\tilde{Q}_N) - \int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right| = \mathcal{O}\left(\frac{\ln^s(N)}{N}\right).$$

Доказательство. Из неравенства Коксмы-Хлавки (теорема 3) для функции \tilde{f} непосредственно следует, что

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{f}(\mathbf{x}_i) - \int_{U_s} \tilde{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right| = \mathcal{O}\left(\frac{\ln^s(N)}{N}\right).$$

Но $\int_{U_s} \tilde{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$, а $\mathbb{E}(Q_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{f}(\mathbf{x}_i)$, что и доказывает утверждение. ■

В этих же предположениях для оценки интеграла методом RQMC возможны два варианта.

- 1) Рассмотрим один N -точечный квазислучайный набор $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$. Проведём для него K независимых рандомизаций и построим K оценок интеграла

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N &\rightarrow \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N && \rightarrow P_N^{(1)} = \sum_{i=1}^N f(\mathbf{y}_i); \\ &\dots && \dots \\ \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N &\rightarrow \mathbf{y}_{(K-1)N+1}, \dots, \mathbf{y}_{KN} && \rightarrow P_N^{(K)} = \sum_{i=(K-1)N+1}^{KN} f(\mathbf{y}_i). \end{aligned}$$

- 2) Рассмотрим KN последовательных точек квазислучайной последовательности, и для каждого отрезка длины N проведём рандомизацию, независимую с остальными. Получим K оценок

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N &\rightarrow \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N && \rightarrow Q_N^{(1)} = \sum_{i=1}^N f(\mathbf{z}_i); \\ &\dots && \dots \\ \mathbf{x}_{(K-1)N+1}, \dots, \mathbf{x}_{KN} &\rightarrow \mathbf{z}_{(K-1)N+1}, \dots, \mathbf{z}_{KN} && \rightarrow Q_N^{(K)} = \sum_{i=(K-1)N+1}^{KN} f(\mathbf{z}_i). \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим комбинированные оценки для обоих случаев, полученные усреднением:

$$\mathcal{P} = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K P_N^{(j)}, \mathcal{Q} = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K Q_N^{(j)}.$$

Предположим, что выполнены условия утверждения 1. В этом случае для оценок $P_N^{(1)}, \dots, P_N^{(K)}$, составляющих \mathcal{P} , будет выполнено

$$\mathbb{E}(P_N^{(1)}) = \dots = \mathbb{E}(P_N^{(K)}) = \int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \mathcal{O}\left(\frac{\ln^s(N)}{N}\right).$$

Из этого в силу независимости рандомизаций следует, что для общей оценки справедливо

$$\mathbb{E}(\mathcal{P}) = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \mathbb{E}(P_N^{(j)}) = \int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \mathcal{O}\left(\frac{\ln^s(N)}{N}\right). \quad (3.9)$$

С другой стороны, для случая, когда мы берём KN последовательных точек, мы вправе ожидать, что

$$\mathbb{E}(\mathcal{Q}) = \int_{U_s} f(x) dx + \mathcal{O}\left(\frac{\ln^s(KN)}{KN}\right), \quad (3.10)$$

что лучше с точки зрения асимптотики. Эта разница может быть существенной при относительно малых размерностях s и достаточно больших значениях N .

В пользу второго подхода свидетельствует ещё одно обстоятельство. Говоря нестрогим языком, использование большего количества точек квазислучайной последовательности является более оправданным в силу того, что к оценкам \mathcal{P} и \mathcal{Q} применима центральная предельная теорема в предположении выполнения условия Линдеберга. В этом свете для \mathcal{Q} следует ожидать более точного результата относительно математического ожидания предельного распределения, потому что мы задействуем более длинный кусок квазислучайной последовательности.

По вышеозначенным причинам во всех уже изложенных и последующих численных экспериментах рандомизация проводится именно по второй схеме. Отметим при этом, что предыдущие утверждения формально не зависят от способа рандомизации, поэтому они остаются в силе и для процедуры скрэмблинга, и для нового алгоритма рандомизации квазислучайных последовательностей, о котором речь пойдёт далее.

3.2 Алгоритм гибридной битовой рандомизации

Традиционный способ применения расслоенной выборки в контексте численного интегрирования подразумевает разбиение области интегрирования на некоторое количество частей и генерацию случайных точек при наличии определённых ограничений на их попадание в выбранные подобласти (более строгое описание метода приведено в подразделе 1.1.3). Так, в простейшем случае мы имеем уже рассмотренную ранее ситуацию: $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ является (U_s, n) -разбиением. Для генерации n -точечной расслоенной выборки необходимо обеспечить принадлежность $x_i \in \mathcal{X}_i$; обычно полагают, что x_i имеет равномерное распределение в соответствующем множестве: $x_i \sim U(\mathcal{X}_i)$. Как уже отмечалось ранее, такая процедура в этом частном случае (который, тем не менее, является самым распространённым именно по причине своей простоты) не может вести к увеличению дисперсии.

Однако уже в таком простейшем варианте появляются некоторые сложности.

- 1) При интегрировании на практике подсчёт обычно ведётся до тех пор, пока не будет достигнута наперёд заданная точность, поэтому общее количество вычислений функции N формально никак не связано с n . Если n фиксировано, то, во-первых, для всякого $N \not\propto n$ требуется дополнительно определять положение неполного набора (например, случайно выкидывать номера индексов из промежутка от 1 до n); во-вторых, если $N \gg n$, то эффективность такого расслоения крайне невелика (по сути, оно становится неотличимым от наивного Монте-Карло).

- 2) Если n также растёт с N , то должен присутствовать этап перехода от одного значения n к другому, что, как правило, означает отказ от предыдущего разбиения $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ и уже имеющегося набора точек, и генерация выборки из более „мелкого“ разбиения начинается заново. Это неудобно как с алгоритмической точки зрения (появляются дополнительные параметры), так и с точки зрения эффективности.

Известно некоторое количество адаптивных алгоритмов, которые достаточно успешно справляются с поставленными проблемами. Наиболее известны MISER (Пресс У., Фаррар Г. и др., [65], [66]) и VEGAS (Лепаж Г., [67], [68]).

Другим вариантом является переход к (рандомизированному) квази-Монте-Карло, который автоматически гарантирует равномерную распределённость в смысле элементарных множеств (см. определение 4). В самом деле, последовательная генерация точек (например, из последовательности Соболя) может продолжаться до тех пор, пока не будет достигнута желаемая точность, что решает обе вышеозначенные проблемы.

Ещё одна важная проблема в теории методов Монте-Карло и квази-Монте-Карло – отсутствие постепенного перехода между полностью случайными и квазислучайными структурами. Как уже отмечалось ранее, различие свойств этих классов конструкций имеет принципиальное значение. Более того, в некоторых задачах адаптация квази-Монте-Карло либо невозможна, либо затруднительна (мы рассмотрим одну такую задачу в следующем разделе).

Далее мы рассмотрим алгоритм действия предлагаемой *гибридной битовой рандомизации* (далее HBR), который будет нами рассмотрен в контексте нескольких численных экспериментов. Имея в виду это обстоятельство, мы сразу будем иметь в виду стандарт IEEE 754 [69] для чисел с плавающей точкой, а именно представление чисел с плавающей точкой двойной точности (binary64). В основе такого представления лежат 64 бита памяти, размеченные следующим образом: 1 бит задаёт знак числа (sign), 11 битов определяют его основание (e), а оставшиеся 52 – мантиссу ($a_i \in \{0,1\}, i = 1, \dots, 52$). Таким образом, запись числа имеет вид

$$(-1)^{\text{sign}} \left(1 + \sum_{i=1}^{52} a_{52-i} 2^{-i} \right) \times 2^{e-1023}. \quad (3.11)$$

Идея алгоритма заключается в том, что имеющийся квазислучайный набор может быть преобразован на уровне битовой структуры (представления (3.11)) путём замены некоторых битов представления на случайные. В самом деле, пусть $x \in [0, 1]$ имеет двоичное представление вида $x = 0.\varepsilon_1\varepsilon_2 \dots \varepsilon_{52}$, получаемое из (3.11) тривиальным образом. Зафиксируем некоторое количество k битов, которые останутся неизменными, а остальные поменяем случайным образом: $\tilde{x} = 0.\varepsilon_1\varepsilon_2 \dots \varepsilon_k \tilde{\varepsilon}_{k+1} \dots \tilde{\varepsilon}_{52}$, где $\tilde{\varepsilon}_j \in U\{0,1\}$ (т.е. 0 или 1 с вероятностью 0.5) и для всех j эти случайные величины независимы в совокупности. Тогда случай $k = 0$ соответствует, по сути, обычному Монте-Карло, $k = 52$ сохраняет исходную квази-Монте-Карло последовательность нетронутой, а все промежуточные значения обеспечат постепенный переход между этими двумя

структурами. Далее под обозначением $HBR(k)$ мы будем подразумевать действие такой процедуры с параметром k .

С точки зрения теории вероятностей, работа со случайными вещественными числами и их конечными двоичными представлениями может быть описана в терминах дискретного вероятностного пространства. Так, пусть под запись двоичного представления числа $x \in [0, 1]$ отведено t бит (в практических вычислениях мы будем использовать случай $t = 52$). Тогда естественно рассматривать вероятностное пространство $\Omega = \{0.\varepsilon_1\varepsilon_2 \dots \varepsilon_t, \varepsilon_j \in \{0,1\}\}$, где каждому из элементов соответствует одинаковая вероятность: $\forall x \in \Omega P(x) = \frac{1}{2^t}$. Поэтому когда в контексте компьютерных вычислений говорят о моделировании случайной величины, равномерно распределённой на отрезке $[0, 1]$, имеют в виду пространство (Ω, P) .

Теперь, пусть мы имеем фиксированный элемент этого пространства $x = 0.\varepsilon_1\varepsilon_2 \dots \varepsilon_t$. Предлагаемая процедура смены $t - k$ последних битов на случайные описывается как получение другого элемента того же пространства $\tilde{x} = 0.\varepsilon_1\varepsilon_2 \dots \varepsilon_k\tilde{\varepsilon}_{k+1} \dots \tilde{\varepsilon}_t$, где, как уже упоминалось, $\tilde{\varepsilon}_j \in U\{0,1\}$. Докажем ряд утверждений о свойствах \tilde{x} .

Утверждение 2. Если $k = t$ (меняются все имеющиеся биты разложения), то \tilde{x} есть случайная величина, равномерно распределённая на множестве Ω .

Доказательство. Каждый из новых битов представляет собой случайную величину, независимую от других битов и принимающую значения 0 или 1 с равной вероятностью. Очевидно, что с вероятностью 1 выполнено $\tilde{x} \in \Omega$. Если рассмотреть произвольный элемент $y = 0.\delta_1\delta_2 \dots \delta_t \in \Omega$, то

$$P(\tilde{x} = y) = P(\tilde{\varepsilon}_1 = \delta_1, \dots, \tilde{\varepsilon}_t = \delta_t) = P(\tilde{\varepsilon}_1 = \delta_1) \cdot \dots \cdot P(\tilde{\varepsilon}_t = \delta_t) = \frac{1}{2^t}. \quad (3.12)$$

■

Утверждение 3. Для произвольного $k < t$ \tilde{x} есть случайная величина, равномерно распределённая на множестве $\Omega_k = \{0.\varepsilon_1\varepsilon_2 \dots \varepsilon_k\delta_{k+1} \dots \delta_t, \delta_j \in \{0,1\}\}$.

