

А. В. Войтишек

**ЛЕКЦИИ ПО ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДАМ
МОНТЕ-КАРЛО**

В данном пособии предложен новый, методически обоснованный порядок представления материалов по теории методов Монте-Карло для студентов старших курсов бакалавриата и магистрантов естественнонаучных направлений классических и инженерных университетов. Представлены подходы к компьютерной реализации стандартных случайных чисел, алгоритмы численного моделирования случайных величин и векторов, методы построения весовых оценщиков (монте-карловских оценок) для задач численного интегрирования (включая приближения специальных сумм интегралов бесконечно возрастающей кратности, связанных с решением интегральных уравнений Фредгольма второго рода). Приведены важнейшие примеры практического использования алгоритмов метода Монте-Карло. Имеется большое количество иллюстративных примеров и упражнений.

Предисловие

В данном пособии предложен новый, методически обоснованный порядок представления материалов по теории методов Монте-Карло для студентов старших курсов бакалавриата и магистрантов естественнонаучных направлений классических и инженерных университетов.

В первых разделах 1–5 представлены основные идеи построения, реализации на компьютере и оптимизации простейшей схемы метода Монте-Карло. Здесь особое внимание уделено основным алгоритмам моделирования случайных величин и векторов, идеям рандомизации алгоритмов и способам уменьшения трудоемкости (на примере «методической» задачи приближенного вычисления многократного интеграла).

Далее в разделах 6–8 на примере простейшей односкоростной модели переноса излучения (частиц) рассмотрены проблемы компьютерного решения практически значимой задачи. Вводится аппарат марковских и произвольных интегральных уравнений Фредгольма второго рода и исследуется основной весовой оценщик (или монте-карловская оценка по столкновениям) и его приложения.

Наконец, в разделах 9–14 представлены детали алгоритмов численного моделирования случайных величин и векторов (включая вопросы построения и реализации генераторов стандартных случайных чисел). Особо отметим, что в данном учебнике существенно увеличено (по сравнению с известными пособиями по методам Монте-Карло) количество полезных иллюстративных примеров и упражнений.

В пособии введен ряд новых терминов и понятий, предлагаемых к широкому использованию: «мера управляемости численных итерационных процессов» (в приложении, в частности, к реализации на ЭВМ стандартных случайных чисел), «технологии построения моделируемых плотностей», «альтернативные методы широкого применения для моделирования случайных величин» (обобщающий термин для методов интегральной, дискретной суперпозиции и мажорантного метода исключения), «моделируемые аппроксимационные базисы», «вычисляемое моделируемое преобразование координат для случайного вектора», «прикладная цепь Маркова» и связанное с ним «марковское интегральное уравнение», «условная оптимизация численных алгоритмов», «дискретно-стохастические численные методы», и, наконец, «оценщик» (от англоязычного «*estimator*») вместо (или в качестве синонима) «монте-карловской оценки».

Материал пособия разбит на разделы. Предполагается, что при чтении соответствующего курса представление каждого раздела занимает приблизительно одну лекцию. В разделе 14 отмечено, что представленный там материал может служить основой для проведения семинаров (примерный план таких семинаров дан в приложении 3 данного пособия).

Материалы пособия опробованы автором при чтении потокового курса «Методы Монте-Карло» (4-й курс механико-математического факультета Новосибирского государственного университета, направление «Прикладная математика и информатика»), магистерского курса (на выбор) «Символьные и численные расчеты в физических приложениях» (магистратура физического факультета НГУ, первый год обучения), а также курса «Методы Монте-Карло (базовый курс) / Monte Carlo methods (basic course)» англоязычной магистерской программы ММФ НГУ «Численное статистическое моделирование / Numerical Statistical Modelling».

1. Развитие и основные области приложения численного статистического моделирования. Общая схема метода Монте-Карло

1.1. Разработка теории и приложений алгоритмов метода Монте-Карло. С развитием вычислительной техники возрастает роль численных методов решения прикладных задач. Важное место в этом процессе занимают *алгоритмы численного статистического моделирования* или *методы Монте-Карло*. Особое место этих методов связано с простотой и естественностью их распараллеливания с целью эффективного применения современных многопроцессорных компьютерных систем.

Под *численным статистическим моделированием* обычно понимают реализацию с помощью компьютера вероятностной модели того или иного объекта с целью оценивания изучаемых интегральных параметров (средних значений нужных характеристик) на основе закона больших чисел.

Исторически интенсивное развитие теории и приложений метода Монте-Карло было связано с разработкой численных моделей ядерных процессов (при создании соответствующих военных и технических устройств – бомб, реакторов и т.п.) в СССР и США в 50-е годы XX века.

Разработка теории метода связана с фундаментальными работами Дж. Неймана, С. Улама, Н. Метрополиса [1], Н. И. Бусленко [2], Дж. М. Хеммерсли [3], Дж. Спанье [4], И. М. Соболя [5], С. М. Ермакова [6, 7], Г. А. Михайлова [7–9], Г. И. Марчука [10], М. Кейлоса [11], К. К. Сабельфельда [12] и др.

В последние шестьдесят лет область применения численного статистического моделирования значительно расширилась. Была разработана содержательная *теория вероятностных представлений решений задач математической физики*. На базе этой теории были построены эффективные (экономичные) оценщики метода Монте-Карло.

Алгоритмы численного статистического моделирования конструируются и используются также для решения задач *статистической физики* (схема Метрополиса – Хастингса, модель Изинга и др.), *физической и химической кинетики* (многочастичные схемы, численные методы решения уравнений Больцмана и Смолуховского, моделирование реакций и фазовых переходов, построение вероятностных клеточных автоматов

и др.), *теории массового обслуживания* (марковские модели с пуассоновскими потоками заявок), *финансовой математики* (вероятностные формулы и итерационные процессы, алгоритмы решения стохастических дифференциальных уравнений и др.), *теории турбулентности, математической биологии* и т. д. Особое развитие получают также *численные модели случайных процессов и полей* (с применениями в метеорологии, физике атмосферы и океана и других областях), а также смешанные *рандомизированные проекционные и дискретно-стохастические* численные схемы (включая *функциональные алгоритмы*).

1.2. Новосибирская школа методов Монте-Карло. В России (и в Советском Союзе) наиболее интенсивное развитие теории и приложений алгоритмов численного статистического моделирования происходило в Санкт-Петербурге (*группа профессора С. М. Ермакова*) и Москве (*группа профессора И. М. Соболя*); можно упомянуть также ряд разработок в закрытых ядерных центрах страны.

Однако лидирующую роль в России (и, пожалуй, в мире) занимает группа ученых, неформально объединенных в *Отдел статистического моделирования в физике* (СМФ) (три лаборатории) *Института вычислительной математики и математической геофизики* (ИВМиМГ, бывшего Вычислительного центра) *Сибирского отделения Российской Академии наук* в Новосибирске. Именно этой группе принадлежит значительная часть перечисленных выше новых результатов в теории и приложениях метода Монте-Карло.

Отдел СМФ был создан по инициативе академика *Г. И. Марчука*, который в середине 60-х годов XX столетия пригласил в новосибирский Академгородок выдающегося ученого *Геннадия Алексеевича Михайлова*, который собрал и возглавил (и до сих пор возглавляет) коллектив новосибирских специалистов по методам Монте-Карло.

В отделе продолжают работать и получать заметные результаты в теории и приложениях численного статистического моделирования такие известные специалисты как *К. К. Сабельфельд, Б. А. Каргин, С. М. Пригарин, В. А. Огородников, А. В. Войтишек, С. В. Рогазинский, С. А. Ухинов, В. С. Антюфеев, М. А. Марченко, С. А. Гусев, Т. А. Аверина, И. А. Шалимова, Е. В. Шкарупа, Г. З. Лотова, А. И. Левыкин, И. Н. Медведев, О. А. Махоткин, А. В. Бурмистров, Е. Г. Каблукова, М. А. Коротченко, Н. В. Трачева, Н. А. Каргаполова, А. Е. Киреева, О. С. Ухинова* и др.

К слову, при чтении данного курса целесообразно представлять дополнительную лекцию, включающую обзор задач, исследованных и ис-

следуемых в новосибирской школе численного статистического моделирования.

1.3. О преподавании теории и приложений методов Монте-Карло в НГУ. Практически все перечисленные сотрудники отдела СМФ ИВМиМГ СО РАН работают по совместительству в высших учебных заведениях Новосибирска, в первую очередь, в Новосибирском государственном университете. На механико-математическом факультете НГУ была разработана и реализована (в том числе на английском языке) *специальная магистерская программа «Численное статистическое моделирование / Numerical Statistical Modelling»* (руководитель – проф. А. В. Войтишек). Кроме того, на механико-математическом и физическом факультетах НГУ читаются многочисленные обязательные и специальные курсы по методам Монте-Карло. Большое количество студентов и аспирантов НГУ специализируются и проводят исследования по численному статистическому моделированию в отделе СМФ ИВМиМГ СО РАН.

Особо отметим, что в данном курсе (и в данном пособии) представлены лишь основы теории и возможных приложений алгоритмов численного статистического моделирования. Для более глубокого изучения этой тематики можно воспользоваться как многочисленными пособиями и монографиями, разработанными сотрудниками отдела СМФ ИВМиМГ СО РАН (укажем прежде всего учебник [9]), так и непосредственными консультациями у перечисленных выше сотрудников (вплоть до специализации по методам Монте-Карло).

1.4. Общая схема метода Монте-Карло. Понятие оценителя (монте-карловской оценки). В самом общем виде *схема метода Монте-Карло* выглядит следующим образом (см., например, [9, 13]).

Пусть требуется приблизительно вычислить на компьютере некоторую величину I . Предполагается, что можно построить (выбрать) случайную величину ζ , математическое ожидание $\mathbf{E}\zeta$ которой равно I (или достаточно близко к этой величине), дисперсия $\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}(\zeta - \mathbf{E}\zeta)^2$ конечна, и кроме того, *выборочные значения ζ_i случайной величины ζ могут быть достаточно эффективно (экономично) численно смоделированы (реализованы на компьютере).*

Здесь и далее греческая буква с нижним индексом (например, ζ_i) обозначает смоделированное выборочное значение, в то время как эта же буква без индекса (например, ζ) обозначает саму моделируемую случайную величину.

АЛГОРИТМ 1.1 (см., например, [9, 13]). Численно моделируем (реализуем на компьютере) достаточно большое количество n выборочных значений ζ_1, \dots, ζ_n случайной величины ζ и, используя **закон больших чисел** (утверждение 1.1), получаем приближение требуемой величины:

$$I = \mathbf{E}\zeta \approx Z_n = \frac{S_n}{n}, \quad \text{где } S_n = \zeta_1 + \dots + \zeta_n. \quad (1.1)$$

Повторение (см., например, [14]). УТВЕРЖДЕНИЕ 1.1 (закон больших чисел в форме Хинчина). Пусть $\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}, \dots$ – это последовательность независимых одинаково распределенных случайных величин, имеющих математическое ожидание $\mathbf{E}\zeta^{(i)} = \hat{I}$ и $\hat{S}_n = \zeta^{(1)} + \dots + \zeta^{(n)}$. Тогда $\hat{S}_n/n \rightarrow \hat{I}$ при $n \rightarrow \infty$.

В русскоязычной литературе по методам Монте-Карло (см., например, [2, 5–13]) базовая случайная величина ζ называется *оценкой величины* I (в англоязычной литературе используется термин «*estimator*», реже – «*estimate*»).

Таким образом, понятие *оценки* в этих книгах отличается от соответствующего термина в математической статистике (см., например, [15]), где уже среднее арифметическое $Z_n = S_n/n$ из соотношения (1.1) называется *оценкой величины* I .

В данном пособии, во избежание путаницы, случайная величина ζ , математическое ожидание которой равно интересующей нас величине I , будет называться **оценивателем** (это буквальный перевод англоязычного термина «*estimator*») или **монте-карловской оценкой** величины I , в то время как выборочное среднее $Z_n = S_n/n$ будет называться **статистической оценкой** величины $\mathbf{E}\zeta = I$.

Чаще всего оцениватель ζ из соотношения (1.1) имеет вид

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

где $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ – это случайный вектор или отрезок последовательности случайных величин с заданными распределениями, а $q(\mathbf{x})$ – функция (неслучайная) d переменных.

Здесь и далее понятие *случайный вектор* (которое, как правило, не используется в классической теории вероятностей – см., например, [14]) обозначает многомерную (конкретнее, d -мерную) случайную величину, состоящую из d одномерных случайных величин (или просто – *случайных величин*) $\xi^{(j)}$, $j = 1, \dots, d$.

По поводу сформулированного основного алгоритма 1.1 возникают следующие вопросы.

ПРОБЛЕМА 1.1. *Насколько велик класс практически значимых величин I , допускающих представление $I = \mathbf{E}\zeta$ (см. соотношение (1.1))?*

ПРОБЛЕМА 1.2. *Является ли выбор оценителя ζ единственным? Если нет, то как оптимизировать этот выбор?*

ПРОБЛЕМА 1.3. *Какова скорость сходимости алгоритма при росте числа n выборочных значений ζ_1, \dots, ζ_n ?*

ПРОБЛЕМА 1.4. *Как смоделировать выборочные значения ζ_1, \dots, ζ_n на компьютере?*

В первых двух разделах данного пособия будут даны ответы на поставленные вопросы.

1.5. Использование обобщенной формулы математического ожидания. Рассмотрим проблему 1.1. Прежде всего заметим, что для оценителя ζ вида (1.2) справедлива следующая обобщенная формула математического ожидания (см., например, [14]):

$$I = \mathbf{E}\zeta = \int q(\mathbf{x})f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (1.3)$$

где $f_{\xi}(\mathbf{x}) = f_{\xi}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$ – это плотность распределения случайного вектора ξ .

Повторение (см., например, [14]). **ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.1.** *Распределение многомерной случайной величины (случайного вектора) $\xi = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ в области $G \subseteq \mathbb{R}^d$ является абсолютно непрерывным, если существует функция $f_{\xi}(\mathbf{x}) = f_{\xi}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$ такая, что для любого борелевского множества $A \subseteq \mathbb{R}^d$ справедливо выражение для вероятности*

$$\mathbf{P}\{\xi \in A\} = \int_A f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (1.4)$$

В этом случае функция $f_{\xi}(\mathbf{x})$ называется **плотностью распределения** вектора ξ .

ЗАМЕЧАНИЕ 1.1. Плотность $f_{\xi}(\mathbf{x})$ однозначно определена «почти всюду» (но в случае, когда предполагается непрерывность или кусочная непрерывность, определение функции $f_{\xi}(\mathbf{x})$ становится однозначным). Кроме того, эта функция обладает следующими **свойствами**:

$$\int_G f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1; \quad (1.5)$$

$$f_{\xi}(x) \geq 0 \text{ для } x \in G \text{ и } f_{\xi}(x) = 0 \text{ для } x \notin G. \quad (1.6)$$

Для представления плотности в дальнейшем будет использоваться запись

$$f_{\xi}(x) = S(x), \quad x \in G,$$

где $S(x)$ – некоторое аналитическое выражение. В этой записи дается только ненулевая (положительная) составляющая плотности на области распределения случайного вектора ξ .

Также в дальнейшем мы будем достаточно часто использовать следующий одномерный аналог формулы (1.4) для случая, когда $G = (a, b)$, а борелевское множество A представляет собой интервал (c, d) :

$$\mathbf{P}\{\xi \in (c, d)\} = \int_c^d f_{\xi}(x) dx \quad (1.7)$$

(рис. 1.1).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.2. Из соотношения (1.7) следует, что с точностью до бесконечно малых второго порядка выполнено равенство

$$\mathbf{P}\{\xi \in dx\} = f_{\xi}(x) dx,$$

где dx обозначает бесконечно малую окрестность точки x (см. далее соотношение (2.9)). Последнее соотношение иногда используется в качестве определения вероятностной плотности распределения $f_{\xi}(x)$.