Доказательство. Доказательство полностью аналогично предыдущему: фиксирование первых k битов приводит к тому, что $\tilde{x} \in \Omega_k$ с вероятностью 1. Точно так же для произвольного $y = 0.\varepsilon_1\varepsilon_2 \dots \varepsilon_k\delta_{k+1} \dots \delta_t \in \Omega_k$

$$P(\tilde{x} = y) = P(\tilde{\varepsilon}_{k+1} = \delta_{k+1}, \dots, \tilde{\varepsilon}_t = \delta_t) = P(\tilde{\varepsilon}_{k+1} = \delta_{k+1}) \cdot \dots \cdot P(\tilde{\varepsilon}_t = \delta_t) = \frac{1}{2^{t-k}}, \quad (3.13)$$

что доказывает равномерность распределения, поскольку количество элементов в Ω_k в точности равно 2^{t-k} . ■

К предлагаемой идее можно относиться как к способу рандомизации квазислучайных последовательностей. Так, скрэмлинг Оуэна (определение 5) имеет ряд замечательных свойств, но обладает определённой вычислительной сложностью. Предлагаемая процедура крайне проста алгоритмически и предлагает гибкую параметрическую шкалу степени рандомизации. С

другой стороны, можно рассматривать этот алгоритм как способ генерации расслоенных выборок, опираясь на свойства распределённости квазислучайных последовательностей (например, (t, m, s) -сетей). Оба этих тезиса будут проиллюстрированы далее.

Чтобы продемонстрировать принцип работы гибридной битовой рандомизации при разных значениях параметра k , мы далее приведём несколько рисунков, на которых изображен единичный гиперкуб в размерности $s = 2$ и распределение точек случайной или квазислучайной последовательности в нём. Мы будем агрегировать количество точек, попадающих в двоичные ячейки квадрата различного объёма. Так, на рисунке 3.2 показана типичная случайная выборка Монте-Карло (256 независимых реализаций случайной величины, имеющей равномерное распределение в $[0, 1]^2$, объём каждой ячейки равен $\frac{1}{256}$).

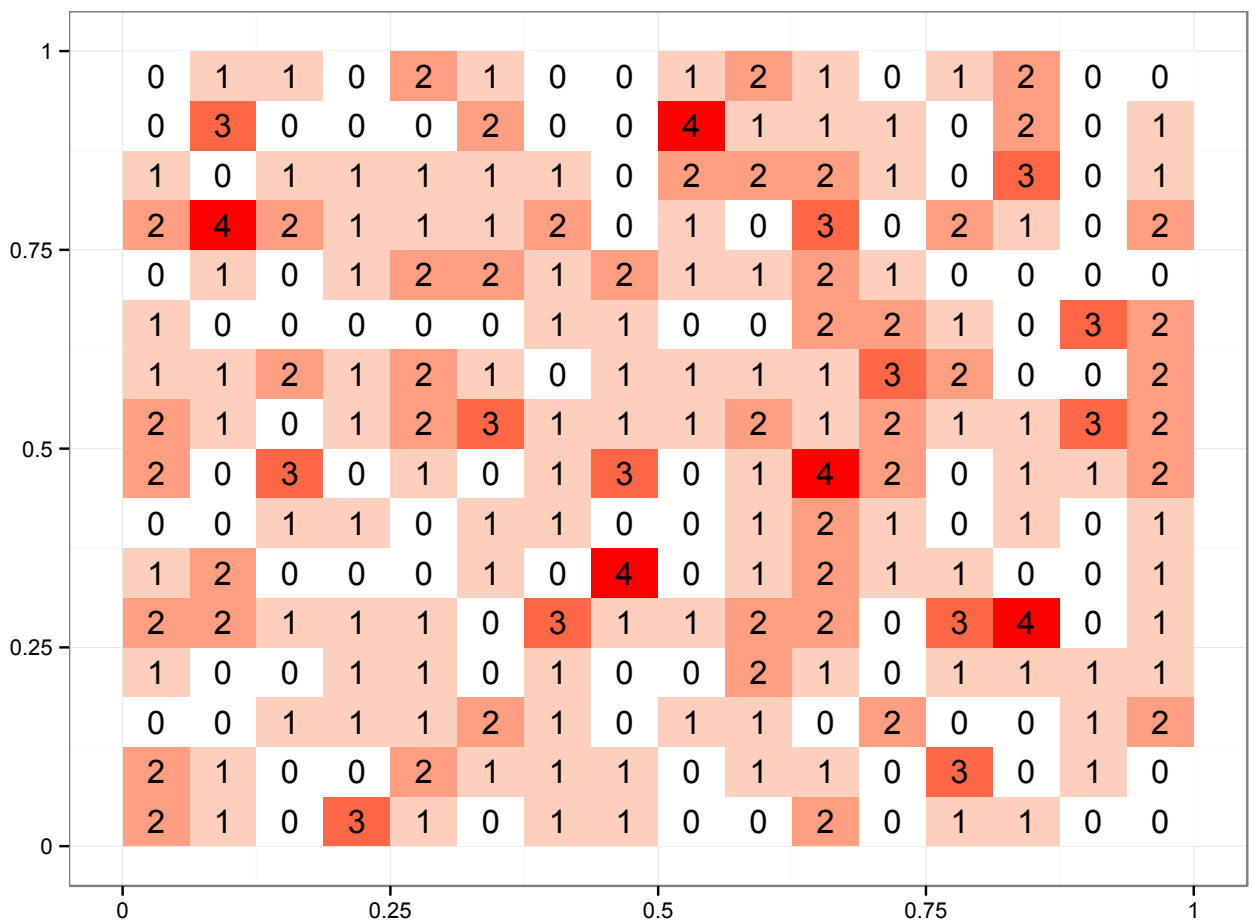


Рисунок 3.2: Распределение точек Монте-Карло

В отличие от Монте-Карло, точки Соболя устроены таким образом, что пропорциональность распределения по ячейкам строго выполнена (рисунок 3.3). Это в точности отражает концепцию (t, s) -последовательности, отражённую определением 4. Необходимо отметить, что рандомизация Оуэна 5, применённая к рассматриваемым точкам Соболя, сохраняет структуру рисунка 3.3.

Теперь применим предлагаемую схему рандомизации с параметром $k = 3$, результат которой приведён на рисунке 3.4. Визуально легко проследить, что такая структура является промежуточ-

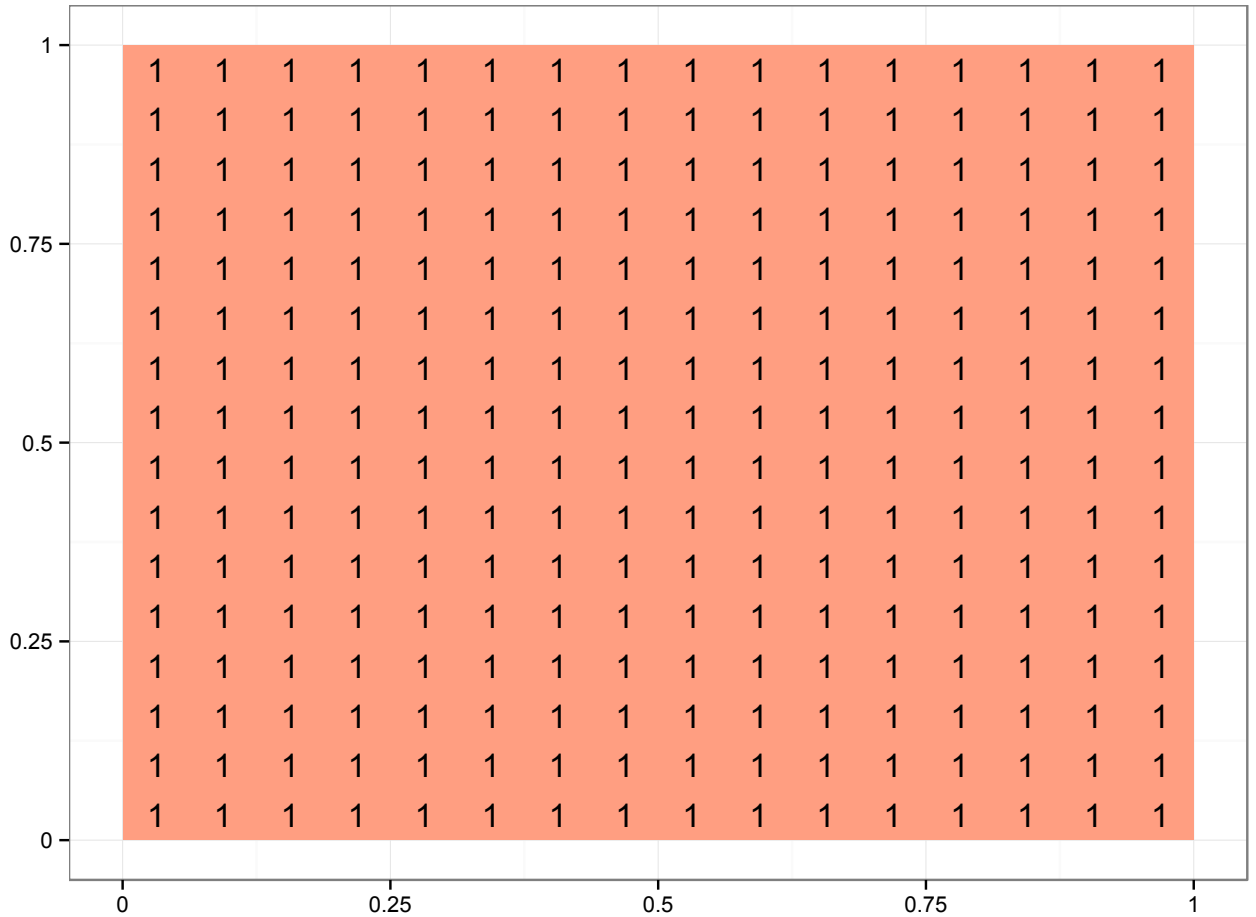


Рисунок 3.3: Распределение точек Соболя

ной между Монте-Карло и квази-Монте-Карло. Более того, параметр k подобран таким образом, что можно проследить сохранённые свойства распределённости по более крупным ячейкам: если провести объединение ячеек по четыре, то окажется, что структура равномерности на этом уровне будет соблюдена (этот эффект проиллюстрирован рисунком 3.6).

Параметр k позволяет варьировать размер ячеек, для которых строго соблюдаются свойства распределённости. Так, если для того же набора точек запустить предлагаемую процедуру с параметром $k = 4$ или больше, мы снова получим картину равномерности, совпадающую с 3.3. Уменьшение параметра, наоборот, ведёт к укрупнению ячеек: так, при $k = 1$ мы получим выборку, равномерно расслоенную только по четырём ячейкам, а именно $[0, \frac{1}{2}] \times [0, \frac{1}{2}]$, $[0, \frac{1}{2}] \times [\frac{1}{2}, 1]$, $[\frac{1}{2}, 1] \times [0, \frac{1}{2}]$ и $[\frac{1}{2}, 1] \times [\frac{1}{2}, 1]$.

Аналогичную ситуацию можно наблюдать и при сдвиге параметра. Так, при агрегации по более крупным ячейкам и $k = 2$ (рисунок 3.5) равномерное расслоение не выполнено, но оно будет выполнено при $k = 3$ (рисунок 3.6).

Для рассматриваемого алгоритма крайне важной является исходная квазислучайная структура. Так, точки Соболя или другая произвольная (t, s) -последовательность обеспечивают описанные свойства распределённости расслоения, чего не произойдёт при использовании других

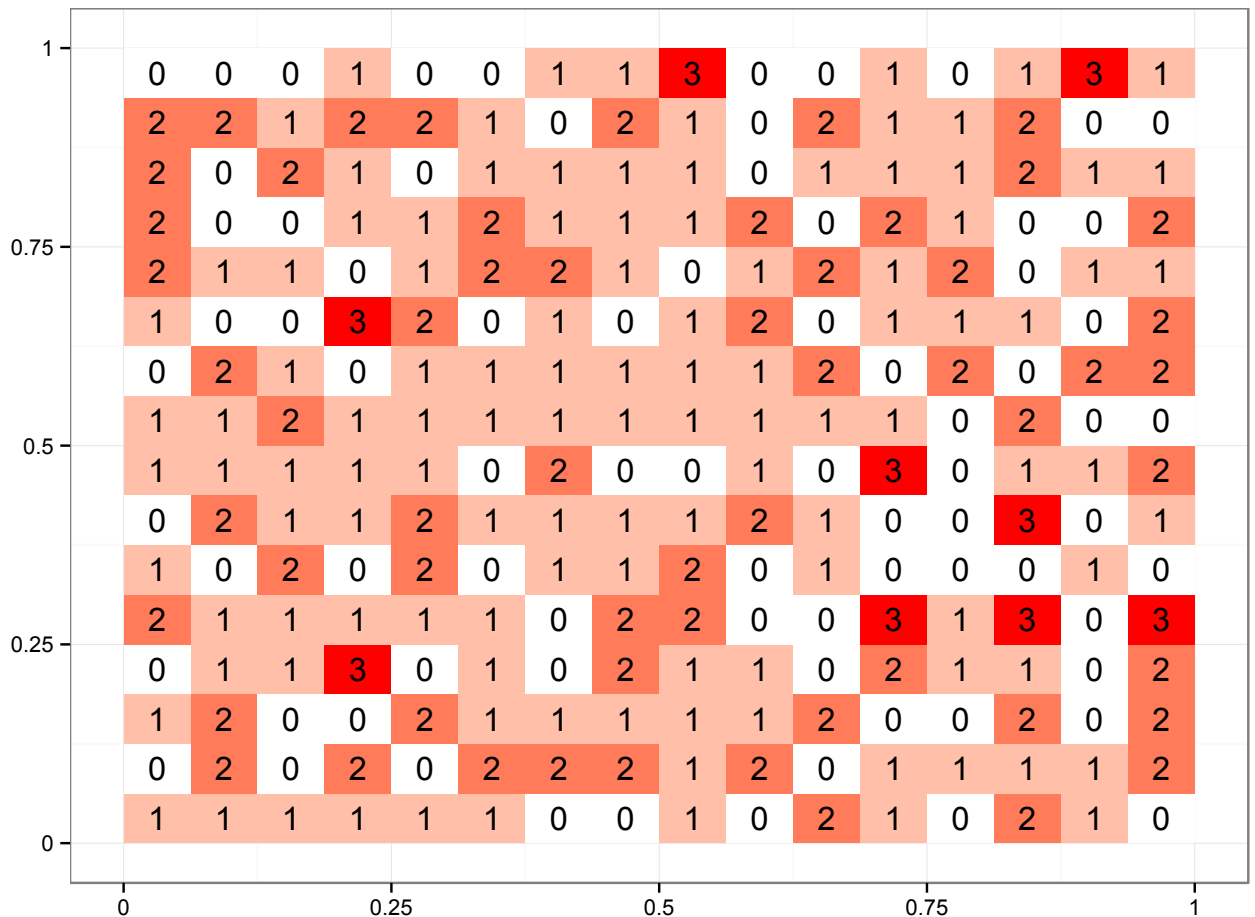


Рисунок 3.4: Результат расслоения для $k = 3$, мелкие ячейки

классов low-discrepancy наборов. Например, при использовании точек Холтона (эта последовательность является популярной альтернативой точкам Соболя; её определение дано в подразделе 1.1.7) действие алгоритма будет иным. Это продемонстрировано рисунками 3.7 (исходное распределение) и 3.8 (конечное распределение при $k = 3$), где отчётливо наблюдается несоблюдение свойств строгой равномерности даже при объединении в достаточно крупные ячейки.

3.3 Гибридная битовая рандомизация в задаче численного интегрирования

Применим описанный алгоритм в простейшей задаче интегрирования. Возьмём уже рассмотренную ранее подынтегральную функцию „Морокофф-Каплиш №1“ в размерности $s = 5$. Иллюстрация работы алгоритма имеет тот же вид, что и в предыдущей главе: профили оценки стандартного отклонения при интегрировании различными методами. Траектории „MC“ и „RQMC“, как и ранее, обозначают Монте-Карло и рандомизированный квази-Монте-Карло. Траектория „MC_strat“ отвечает за метод Монте-Карло с расслоением на 32 подмножества (полученных

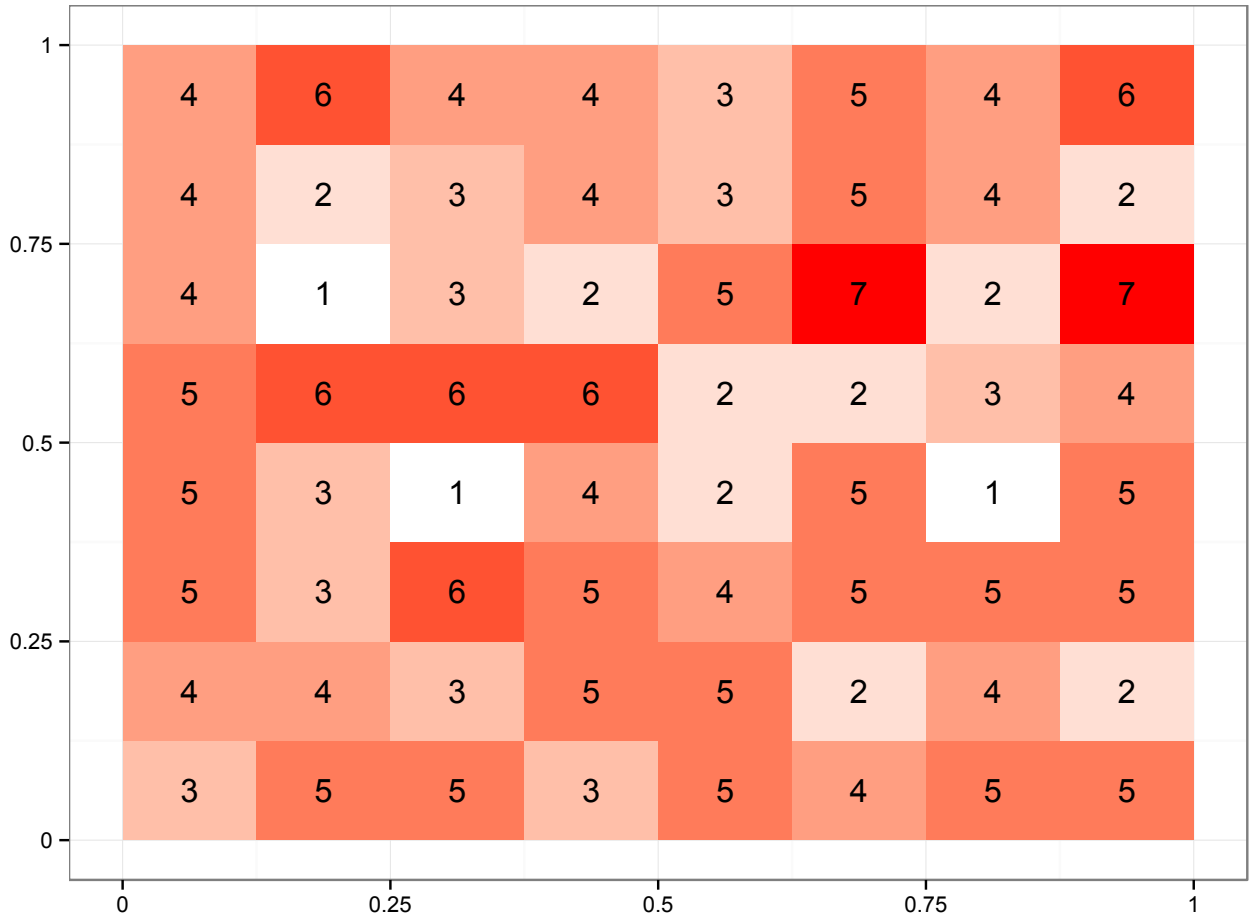


Рисунок 3.5: Результат расслоения для $k = 2$, крупные ячейки

применением правила бинарного рассечения единожды по всем пяти координатам). Наконец, „Hybrid_k“ есть результат применения гибридной битовой рандомизации с параметром k .

Иллюстрация 3.9 демонстрирует следующие важные особенности сравниваемых алгоритмов:

- 1) статическое расслоение („MC_strat“) быстро теряет эффективность с увеличением количества вычислений подынтегральной функции;
- 2) поведение гибридной рандомизации соответствует предсказанному при значениях параметра k , близких к краевым: вблизи $k = 0$ оно повторяет Монте-Карло, при достаточно больших k – квази-Монте-Карло;
- 3) для повторения траектории рандомизированного квази-Монте-Карло достаточно $k = 26$ (при дальнейшем увеличении k траектории, по сути, идентичны, и поэтому не приведены);
- 4) скорость убывания стандартного отклонения соответствует теоретической: $\mathcal{O}(N^{-0.5})$ для MC, $\mathcal{O}(N^{-1+\varepsilon})$ для RQMC;
- 5) небольшой диапазон возможных параметров k покрывает переход от MC к RQMC (по сути, достаточно перебрать $0 \leq k \leq 10$).