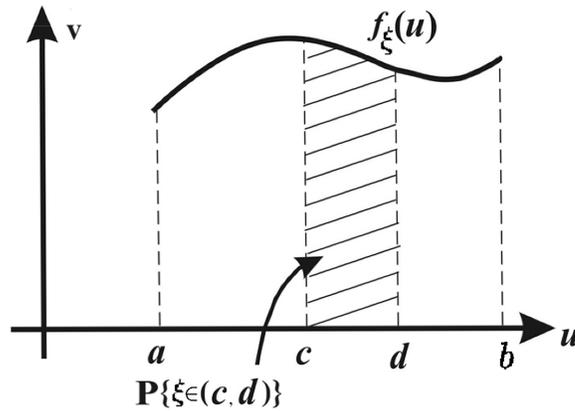


Рис. 1.1. Иллюстрация к определению плотности случайной величины ξ

1.6. Приближенное вычисление интеграла методом Монте-Карло. В связи с соотношением (1.3), с математической точки зрения теория методов Монте-Карло является *специальным разделом теории численного интегрирования* (см., например, [16]).

Действительно, наиболее известным примером использования метода Монте-Карло является *задача приближенного вычисления интеграла*

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}; \quad X \subseteq \mathbb{R}^d.$$

Выберем плотность распределения $f_{\xi}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, случайного вектора ξ так, что $f_{\xi}(\mathbf{x}) > 0$ для $g(\mathbf{x}) \neq 0$ и выборочные значения ξ_1, \dots, ξ_n могут быть достаточно просто смоделированы на компьютере. Тогда из соотношений (1.1)–(1.3) вытекает следующий алгоритм.

АЛГОРИТМ 1.2 (см., например, [9, 13]). *Численно приближаем интеграл I следующим образом:*

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_X \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})} f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta \approx \frac{1}{n} \left(\frac{g(\xi_1)}{f_{\xi}(\xi_1)} + \dots + \frac{g(\xi_n)}{f_{\xi}(\xi_n)} \right), \quad (1.8)$$

где $\zeta = q(\xi) = g(\xi)/f_{\xi}(\xi)$ и ξ_1, \dots, ξ_n – это выборочные значения случайного вектора ξ , смоделированные на компьютере согласно выбранной плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$.

Равенства (1.8) отражают принцип построения *весового оценителя (монте-карловской оценки) интеграла I* .

Достаточно очевидным является то обстоятельство, что вариант выбора плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ (а значит, и случайных величин ξ и $\zeta = q(\xi)$) не является единственным (см. выше проблему 1.2).

При выборе плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ в алгоритме 1.2 (и случайной величины ζ в общем алгоритме 1.1) используется следующий *корректный и естественный критерий оптимальности алгоритмов*.

КРИТЕРИЙ 1.1. *Лучшим (наиболее эффективным, экономичным) является тот алгоритм, который позволяет получить заданный уровень погрешности за меньшее компьютерное время.*

Из последних рассуждений следует, что сформулированная выше проблема 1.2 связана с исследованием погрешностей численных схем типа алгоритмов 1.1 и 1.2, то есть с проблемой 1.3 (см. далее подразделы 1.7, 1.8).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.3. Далеко не во всех исследованиях тех или иных численных алгоритмов используется критерий 1.1. Например, в теории *сеточных* схем численного интегрирования (см., например, [16]) считается лучшим тот алгоритм, который дает более высокую степень k в множителе h^k (здесь h – максимальный размер шага по всем компонентам прямоугольной сетки), входящем в верхнюю границу погрешности алгоритма; при этом не учитывается, какой ценой дается увеличение степени k . Такой подход может быть не совсем корректным с позиций критерия 1.1.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.4. Проблема приближенного вычисления интеграла и соответствующий алгоритм 1.2 считаются «методически полезными» (но не слишком актуальными с точки зрения современных прикладных проблем) *применениями метода Монте-Карло*. Гораздо более широко методы численного статистического моделирования применяются для *вычисления линейных функционалов от решений интегральных уравнений Фредгольма второго рода*, связанных с прикладными марковскими процессами (см., в частности, [9, 13], а также разделы 6–8 данного пособия). В этих задачах соответствующие оценщики ζ и численные схемы типа алгоритма 1.1 строятся для приближения *бесконечных сумм интегралов* вида

$$I_h = \sum_{m=0}^{\infty} (K^m f, h), \quad (1.9)$$

$$(K^m f, h) = \int_X \dots \int_X \left[f(y^{(0)}) k(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \dots \right. \\ \left. \times k(y^{(m-1)}, y^{(m)}) h(y^{(m)}) \right] dy^{(0)} dy^{(1)} \dots dy^{(m-1)} dy^{(m)}, \quad (1.10)$$

где $f(y)$, $h(y)$, $k(x, y)$ – некоторые заданные функции (см. раздел 7).

1.7. Построение доверительного интервала с помощью центральной предельной теоремы. Займемся вопросом оценки *погрешности алгоритма* 1.1, которая имеет вид

$$\delta_n = |I - Z_n| = \left| \frac{S_n - nI}{n} \right|$$

(см. проблему 1.3). Здесь можно воспроизвести следующие простые рассуждения из математической статистики (см., например, [15]).

Погрешность δ_n может быть представлена в виде

$$\delta_n = \left| \frac{S_n - nI}{n} \right| = \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}} \left| \frac{S_n - n\mathbf{E}\zeta}{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}\sqrt{n}} \right|. \quad (1.11)$$

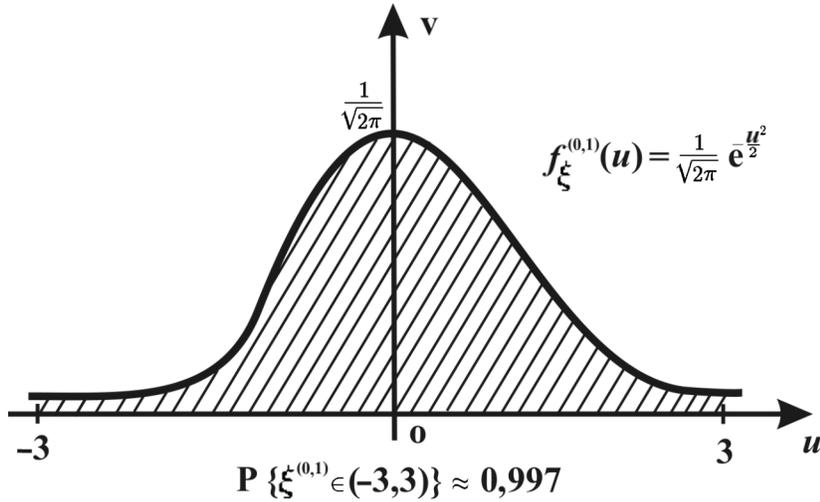


Рис. 1.2. Иллюстрация к «правилу трех сигма»

Повторение (см., например, [14]). **УТВЕРЖДЕНИЕ 1.2** (центральная предельная теорема для одинаково распределенных случайных величин). Пусть $\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}, \dots$ является последовательностью независимых одинаково распределенных случайных величин, которые имеют конечное математическое ожидание $\mathbf{E}\zeta^{(i)} = \hat{I}$ и конечную отличную от нуля дисперсию $0 < \mathbf{D}\zeta^{(i)} = \sigma^2 < +\infty$. Рассмотрим также последовательность случайных величин

$$\Xi^{(n)} = \frac{\hat{S}_n - n\hat{I}}{\sigma\sqrt{n}}, \quad \text{где } \hat{S}_n = \zeta^{(1)} + \dots + \zeta^{(n)}.$$

Тогда $\Xi^{(n)}$ сходится по распределению при $n \rightarrow \infty$ к **стандартной нормальной (гауссовской) случайной величине** $\xi^{(0,1)}$, имеющей плотность распределения

$$f_{\xi}^{(0,1)}(u) = \frac{e^{-\frac{u^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}, \quad -\infty < u < +\infty \quad (1.12)$$

(рис. 1.2).

Сходимость по распределению означает сходимость функций распре-

деления:

$$F_{\Xi_n}(x) = \mathbf{P}\{\Xi_n < x\} \rightarrow \Phi(x) = F_{\xi}^{(0,1)}(x) = \mathbf{P}\{\xi^{(0,1)} < x\} = \int_{-\infty}^x \frac{e^{-\frac{u^2}{2}} du}{\sqrt{2\pi}}.$$

Стандартная нормальная (гауссовская) величина $\xi^{(0,1)}$ известна как случайная величина, *практически не принимающая больших значений*. В частности, на практике широко применяется «правило трех сигма», означающее, что $\mathbf{P}\{-3 < \xi^{(0,1)} < 3\} = \int_{-3}^{+3} (1/\sqrt{2\pi}) \exp(-u^2/2) du \approx 0,997$ (рис. 1.2).

Из соотношения (1.11) и утверждения 1.2 получаем, что для любого малого $\varepsilon > 0$ найдется константа H_ε такая, что для достаточно большого $n \gg 1$ может быть построен следующий *доверительный интервал для погрешности* δ_n (см., например, [15]):

$$\mathbf{P}\left\{\delta_n \leq H_\varepsilon \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}}\right\} \approx \mathbf{P}\left\{|\xi^{(0,1)}| < H_\varepsilon\right\} \geq 1 - \varepsilon. \quad (1.13)$$

Например, для $\varepsilon = 0,003$ имеем $H_\varepsilon \approx 3$ (что соответствует «правилу трех сигма»).

1.8. Низкая скорость сходимости и «универсальность» метода Монте-Карло. Соотношение (1.13) означает, что *скорость сходимости метода Монте-Карло по числу n выборочных значений $\{\zeta_i\}$* (см. алгоритмы 1.1 и 1.2) *определяется формулой $n^{-1/2}$* (это ответ на вопрос сформулированной выше проблемы 1.3).

Таким образом, *эта скорость сходимости относительно невысока* (это определяет основной недостаток метода Монте-Карло). Чтобы получить следующий десятичный знак в мантиссе величины I (т. е. уменьшить примерно в десять раз погрешность δ_n), нужно численно моделировать в сто раз больше выборочных значений $\{\zeta_i\}$. Поэтому в практических расчетах число n берется весьма большим, а учитывая тот факт, что получение каждого ζ_i , как правило, является трудоемким (см., например, [9, 13], а также следующий раздел 2), можно констатировать, что методы Монте-Карло являются весьма «тяжеловесными» (затратными).

Для сравнения заметим, например, что *уровень погрешности* вычисления однократного интеграла $I = \int_a^b g(x) dx$ (здесь $d = 1$) с гладкой подынтегральной функцией $g(x)$ с помощью простейшего *метода*

центральных прямоугольников

$$I \approx h \times \sum_{i=1}^n g\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right); \quad x_i = a + (i-1)h; \quad h = \frac{b-a}{n} \quad (1.14)$$

(это вариант интегральной суммы – рис. 1.3) определяется соотношением n^{-2} (на четыре порядка лучше, чем у алгоритма 1.2; см., например, [16]).

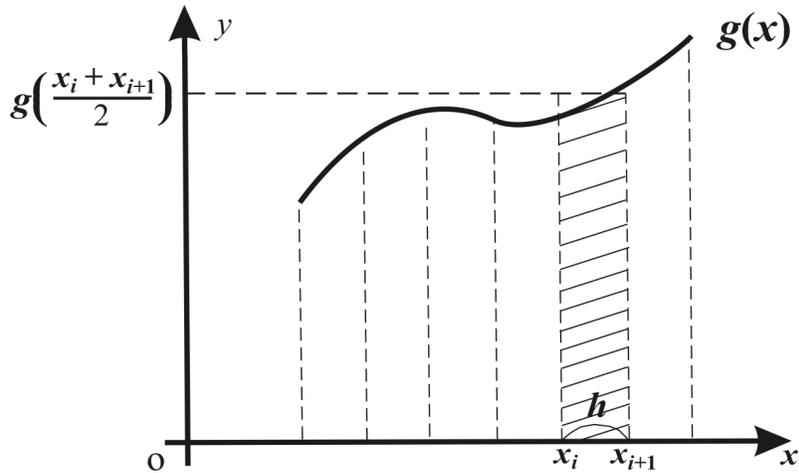


Рис. 1.3. Иллюстрация к формуле центральных прямоугольников

Погрешность чуть более «хитрой» формулы Симпсона

$$I \approx \frac{h}{6} \times \sum_{i=1}^n \left[g(x_i) + 4g\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + g(x_{i+1}) \right] \quad (1.15)$$

имеет порядок n^{-3} (см., например, [16]), и т. д.

Методы (1.14), (1.15) отражают частные случаи *квадратурных формул Ньютона – Котеса*, которые строятся с помощью соответствующих полиномиальных сеточных приближений подынтегральной функции $g(x)$. Хорошо известно (см., например, [16]), что при переходе к многомерному случаю и при рассмотрении негладких подынтегральных функций $g(\mathbf{x})$ построение «хороших» (в смысле скорости сходимости) сеточных *кубатурных формул* существенно затрудняется.

В свою очередь, *порядок сходимости* $n^{-1/2}$ *метода Монте-Карло* (алгоритма 1.2) *не зависит от размерности* d (этот порядок сохраняется даже при приближении бесконечных сумм интегралов вида (1.9), (1.10)). Свойства подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$ (в том числе гладкость) влияют только на величину дисперсии $\mathbf{D}\zeta$ из соотношения (1.13).

Поэтому «нишей» алгоритмов численного статистического моделирования считаются многомерные задачи со сложными (например, негладкими) входными данными (а таких задач на практике довольно много, если не большинство). В частности, при численном приближении интеграла $I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$, $X \subseteq \mathbb{R}^d$, считается, что

- для размерностей $1 \lesssim d \lesssim 3$ целесообразно использовать детерминированные кубатурные формулы (типа приближений (1.14), (1.15));
- для размерностей $d \gtrsim 10$ (включая задачи бесконечной размерности типа (1.9), (1.10)) практически не имеет конкурентов метод Монте-Карло (алгоритм 1.2);
- для размерностей $3 \lesssim d \lesssim 10$ можно использовать *дискретно-стохастические методы* численного интегрирования [17].

1.9. Затраты и трудоемкость метода Монте-Карло. Важным преимуществом метода Монте-Карло является относительная простота подсчета затрат (а это, в свою очередь, следствие простоты схемы (1.1)), что существенно упрощает применение «корректного» оптимизационного критерия 1.1.

Вычислительные затраты метода Монте-Карло (см. алгоритмы 1.1, 1.2) близки к времени вычисления суммы S_n и приблизительно равны величине

$$s = t \times n, \quad (1.16)$$

где t – это *среднее время подсчета одного выборочного значения* ζ_i *случайной величины* $\zeta = q(\xi)$ (слово «среднее» здесь является принципиальным!).

Из многочисленных практических расчетов известно, что формула

$$\delta_n \sim H \times \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}} \quad (1.17)$$

определяет поведение погрешности δ_n , при этом константа H невелика. Проведенные нами аккуратные тестовые вычисления дали значение $H \approx 0,80\dots$ – точно устанавливаются только две первые десятичные цифры мантииссы.

Отсюда получается, что при заданном уровне погрешности Δ дисперсия $\mathbf{D}\zeta$ пропорциональна числу выборочных значений n . Действительно, из равенства

$$H \times \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}} = \Delta \text{ следует соотношение } n = \left(\frac{H}{\Delta}\right)^2 \times \mathbf{D}\zeta.$$

Это обосновывает возможность использования вместо затрат s из (1.16) пропорциональной ей, более практичной и информативной величины

$$S = t \times \mathbf{D}\zeta. \quad (1.18)$$

Величина (1.18) называется *трудоемкостью метода Монте-Карло* и используется для формулировки следующего аналога сформулированного выше критерия 1.1.