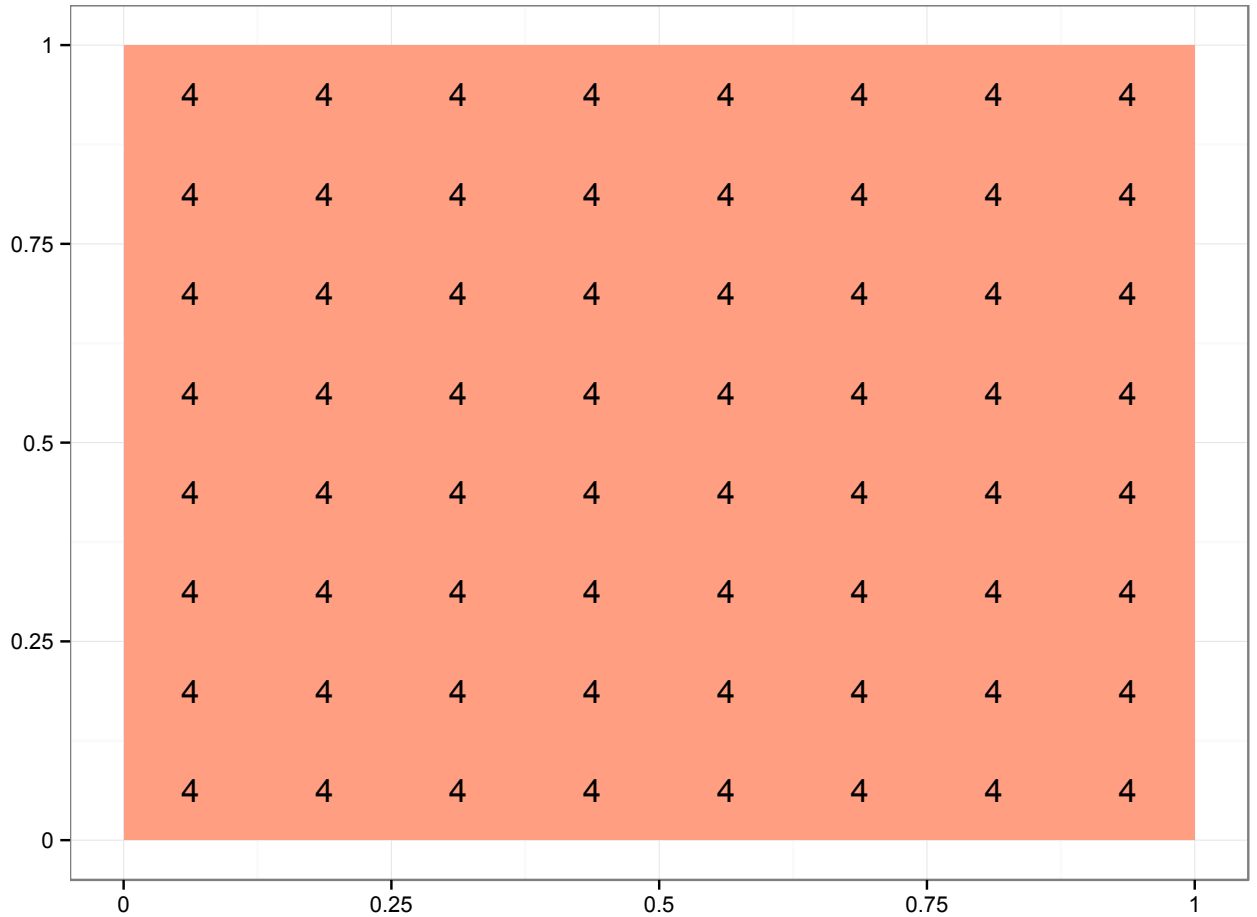


Рисунок 3.6: Результат расслоения для $k = 3$, крупные ячейки

Помимо этого, все перечисленные особенности выполнены и для достаточно высоких размерностей: вариант $s = 20$ указан на иллюстрации 3.10, что свидетельствует об универсальности метода.

Подводя промежуточный итог, отметим, что алгоритм использования гибридной битовой рандомизации в задачах численного интегрирования может служить заменой расслоению, причём, с одной стороны, он несложен с алгоритмической точки зрения (по сравнению с известной процедурой скремблинга, например), а с другой, остаётся эффективным с ростом размерности. С практической точки зрения, параметр можно выбирать из диапазона $k = 2, \dots, 10$.

Обобщение алгоритма на другие численные типы с плавающей точкой (например, `binary32`) может быть получено тривиальным образом: для этого достаточно только скорректировать представление (3.11). Естественно, диапазон допустимых значений параметра k изменится в зависимости от того, сколько бит отводится под мантиссу в рассматриваемом типе данных.

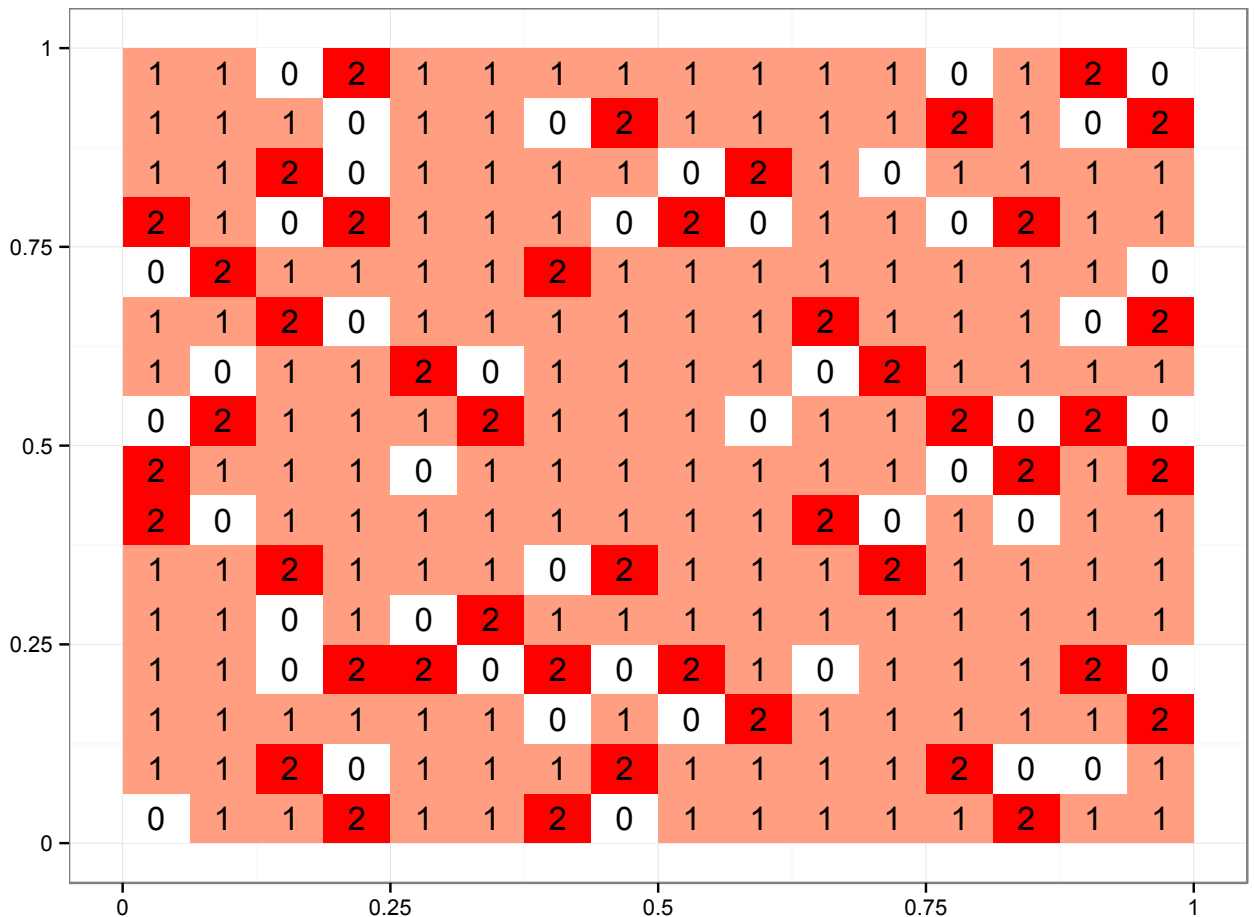


Рисунок 3.7: Распределение точек Холтона

3.4 Гибридная битовая рандомизация для метода „блужданий по сфере“

В предшествующих разделах мы ограничивались рассмотрением исключительно задач численного интегрирования. В этих условиях рандомизированный квази-Монте-Карло почти всегда оказывается существенно (с точки зрения асимптотики сходимости) лучше, чем наивный или расслоенный Монте-Карло, что, в общем, только подтверждает распространённую точку зрения и известные результаты (например, Шюрер Р. [23]). Однако в настоящий момент существует большой пласт задач, в которых замена Монте-Карло на квази-Монте-Карло не только не эффективна, но и вообще неосуществима. Это, в основном, задачи моделирования специальных распределений или случайных процессов. Это связано в первую очередь с тем, что последовательные точки квазислучайных последовательностей сильно коррелированы, что приводит к падению скорости сходимости дисперсии или же, что более потенциально опасно, к сильному смещению оценок (см. Морокофф У. и Кафлиш Р. [70]). Универсальный способ адаптации квазислучайных конструкций в этих случаях в настоящий момент неизвестен, поэтому в таких задачах по-прежнему актуальны традиционные для Монте-Карло методы понижения диспер-

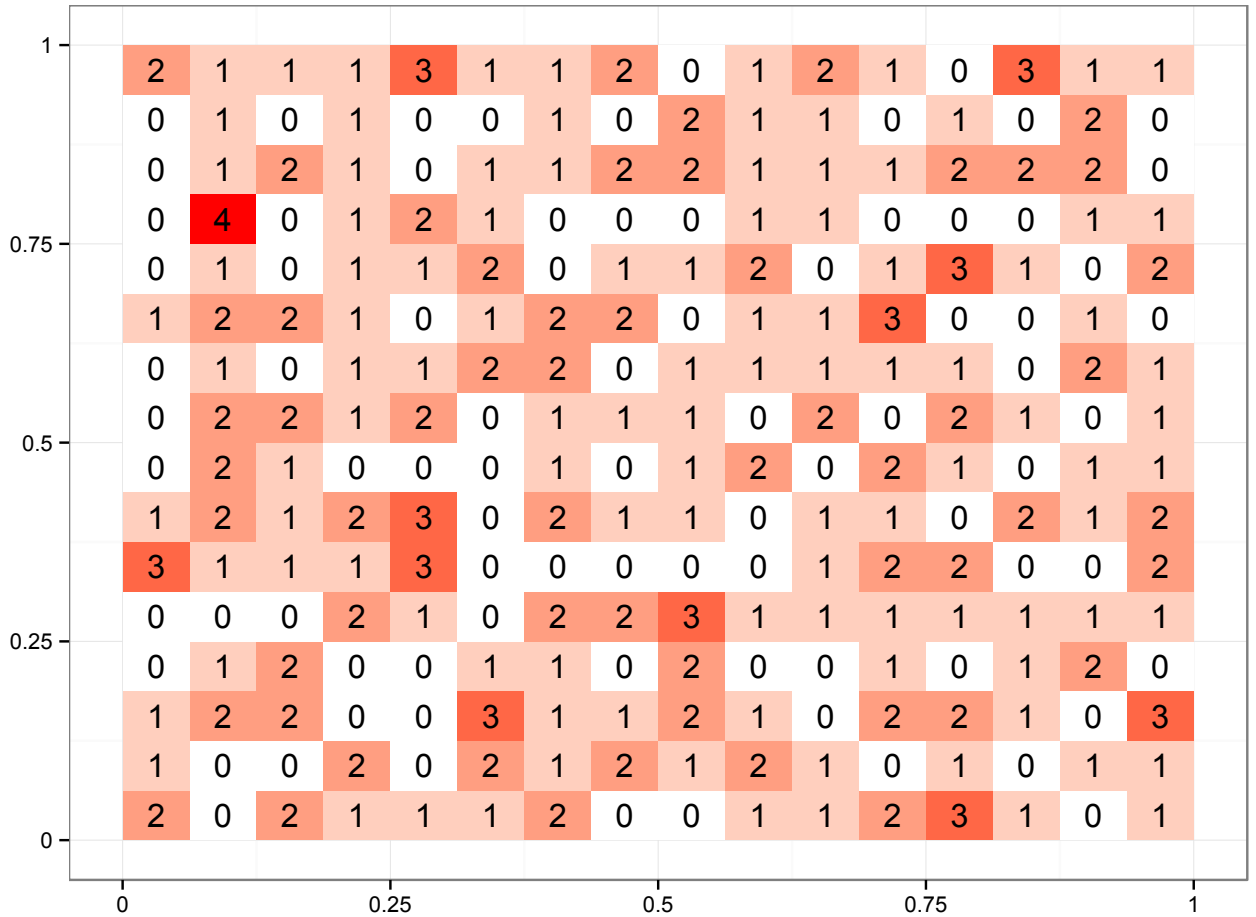


Рисунок 3.8: Результат расслоения (точки Холтона) для $k = 3$, мелкие ячейки

сии, в частности расслоение. Однако полученный нами результат об эффективности гибридной битовой рандомизации может служить ключом к успешному применению low-discrepancy последовательностей и в таких условиях. В частности, мы покажем, каким образом с его помощью можно получить уменьшение дисперсии при использовании метода „блуждания по сферам“ для решения задачи Дирихле.

Рассмотрим постановку внутренней задачи Дирихле для оператора Лапласа. Пусть требуется найти решение уравнения

$$\Delta u = 0 \quad (3.14)$$

в ограниченной области $G \subset \mathbb{R}^s$, удовлетворяющее на границе $\Gamma = \partial G$ условию

$$u|_{\Gamma} = g \quad (3.15)$$

для наперёд заданной непрерывной функции $g(x)$. Искомая функция должна быть дважды дифференцируема в области и непрерывна вплоть до границы: $u \in C^2(G) \cap C(G \cup \Gamma)$.

При наличии некоторых ограничений на область G и границу Γ решение задачи всегда существует и единственно (Владимиров В.С., [71]).

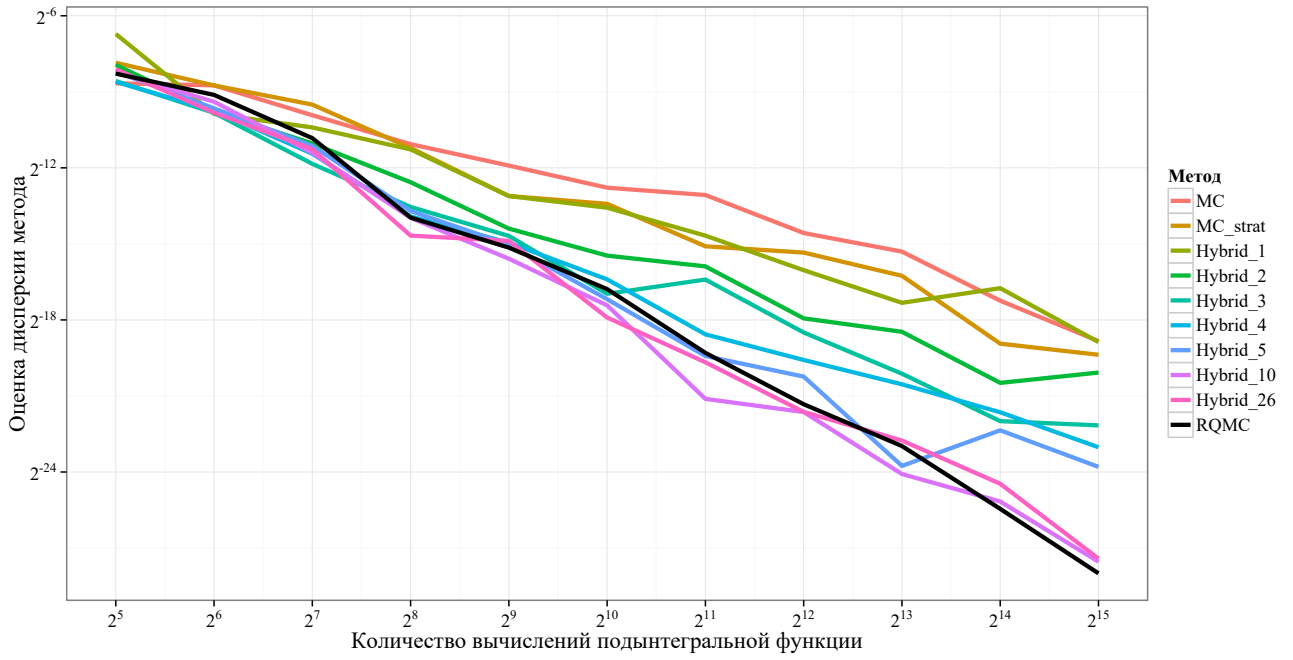


Рисунок 3.9: Гибридная битовая рандомизация, размерность $s = 5$

Одним из способов численного решения рассматриваемой задачи является так называемый *сферический процесс (процесс блуждания по сферам)*. Введём ряд обозначений:

- $\bar{\Omega}$ – замыкание области Ω ;
- $\rho(P, \Gamma)$ – расстояние от точки $P \in \bar{\Omega}$ до границы Γ ;
- $\rho(P, Q)$ – расстояние между двумя точками P и Q ;
- $\Gamma_\varepsilon = \{P \in \bar{\Omega} : \rho(P, \Gamma) < \varepsilon\}$ – ε -окрестность Γ ;
- $S(P) = \{Q \in \bar{\Omega} : \rho(P, Q) = \rho(P, \Gamma)\}$ – сфера максимального радиуса, целиком лежащая внутри $\bar{\Omega}$.

Сферический процесс определяется как однородная марковская цепь $\{P_m\}$, выходящая из заданной точки P_0 . Переход между последовательными состояниями цепи задаётся следующим образом: каждая следующая точка P_m имеет равномерное распределение на сфере $S(P_{m-1})$. Цепь обрывается после шага m , если $P_m \in \Gamma_\varepsilon$.

Определённая таким образом цепь имеет несколько важных свойств (Мюллер М., [72], Ермаков С.М. и Михайлов Г.А. [5], Ермаков, С.М., Некруткин, В.В., Сипин, А.С. [73]):

- 1) траектория блуждания по сферам сходится к границе области с вероятностью 1;
- 2) для каждого шага вероятность попадания в Γ_ε ограничена снизу величиной $\frac{\varepsilon^2}{4\rho^2(P, \Gamma)}$;
- 3) среднее количество переходов не превосходит величины $c|\ln(\varepsilon)|$, где c – константа, не зависящая от ε .

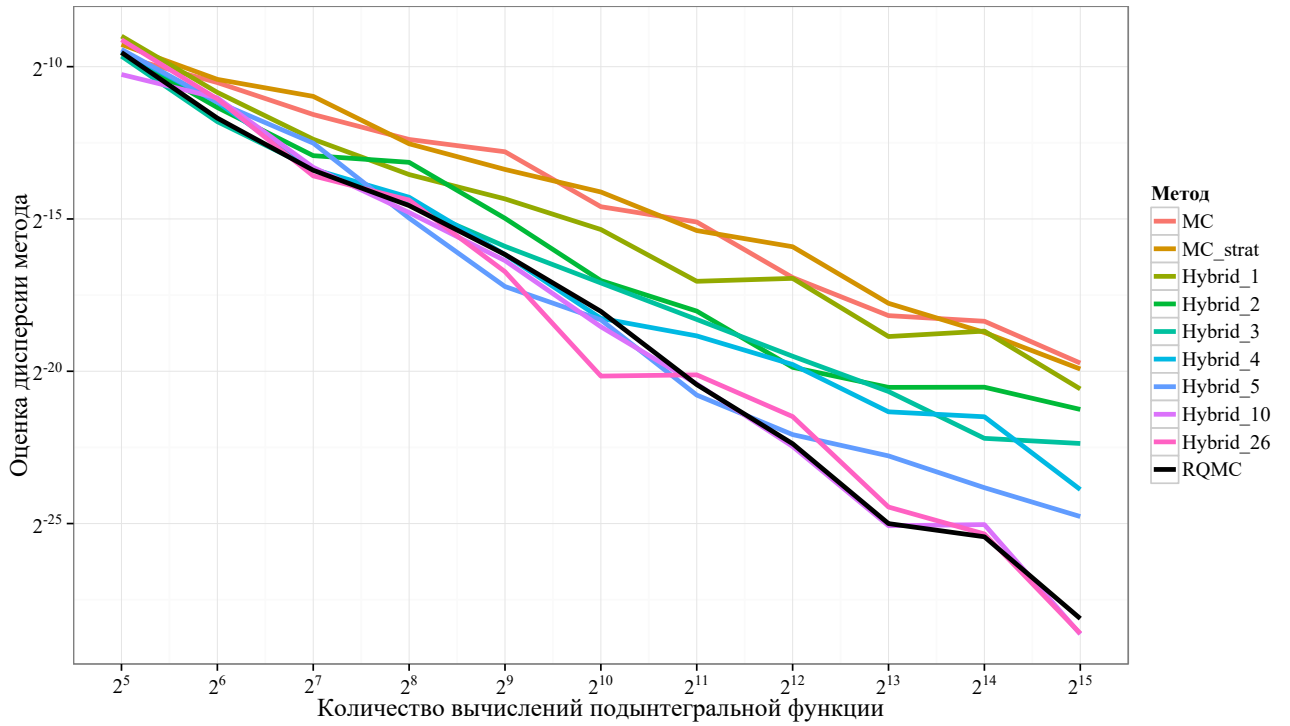


Рисунок 3.10: Гибридная битовая рандомизация, размерность $s = 20$

Пусть теперь необходимо получить оценку решения задачи во внутренней точке P_0 . Это решение оценивается с помощью усреднения известных граничных значений в точках выхода по некоторому количеству смоделированных траекторий процесса. Основанием для такой процедуры служит результат о несмещённости такой оценки, впервые полученный Мюллером М. в [72] на основе теоремы о среднем и формул Грина. Классический алгоритм Монте-Карло предполагает, однако, обрыв траекторий в окрестности Γ_ε замену точки обрыва на ближайшую точку Γ , что вносит смещение в оценку в силу того, что $\varepsilon > 0$.

Основная сложность для метода Монте-Карло по сравнению с численным интегрированием заключается в том, что в этом случае речь идёт о траекториях неограниченной длины, то есть, фактически, об интегралах, имеющих сколь угодно большую размерность. Это затруднение приводит к тому, что в настоящий момент не существует надёжной адаптации квази-Монте-Карло, которая не приводила бы к непредсказуемому росту смещения схемы. Среди предпринимаемых попыток построения гибридных схем моделирования марковских цепей достаточно известен метод Aray-RQMC (Лекуер П., Леко К. и Туффин Б., [74]), но этот метод предполагает наличие несмещённой схемы и поэтому не подходит для рассматриваемой задачи.

Ключевым шагом для генерации траектории сферического процесса является подзадача моделирования положения каждой следующей точки, равномерно распределённой на s -мерной сфере. Для этого можно использовать следующий алгоритм, предложенный Марсальей Г. [75]. Возьмём вектор $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \dots, z_s)$, состоящий из нормально распределённых независимых компонент, т.е. $\forall j \ z_j \sim N(0,1)$. Положим $r = \sqrt{z_1^2 + z_2^2 + \dots + z_s^2}$, тогда вектор $\frac{\mathbf{z}}{r}$ равномерно распределён

на единичной s -мерной сфере. Распределение на сфере произвольного радиуса моделируется из распределения на единичной сфере при помощи тривиального масштабирования.