КРИТЕРИЙ 1.2 (см., например, [9, 13]). *В алгоритмах метода Монте-Карло лучшим (оптимальным) является тот выбор случайной величины $\zeta = g(\xi)$ (для алгоритма 1.1) или плотности распределения $f_{\xi}(\mathbf{x})$ вектора ξ (для алгоритма 1.2), который дает меньшее значение трудоемкости S из (1.18).*

Критерий 1.2 дает ответ на вопрос из сформулированной выше проблемы 1.2.

Как правило, уменьшение величины t из (1.18) связано с оптимизацией моделирования случайного вектора ξ (см., например, [9, 13], а также раздел 2).

Методы уменьшения дисперсии $\mathbf{D}\zeta$ случайной величины $\zeta = g(\xi)/f_{\xi}(\xi)$ из соотношения (1.8) кратко представлены в разделах 3–5 данного пособия (см. также книги [5, 9, 17]).

1.10. Оценивание трудоемкости с помощью предварительных расчетов. Иногда использование критерия 1.2 подвергается критике по той причине, что величины t и $\mathbf{D}\zeta$ из соотношения (1.18) неизвестны. Тем не менее, эти величины могут быть достаточно просто оценены с помощью предварительных компьютерных расчетов (до использования алгоритмов 1.1 и 1.2 с большим количеством $n \gg 1$ выборочных значений $\{\zeta_i\}$).

В частности, можно смоделировать относительно малое количество $\hat{n} \ll n$ выборочных значений $\{\zeta_i; i = 1, \dots, \hat{n}\}$ и построить следующее приближение для среднего времени t :

$$t \approx \frac{1}{\hat{n}} \sum_{i=1}^{\hat{n}} \hat{t}_i, \quad (1.19)$$

где \hat{t}_i – время вычисления выборочного значения ζ_i .

Эти же выборочные значения $\zeta_1, \dots, \zeta_{\hat{n}}$ можно использовать и для оценивания неизвестной величины $\mathbf{D}\zeta$ из соотношения (1.18). Простейшее **приближение дисперсии** $\mathbf{D}\zeta$ может быть получено с помощью формул (1.1), (1.3) для $\mathbf{x} = x$ и $q(x) = x^2$:

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}\zeta^2 - (\mathbf{E}\zeta)^2 \approx \mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} = \frac{1}{\hat{n}} \sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i^2 - \left(\frac{1}{\hat{n}} \sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i \right)^2; \quad (1.20)$$

см., например, [15].

Если трактовать $\zeta_1, \dots, \zeta_{\hat{n}}$ из соотношения (1.20) как независимые одинаково распределенные (как ζ) случайные величины, то справедливо равенство

$$\mathbf{E}\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} = \left(1 - \frac{1}{\hat{n}}\right) \mathbf{D}\zeta. \quad (1.21)$$

Действительно, имеем $\mathbf{E}\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} = \mathbf{E}\zeta^2 - \mathbf{E}(S_{\hat{n}}/\hat{n})^2 = \mathbf{D}\zeta - \mathbf{D}(S_{\hat{n}}/\hat{n})$, так как $\mathbf{E}(S_{\hat{n}}/\hat{n}) = \mathbf{E}\zeta$. Учитывая, что $\mathbf{D}(S_{\hat{n}}/\hat{n}) = \mathbf{D}\zeta/\hat{n}$, получаем равенство (1.21).

Соотношение (1.21) означает, что полученная *статистическая оценка дисперсии* $\mathbf{D}\zeta$ является *смещенной и состоятельной* (см., например, [15]): $\mathbf{E}\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} \neq \mathbf{D}\zeta$, но $\mathbf{E}\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)} \rightarrow \mathbf{D}\zeta$ при $\hat{n} \rightarrow \infty$.

Разделим $\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(1)}$ на $(1 - 1/\hat{n})$ и рассмотрим величину

$$\mathbf{D}_{\hat{n}}^{(2)} = \frac{1}{\hat{n} - 1} \sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i^2 - \frac{1}{\hat{n}(\hat{n} - 1)} \left(\sum_{i=1}^{\hat{n}} \zeta_i \right)^2, \quad (1.22)$$

которая является *несмещенной статистической оценкой дисперсии* $\mathbf{D}\zeta$ (см., например, [15]).

На практике при приближении дисперсии $\mathbf{D}\zeta$ из соотношения (1.18) по выборочным значениям $\{\zeta_i; i = 1, \dots, \hat{n}\}$ используют обе статистические оценки (1.21) и (1.22) (они, как правило, дают близкие значения дисперсии).

1.11. Простейшая параллелизация вычислений по методу Монте-Карло. Отметим, что *использование K независимых (и, вообще говоря, не одинаковых по производительности) процессоров на современных компьютерных системах для вычислений по методу Монте-Карло дает эффект, близкий к идеальному*, так как для фиксированного времени счета T может быть использован следующий аналог формулы (1.1):

$$I \approx \frac{\tilde{S}_{n_1(T)}(T) + \dots + \tilde{S}_{n_K(T)}(T)}{n_1(T) + \dots + n_K(T)}. \quad (1.23)$$

Здесь $\tilde{S}_{n_k(T)}(T)$ – это сумма $n_k(T)$ выборочных значений $\{\zeta_i\}$, которая может быть независимо вычислена на k -ом процессоре современного многопроцессорного компьютера за время T .

Вообще у автора пособия сформировалось устойчивое убеждение в том, что *вычислительный алгоритм тем эффективнее распараллеливается для вычислений на современной многопроцессорной технике, чем ближе он к процедуре суммирования независимых слагаемых*. Остается заметить, что именно такое суммирование и является основным элементом алгоритмов 1.1 и 1.2.

1.12. Преимущества и недостатки метода Монте-Карло. Суммируя приведенные в этом разделе соображения (а также учитывая материалы последующих разделов), можно сформулировать следующие преимущества и недостатки методов Монте-Карло.

К *преимуществам алгоритмов численного статистического моделирования* относятся:

- возможность решения многомерных (в том числе бесконечномерных) задач численного интегрирования со сложными (в том числе негладкими) начальными данными;
- возможность решения задач со случайными параметрами на основе принципа рандомизации (см. раздел 3), в том числе возможность моделирования траекторий прикладных случайных процессов и полей (см. раздел 13);
- возможность учета специальных свойств начальных данных (в частности, с помощью принципа выборки по важности – см. раздел 4);
- универсальная (хотя и невысокая) скорость сходимости (порядка $1/\sqrt{n}$ по числу выборочных значений $\{\zeta_i; i = 1, \dots, n\}$);
- корректная теория оптимизации метода (см. критерии 1.1, 1.2);
- естественная и практически идеальная параллелизация основной схемы метода.

Главным *недостатком методов Монте-Карло* следует назвать некоторую «тяжеловесность» (неэкономичность) вычислений, которая, в свою очередь связана с:

- относительно медленной сходимостью метода (порядка $1/\sqrt{n}$);
- трудоемким получением каждого выборочного значения ζ_i (во всяком случае для «серьезных» прикладных задач, для которых среднее время t из (1.18) может быть значительным; см., в частности, разделы 2 и 6).

2. Численное моделирование случайных векторов, метод обратной функции распределения: обоснование алгоритмов, основные приложения

2.1. Теорема о разложении совместной плотности распределения двумерного случайного вектора. Для многих разделов теории методов Монте-Карло (таких как *моделирование случайных векторов* – см. подраздел 2.3 – и *прикладных цепей Маркова* – см. подраздел 2.7; обоснование *метода суперпозиции* и *мажорантного метода исключения* – см. разделы 3, 11; построение *метода математических ожиданий* и *метода расщепления* – см. раздел 3) важны соображения о построении и численном моделировании двумерного случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$ с зависимыми компонентами.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2.1 (см., например, [14]) Пусть $\xi^{(1)}$ и $\xi^{(2)}$ – это случайные величины со значениями в \mathbb{R} , и \hat{A} является сигма-алгеброй борелевских множеств в \mathbb{R} (по сути это различные комбинации объединений и пересечений интервалов). Функция $\mathbf{P}\{\xi^{(2)} \in B|u\} = \mathbf{P}\{\xi^{(2)} \in B|\xi^{(1)} = u\}$ двух аргументов $u \in R$ и $B \in \hat{A}$ называется *условным распределением случайной величины $\xi^{(2)}$ при условии $\xi^{(1)} = u$, если*

1) для любого $A \in \hat{A}$ выполнено соотношение

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\left(\mathbf{P}\{\xi^{(2)} \in B|u\}; \xi^{(1)} \in A\right) &\stackrel{\text{def}}{=} \int_A \mathbf{P}\{\xi^{(2)} \in B|u\} \mathbf{P}\{\xi^{(1)} \in du\} = \\ &= \mathbf{P}\left\{(\xi^{(1)} \in A) \cap (\xi^{(2)} \in B)\right\}; \end{aligned} \quad (2.1)$$

2) для каждого фиксированного $u = u_0$ функция $\mathbf{P}\{\xi^{(2)} \in B|u_0\}$ является вероятностным распределением на множестве B .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2.2 (см., например, [14]). Предположим, что условное распределение $\mathbf{P}\{\xi^{(2)} \in B|u\}$ является **абсолютно непрерывным** по борелевской мере в \mathbb{R} (см. определение 1.1) для каждого фиксированного $u = u_0$; это означает, что

$$\mathbf{P}\{\xi^{(2)} \in B|u_0\} = \int_B f_{\xi^{(2)}}(v|u_0) dv.$$

Тогда функция $f_{\xi^{(2)}}(v|u) = f_{\xi^{(2)}}(v|\xi^{(1)} = u)$ называется **условной плотностью распределения случайной величины $\xi^{(2)}$ при условии, что $\xi^{(1)} = u$** .

Другими словами, измеримая (по переменным u и v) функция $f_{\xi^{(2)}}(v|u)$ является условной плотностью случайной величины $\xi^{(2)}$ при условии, что $\xi^{(1)} = u$, если

1) для любых борелевских множеств A и B выполнено соотношение

$$\int_A \int_B f_{\xi^{(2)}}(v|u) dv \mathbf{P}\{\xi^{(1)} \in du\} = \mathbf{P}\{(\xi^{(1)} \in A) \cap (\xi^{(2)} \in B)\}; \quad (2.2)$$

2) для любого фиксированного $u = u_0$ функция $f_{\xi^{(2)}}(v|u)$ является вероятностной плотностью распределения.

Если вдобавок и случайная величина $\xi^{(1)}$ является абсолютно непрерывной и имеет плотность $f_{\xi^{(1)}}(u)$ (см. определение 1.1), то соотношение (2.2) может быть представлено в виде

$$\int_A \int_B f_{\xi^{(2)}}(v|u) f_{\xi^{(1)}}(u) du dv = \mathbf{P}\{(\xi^{(1)} \in A) \cap (\xi^{(2)} \in B)\}. \quad (2.3)$$

Соотношение (2.3) означает, что в \mathbb{R}^2 определено абсолютно непрерывное **совместное распределение случайных величин $\xi^{(1)}$ и $\xi^{(2)}$**

$$\mathbf{P}\{(\xi^{(1)} \in A) \cap (\xi^{(2)} \in B)\} = \int_A \int_B f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v) du dv,$$

с **совместной плотностью, представленной в виде разложения**

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v) = f_{\xi^{(1)}}(u) \times f_{\xi^{(2)}}(v|u); \quad (2.4)$$

здесь, как и ранее, $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$; см. определение 1.1 и рис. 2.1.

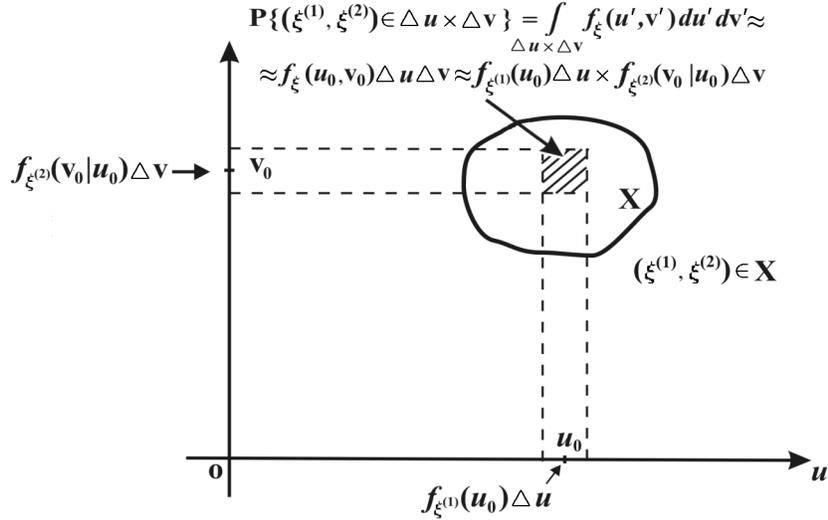


Рис. 2.1. Иллюстрация к определению совместной плотности $f_{\xi}(u, v)$

Справедливо также обратное утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2.1 (см., например, [14]). *Если совместное распределение случайных величин $\xi^{(1)}$ и $\xi^{(2)}$ имеет плотность $f_{\xi}(u, v)$ в \mathbb{R}^2 , то функция*

$$f_{\xi^{(2)}}(v|u) = \frac{f_{\xi}(u, v)}{f_{\xi^{(1)}}(u)}, \quad \text{где } f_{\xi^{(1)}}(u) = \int f_{\xi}(u, v) dv, \quad (2.5)$$

является условной плотностью случайной величины $\xi^{(2)}$ при условии, что $\xi^{(1)} = u$, а функция $f_{\xi^{(1)}}(u)$ – «безусловная» (обычная) плотность распределения случайной величины $\xi^{(1)}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Утверждение относительно плотности $f_{\xi^{(1)}}(u)$ очевидно в силу того, что для любого борелевского множества A

$$\mathbf{P}\{\xi^{(1)} \in A\} = \int_A \int f_{\xi}(u, v) du dv = \int_A f_{\xi^{(1)}}(u) du$$

(см. определение 1.1).

Осталось показать, что функция $f_{\xi^{(2)}}(v|u) = f_{\xi}(u, v)/f_{\xi^{(1)}}(u)$ удовлетворяет определению 2.2. Действительно, следуя определению 1.1 и

соотношениям (2.5), имеем

$$\begin{aligned} \int_A \int_B f_{\xi^{(2)}}(v|u) dv \mathbf{P} \{ \xi^{(1)} \in du \} &= \int_A \int_B \frac{f_{\xi}(u, v)}{f_{\xi^{(1)}}(u)} du f_{\xi^{(1)}}(u) dv = \\ &= \mathbf{P} \{ \xi \in A \times B \} = \mathbf{P} \{ (\xi^{(1)} \in A) \cap (\xi^{(2)} \in B) \}, \end{aligned}$$

т. е. соотношение (2.3) выполнено.