Описанный алгоритм будет служить основой для традиционного Монте-Карло подхода, с которой мы будем сравнивать предлагаемую адаптацию. Эта адаптация заключается в том, что разные траектории будут моделироваться нами не независимо друг от друга, как это делается в классическом алгоритме, а исходя из идеи расслоения траекторий на нескольких первых шагах, при этом остаток траектории моделируется обычным способом. Нами уже предложен способ генерации такого рода расслоений на основе гибридной битовой рандомизации, поэтому целесообразно использовать его в данной задаче. В самом деле, пусть нам требуется смоделировать n траекторий сферического процесса. В случае Монте-Карло мы запустим n независимых процессов, где каждый переход происходит в соответствии с процедурой, описанной выше. В предлагаемой гибридной вариации мы поступим иначе:

- 1) Возьмём n точек из последовательности Соболя размерности ps , где s – размерность задачи, а p – параметр алгоритма, отвечающий за число гибридных шагов:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c} s \\ \vdots \\ s \end{array} \left[\begin{array}{cccc} x_{1,1} & x_{1,2} & \dots & x_{1,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{s,1} & x_{s,2} & \dots & x_{s,n} \\ x_{s+1,1} & x_{s+1,2} & \dots & x_{s+1,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{2s,1} & x_{2s,2} & \dots & x_{2s,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right. \\
 \begin{array}{c} s \\ \vdots \\ s \end{array} \left[\begin{array}{cccc} x_{(p-1)s+1,1} & x_{(p-1)s+1,2} & \dots & x_{(p-1)s+1,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{ps,1} & x_{ps,2} & \dots & x_{ps,n} \end{array} \right.
 \end{array} \quad (3.16)$$

- 2) Проведём гибридизацию массива по следующему правилу: первый блок из s рядов получает p случайных бит, во втором заменяется $p-1$ бит и так далее, последний блок получает 1 случайный бит. Иными словами, последовательные блоки размером по s рядов проходят

процедуру гибридной битовой рандомизации с параметрами $k = p, k = p - 1, \dots, k = 1$:

$$\begin{array}{c}
 HBR(p) \\
 \vdots \\
 HBR(p-1) \\
 \vdots \\
 HBR(1)
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 \tilde{x}_{1,1} & \tilde{x}_{1,2} & \dots & \tilde{x}_{1,n} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \tilde{x}_{s,1} & \tilde{x}_{s,2} & \dots & \tilde{x}_{s,n} \\
 \tilde{x}_{s+1,1} & \tilde{x}_{s+1,2} & \dots & \tilde{x}_{s+1,n} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \tilde{x}_{2s,1} & \tilde{x}_{2s,2} & \dots & \tilde{x}_{2s,n} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \tilde{x}_{(p-1)s+1,1} & \tilde{x}_{(p-1)s+1,2} & \dots & \tilde{x}_{(p-1)s+1,n} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \tilde{x}_{ps,1} & \tilde{x}_{ps,2} & \dots & \tilde{x}_{ps,n}
 \end{bmatrix}
 \quad (3.17)$$

- 3) Каждый из столбцов высоты s преобразуем при помощи функции квантилей (обратной функции распределения) стандартного нормального распределения. Отмасштабируем эти точки на сферу желаемого радиуса. Получим точки $z_{i,j}$ (i – номер шага, j – номер траектории), которые задают переходы для первых p шагов по всем n траекториям:

$$\begin{array}{cccc}
 z_{1,1} & z_{1,2} & \dots & z_{1,n} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 z_{p,1} & z_{p,2} & \dots & z_{p,n}
 \end{array}
 \quad (3.18)$$

- 4) Для тех траекторий, которые не оборваны после шага p , последующие переходы моделируются методом Монте-Карло.

Перечислим параметры алгоритма Монте-Карло (MC) и предложенного гибридного квази-Монте-Карло (HQMC). В рамках последующего численного эксперимента мы зафиксируем все имеющиеся параметры, кроме размерности, по которой будем проводить перебор значений. Значения параметров алгоритма указаны в таблице 3.1.

Таблица 3.1: Параметры алгоритмов моделирования сферического процесса и диапазоны рассматриваемых значений

| Параметр | MC | HQMC | Перебираемые значения |
|--|----|------|-----------------------|
| Размерность задачи s | + | + | 10, 20 |
| Точность выхода на границу ε | + | + | 0.0001 |
| Количество траекторий n | + | + | 1000 |
| Количество внешних повторов r | + | + | 120 |
| Количество шагов гибридизации p | – | + | 10 |

Как и в экспериментах в задаче численного интегрирования, внешние повторы необходимы для того, чтобы нивелировать эффект случайности для одного запуска алгоритма. Плюс или минус в ячейках таблицы означает, присутствует ли данный параметр в этом алгоритме или нет.

Для демонстрации работы двух рассматриваемых алгоритмов мы рассмотрим конкретный случай задачи Дирихле для оператора Лапласа, подразумевающий специфическую область Γ и специального вида функцию $u(\mathbf{x})$, гармоническую в этой области. А именно, положим

$$u(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^{2-s} \quad (3.19)$$

для некоторой фиксированной точки $\mathbf{y} \in U_s$ и $s \geq 3$. Убедимся, что функция является гармонической всюду, кроме окрестности сингулярной точки \mathbf{y} . Первая частная производная имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x_k}(\mathbf{x}) &= \frac{2-s}{2} \left(\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2 \right)^{\frac{2-s}{2}-1} 2(x_k - y_k) = \\ &= (2-s)(x_k - y_k) \left(\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2 \right)^{-\frac{s}{2}}. \end{aligned}$$

Аналогично, вторая частная производная равна

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2}(\mathbf{x}) &= (2-s) \left(\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2 \right)^{-\frac{s}{2}} - (2-s)(x_k - y_k) \left(-\frac{s}{2} \right) \left(\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2 \right)^{-\frac{s+2}{2}} 2(x_k - y_k) = \\ &= (2-s) \left(\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2 \right)^{-\frac{s}{2}} \left(1 - s(x_k - y_k)^2 \left(\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2 \right)^{-1} \right), \end{aligned}$$

и, суммируя по k ,

$$\sum_{k=1}^s \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2}(\mathbf{x}) = (2-s) \left(\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2 \right)^{-\frac{s}{2}} \left(s - s \frac{\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2}{\sum_{j=1}^s (x_j - y_j)^2} \right) = 0.$$

Следовательно, достаточно вынести точку сингулярности \mathbf{y} за границу области, чтобы задача была поставлена корректно. Поэтому определим

$$\Omega = U_s \setminus C_s(\mathbf{y}, r),$$

где U_s – единичный гиперкуб, $C_s(\mathbf{y}, r)$ – s -мерный шар с центром в точке \mathbf{y} и радиусом r . В дальнейших экспериментах во всех рассматриваемых размерностях зафиксируем точку сингулярности $\mathbf{y} = (0.7, 0.7, \dots, 0.7)$, а радиус выберем таким, чтобы объём этого шара был равен $\frac{1}{8}$ (он будет различным в разных размерностях). Это сделано для того, чтобы задача была достаточно сложной: небольшой радиус шара увеличивает дисперсию, потому что траектории, обрывающиеся вблизи его границы, будут вносить экстремальные значения в общую оценку, а разный радиус необходим, чтобы сохранить эту сложность как для малых, так и для больших размер-

ностей. Начальной точкой для всех траекторий будет $x_0 = (0.2, 0.2 + \frac{0.6}{s-1}, 0.2 + 2\frac{0.6}{s-1}, \dots, 0.8)$. В асимметрии такого выбора лежит идея о том, что излишняя симметричность также способствует упрощению задачи и уменьшению дисперсии.

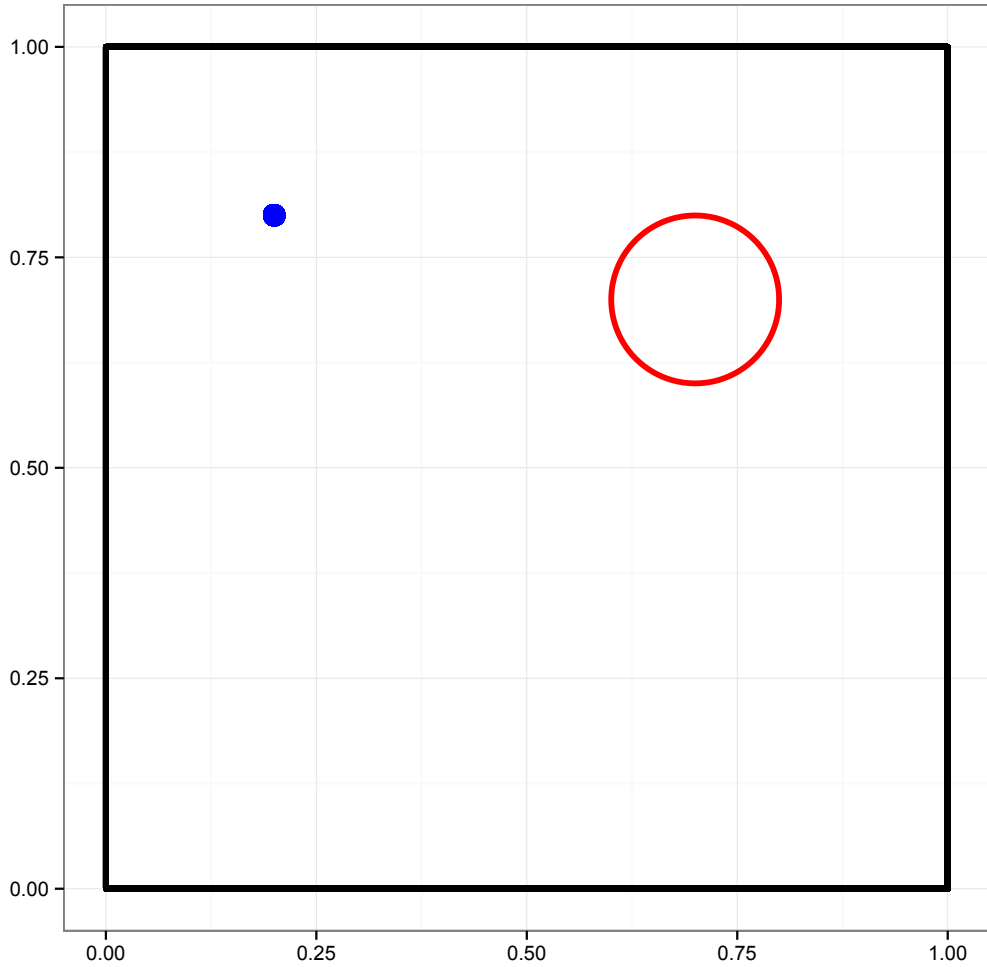


Рисунок 3.11: Конфигурация задачи Дирихле, размерность $s = 2$

Иллюстрация 3.11 даёт представление о поставленной задаче в случае $s = 2$: окружность имеет центром точку сингулярности, а $(0.2, 0.8)$ – точка старта.

В отличие от задачи численного интегрирования, здесь мы имеем дело со смещённой оценкой. Это означает, что недостаточно сравнивать только дисперсию двух методов, потому что уменьшение дисперсии может сопровождаться увеличением смещения и наоборот². Однако надо понимать при этом, что для фиксированного ε смещение схемы для традиционного Монте-Карло постоянно, поэтому первоочередное значение играет именно дисперсия.

Помимо смещения и дисперсии, мы будем рассматривать два дополнительных показателя: среднюю длину траектории и отношение между количеством траекторий, оборванных в ε -окрестности куба U_s и сферы C_s , соответственно. Кроме того, мы приводим значение коэффициента уменьшения дисперсии (variance reduction factor, VRF), высчитываемого как отношение

² В зарубежной литературе этот эффект имеет распространённое название *bias-variance tradeoff*.

средней дисперсии Монте-Карло к средней дисперсии гибридного метода. Так, если количество внешних повторов для обоих алгоритмов равно r , то мы имеем две выборки, $(\sigma_{MC,1}^2, \dots, \sigma_{MC,r}^2)$ и $(\sigma_{HQM,1}^2, \dots, \sigma_{HQM,r}^2)$. В этом случае мы определим показатель VRF как отношение выборочных средних $\mu(\sigma_{MC,1}^2, \dots, \sigma_{MC,r}^2) / \mu(\sigma_{HQM,1}^2, \dots, \sigma_{HQM,r}^2)$. Чтобы убедиться в том, что надёжность предлагаемого метода не носит случайный характер и что эффект уменьшения дисперсии не носит случайный характер, мы дополнительно проводим двухвыборочный t -критерий Стьюдента, проверяющий нулевую гипотезу о равенстве математических ожиданий. Полученное p -значение также указано в таблицах результатов работы алгоритмов.

Таблица 3.2: Сравнение методов решения задачи Дирихле, $s = 10$

| Контрольная величина | MC | HQMC |
|---|---------|----------|
| Среднее смещение | 31.93 | 29.06 |
| Средняя дисперсия | 17101.7 | 10727.5 |
| Средняя длина траекторий | 28.74 | 28.67 |
| Средняя доля траекторий на границе куба | 0.65 | 0.65 |
| VRF относительно Монте-Карло | — | 1.59 |
| p-value | — | $< 1E-9$ |

Первый запуск сравниваемых алгоритмов проведём для размерности $s = 10$. Результаты его работы представлены в таблице 3.2. Отметим, что и смещение, и дисперсия уменьшены по сравнению с базовым Монте-Карло, причём результат уменьшения дисперсии статистически значим. Вспомогательные контрольные величины свидетельствуют о том, что распределение выхода траекторий на границу области соблюдено.

Таблица 3.3: Сравнение методов решения задачи Дирихле, $s = 20$

| Контрольная величина | MC | HQMC |
|---|------------|----------|
| Среднее смещение | 111.91 | 73.75 |
| Средняя дисперсия | 5928411.33 | 530632.9 |
| Средняя длина траекторий | 64.58 | 64.29 |
| Средняя доля траекторий на границе куба | 0.72 | 0.72 |
| VRF относительно Монте-Карло | — | 11.17 |
| p-value | — | 0.00026 |

Случай $s = 20$ отражён таблицей 3.3. Задача подобрана таким образом, что с ростом размерности она становится всё более и более тяжёлой (в плане смещения и дисперсии) для базового Монте-Карло. Тем не менее, выигрыш от применения гибридного метода только растёт, что видно по величинам смещения и VRF.

Третья глава диссертационной работы представляет идею о гибридном расслоении на основе двоичного представления чисел с плавающей точкой. Показано, что квазислучайная последовательность (в особенности, (t, s) -последовательность) может быть рандомизирована таким образом, чтобы получить расслоенную выборку, при этом степень сохранения исходной структуры

гибко контролируется параметром алгоритма. Приводится ряд утверждений о свойствах такой процедуры, и действие работы алгоритма иллюстрируется на конечных наборах точек Соболя и Холтона.

Представленный приём применяется в задаче численного интегрирования, где он может служить альтернативой процедуре скрэмблинга, и в задаче Дирихле для оператора Лапласа. При моделировании траекторий сферического процесса получено значительное уменьшение дисперсии при сохранении смещения, что является новой устойчивой и эффективной адаптацией квази-Монте-Карло.

Заключение

Итоги диссертационной работы

Исследование, изложенное в диссертационной работе, посвящено установлению связи между известными приёмами понижения дисперсии для метода Монте-Карло и методом квази-Монте-Карло. Перечислим основные научные результаты, изложенные в диссертации.

- 1) Получен новый класс случайных квадратурных формул, обладающих свойством точности для системы обобщённых функций Хаара. В общем виде получена дисперсия таких формул в нескольких эквивалентных формах. Доказано, что применение этого класса является новым универсальным способом понижения дисперсии.
- 2) Существующие результаты теории случайных квадратурных формул обобщены, уточнены и дополнены. Полностью изучен вопрос о дисперсии класса формул, точных для широкого класса систем со скользящим носителем.
- 3) Предложена новая вычислительная схема, основанная на полученном классе формул и рандомизированных квазислучайных последовательностях, которая может служить альтернативой стандартной процедуре. Изучен вопрос об оценивании погрешности при её использовании и установлен ряд важных свойств монотонности оценок.
- 4) Проведён ряд вычислительных экспериментов, подтверждающих эффективность предложенной схемы. Указан ряд случаев, в которых предлагаемый метод является более выигрышным с точки зрения скорости убывания дисперсии.
- 5) Разработан новый гибридный битовый метод рандомизации квазислучайных последовательностей. Показано, что гибкая параметризация позволяет использовать его как альтернативу традиционному расслоению.
- 6) Впервые представлена адаптация квази-Монте-Карло для метода „блуждания по сферам“, основанная на гибридной битовой рандомизации. Работа алгоритма продемонстрирована рядом численных экспериментов, в которых получено значительное уменьшение дисперсии по сравнению с традиционным методом Монте-Карло.

Рекомендации по применению результатов работы

Новый класс случайных квадратурных формул может быть использован для понижения дисперсии в методе Монте-Карло или для уточнения дисперсии рандомизированного квази-Монте-Карло. Важно отметить, что новые теоретические факты, дополняющие существующую теорию случайных кубатурных формул, могут быть использованы для поиска новых классов формул, обеспечивающих гарантированное уменьшение дисперсии.

Предложенный метод рандомизации квазислучайных последовательностей может рассматриваться как альтернатива существующим. В частности, если процедура скремблинга оказывается достаточно трудоёмкой с вычислительной точки зрения, то гибридная рандомизация может служить эффективной заменой при удачном выборе параметра k .

Уменьшение дисперсии при решении рассматриваемой задачи Дирихле может быть достигнуто для произвольной конфигурации, но эффективность предлагаемого метода оказывается особенно явно выраженной в высоких размерностях и при наличии особенностей вблизи границы области.

Перспективы дальнейшей разработки тематики

Для дальнейшего развития метода Qint одним из ключевых является вопрос о возможности уточнения выражения для дисперсии и процедуры её оценивания. В частности, известно, что (t,s) -последовательности обладают рядом дополнительных свойств равномерной распределённости. Формализация этих свойств в рамках процедуры Qint может привести к дополнительному выигрышу по сравнению как с Монте-Карло, так и квази-Монте-Карло. Кроме того, текущая реализация имеет ряд ограничений на (U_s, n) -разбиение и количество элементов такого разбиения. Снятие этих ограничений может значительно увеличить спектр применимости метода Qint.

Квазислучайная адаптация для метода „блуждания по сферам“ может быть улучшена путём нахождения автоматического способа калибровки параметров алгоритма. Это может привести к наблюдаемому уменьшению дисперсии и в более простых конфигурациях задачи Дирихле.

Список рисунков

| | | |
|------|--|----|
| 1.1 | Расслоенная выборка | 16 |
| 1.2 | Точки Холтона | 23 |
| 1.3 | Точки Соболя как $(0,2)$ -последовательность по основанию 2 | 25 |
| 2.1 | Первые шесть шагов правила бинарного рассечения, $s = 3$ | 59 |
| 2.2 | Произведение кубических полиномов, $s = 1$, без внешних повторов | 62 |
| 2.3 | Произведение кубических полиномов, $s = 1$, 16 внешних повторов | 63 |
| 2.4 | Произведение кубических полиномов, $s = 15$, без внешних повторов | 64 |
| 2.5 | Произведение кубических полиномов, $s = 15$, 16 внешних повторов | 65 |
| 2.6 | Плотность нормального распределения, $s = 2$, без внешних повторов | 66 |
| 2.7 | Плотность нормального распределения, $s = 3$, без внешних повторов | 67 |
| 2.8 | Плотность нормального распределения, $s = 4$, без внешних повторов | 68 |
| 2.9 | Плотность нормального распределения, $s = 20$, без внешних повторов | 69 |
| 2.10 | Плотность нормального распределения, $s = 20$, 16 внешних повторов | 70 |
| 2.11 | Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 1$, 16 внешних повторов | 71 |
| 2.12 | Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 2$, 16 внешних повторов | 71 |
| 2.13 | Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 30$, без внешних повторов | 72 |
| 2.14 | Функция „Морокофф-Кафлиш №1“, $s = 30$, 16 внешних повторов | 72 |
| 2.15 | Кусочно-линейная функция, $s = 3$, 16 внешних повторов | 73 |
| 2.16 | Кусочно-линейная функция, $s = 5$, 16 внешних повторов | 73 |
| 2.17 | Кусочно-линейная функция, $s = 10$, без внешних повторов | 74 |
| 2.18 | Кусочно-линейная функция, $s = 10$, 16 внешних повторов | 74 |
| 3.1 | Пример неравномерного разбиения двоичного гиперкуба | 77 |
| 3.2 | Распределение точек Монте-Карло | 83 |
| 3.3 | Распределение точек Соболя | 84 |
| 3.4 | Результат расслоения для $k = 3$, мелкие ячейки | 85 |
| 3.5 | Результат расслоения для $k = 2$, крупные ячейки | 86 |
| 3.6 | Результат расслоения для $k = 3$, крупные ячейки | 87 |
| 3.7 | Распределение точек Холтона | 88 |
| 3.8 | Результат расслоения (точки Холтона) для $k = 3$, мелкие ячейки | 89 |
| 3.9 | Гибридная битовая рандомизация, размерность $s = 5$ | 90 |
| 3.10 | Гибридная битовая рандомизация, размерность $s = 20$ | 91 |
| 3.11 | Конфигурация задачи Дирихле, размерность $s = 2$ | 95 |

Список таблиц

| | | |
|-----|---|----|
| 3.1 | Параметры алгоритмов моделирования сферического процесса и диапазоны рассматриваемых значений | 93 |
| 3.2 | Сравнение методов решения задачи Дирихле, $s = 10$ | 96 |
| 3.3 | Сравнение методов решения задачи Дирихле, $s = 20$ | 96 |

Список литературы

1. Крылов В.И. Приближенное вычисление интегралов. — Москва: Наука, 1967.
2. Бахвалов Н.С. Численные методы. — Москва: Наука, 1973.
3. Соболев С.Л. Введение в теорию кубатурных формул. — Москва: Наука, 1974.
4. Мысовских И.П. Лекции по методам вычислений. — СПб, 1998.
5. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. — Москва: Наука, 1982.
6. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. — Москва: Наука, 1975.
7. Cochran W.G. Sampling Techniques, 3rd Edition. — John Wiley, 1977.
8. Ермаков С.М., Золотухин В.Г. Полиномиальные приближения и метод Монте-Карло // *Теория вероятностей и её применения*. — 1960. — Т. 5, № 4. — С. 473–476.
9. Ермаков С.М. Случайные квадратурные формулы повышенной точности // *Журнал вычислит. матем. и матем. физики*. — 1964. — Т. 4, № 3. — С. 550–554.
10. Ермаков С.М. Письмо в редакцию // *Теория вероятностей и её применения*. — 1966. — Т. 11, № 4. — С. 728.
11. Handscomb D.C. Remarks on a Monte Carlo integration method // *Numer. Math.* — 1964. — Vol. 6, no. 1. — Pp. 261–268.
12. Грановский Б.Л., Ермаков С.М. Случайные квадратуры с частично фиксированными узлами // *Методы вычислений*. — 1970. — № 6. — С. 79–88.
13. Ермаков С.М. О допустимости процедур метода Монте-Карло // *ДАН СССР*. — 1967. — Т. 172, № 2. — С. 262–263.
14. Соболев И.М. Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. — Москва: Наука, 1969.
15. Соболев И.М. О распределении точек в кубе и приближенном вычислении интегралов // *Журнал вычислит. матем. и матем. физики*. — 1967. — Т. 7, № 4. — С. 784–802.