Аналогично

$$\int_B f_{\xi^{(2)}}(v|u_0) dv = \mathbf{P} \{ (\xi^{(1)} = u_0) \cap (\xi^{(2)} \in B) \},$$

т. е. для любого фиксированного $u = u_0$ функция $f_{\xi^{(2)}}(v|u)$ является вероятностной плотностью распределения. Утверждение 2.1 доказано.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.1. По аналогии с предыдущими рассуждениями может быть построено *второе представление совместной плотности* вида

$$f_{\xi}(u, v) = f_{\xi^{(2)}}(v) \times f_{\xi^{(1)}}(u|v); \quad (2.6)$$

здесь

$$f_{\xi^{(2)}}(v) = \int f_{\xi}(u, v) du \quad \text{и} \quad f_{\xi^{(1)}}(u|v) = \frac{f_{\xi}(u, v)}{f_{\xi^{(2)}}(v)} \quad (2.7)$$

являются «безусловной» плотностью распределения случайной величины $\xi^{(2)}$ и условной плотностью случайной величины $\xi^{(1)}$ при условии, что $\xi^{(2)} = v$, соответственно.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.2. *Представления (2.4)–(2.7) справедливы и для той ситуации, когда $\xi^{(1)}$ является k -мерным случайным вектором, а $\xi^{(2)}$ – m -мерным случайным вектором;* здесь соответствующее совместное распределение вектора ξ рассматривается в \mathbb{R}^d , где $d = k + m$.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.3. Из соотношений (2.1)–(2.3) следует равенство

$$\mathbf{P} \{ \xi^{(2)} \in B | u_0 \} = \frac{\mathbf{P} \{ (\xi^{(2)} \in B) \cap (\xi^{(1)} \in du) \}}{\mathbf{P} \{ \xi^{(1)} \in du \}} = \mathbf{P} \{ \xi^{(2)} \in B | \xi^{(1)} \in du \}; \quad (2.8)$$

здесь du обозначает бесконечно малую окрестность точки u_0 .

2.2. Алгоритм численного моделирования двумерного случайного вектора. Выберем представление (2.4), (2.5) совместной плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v)$ двумерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$ и рассмотрим следующий алгоритм численного моделирования выборочного значения $\boldsymbol{\xi}_0 = (\xi_0^{(1)}, \xi_0^{(2)})$ этого вектора.

АЛГОРИТМ 2.1 (см., например, [9, 13]). 1. Численно моделируем (реализуем на компьютере) выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(u)$.

2. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(2)}$ случайной величины $\xi^{(2)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(2)}}(u|\xi_0^{(1)}) = f_{\boldsymbol{\xi}}(\xi_0^{(1)}, u) / f_{\xi^{(1)}}(\xi_0^{(1)})$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2.2 (см., например, [5]). Совместное распределение случайной точки $\boldsymbol{\xi}_0 = (\xi_0^{(1)}, \xi_0^{(2)})$, реализуемой с помощью алгоритма 2.1, имеет плотность распределения $f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v)$ вида (2.6).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Используя определения вероятностной плотности (см. определение 1.1 и замечание 1.2) и условной плотности (см. определение 2.2), имеем, что для фиксированного $\xi^{(1)} = \xi_0^{(1)}$ с точностью до бесконечно малых второго порядка выполнено равенство

$$\mathbf{P}\{\xi_0^{(2)} \in dv | \xi_0^{(1)}\} = f_{\xi^{(2)}}(v | \xi_0^{(1)}) dv; \quad (2.9)$$

здесь и далее du и dv обозначают бесконечно малые окрестности точек u и v соответственно.

Используя формулу умножения вероятностей (см., например, [14]), получаем

$$\mathbf{P}\left\{(\xi_0^{(1)} \in du) \cap (\xi_0^{(2)} \in dv)\right\} = \mathbf{P}\{\xi_0^{(1)} \in du\} \times \mathbf{P}\{\xi_0^{(2)} \in dv | \xi_0^{(1)} \in du\}.$$

Учитывая соотношения (2.8), (2.9) и замечание 1.2 (см. также рис. 2.1), имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left\{(\xi_0^{(1)} \in du) \cap (\xi_0^{(2)} \in dv)\right\} &= \mathbf{P}\{\xi_0^{(1)} \in du\} \times \mathbf{P}\{\xi_0^{(2)} \in dv | \xi_0^{(1)}\} = \\ &= f_{\xi^{(1)}}(u) du \times f_{\xi^{(2)}}(v | u) dv = f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v) du dv. \end{aligned}$$

Из того же замечания 1.2 следует, что функция $f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v)$ является плотностью распределения случайной точки $\boldsymbol{\xi}_0 = (\xi_0^{(1)}, \xi_0^{(2)})$. Утверждение 2.2 доказано.

Аналогично при выборе представления (2.6), (2.7) можно построить и обосновать следующий алгоритм численного моделирования выборочного значения $\xi_0 = (\xi_0^{(1)}, \xi_0^{(2)})$ случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$.

АЛГОРИТМ 2.2 (см., например, [9, 13]). 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(2)}$ случайной величины $\xi^{(2)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(2)}}(u)$.

2. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(u|\xi_0^{(2)}) = f_{\xi}(u, \xi_0^{(2)})/f_{\xi^{(2)}}(\xi_0^{(2)})$.

2.3. Стандартный алгоритм моделирования случайного вектора. Исследуем сформулированную выше проблему 1.4. Принимая во внимание соотношение (1.2), мы можем утверждать, что задача конструирования алгоритмов численного моделирования (реализации на компьютере) выборочных значений

$$\zeta_1 = q(\xi_1), \dots, \zeta_n = q(\xi_n)$$

сводится к вопросу моделирования d -мерного случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$, распределенного согласно заданной (выбранной) совместной плотности $f_{\xi}(\mathbf{x}) = f(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$.

Используя рассуждения подраздела 2.1 (в том числе замечание 2.2) и метод математической индукции по размерности d , несложно показать возможность построения $d!$ *представлений совместной плотности* $f_{\xi}(\mathbf{x})$:

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) = f_{\xi^{(i_1)}}(x^{(i_1)}) f_{\xi^{(i_2)}}(x^{(i_2)}|x^{(i_1)}) f_{\xi^{(i_3)}}(x^{(i_3)}|x^{(i_1)}, x^{(i_2)}) \times \dots \\ \times f_{\xi^{(i_{d-1})}}(x^{(i_{d-1})}|x^{(i_1)}, \dots, x^{(i_{d-2})}) f_{\xi^{(i_d)}}(x^{(i_d)}|x^{(i_1)}, x^{(i_2)}, \dots, x^{(i_{d-1})}), \quad (2.10)$$

где (i_1, \dots, i_d) – это *перестановка номеров* $(1, \dots, d)$ (число таких перестановок как раз равно $d!$; см., например, [14]) и

$$f_{\xi^{(i_1)}}(x^{(i_1)}) = \int \dots \int f_{\xi}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) dx^{(i_2)} \dots dx^{(i_d)}, \\ f_{\xi^{(i_2)}}(x^{(i_2)}|x^{(i_1)}) = f_{\xi^{(i_2)}}(x^{(i_2)}|\xi^{(i_1)} = x^{(i_1)}) = \frac{\int \dots \int f_{\xi}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) dx^{(i_3)} \dots dx^{(i_d)}}{f_{\xi^{(i_1)}}(x^{(i_1)})}, \\ f_{\xi^{(i_3)}}(x^{(i_3)}|x^{(i_1)}, x^{(i_2)}) = \frac{\int \dots \int f_{\xi}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) dx^{(i_4)} \dots dx^{(i_d)}}{f_{\xi^{(i_1)}}(x^{(i_1)}) f_{\xi^{(i_2)}}(x^{(i_2)}|x^{(i_1)})}, \quad (2.11)$$

мерно распределенной в интервале $(0, 1)$ (обозначение $\alpha \in U(0, 1)$); при этом используется доступный генератор (датчик) случайных (псевдослучайных) чисел – специальная компьютерная программа (называемая в компьютерных языках **RAND** или **RANDOM**) или устройство;

2) с использованием преобразований полученного стандартного случайного (псевдослучайного) числа α_0 (или значений $\alpha_1, \dots, \alpha_k$) моделируется требуемое выборочное значение ξ_0 одномерной случайной величины ξ , распределенной согласно заданной плотности $f_\xi(u)$.

Особенности построения генераторов стандартных случайных и псевдослучайных чисел (в первую очередь, мультипликативного метода вычетов и его модификаций, используемых в новосибирской школе методов численного статистического моделирования) будут представлены далее в разделе 9.

Суммируя сказанное в этом разделе, можно дать очередное определение методам Монте-Карло, определив их как **науку о преобразованиях стандартной случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$, позволяющих численно решать актуальные прикладные задачи.**

В связи с этим целесообразно сформулировать (напомнить) **основные свойства стандартной случайной величины α .** Эта величина имеет функцию распределения

$$F_\alpha(x) = \mathbf{P}\{\alpha < x\} = \begin{cases} 0 & \text{для } x \in (-\infty, 0]; \\ x & \text{для } x \in (0, 1); \\ 1 & \text{для } x \in [1, +\infty); \end{cases} \quad (2.12)$$

и плотность распределения

$$f_\alpha(u) \equiv 1, \quad 0 < u < 1$$

(рис. 2.2).

Несложно подсчитать математическое ожидание и дисперсию стандартной случайной величины α :

$$\mathbf{E}\alpha = \int_0^1 u f_\alpha(u) du = \frac{1}{2}; \quad \mathbf{D}\alpha = \mathbf{E}\alpha^2 - (\mathbf{E}\alpha)^2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12}. \quad (2.13)$$

Для обоснования алгоритмов Монте-Карло часто используется следующее свойство случайных точек, равномерно распределенных в ограниченных областях в \mathbb{R}^l (в частности, случайной величины α).

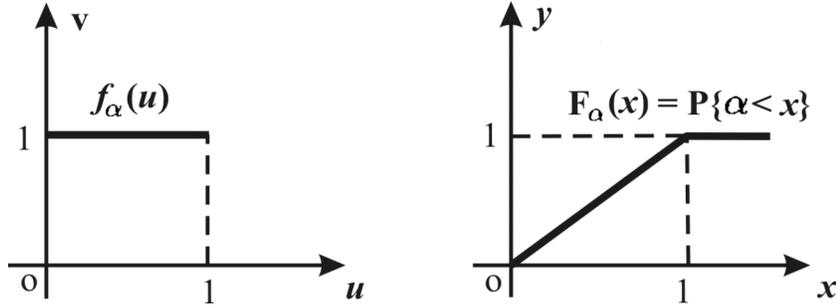


Рис. 2.2. Функция и плотность распределения стандартной случайной величины α

УТВЕРЖДЕНИЕ 2.3 (см., например, [9, 13]). Если l -мерная случайная точка α равномерно распределена в области $G^{(1)} \subset \mathbb{R}^l$ конечного объема $\bar{G}^{(1)} = \int_{G^{(1)}} d\mathbf{u}$, то она также равномерно распределена в любой подобласти $G \subseteq G^{(1)}$ объема \bar{G} при условии попадания в эту подобласть. В этом случае $\mathbf{P}\{\alpha \in G\} = \bar{G}/\bar{G}^{(1)}$ (рис. 2.3).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Плотность распределения случайной точки α имеет вид

$$f_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{u}) \equiv \frac{1}{\bar{G}^{(1)}}, \quad \mathbf{u} \in G^{(1)}.$$

Рассмотрим произвольное борелевское подмножество $A \subseteq G$ множества G и подсчитаем условную вероятность

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{\alpha \in A | \alpha \in G\} &= \frac{\mathbf{P}\{(\alpha \in A) \cap (\alpha \in G)\}}{\mathbf{P}\{\alpha \in G\}} = \\ &= \frac{\int_A \frac{1}{\bar{G}^{(1)}} d\mathbf{u}}{\int_G \frac{1}{\bar{G}^{(1)}} d\mathbf{u}} = \frac{\bar{A}}{\bar{G}} = \int_A \frac{1}{\bar{G}} d\mathbf{u}. \end{aligned}$$

Используя определение 1.1 и произвольность множества A , получаем, что случайная точка α , при условии попадания в подобласть G , распределена в G равномерно согласно плотности распределения

$$f_{\alpha}(\mathbf{u} | \alpha \in G) \equiv \frac{1}{\bar{G}}, \quad \mathbf{u} \in G.$$

Для $A = G$ получаем $\mathbf{P}\{\alpha \in G\} = \bar{G}/\bar{G}^{(1)}$. Утверждение 2.3 доказано.

Сформулируем также весьма важное и широко применимое следствие утверждения 2.3.

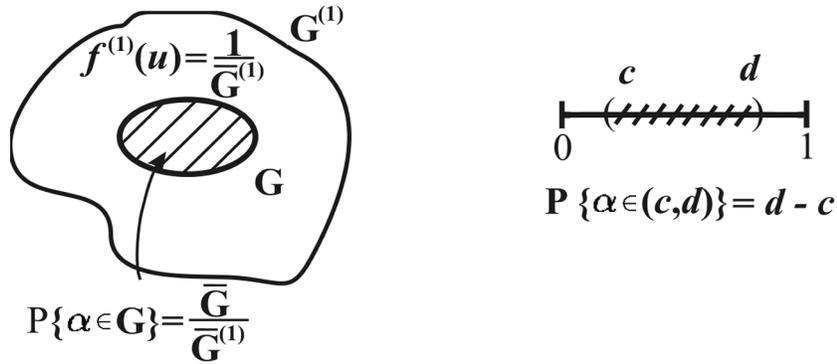


Рис. 2.3. Иллюстрации к утверждениям 2.3 и 2.4

УТВЕРЖДЕНИЕ 2.4 (см., например, [9, 13]). Пусть интервал (c, d) является подмножеством интервала $(0, 1)$: $(c, d) \subseteq (0, 1)$. Тогда стандартная случайная величина α равномерно распределена в интервале (c, d) при условии попадания в него и

$$\mathbf{P}\{\alpha \in (c, d)\} = d - c \quad (2.14)$$

(рис. 2.3).

2.5. Метод обратной функции распределения. Вернемся к решению проблемы 2.1.

В дальнейшем будем предполагать, что плотность распределения $f_\xi(u)$ одномерной случайной величины ξ положительна (с точностью до множества меры нуль) на интервале (a, b) (а вне этого интервала тождественно равна нулю). Это означает, что случайная величина ξ распределена на интервале (a, b) (обозначение $\xi \in (a, b)$).

Последнее предположение выполняется на практике в подавляющем числе случаев (т.е. распределения на объединении непересекающихся интервалов или распределения, не являющиеся абсолютно непрерывными, встречаются на практике крайне редко). Тем не менее, здесь уместно заметить, что приводимые далее рассуждения несложно распространить и на перечисленные нестандартные случаи, когда $\xi \notin (a, b)$.

В рассматриваемом случае $\xi \in (a, b)$ функция распределения

$$F_\xi(x) = \mathbf{P}\{\xi < x\} = \int_{-\infty}^x f_\xi(u) du$$

(см., например, [14]) случайной величины ξ является непрерывной и строго возрастающей на интервале (a, b) :

$$F_\xi(x_2) - F_\xi(x_1) = \int_{x_1}^{x_2} f_\xi(u) du > 0 \text{ при } a \leq x_1 < x_2 \leq b.$$

Сформулируем *стандартный алгоритм моделирования непрерывных случайных величин $\xi \in (a, b)$ (метод обратной функции распределения)*.

АЛГОРИТМ 2.4 (см., например, [9, 13]). Для численного моделирования (реализации на компьютере) выборочного значения ξ_0 случайной величины $\xi \in (a, b)$ используем формулу

$$\xi_0 = F_\xi^{-1}(\alpha_0); \quad (2.15)$$

где $\alpha_0 \in U(0, 1)$ – стандартное случайное число (рис. 2.4).

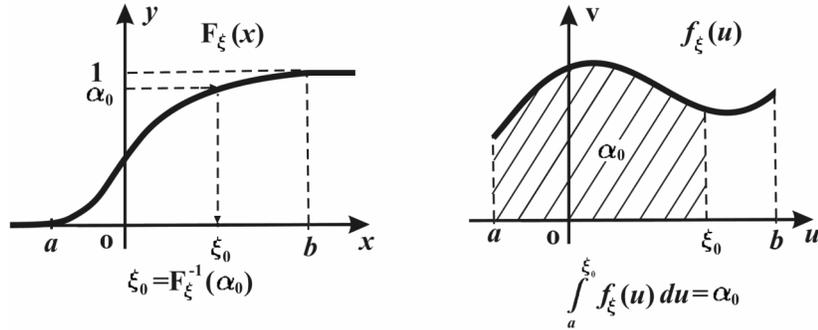


Рис. 2.4. Иллюстрации к методу обратной функции распределения

Обоснование формулы (2.15) (а значит, и стандартного алгоритма 2.4) следует из того факта, что функции распределения случайных величин ξ и $\tilde{\xi} = F_\xi^{-1}(\alpha)$ совпадают.

Действительно, так как $F_\xi^{-1}(\alpha) \in (a, b)$ (рис. 2.4), то при $x \leq a$ с очевидностью имеем $F_{\tilde{\xi}}(x) = \mathbf{P}\{\tilde{\xi} < x\} = 0 = F_\xi(x)$, а для $x \geq b$ получаем $F_{\tilde{\xi}}(x) = 1 = F_\xi(x)$.

Наконец, для $a < x < b$ в силу монотонности функции $F_\xi(x)$ на интервале (a, b) верны следующие равенства:

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

здесь использовано соотношение (2.14) для $c = 0$ и $d = F_\xi(x)$.

2.6. Элементарные плотности. На первый взгляд, алгоритм 2.4 полностью решает проблему 2.1. Однако остается одна важная «техническая» проблема, связанная с использованием формулы (2.15) в прикладных компьютерных программах.

ПРОБЛЕМА 2.2. *Представить соотношение $\psi(x) = F^{-1}(x)$ в виде композиции доступных в данном языке программирования (конкретнее – элементарных) функций так, чтобы вычисление значения $\psi(x)$ могло быть эффективно (экономично) реализовано на компьютере.*

Учитывая, что значения ξ_0 и $F_\xi^{-1}(\alpha_0)$ принадлежат интервалу (a, b) (рис. 2.4), и функция $F_\xi(x)$ монотонно возрастает на этом интервале, мы можем переписать соотношение (2.15) в виде $F_\xi(\xi_0) = \alpha_0$ или

$$\int_a^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0 \quad (2.16)$$

(рис. 2.4); здесь учтено, что $f_\xi(u) = 0$ при $x \leq a$ и что $a < \xi_0 < b$.

В случае, когда проблема 2.2 разрешима, будем называть плотность распределения $f_\xi(u)$ случайной величины ξ *элементарной* (с точки зрения возможности численного моделирования выборочных значений, но не с точки зрения какой-то «простоты» формы записи этой функции). Другими словами, на основании соотношения (2.16) мы вводим следующее определение.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2.3. (см., например, [9, 13]). *Плотность $f_\xi(u)$ случайной величины ξ называется элементарной, если решение уравнения (2.16) (по отношению к верхнему пределу ξ_0 интеграла в левой части этого уравнения) может быть представлено в виде $\xi_0 = \psi(\alpha_0)$, где $\psi(x)$ – относительно простая композиция элементарных функций, для которой подсчет значения $\psi(x)$ на компьютере достаточно эффективен (экономичен).*

Уравнение (2.16) может быть неразрешимо по двум причинам.

Первая причина состоит в том, что *интеграл в правой части уравнения (2.16) не берется аналитически* (т. е. не удается выразить соответствующую первообразную в виде композиции элементарных функций).

В качестве примера можно упомянуть такое широко применимое распределение, как *стандартное нормальное распределение* случайной величины $\xi^{(0,1)}$ с плотностью (1.12) – см. рис. 1.2 (соответствующая функция распределения табулируется, что, в частности, усложняет процедуру построения доверительных интервалов в математической статистике).

Тем не менее, заметим, что для моделирования выборочного значения $\xi_0^{(0,1)}$ случайной величины $\xi^{(0,1)}$ можно построить эффективный *специальный алгоритм* численного моделирования соответствующих выборочных значений (*формулы Бокса – Мюллера*), связанный со свойствами *изотропного вектора* случайной длины – см., например, [9, 13], а также подразделы 6.3, 13.1, 13.2 данного пособия.

Вторая причина, по которой та или иная плотность может быть не элементарной, состоит в том, что даже если интеграл в левой части уравнения (2.16) берется, *получаемое после интегрирования уравнение неразрешимо относительно ξ_0* .

В качестве примера приведем *распределение с полиномиальной плотностью*

$$f_\xi(u) = \sum_{m=0}^M c_m u^m, \quad 0 < u < 1, \quad M = 1, 2, \dots \quad (2.17)$$

Широкое применение распределения (2.17) связано с идеей замены «немоделируемых» плотностей распределения в конечных интервалах на моделируемые полиномиальные приближения этих плотностей.

После подстановки плотности (2.17) в уравнение (2.16) получаем соотношения

$$\int_0^{\xi_0} \left(\sum_{m=0}^M c_m u^m \right) du = \alpha_0 \quad \text{или} \quad \sum_{m=0}^M \frac{c_m \xi_0^{m+1}}{m+1} = \alpha_0.$$

Последнее уравнение, вообще говоря, неразрешимо относительно ξ_0 при $M \geq 2$ и $c_m \neq 0$ (моделирующие формулы получаются только для редких частных случаев – см., в частности, пример 2.2).

ЗАМЕЧАНИЕ 2.4. Практически для всех распределений с неэлементарными плотностями можно построить алгоритм моделирования выборочных значений – как минимум *мажорантный метод исключения* (но этот метод часто оказывается неэкономичным, см., например, [9, 13], а также раздел 11 данного пособия), или *специальный метод* (использующий особенности моделируемого распределения; примеры таких алгоритмов приведены, в частности, в [9, 13], а также в разделах 12 и 13 данного пособия), или *методы интегральной и дискретной суперпозиции (рандомизации)* (см., например, [9, 13], а также разделы 3 и 11 данного пособия).

В частности, для распределения (2.17) в [9, 13] и в разделе 11 (см. пример 11.8) приведены достаточно эффективные (экономичные) алго-

ритмы метода дискретной суперпозиции (для случая $c_m \geq 0$) и мажорантного метода исключения (в произвольном случае).

Теперь приведем примеры элементарных плотностей.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.5. Имеется возможность конструирования *неограниченного количества элементарных плотностей*. Такую возможность дает, в частности, *технология последовательных (вложенных) замен* (технология А), подробно представленная в [13] и далее в подразделе 14.2 данного пособия.

В связи с замечанием 2.5 имеет смысл рассматривать здесь лишь «знаменитые» элементарные плотности, используемые в содержательных прикладных задачах.

Отметим, что в приводимых здесь и далее примерах моделируемых тем или иным методом плотностей распределения после слова «Пример» в круглых скобках приводится *индекс типа алгоритма (буквы от «А» до «Д») и оценка за такой пример (в дробных баллах от «0» до «3») семестрового домашнего задания (см. далее подраздел 14.1)*.

В частности, буква «А» относит тот или иной пример к теме «Метод обратной функции распределения».

ПРИМЕР 2.1 (А; 0,5 балла; см., например, [9, 13]). Рассмотрим *экспоненциальное (показательное) распределение* (см., например, [14]) с плотностью

$$f_{\xi}(u) = \lambda e^{-\lambda u}, \quad u > 0; \quad \lambda > 0. \quad (2.18)$$

Спектр применимости этого распределения поистине огромен (см., например, [9]). На основе этого распределения формируются *пуассоновские потоки*, применяемые в *численных моделях теории массового обслуживания*, при решении *стохастических дифференциальных уравнений*, при моделировании *пробегов частиц различной природы*, при построении *моделей прикладных случайных процессов и полей* и др.

Решая уравнение (2.16) для плотности (2.18)

$$\int_0^{\xi_0} \lambda e^{-\lambda u} du = \alpha'_0, \quad (2.19)$$

последовательно получаем

$$-e^{-\lambda u} \Big|_0^{\xi_0} = \alpha'_0, \quad 1 - e^{-\lambda \xi_0} = \alpha'_0 \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \frac{-\ln(1 - \alpha'_0)}{\lambda}.$$

Заметим, *случайная величина* $\alpha = 1 - \alpha'$ *равномерно распределена в интервале* $(0, 1)$ (так же, как случайная величина α' из соотношения (2.19)).

Действительно, так как $\alpha' \in (0, 1)$, то мы имеем $F_\alpha(x) = 0 = F_{\alpha'}(x)$ для $x \in (-\infty, 0]$ и $F_\alpha(x) = 1 = F_{\alpha'}(x)$ для $x \in [1, +\infty)$. Наконец, для $x \in (0, 1)$ получаем

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

здесь использовано соотношение (2.14) для α' и для $c = 1 - x$, $d = 1$. Таким образом, случайная величина $\alpha = 1 - \alpha'$ имеет распределение (2.12).

При обращении к генератору стандартных случайных чисел типа *RAND* или *RANDOM*, мы можем предположить, что на компьютере реализуется значение $\alpha_0 = 1 - \alpha'_0 \in U(0, 1)$.

Таким образом, моделирующая формула для экспоненциального распределения имеет вид

$$\xi_0 = -\frac{\ln \alpha_0}{\lambda}. \quad (2.20)$$

Описание примера 2.1 закончено.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.6. Последнее, на первый взгляд, незначительное замечание о замене $(1 - \alpha'_0)$ на α_0 на самом деле имеет большое практическое значение. В связи с малой скоростью сходимости метода Монте-Карло число n обращений к моделирующей формуле типа (2.20) бывает очень большим ($n \gg 1$), и небольшая экономия ε , связанная с рассматриваемой заменой, может дать существенное уменьшение вычислительных затрат на величину $n \times \varepsilon$.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.7. При практическом применении моделирующих формул в трудоемких «промышленных» расчетах следует *тщательно верить* их, представляя в наиболее экономичной для компьютерных вычислений форме.

Например, соотношение (2.20) может быть представлено в следующих эквивалентных (с точки зрения элементарной математики) формах:

$$\xi_0 = \frac{\ln(1/\alpha_0)}{\lambda} \quad \text{или} \quad \xi_0 = \ln(\alpha_0)^{-1/\lambda}.$$

Однако с вычислительной точки зрения эти формы хуже, чем формула (2.20) (ведь операция вычитания экономичнее деления и взятия дробной степени).

ПРИМЕР 2.2 (А; 0,5 балла; см., например, [9, 13]). Рассмотрим *степенное распределение* с плотностью

$$f_\xi(u) = (\lambda + 1)u^\lambda, \quad 0 < u < 1, \quad \lambda > 0. \quad (2.21)$$

Распределение (2.21) используется, в частности, при построении алгоритмов дискретной суперпозиции и мажорантного метода исключения для распределения с полиномиальной плотностью (2.17) (см. [9, 13] и пример 11.8 из подраздела 11.7 данного пособия).

Решая уравнение (2.16) для плотности (2.21), получаем

$$\xi_0^{\lambda+1} = \alpha_0 \quad \text{или} \quad \xi_0 = \alpha_0^{1/(\lambda+1)}. \quad (2.22)$$

Описание примера 2.2 закончено.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.8. Далее будем называть распределения (2.18), (2.21) и соответствующие моделирующие формулы (2.20), (2.22) *табличными* (не требующими вывода для конкретных положительных значений параметра λ). Также *табличными* мы будем называть плотность и формулу моделирования равномерного распределения в конечном (ограниченном) интервале (a, b) :

$$f_\xi(u) \equiv \frac{1}{b-a}; \quad -\infty < a < u < b < +\infty; \quad \xi_0 = a + (b-a)\alpha_0. \quad (2.23)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 2.9. Для относительно сложных элементарных плотностей $f_\xi(u)$ (получаемых в том числе при выполнении семестрового домашнего задания – см. раздел 14 данного пособия) при решении уравнения (2.16) для получения моделирующей формулы вида $\xi_0 = \psi_\xi(\alpha_0)$ могут возникнуть ошибки (неточности). В подавляющем числе случаев эти ошибки можно обнаружить с помощью следующей незамысловатой процедуры.

ПРОВЕРКА 2.1. Подставим в соотношение $\xi_0 = \psi_\xi(\alpha_0)$, полученное в результате решения уравнения (2.16), значение $\alpha_0 = 0$. В этом случае мы должны получить $\xi_0 = \psi_\xi(0) = a$. Соответственно, для $\alpha_0 = 1$ должно получаться значение $\xi_0 = \psi_\xi(1) = b$ (см. рис. 2.4).

Студентам и специалистам, использующим методы Монте-Карло, **настоятельно рекомендуется применять проверку 2.1 для выводимых ими моделирующих формул метода обратной функции распределения.**

Например, для простейшей формулы (2.22) проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = 0^{1/(\lambda+1)} = 0$, а для $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = 1^{1/(\lambda+1)} = 1$.

Для формулы (2.23) проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = a + (b-a) \times 0 = a$, а для $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = a + (b-a) \times 1 = b$.

Некоторые особенности имеет проверка 2.1 при наличии замены $\alpha_0 = 1 - \alpha'_0$. Здесь при $\alpha_0 = 0$ имеем $\xi_0 = b$, а для $\alpha_0 = 1$ получаем $\xi_0 = a$.

Так, для формулы (2.20) проверка 2.1 для $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = (-\ln 0)/\lambda = +\infty$, а для $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = (-\ln 1)/\lambda = 0$.

2.7. Пример моделирования двумерного вектора. В связи с алгоритмами 2.1–2.3 возникает следующая проблема.

ПРОБЛЕМА 2.3. *Выбрать ту перестановку (i_1, \dots, i_d) номеров $(1, \dots, d)$, которая дает наиболее эффективный (экономичный) алгоритм 2.3.*

Нюансы этой проблемы проявляются уже в двумерном случае (примеры моделирования двумерного вектора помечаются здесь и далее буквой «Б»).

ПРИМЕР 2.3 (Б; 1 балл; [9, 13]). Пусть требуется смоделировать на ЭВМ выборочное значение $\xi_0 = (\xi_0, \eta_0)$ двумерного случайного вектора $\xi = (\xi, \eta)$, имеющего совместную плотность распределения

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

Здесь и далее *при рассмотрении двумерных векторов в примерах мы будем использовать обозначение $\xi = (\xi, \eta)$ (т. е. ξ вместо $\xi^{(1)}$ и η вместо $\xi^{(2)}$ – см. формулы (2.4)–(2.7)), чтобы не использовать лишние верхние индексы.*

Рассмотрим соответствующий аналог разложения (2.6), (2.7):

$$f_{\xi}(u, v) = f_{\eta}(v) f_{\xi}(u|v); \quad f_{\eta}(v) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} v e^{-uv} du = \frac{1}{2}, \quad 0 < v < 2;$$

$$f_{\xi}(u|v) = \frac{f_{\xi}(u, v)}{f_{\eta}(v)} = v e^{-vu}, \quad u > 0.$$

Функция $f_{\eta}(v)$ является *табличной плотностью равномерного распределения в интервале $(0, 2)$* . Соответствующая моделирующая формула для выборочного значения η_0 случайной величины η имеет вид $\eta_0 = 2\alpha_1$, где $\alpha_1 \in U(0, 1)$ (см. формулу (2.23)).

Функция $f_{\xi}(u|\eta_0)$ (т. е. условная плотность $f_{\xi}(u|v)$ при фиксированном $\xi = v = \eta_0$) также является *табличной плотностью экспоненциального распределения с параметром $\lambda = \eta_0$* (см. соотношение (2.18)), поэтому соответствующая моделирующая формула имеет вид (2.20): $\xi_0 = -(\ln \alpha_2)/\eta_0$, где $\alpha_2 \in U(0, 1)$.