16. *Halton J.H.* On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals // *Numerische Mathematik*. — 1960. — Vol. 2, no. 1. — Pp. 84–90.
17. *Niederreiter H.* Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods. — Dover: Dover Publications, 2006.
18. *Антонов А.А., Ермаков С.М.* Эмпирическая оценка погрешности интегрирования методом квази Монте-Карло // *Вестник Санкт-Петербургского Университета. Сер. 1*. — 2014. — Т. 1(59), № 1. — С. 3–11.
19. *Антонов А.А.* Qint: алгоритм численного интегрирования методом квази Монте-Карло с апостериорной оценкой погрешности // *Вестник Санкт-Петербургского Университета. Сер. 1*. — 2015. — Т. 2(60), № 1. — С. 3–13.
20. *Antonov A.A., Ermakov S.M.* Random cubatures and quasi-Monte Carlo methods // *Monte Carlo Methods and Applications*. — 2015. — Vol. 21, no. 3. — Pp. 179–187.
21. *Колмогоров А.Н., Фомин С.В.* Элементы теории функций и функционального анализа. — Москва: Наука, 1976.
22. *Ширяев А.Н.* Вероятность. — 2-е изд. — Москва: Наука, 1989. — 640 с.
23. *Schürer R.* A Comparison between (Quasi-)Monte Carlo and Cubature Rule Based Methods for Solving High-dimensional Integration Problems // *Mathematics and Computers in Simulation*. — 2003. — Vol. 62, no. 3–6. — Pp. 509–517.
24. *Соболев И.М.* Многомерные интегралы и метод Монте-Карло // *ДАН СССР*. — 1957. — Т. 114, № 4. — С. 706–709.
25. *Гельфанд И.М., Фролов А.С., Ченцов Н.Н.* Вычисление континуальных интегралов методом Монте-Карло // *Известия вузов, сер. матем.* — 1958. — Т. 6, № 5. — С. 32–45.
26. *Розенталь Д.Э.* Справочник по правописанию и литературной правке. — 3-е, испр. изд. — Москва: Рольф, 2001.
27. *Соболев И.М.* Численные методы Монте-Карло. — Москва: Наука, 1973. — 311 с.
28. *Hickernell F. J.* A generalized discrepancy and quadrature error bound // *Math. Comp.* — 1998. — Vol. 67. — Pp. 299–322.
29. *Dick J., Pillichshammer F.* Digital Nets and Sequences. — New York: Cambridge University Press, 2010.
30. *Gnewuch M., Srivastav A., Winzen C.* Finding optimal volume subintervals with k points and calculating the star discrepancy are NP-hard problems // *J. Complexity*. — 2009. — Vol. 25. — Pp. 115–127.

31. *Lemieux C.* Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Sampling. — New York: Springer, 2009.
32. *Faure H.* Discrépance de suites associées à un système de numération (en dimension s) // *Acta Arithmetica*. — 1982. — Vol. 41, no. 4. — Pp. 337–351.
33. *Niederreiter H.* Point sets and sequences with small discrepancy // *Monatshefte für Mathematik*. — 1987. — Vol. 104, no. 4. — Pp. 273–337.
34. *Коробов Н.М.* Теоретико-числовые методы в приближенном анализе. — Москва: Физматгиз, 1963.
35. *Sloan I. H., Joe S.* Lattice Methods for Multiple Integration. — Oxford Science Publications, 1994.
36. *Nuyens D., Cools R.* Higher order quasi-Monte Carlo methods: A comparison. — 2010.
37. *Schürer R., Schmid W.* A Database for Optimal Net Parameters // *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2004*. — 2006. — Pp. 457–469.
38. *Антонов И.А., Салеев В.М.* Экономичный способ вычисления ЛП _{τ} -последовательностей // *Журнал вычислит. матем. и матем. физики*. — 1979. — Т. 19, № 1. — С. 252–256.
39. *Joe S., Kuo F.Y.* Constructing Sobol sequences with better two-dimensional projections // *SIAM Journal on Scientific Computing*. — 2008. — Vol. 30, no. 5. — Pp. 2635–2654.
40. *Dick J., Niederreiter H.* On the exact t -value of Niederreiter and Sobol' sequences // *J. Complexity*. — 2008. — Vol. 24. — Pp. 572–581.
41. *Bratley P., Fox B.L.* Algorithm 659: Implementing Sobol's quasirandom sequence generator // *ACM Transactions on Mathematical Software*. — 1988. — Vol. 14, no. 1. — Pp. 88–100.
42. *Schürer R.* HIntLib. — <http://mint.sbg.ac.at/HIntLib/>. — 2008.
43. *Owen A.B.* Randomly permuted (t, m, s) -nets and (t, s) -sequences // *Quasi-Monte Carlo in Scientific Computing*. — 1995. — Pp. 299–317.
44. *Owen A.B.* Scrambling Sobol' and Niederreiter-Xing Points // *Journal of Complexity*. — 1998. — Pp. 466–489.
45. *Owen A.B.* Scrambled net variance for integrals of smooth functions // *Annals of Statistics*. — 1997. — Vol. 25, no. 4. — Pp. 1541–1562.
46. *Haar A.* Zur Theorie der orthogonalen Funktionensysteme // *Math. Ann.* — 1910. — Vol. 69. — Pp. 331–371.
47. *Entacher K.* Generalized Haar function systems, digital nets and quasi-Monte Carlo integration // *Wavelet Applications III, Proc. SPIE 2762*. — 1996.

48. *Schauder J.* Eine Eigenschaft des Haarschen Orthogonalsystems // *Math. Z.* — 1928. — Vol. 28. — Pp. 317–320.
49. *Голубов Б.И.* Ряды по системе Хаара // *Итоги науки. Сер. Математика. Мат. анализ.* 1970. — 1971. — С. 109–146.
50. *Faber G.* Über die Orthogonalfunktionen des Herrn Haar // *Jahresberichte Deutsch. Math. Verein.* — 1910. — Vol. 19. — Pp. 104–112.
51. *Ульянов П.Л.* О рядах по системе Хаара // *Докл. АН СССР.* — 1963. — Т. 149, № 3. — С. 532–534.
52. *Ульянов П.Л.* О рядах по системе Хаара // *Матем. сб.* — 1964. — Т. 63(105), № 3. — С. 356–391.
53. *Sz.-Nagy B.* Approximation properties of orthogonal expansion // *Acta scient. math.* — 1953. — Vol. 15, no. 1. — Pp. 31–37.
54. *Голубов Б.И.* Абсолютная сходимость двойных рядов из коэффициентов Фурье–Хаара функций ограниченной p -вариации // *Изв. вузов. Матем.* — 2012. — № 6. — С. 3–13.
55. *Hellekalek P.* General discrepancy estimates III: the Erdos-Turan-Koksma inequality for the Haar function system // *Monatsh. Math.* — 1995. — Vol. 120. — Pp. 25–45.
56. *Entacher K.* Quasi-Monte Carlo methods for numerical integration of multivariate Haar series // *BIT.* — 1997. — Vol. 37, no. 4. — Pp. 846–861.
57. *Entacher K.* Quasi-Monte Carlo methods for numerical integration of multivariate Haar series II // *BIT.* — 1998. — Vol. 38, no. 2. — Pp. 283–292.
58. Programming Language C++ // *ISO International Standard ISO/IEC 14882:2014(E).* — 2014.
59. *R Core Team.* — R: A Language and Environment for Statistical Computing. — R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2015. <http://www.R-project.org/>.
60. *Christophe Dutang, Petr Savicky.* — randtoolbox: Generating and Testing Random Numbers, 2014. — R package version 1.16.
61. *Wickham Hadley.* ggplot2: elegant graphics for data analysis. — Springer New York, 2009. <http://had.co.nz/ggplot2/book>.
62. *Antonov A.A.* QINT2. — <https://github.com/tonytonov/QINT2>. — 2015.
63. *Genz A.* A Package for Testing Multiple Integration Subroutines // *Numerical Integration: Recent Developments, Software and Applications.* — 1987. — Vol. 203. — Pp. 337–340.

64. Morokoff W.J., Caflisch R.E. Quasi-Monte Carlo integration // *Journal of Computational Physics*. — 1995. — Vol. 122, no. 2. — Pp. 218–230.
65. Press W.H., Farrar G.R. Recursive stratified sampling for multidimensional Monte Carlo integration // *Computers in Physics*. — 1990. — Vol. 4. — Pp. 190–195.
66. Numerical Recipes in C / W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery. — Cambridge University Press, 1992.
67. Lepage G.P. A new algorithm for adaptive multidimensional integration // *Journal of Computational Physics*. — 1978. — Vol. 27. — Pp. 192–203.
68. Lepage G.P. VEGAS: An adaptive multi-dimensional integration routine: Tech. Rep. CLNS-80/447. — Ithaca, NY: Newman Laboratory of Nuclear Studies, Cornell University, 1980.
69. IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic // *IEEE Std. 754-2008*. — 2008.
70. Morokoff W.J., Caflisch R.E. A quasi-Monte Carlo Approach to Particle Simulation of the Heat Equation // *SIAM J. Numer. Anal.* — 1993. — Vol. 30, no. 6. — Pp. 1558–1573.
71. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. — Москва: Наука, 1981.
72. Müller M.E. Some continuous Monte Carlo methods for the Dirichlet problem // *Ann. Math. Statistics*. — 1956. — Vol. 27, no. 3. — Pp. 569–589.
73. Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. — Москва: Наука, 1984.
74. L'Ecuyer Pierre, Lécot Christian, Tuffin Bruno. A randomized quasi-Monte Carlo simulation method for Markov chains // *Operations Research*. — 2008. — Vol. 56, no. 4. — Pp. 958–975.
75. Marsaglia G. Choosing a Point from the Surface of a Sphere // *Operations Research*. — 1972. — Vol. 43, no. 2. — Pp. 645–646.