Теперь рассмотрим аналог разложения (2.4), (2.5): $f_{\xi}(u, v) = f_{\xi}(u) \times$

$\times f_{\eta}(v|u)$. Интегрируя по частям, получаем

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

$$f_{\eta}(v|u) = \frac{f_{\xi}(u, v)}{f_{\xi}(u)} = \frac{u^2 v e^{-uv}}{1 - (2u + 1)e^{-2u}}, \quad 0 < v < 2.$$

Достаточно очевидно то, что *обе эти плотности не являются элементарными*. Таким образом, для этого примера разложение (2.4), (2.5) оказалось хуже (в смысле применения алгоритмов 2.1 и 2.2), чем представление (2.6), (2.7). Описание примера 2.3 закончено.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.10. Содержательные примеры ситуаций, когда одно из разложений (2.4), (2.5) или (2.6), (2.7) является «моделируемым», а второе – нет, дает *технология распределенного (взвешенного) параметра* для конструирования моделируемых распределений двумерных случайных векторов с зависимыми компонентами (технология Б), представленная далее в подразделе 14.3 данного пособия.

2.8. О выборе плотностей распределения при численном решении прикладных задач. Моделирование траекторий цепей Маркова. Вернемся к обсуждению проблемы 2.3.

Для произвольной неотрицательной функции $f_{\xi}(\mathbf{x})$, имеющей свойства плотности (1.4)–(1.6), часто ни одна из перестановок (i_1, \dots, i_d) , упомянутых в формулировке проблемы 2.3, не дает удовлетворительную версию алгоритма 2.3 (например, интегралы (2.11) не берутся аналитически).

Однако для большинства прикладных проблем, в которых используются численные методы Монте-Карло, **выбор или конструирование плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ производится самим пользователем соответствующих численных схем**. Поэтому имеется возможность использования «упрощенных» версий функции $f_{\xi}(\mathbf{x})$.

В частности, часто разумным бывает предположить, что компоненты вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ являются *независимыми* (см., например, [14]). Это означает, что плотность $f_{\xi}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$ имеет вид

$$f_{\xi}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) = f_{\xi^{(1)}}(x^{(1)}) \times f_{\xi^{(2)}}(x^{(2)}) \times \dots \times f_{\xi^{(d)}}(x^{(d)}), \quad (2.24)$$

т. е. условные плотности из соотношения (2.10) становятся «независимыми» и *вся разница между представлениями (2.10) связана только с порядком умножения плотностей $\{f_{\xi^{(i)}}(x^{(i)})\}$* .

В этом случае каждое выборочное значение $\xi_0^{(i)}$ случайной компоненты $\xi^{(i)}$ можно моделировать согласно своей разумно выбранной (с точки зрения решения проблемы 2.2) плотности $f_{\xi^{(i)}}(x^{(i)})$, причем *порядок моделирования – произвольный*.

Однако необходимо всегда помнить, что *«удобство» моделирования случайного вектора ξ не всегда означает эффективность (экономичность) соответствующего метода Монте-Карло (алгоритмов 1.1 или 1.2) с оценителем (монте-карловской оценкой) $\zeta = q(\xi)$* .

Для оптимизации этого метода *необходимо минимизировать значение трудоемкости $S = t \times \mathbf{D}\zeta$* (см. формулу (1.18)). Выбор плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ в форме (2.24) отражает попытку уменьшить величину среднего времени t , в то время как величина дисперсии $\mathbf{D}\zeta$ при таком выборе может быть достаточно большой (даже бесконечной).

В ряде прикладных задач (в частности, при решении важной задачи оценки линейного функционала от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода – см., например, [9, 13], а также разделы 6, 7 данного пособия) требуется численно моделировать выборочное значение $\tilde{\xi}_0^{(m+1)}$ случайного вектора $\tilde{\xi}^{(m+1)} = (\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)})$, распределенного согласно плотности вида

$$f_{(\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)})}(x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(m)}) = \tilde{\pi}(x^{(0)}) \times r_1(x^{(0)}, x^{(1)}) \times \\ \times r_2(x^{(1)}, x^{(2)}) \times \dots \times r_m(x^{(m-1)}, x^{(m)}). \quad (2.25)$$

Представление (2.25) означает, что вектор $\tilde{\xi}^{(m+1)}$ обладает так называемым *марковским свойством*: для одного из представлений вида (2.10), а конкретнее, для тождественной подстановки

$$(i_0, i_1, \dots, i_m) = (0, 1, \dots, m),$$

распределение случайной компоненты $\tilde{\xi}^{(j)}$ полностью определяется фиксированным значением $x^{(j-1)}$ предыдущей по номеру компоненты $\tilde{\xi}^{(j-1)}$:

$$f_{\tilde{\xi}^{(j)}}(x | x^{(0)}, \dots, x^{(j-1)}) \equiv f_{\tilde{\xi}^{(j)}}(x | \tilde{\xi}^{(j-1)} = x^{(j-1)}) = r_j(x^{(j-1)}, x).$$

Таким образом, вектор $\tilde{\xi}^{(m+1)} = (\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)})$ представляет собой *отрезок длины $(m + 1)$ цепи Маркова $\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \tilde{\xi}^{(2)}, \dots$* (см.,

например, [14]) с *начальной плотностью* $\tilde{\pi}(x) = f_{\tilde{\xi}^{(0)}}(x)$ и *переходными плотностями*

$$r_j(x', x) = r_j \left[(\tilde{\xi}^{(j-1)} = x') \rightarrow (\tilde{\xi}^{(j)} = x) \right] = r_j(x | \tilde{\xi}^{(j-1)} = x'); \quad (2.26)$$

это условные плотности компонент $\xi^{(j)}$ при условии, что $\tilde{\xi}^{(j-1)} = x'$.

Численное моделирование выборочных значений

$$\tilde{\xi}_0^{(0)}, \tilde{\xi}_0^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}_0^{(m)}$$

первых $m + 1$ состояний цепи Маркова реализуется с помощью следующего алгоритма.

АЛГОРИТМ 2.5 (см., например, [9, 13]). *Численно моделируем (реализуем на компьютере) выборочное значение $\tilde{\xi}_0^{(0)}$ начального состояния $\xi^{(0)}$ цепи Маркова согласно плотности $\tilde{\pi}(x)$. Затем для $j = 1, 2, \dots, m$ последовательно моделируем выборочные значения $\tilde{\xi}_0^{(j)}$ случайных величин (состояний цепи Маркова) $\xi^{(j)}$ согласно плотностям $r_j(\tilde{\xi}_0^{(j-1)}, x)$.*

Важным для приложений является случай, когда *переходные плотности (2.26) одинаковы для всех $j = 1, 2, \dots$:*

$$r_j(x', x) \equiv r(x', x),$$

что означает, что марковская цепь $\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \tilde{\xi}^{(2)}, \dots$ является **однородной** (см., например, [14]).

По аналогии с соотношением (2.25) совместная плотность состояний $(\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)})$ для однородной цепи Маркова имеет вид

$$f_{(\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)})}(x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(m)}) = \tilde{\pi}(x^{(0)}) \times r(x^{(0)}, x^{(1)}) \times \\ \times r(x^{(1)}, x^{(2)}) \times \dots \times r(x^{(m-1)}, x^{(m)}). \quad (2.27)$$

Численное моделирование выборочных значений первых $m + 1$ состояний однородной цепи Маркова реализуется следующим образом.

АЛГОРИТМ 2.6 (см., например, [9, 13]). *Численно моделируем выборочное значение $\tilde{\xi}_0^{(0)}$ согласно плотности $\tilde{\pi}(x)$. Затем для $j = 1, 2, \dots, m$ последовательно моделируем выборочные значения $\tilde{\xi}_0^{(j)}$ согласно плотностям $r(\tilde{\xi}_0^{(j-1)}, x)$.*

Наконец, для практически важных расчетов, связанных с решением интегральных уравнений Фредгольма второго рода, нам потребуются введение и численное моделирование *прикладной цепи Маркова* или *однородной цепи Маркова, обрывающейся с вероятностью единица*

$$\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)} \quad (2.28)$$

(см., например, [9, 13], а также разделы 6, 7 данного пособия).

Здесь номер $m = N$ последней компоненты вектора $\tilde{\xi}^{(m+1)}$ является случайным, а вместо *переходной плотности* рассматривается *переходная функция*

$$p(x', x) = [1 - p^{(a)}(x')] \times r(x', x), \quad (2.29)$$

где значение $0 \leq p^{(a)}(x') \leq 1$ трактуется как *вероятность обрыва* траектории прикладной цепи Маркова (соответственно $p^{(s)}(x') = 1 - p^{(a)}(x')$ – *вероятность «выживания»*), а $r(x', x) = r_{\xi^{(j)}}(x | \xi^{(j-1)} = x')$ – условная вероятностная плотность типа (2.26) (одинаковая для всех $j = 1, \dots, N$).

При моделировании траекторий прикладной цепи Маркова (2.28) используется аналог алгоритмов 2.5, 2.6, в котором перед моделированием очередного перехода $\xi_0^{(j-1)} \rightarrow \xi_0^{(j)}$ проверяется, не является ли состояние $\xi_0^{(j-1)}$ точкой обрыва траектории.

Этот розыгрыш обрыва траектории происходит согласно *стандартному алгоритму моделирования выборочных значений дискретной случайной величины, принимающей только два значения* (см., например, [9, 13], а также подраздел 10.3 данного пособия – алгоритм 10.3).

АЛГОРИТМ 2.7. Если $\alpha_0 < p^{(a)}(\xi_0^{(j-1)})$, то происходит обрыв траектории; иначе моделирование траектории продолжается; здесь $\alpha_0 \in U(0, 1)$ – стандартное случайное число.

В итоге алгоритм моделирования траекторий прикладной цепи Маркова (2.28) выглядит следующим образом.

АЛГОРИТМ 2.8 (см., например, [9, 13]). 1. Полагаем $j := 1$. Численно моделируем выборочное значение $\xi_0^{(j-1)} = \xi_0^{(0)}$ согласно начальной плотности $\pi(x)$.

2. Согласно вероятности $p^{(a)}(\xi_0^{(j-1)})$ и алгоритму 2.7 определяем факт обрыва траектории.

3. Если обрыв траектории произошел, то полагаем $N = j - 1$ и прекращаем моделирование траектории.

4. Если обрыва не произошло, то численно моделируем выборочное значение $\xi_0^{(j)}$ согласно плотности $r(\xi_0^{(j-1)}, x)$, а затем полагаем $j := j + 1$ и переходим на пункт 2 данного алгоритма.

В алгоритме 2.8 и далее знак «:=» означает *переприсваивание*, т.е. при $A := B$ числа или результаты вычислений в правой части B помещаются в ячейку памяти ЭВМ с именем A .

3. Метод интегральной суперпозиции. Рандомизация. Метод условного математического ожидания. Метод расщепления

3.1. Метод интегральной суперпозиции. В этом разделе мы используем рассуждения подразделов 2.1 и 2.2 в многомерном случае (т.е. с учетом замечания 2.2) для изучения методов *рандомизации*, означающих *специальное введение случайных величин для построения и модификации численных алгоритмов*.

Сразу отметим, что сама общая схема метода Монте-Карло (алгоритм 1.1) и ее применение для вычисления интеграла (алгоритм 1.2) являются примерами рандомизации задачи приближенного вычисления величины I , связанными со специальным введением случайных величин (оценителей) ζ .

Сначала представим следующий пример применения метода рандомизации при численном моделировании случайных векторов.

Предположим, что требуется построить алгоритм численного моделирования (реализации на компьютере) выборочного значения $\check{\xi}_0$ k -мерного вектора $\check{\xi}$, плотность которого представляет собой интеграл, зависящий от параметра $\mathbf{u} \in U \subseteq \mathbb{R}^k$:

$$f_{\check{\xi}}(\mathbf{u}) = \int_V p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad \mathbf{u} \in U; \quad V \subseteq \mathbb{R}^m, \quad (3.1)$$

и, кроме того,

1) функция $p(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ является совместной плотностью распределения d -мерного случайного вектора $\xi = (\check{\xi}, \check{\eta})$ в $X = U \times V \subseteq \mathbb{R}^k$ (здесь $d = k + m$), для которой, в частности, можно выписать многомерный аналог представления (2.6), (2.7) (с заменой $\xi^{(1)}$ на $\check{\xi}$ и $\xi^{(2)}$ на $\check{\eta}$):

$$p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = f_{\check{\eta}}(\mathbf{v})f_{\check{\xi}}(\mathbf{u}|\mathbf{v}); \quad (3.2)$$

$$f_{\tilde{\eta}}(\mathbf{v}) = \int_U p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{u}; \quad f_{\tilde{\xi}}(\mathbf{u}|\mathbf{v}) = \frac{p(\mathbf{u}, \mathbf{v})}{f_{\tilde{\eta}}(\mathbf{v})}; \quad (3.3)$$

2) в соответствующем аналоге формулы (2.5) (это комбинация формул (3.1) и (3.2))

$$f_{\tilde{\xi}}(\mathbf{u}) = \int_V f_{\tilde{\eta}}(\mathbf{v}) f_{\tilde{\xi}}(\mathbf{u}|\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad (3.4)$$

который можно назвать *формулой для «безусловной» плотности случайного вектора (случайной величины) $\tilde{\xi}$* , плотности (3.3) являются «моделируемыми»: для реализации выборочного значения $\tilde{\eta}_0$ случайного вектора (случайной величины) $\tilde{\eta}$, распределенного согласно плотности $f_{\tilde{\eta}}(\mathbf{v})$, и выборочного значения $\tilde{\xi}_0$ случайного вектора $\tilde{\xi}$, распределенного согласно плотности $f_{\tilde{\xi}}(\mathbf{u}|\mathbf{v})$ (для каждого фиксированного \mathbf{v}), имеются эффективные (экономичные) алгоритмы (формулы) вида $\tilde{\eta}_0 = \psi_{\tilde{\eta}}(\bar{\alpha}_1)$, $\tilde{\xi}_0 = \psi_{\tilde{\xi}}(\bar{\alpha}_2; \mathbf{v})$, где $\bar{\alpha}_i$ – соответствующие наборы стандартных случайных чисел.

При сделанных предположениях можно рассмотреть следующий многомерный аналог алгоритма 2.2 (с заменой $\xi^{(1)}$ на $\tilde{\xi}$ и $\xi^{(2)}$ на $\tilde{\eta}$) – **метод интегральной суперпозиции (рандомизации)**.

АЛГОРИТМ 3.1 (см., например, [9, 13]). Численно моделируем выборочное значение $\tilde{\xi}_0$ случайного вектора (случайной величины) $\tilde{\xi}$, распределенного согласно плотности (3.4), используя алгоритм (формулу) $\tilde{\xi}_0 = \psi_{\tilde{\xi}}(\bar{\alpha}_2; \tilde{\eta}_0)$, где выборочное значение $\tilde{\eta}_0$ случайного вектора (случайной величины) $\tilde{\eta}$ реализовано на компьютере с помощью алгоритма (формулы) $\tilde{\eta}_0 = \psi_{\tilde{\eta}}(\bar{\alpha}_1)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 3.1. Отличие алгоритма 3.1 от многомерного аналога алгоритма 2.2 (с заменой $\xi^{(1)}$ на $\tilde{\xi}$ и $\xi^{(2)}$ на $\tilde{\eta}$) состоит в том, что в алгоритме 2.2 компоненты $\xi^{(1)}$ и $\xi^{(2)}$ являются равнозначными (одинаково важными), в то время как в алгоритме 3.1, учитывая постановку задачи для метода интегральной суперпозиции, компонента $\tilde{\xi}$ вектора $\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}, \tilde{\eta})$ является основной (для моделирования), а компонента $\tilde{\eta}$ – вспомогательной.

ЗАМЕЧАНИЕ 3.2. Метод интегральной суперпозиции (алгоритм 3.1) является некоторой альтернативой алгоритму 2.3 (когда последний алгоритм неприменим и одновременно справедливо представление (3.4) с соответствующими предположениями).

Следует отметить, что применение алгоритма 3.1 является довольно редким.

При этом весьма частым является применение дискретного аналога алгоритма 3.1 для случая, когда вспомогательный случайный вектор $\tilde{\eta}$ является одномерной *целочисленной случайной величиной* η .

Здесь интеграл (3.4) превращается в соответствующую *взвешенную сумму моделируемых плотностей*, а при моделировании целочисленного значения η_0 вспомогательной случайной величины η используется тот или иной *алгоритм моделирования дискретной случайной величины* (см., например, [9, 13], а также раздел 10 данного пособия).

Соответствующий алгоритм называется *методом дискретной суперпозиции* или просто *методом суперпозиции* (см., например, [9, 13], а также подраздел 11.1 данного пособия).

ЗАМЕЧАНИЕ 3.3. Ситуацию, возникающую при постановке задачи для метода интегральной суперпозиции можно трактовать следующим образом.

Пусть нам требуется численно смоделировать выборочное значение k -мерной компоненты $\tilde{\xi}$ d -мерного случайного вектора $\xi = (\xi, \tilde{\eta})$ (здесь $d = k + m$).

«Подходящим» для моделирования оказывается многомерный аналог алгоритма 2.2 (с заменой $\xi^{(1)}$ на $\tilde{\xi}$ и $\xi^{(2)}$ на $\tilde{\eta}$) для разложения (3.2), (3.3) (это аналог формул (2.6), (2.7)), в то время как для разложения типа (2.4), (2.5) многомерный аналог алгоритма 2.1 (все с той же заменой $\xi^{(1)}$ на $\tilde{\xi}$ и $\xi^{(2)}$ на $\tilde{\eta}$) построить не удастся по той причине, что интеграл (3.4) (или (3.1)) не берется аналитически.

К слову, такую ситуацию, когда одно из разложений (2.4), (2.5) или (2.6), (2.7) является «моделируемым», а второе – нет, дает *технология распределенного (взвешенного) параметра* для конструирования моделируемых распределений двумерных случайных векторов с зависимыми компонентами (технология Б), представленная далее в подразделе 14.3 данного пособия (см. также подраздел 2.7 и замечание 2.10).

Таким образом, технология Б весьма эффективна для конструирования примеров плотностей, для которых применим метод интегральной суперпозиции (такие примеры здесь и в дальнейшем индексируются символами «В.1») – см. далее подраздел 14.4.

ПРИМЕР 3.1 (В.1; 2 балла; [13]). Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , распределенной согласно плотности

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

Рассмотрим случайный вектор (ξ, η) с совместной плотностью распределения

$$p(u, v) = 2v \cos v \cos uv, \quad 0 < u < 1, \quad 0 < v < \pi/2. \quad (3.5)$$

Рассмотрим разложение (2.6), (2.7) для плотности (3.5):

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

$$f_\xi(u|v) = \frac{p(u, v)}{f_\eta(v)} = \frac{2v \cos v \cos uv}{2 \cos v \sin v} = \frac{v \cos uv}{\sin v}, \quad 0 < u < 1. \quad (3.6)$$

Полученные одномерные плотности являются элементарными.

Выведем формулу метода обратной функции распределения для выборочного значения η_0 случайной компоненты η . Решаем соответствующий аналог уравнения (2.16) и последовательно получаем

$$\int_0^{\eta_0} \sin 2v dv = \alpha_1, \quad \left. \frac{-\cos 2v}{2} \right|_0^{\eta_0} = \alpha_1 \quad \text{и, наконец,} \quad \eta_0 = \frac{\arccos(1 - 2\alpha_1)}{2}. \quad (3.7)$$

Проверка 2.1 для формулы (3.7) при $\alpha_1 = 0$ дает $\eta_0 = [\arccos(1 - 2 \times 0)]/2 = 0$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\eta_0 = [\arccos(1 - 2 \times 1)]/2 = \pi/2$.

Поставим полученное значение η_0 в условную плотность (3.6) и выведем формулу метода обратной функции распределения для выборочного значения ξ_0 компоненты ξ . Решаем соответствующий аналог уравнения (2.16) и последовательно получаем

$$\int_0^{\xi_0} \frac{\eta_0 \cos(\eta_0 u) du}{\sin \eta_0} = \alpha_2, \quad \left. \frac{\sin(\eta_0 u)}{\sin \eta_0} \right|_0^{\xi_0} = \alpha_2$$

$$\text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \frac{\arcsin(\alpha_2 \sin \eta_0)}{\eta_0}. \quad (3.8)$$

Проверка 2.1 для формулы (3.8) при $\alpha_2 = 0$ дает $\xi_0 = [\arcsin(0 \times \sin \eta_0)]/\eta_0 = 0$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = [\arcsin(1 \times \sin \eta_0)]/\eta_0 = 1$.

Последовательное применение формул (3.7) и (3.8) дает требуемый алгоритм метода интегральной суперпозиции (алгоритм 3.1) для получения выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ . Описание примера 3.1 закончено.

3.2. Введение случайных параметров. В задачах численного статистического моделирования часто целесообразным является *увеличение числа случайных параметров*, описывающих исследуемую численную модель того или иного прикладного процесса.

Как правило, для такой модели требуется численно аппроксимировать значение среднего

$$\hat{I} = q^{(2)}(\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}} \left[q(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}) \right] = \int_V q(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}) f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}; \boldsymbol{\lambda}) d\mathbf{v}, \quad V \subseteq \mathbb{R}^m, \quad (3.9)$$

где $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda^{(1)}, \dots, \lambda^{(k)})$ – набор фиксированных (не случайных) параметров, а $\boldsymbol{\xi}^{(2)} = (\eta^{(1)}, \dots, \eta^{(m)})$ – исходный набор m случайных параметров, распределенных в области $V \subseteq \mathbb{R}^m$. При этом можно использовать следующий аналог алгоритма 1.2 метода Монте-Карло:

$$\hat{I} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i^{(2)}; \quad \zeta_i^{(2)} = q(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\xi}_i^{(2)}),$$

где выборочные значения $\boldsymbol{\xi}_1^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\xi}_n^{(2)}$ численно моделируются согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}; \boldsymbol{\lambda})$.

Для модификации модели часто полезно предположить, что вектор $\boldsymbol{\lambda}$ является случайно распределенным в области $U \subseteq \mathbb{R}^k$. В этом случае вместо $\boldsymbol{\lambda}$ можно ввести случайный вектор $\boldsymbol{\xi}^{(1)} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(k)})$, распределенный согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{u})$; при этом актуальным становится вычисление величины

$$\begin{aligned} I &= \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi}) = \int_U \int_V q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{u} d\mathbf{v} = \\ &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}} q^{(2)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \int q^{(2)}(\mathbf{u}) f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{u}) d\mathbf{u}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Здесь $\boldsymbol{\xi} = (\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}) = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(k)}, \xi^{(k+1)} = \eta^{(1)}, \dots, \xi^{(d)} = \eta^{(m)})$ – это d -мерный случайный вектор ($d = k + m$), распределенный в области $X = U \times V \subseteq \mathbb{R}^d$ согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{u}) \times f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})$, при этом $f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) = f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}; \mathbf{u})$.

Отдельно отметим, что *здесь и далее можно рассматривать не «прямоугольные», а «криволинейные» области $X \subseteq \mathbb{R}^d$* , для которых запись $X = U \times V$ не совсем корректна. Все рассуждения данного раздела переносятся и на этот «криволинейный» случай (см., в частности,

пример 3.2). Однако для простоты изложения в формулах здесь мы будем рассматривать «прямоугольный» случай $X = U \times V$.

По аналогии с формулами (2.5) имеем

$$f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{u}) = \int_V f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) = \frac{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}, \mathbf{v})}{f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{u})}. \quad (3.11)$$

Для вычисления величины (3.10) можно применить алгоритм метода Монте-Карло (в точности совпадающий с алгоритмом 1.2):

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i; \quad \zeta_i = q(\boldsymbol{\xi}_i). \quad (3.12)$$

3.3. Метод условного математического ожидания для вычисления интеграла как один из методов уменьшения дисперсии весового оценщика. Соображения этого пункта являются в каком-то смысле «обратными» к рассуждениям из предыдущего подраздела.

Речь пойдет о *методе уменьшения дисперсии* оценщика (монте-карловской оценки) $\zeta = q(\boldsymbol{\xi}) = q(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)})$ интеграла

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_X q(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_U \int_V q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{u} d\mathbf{v} = \mathbf{E}\zeta. \quad (3.13)$$

Здесь $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})/f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$; функция $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ является плотностью распределения случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$;

$$\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) = (\mathbf{u}, \mathbf{v}); \quad \mathbf{u} = (x^{(1)}, \dots, x^{(k)}); \quad \mathbf{v} = (x^{(k+1)}, \dots, x^{(d)}).$$

Метод Монте-Карло для приближения величины (3.13) имеет вид (3.12) (см. также алгоритм 1.2).

Учитывая соотношение (3.11) и выделяя в переменной \mathbf{x} первые k компонент (как в соотношении (3.13)), положим, что *функция* $q^{(2)}(\mathbf{u}) = \int_V q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}|\mathbf{u}) d\mathbf{v}$ (см. также соотношение (3.9)) *для каждого \mathbf{u} может быть вычислена аналитически*. Тогда можно рассмотреть следующую модификацию стандартного алгоритма (3.12).

АЛГОРИТМ 3.2 (см., например, [9]). *Численно приближаем интеграл I следующим образом:*

$$I = \int_U q^{(2)}(\mathbf{u}) f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \mathbf{E}\zeta^{(1)} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i^{(1)}; \quad \zeta_i^{(1)} = q^{(2)}(\boldsymbol{\xi}_i^{(1)}), \quad (3.14)$$

где случайный вектор (случайная величина) $\xi^{(1)}$ и соответствующие выборочные значения $\{\xi_i^{(1)}\}$ распределены согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$ (см. соотношение (3.11)).

Алгоритм 3.2 называется **методом условного математического ожидания**. Этот алгоритм строится для вычисления k -мерного интеграла (3.10) (кратность которого на t меньше, чем размерность d равного ему исходного интеграла (3.13)). Поэтому иногда алгоритм 3.2 иногда называют **методом уменьшения кратности интегрирования**.

УТВЕРЖДЕНИЕ 3.1 (см., например, [9]). Верна следующая формула – **формула полной дисперсии**

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{D}_{\xi^{(1)}}\zeta^{(1)} + \mathbf{E}_{\xi^{(1)}}\mathbf{D}_{\xi^{(2)}}(q(\xi)|\xi^{(1)}). \quad (3.15)$$

Иными словами, **полная дисперсия равна сумме дисперсии условного математического ожидания и математического ожидания условной дисперсии**.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Заметим, что

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}\zeta^2 - (\mathbf{E}\zeta)^2 = \int_X q^2(\mathbf{x})f_{\xi}(\mathbf{x})d\mathbf{x} - I^2. \quad (3.16)$$

Используя соотношения (3.11), (3.14), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\zeta - \mathbf{D}_{\xi^{(1)}}\zeta^{(1)} &= \int_U \int_V q^2(\mathbf{u}, \mathbf{v})f_{\xi}(\mathbf{u}, \mathbf{v})d\mathbf{u}d\mathbf{v} - \int_U (q^{(2)}(\mathbf{u}))^2 f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})d\mathbf{u} = \\ &= \int_U \left[\int_V q^2(\mathbf{u}, \mathbf{v})f_{\xi^{(2)}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})d\mathbf{v} - \left(\int_V q(\mathbf{u}, \mathbf{v})f_{\xi^{(2)}}(\mathbf{v}|\mathbf{u})d\mathbf{v} \right)^2 \right] f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})d\mathbf{u} = \\ &= \mathbf{E}_{\xi^{(1)}}\mathbf{D}_{\xi^{(2)}}(q(\xi)|\xi^{(1)}). \end{aligned}$$

Утверждение 3.1 доказано.

Из соотношения (3.15) следует, что дисперсия $\mathbf{D}_{\xi^{(1)}}\zeta^{(1)}$ *взвешенного оценщика (монте-карловской оценки) $\zeta^{(1)}$ метода условного математического ожидания не превосходит дисперсию $\mathbf{D}\zeta$ оценщика ζ стандартного метода (3.12)*.

Тем не менее, имеются примеры ситуаций, в которых подсчет функции $q^{(2)}(\mathbf{u})$ в точке сложнее вычисления функции $q(\mathbf{u}, \mathbf{v})$, и выигрыш алгоритма 3.1 у алгоритма 1.2 (или (3.12)) по трудоемкости $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ может не достигаться.

ПРИМЕР 3.2 [5, 9]. Рассмотрим тестовую задачу вычисления интеграла

$$I = \int_X \frac{du dv}{v}, \quad (3.17)$$

где двумерная область X представляет собой треугольник, ограниченный прямыми $u = 2$, $v = 1$ и $u = v$ (рис. 3.1).

Здесь и далее *тестовой* называется задача с известным решением, на примере которой изучаются те или иные особенности рассматриваемых алгоритмов.

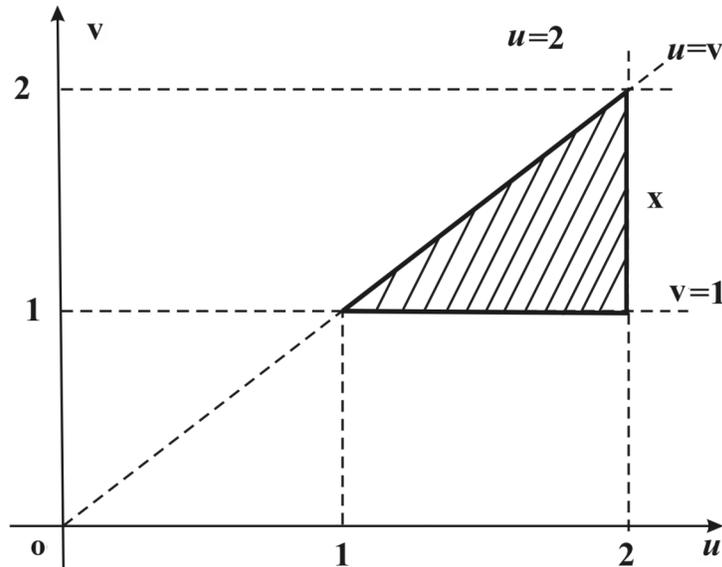


Рис. 3.1. Область интегрирования X в примере 3.2

Интегрируя по частям, несложно подсчитать, что величина (3.17) равна

$$I = \int_1^2 du \int_1^u \frac{dv}{v} = 2 \ln 2 - 1 \approx 0,3863.$$

Реализуем алгоритм 3.1 (формулу (3.12)) для вычисления интеграла (3.17).

В качестве функции $f_{\xi}(u, v)$ рассмотрим $f_{\xi}(u, v) \equiv 2$ при $(u, v) \in X$; это плотность равномерного распределения случайной точки $\xi = (\xi, \eta)$ в треугольнике X .

Тогда

$$I = \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi}), \text{ где } q(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2\eta}.$$

Найдем плотность $f_\eta(v) = \int_v^2 f_\xi(u, v) du = 2(2-v)$; $1 < v < 2$. Для численного моделирования выборочного значения η_0 случайной величины η применяем метод обратной функции распределения (с учетом того, что $1 < \eta_0 < 2$):

$$F_\eta(\eta_0) = \int_1^{\eta_0} (4-2v) dv = \alpha'_0 \text{ или } \eta_0 = 2 - \sqrt{\alpha_0}, \alpha_0 = 1 - \alpha'_0,$$

и тогда

$$I \approx \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2 - \sqrt{\alpha_i}}. \quad (3.18)$$

Дисперсия случайной величины $\zeta = q(\boldsymbol{\xi})$ равна

$$\mathbf{D}\zeta = \int_1^2 du \int_1^u \frac{2}{(2v)^2} dv - I^2 = \frac{1}{2}(1 - \ln 2) - (2 \ln 2 - 1)^2 \approx 0,0043.$$

Теперь рассмотрим алгоритм 3.2. Интегрируя по v , получаем, что $f_\xi(u) = \int_1^u 2 dv = 2(u-1)$; $1 < u < 2$, и, следовательно, $f_\eta(v|u) = \frac{2}{2(u-1)} = \frac{1}{u-1}$; $1 < v < u$, и

$$q^{(2)}(u) = \int_1^u \left(\frac{1}{2v} \times \frac{1}{u-1} \right) dv = \frac{\ln u}{2(u-1)}.$$

Функция распределения случайной величины ξ равна $F_\xi(u) = (u-1)^2$ и моделирующая формула метода обратной функции распределения (с учетом того, что $1 < \xi_0 < 2$) имеет вид $\xi_0 = 1 + \sqrt{\alpha_0}$. Следовательно, алгоритм 3.2 имеет вид

$$I \approx \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \frac{\ln(1 + \sqrt{\alpha_i})}{\sqrt{\alpha_i}}. \quad (3.19)$$

Дисперсия случайной величины $\zeta^{(1)} = q^{(2)}(\xi)$ меньше дисперсии $\mathbf{D}\zeta$:

$$\mathbf{D}\zeta^{(1)} = \mathbf{D}q_1(\xi) = \int_1^2 \frac{\ln^2 u}{u-1} du - I^2 \approx 0,0010.$$

Однако, сравнивая формулы (3.18), (3.19), можно убедиться, что реализация одного выборочного значения случайной величины $\zeta_i^{(1)} = q^{(2)}(\xi_i)$ является более трудоемкой, чем реализация одного значения $\zeta_i = q(\xi_i)$. Таким образом, вопрос о соотношении трудоемкостей алгоритмов 1.2 и 3.2 требует здесь отдельного численного исследования. Окончательный вывод о целесообразности использования алгоритма 3.2 вместо алгоритма 1.2 зависит, в частности, от того, как реализовано в данном языке программирования вычисление элементарных функций – логарифма и корня квадратного – из формул (3.18), (3.19). Описание примера 3.2 закончено.

3.4. Метод расщепления и его оптимизация. Алгоритм 3.2 основан на возможности избежать моделирования «хвоста» $\xi^{(2)}$ случайного вектора ξ из-за наличия удобной для вычислений аналитической формы функции $q^{(2)}(\mathbf{u}) = \mathbf{E}_{\xi^{(2)}}(q(\xi) | \xi^{(1)} = \mathbf{u})$.

Напротив, следующий способ уменьшения трудоемкости $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ стандартного метода Монте-Карло (3.12), использующий представление интеграла в виде

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_U \int_V q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u}) f_{\xi^{(2)}}(\mathbf{v} | \mathbf{u}) d\mathbf{u} d\mathbf{v} \quad (3.20)$$

(см. соотношение (3.13)), основан на моделировании дополнительных выборочных значений $\{\xi_k^{(2)}\}$ для приближенного вычисления соответствующих значений функции $q^{(2)}(\mathbf{u})$ методом Монте-Карло.

АЛГОРИТМ 3.3 (см., например, [9]). Численно моделируем n независимых выборочных значений $\{\xi_i^{(1)}\}$ случайного вектора (случайной величины) $\xi^{(1)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$; $\mathbf{u} \in U$. Для каждого $\xi_i^{(1)}$ получаем $K(\xi_i^{(1)})$ независимых компьютерных реализаций

$$\{\xi_{i,k}^{(2)}; k = 1, \dots, K(\xi_i^{(1)})\}$$

случайного вектора (случайной величины) $\xi^{(2)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(2)}}(\mathbf{v} | \xi_i^{(1)})$; $\mathbf{v} \in V$.

Вычисляем приближенно интеграл (3.20) по формуле

$$I = \mathbf{E}\zeta^{(K)} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{K(\xi_i^{(1)})} \sum_{k=1}^{K(\xi_i^{(1)})} q(\xi_i^{(1)}, \xi_{i,k}^{(2)}), \quad (3.21)$$

$$\text{где } \zeta^{(K)} = \frac{1}{K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})} \sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})} q(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}_k^{(2)})$$

и $\boldsymbol{\xi}_k^{(2)}$ – независимые, одинаково распределенные (как $\boldsymbol{\xi}^{(2)}$) случайные векторы (величины).

Алгоритм 3.3 называется **методом расщепления**.

Заметим, что если $K(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \equiv 1$ (то есть «расщепление» отсутствует), то алгоритм 3.3 превращается в стандартный алгоритм метода Монте-Карло (3.12) (см. также алгоритм 1.2) и $\zeta^{(K)} = \zeta$.

В этом случае выборочные значения $\boldsymbol{\xi}_i = (\boldsymbol{\xi}_i^{(1)}, \boldsymbol{\xi}_i^{(2)})$ получаются согласно многомерной версии алгоритма 2.1: значения $\boldsymbol{\xi}_i^{(1)}$ моделируются согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{u})$, а значения $\boldsymbol{\xi}_i^{(2)}$ – согласно плотностям $f_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}}(\mathbf{v}|\boldsymbol{\xi}_i^{(1)})$.

Равенство $I = \mathbf{E}\zeta^{(K)}$ (см. соотношение (3.21)) может быть обосновано следующим образом (см. также [9]).

Рассмотрим вектор $\vec{\boldsymbol{\xi}}^{(2)} = \left(\boldsymbol{\xi}_1^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\xi}_{K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})}^{(2)} \right)$, где $\boldsymbol{\xi}_k^{(2)}$ – независимые, одинаково распределенные (как $\boldsymbol{\xi}^{(2)}$) случайные векторы (величины).

Используя формулу полного математического ожидания и свойство аддитивности математического ожидания (см., например, [14]), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\zeta^{(K)} &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}} \mathbf{E}_{\vec{\boldsymbol{\xi}}^{(2)}} (\zeta^{(K)} | \boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \\ &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}} \left(\frac{\mathbf{E}_{\vec{\boldsymbol{\xi}}^{(2)}} \left[\sum_{k=1}^{K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})} q(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}_k^{(2)}) | \boldsymbol{\xi}^{(1)} \right]}{K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})} \right) = \\ &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}} \left(\frac{\mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}} \left[q(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}) | \boldsymbol{\xi}^{(1)} \right] \times K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})}{K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})} \right) = \\ &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}} \mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}^{(2)}} \left[q(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}) | \boldsymbol{\xi}^{(1)} \right] = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi}) = I. \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим вопрос о выборе оптимального числа $K(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, минимизирующего трудоемкость $S^{(K)} = t^{(K)} \times \mathbf{D}\zeta^{(K)}$ (см. также [9]).

Согласно утверждению 3.1 получаем

$$\mathbf{D}\zeta^{(K)} = \mathbf{D}_{\xi^{(1)}} \mathbf{E}_{\bar{\xi}^{(2)}} (\zeta^{(K)} | \xi^{(1)}) + \mathbf{E}_{\xi^{(1)}} \mathbf{D}_{\bar{\xi}^{(2)}} (\zeta^{(K)} | \xi^{(1)}).$$

Используя свойства математического ожидания и дисперсии (см., например, [14]), а также независимость компонент вектора $\bar{\xi}^{(2)}$, получаем

$$\mathbf{D}\zeta^{(K)} = \mathbf{D}_{\xi^{(1)}} \mathbf{E}_{\xi^{(2)}} (q(\xi) | \xi^{(1)}) + \mathbf{E}_{\xi^{(1)}} \left(\frac{\mathbf{D}_{\xi^{(2)}} (q(\xi) | \xi^{(1)})}{K(\xi^{(1)})} \right).$$

Пусть t_1 обозначает среднее время моделирования одного выборочного значения $\xi_i^{(1)}$ случайного вектора (случайной величины) $\xi^{(1)}$, а $t_2(\xi^{(1)})$ – среднее время получения на ЭВМ одного выборочного значения $\xi_{i,k}^{(2)}$ случайного вектора (случайной величины) $\xi^{(2)}$ при фиксированном $\xi^{(1)} = \xi_i^{(1)}$. Тогда среднее время получения выборочного значения $\zeta_i^{(K)}$ случайной величины $\zeta^{(K)}$ равно

$$t^{(K)} = t_1 + \mathbf{E}_{\xi^{(1)}} \left[K(\xi^{(1)}) t_2(\xi^{(1)}) \right].$$

Для простоты дальнейших выкладок найдем оптимальное $K(\xi^{(1)})$ для весьма распространенного на практике *простейшего варианта метода расщепления*, для которого $K(\xi^{(1)}) \equiv K = \text{const}$. В этом случае

$$t^{(K)} = t_1 + K t_2, \quad \mathbf{D}\zeta^{(K)} = A_1 + \frac{A_2}{K}, \quad (3.22)$$

где $t_2 = \mathbf{E}_{\xi^{(1)}} t_2(\xi^{(1)})$ и

$$A_1 = \mathbf{D}_{\xi^{(1)}} \mathbf{E}_{\xi^{(2)}} (q(\xi) | \xi^{(1)}), \quad A_2 = \mathbf{E}_{\xi^{(1)}} \mathbf{D}_{\xi^{(2)}} (q(\xi) | \xi^{(1)}).$$

Найдем минимум функции

$$S(r) = (t_1 + t_2 r) \times \left(A_1 + \frac{A_2}{r} \right) \quad \text{для } r > 0.$$

Вычислим производную

$$S'(r) = \frac{A_1 t_2}{r^2} \left(r^2 - \frac{A_2 t_1}{A_1 t_2} \right),$$

учтем положительность величин A_1, A_2, t_1, t_2 и переменной r и получим точку минимума

$$r_{min} = \sqrt{\frac{A_2 t_1}{A_1 t_2}}. \quad (3.23)$$

Таким образом, в качестве *оптимального параметра K для простейшего варианта метода расщепления* целесообразно использовать ближайшее к r_{min} целое число:

$$K_{opt} \approx \sqrt{\frac{A_2 t_1}{A_1 t_2}}. \quad (3.24)$$

Другая возможность выбора оптимального K – считать это значение *целочисленной дискретной случайной величиной κ* с двумя значениями $K^{(0)}$ и $K^{(0)} + 1$, такими, что $K^{(0)} < r_{min} < K^{(0)} + 1$, и распределением $\mathbf{P}\{\kappa = K^{(0)}\} = K^{(0)} + 1 - r_{min}$ и $\mathbf{P}\{\kappa = K^{(0)} + 1\} = r_{min} - K^{(0)}$. Такая величина κ имеет наименьшую дисперсию среди всевозможных целочисленных случайных величин $\tilde{\kappa}$, имеющих математическое ожидание $\mathbf{E}\tilde{\kappa} = r_{min}$.

Соответствующий алгоритм моделирования выборочных значений и обоснование указанного свойства случайной величины κ приведены далее в подразделе 10.3.

Некоторая проблема, связанная с использованием величин (3.23) и (3.24), состоит в том, что величины t_1, t_2, A_1 и A_2 заранее не известны. Однако они *могут быть оценены с помощью предварительных расчетов* следующим образом.

Реализуя алгоритм 3.3 для двух параметров K_1, K_2 и относительно небольшого числа испытаний $n = \hat{n}$, получаем приближения $\tilde{t}^{(K_1)}, \tilde{t}^{(K_2)}$ времен $t^{(K_1)}, t^{(K_2)}$ (по формулам вида (1.19)) и приближения $\tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_1)}, \tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_2)}$ дисперсий $\mathbf{D}\zeta^{(K_1)}, \mathbf{D}\zeta^{(K_2)}$ (по формулам вида (1.20) или (1.22)).

Тогда с учетом соотношений (3.19) можно рассмотреть следующую систему приближенных линейных уравнений относительно неизвестных величин t_1, t_2, A_1 и A_2 :

$$\begin{cases} \tilde{t}^{(K_1)} \approx t_1 + K_1 t_2 \\ \tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_1)} \approx A_1 + A_2/K_1 \\ \tilde{t}^{(K_2)} \approx t_1 + K_2 t_2 \\ \tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_2)} \approx A_1 + A_2/K_2 \end{cases}$$

Решая эту систему, получаем приближения требуемых значений

$$t_1 \approx \frac{K_2 \tilde{t}^{(K_1)} - K_1 \tilde{t}^{(K_2)}}{K_2 - K_1}; \quad t_2 \approx \frac{\tilde{t}^{(K_1)} - \tilde{t}^{(K_2)}}{K_2 - K_1};$$

$$A_1 \approx \frac{1}{K_2 - K_1} \left(K_2 \tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_2)} - K_1 \tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_1)} \right);$$

$$A_2 \approx \frac{K_1 K_2}{K_2 - K_1} \left(\tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_1)} - \tilde{\mathbf{D}}\zeta^{(K_2)} \right).$$

На практике метод расщепления применяется также в случае, когда $\xi^{(1)}$ и $\xi^{(2)}$ (а значит, и $q(\xi)$) имеют дискретное распределение, при этом соответствующие интегралы превращаются в суммы. Приведем характерный пример из *теории переноса частиц (излучения)*.

ПРИМЕР 3.3 [9]. Пусть требуется оценить вероятность P прохождения частицы через слой вещества $\{x, y, z : 0 \leq z \leq H\}$. Моделируем на ЭВМ n траекторий блуждания частиц в слое, полагая, что каждая частица движется в веществе прямолинейными «пробегами» случайной длины; в конце каждого пробега с некоторой вероятностью она может поглотиться или рассеяться по случайному закону (см. далее раздел 6 данного пособия). Источник частиц расположен на плоскости $z = 0$.

Рассмотрим бернуллиевскую случайную величину ζ , которая равна единице, если частица вылетает из слоя через плоскость $z = H$ (при этом $\mathbf{P}\{\zeta = 1\} = P$), и нулю, если частица поглощается или вылетает из слоя через плоскость $z = 0$. Стандартный алгоритм приближения величины $P = \mathbf{E}\zeta$ описывается формулой (1.1).

Модификация стандартного алгоритма (простейший вариант метода расщепления) состоит в том, что фиксируется точка первого пересечения частицей плоскости $z = z_0$; $0 < z_0 < H$ (которая называется *плоскостью расщепления*); из этой точки «испускается» K «новых» независимых частиц, для которых результат прохождения слоя учитывается с «весом» $1/K$.

Рассмотрим случайную величину ξ (это аналог $\xi^{(1)}$ в двумерном случае), которая равна единице, если частица пересекла плоскость расщепления (вероятность этого события обозначим p_1), и нулю иначе.

Введем также случайную величину η (это аналог $\xi^{(2)}$), которая равна единице, если «новая» частица, выпущенная из точки расщепления, достигает плоскости $z = H$ (вероятность этого события обозначим p_2), и нулю иначе. Заметим, что $P = p_1 \times p_2$.

Для введенных таким образом случайных величин ξ и η выполняются соотношения

$$\mathbf{P}\{\xi = 1\} = p_1, \quad \mathbf{P}\{\xi = 0\} = 1 - p_1, \quad \mathbf{P}\{\eta = 1 | \xi = 0\} = 0,$$

$$\mathbf{P}\{\eta = 0 | \xi = 0\} = 1, \quad \mathbf{P}\{\eta = 1 | \xi = 1\} = p_2, \quad \mathbf{P}\{\eta = 0 | \xi = 1\} = 1 - p_2. \quad (3.25)$$

Рассмотрим также функцию

$$q(u, v) = \begin{cases} 0 & \text{при } v = 0, \\ 1 & \text{при } v = 1. \end{cases}$$

Несложно понять, что $P = p_1 \times p_2 = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi})$, где $\boldsymbol{\xi} = (\xi, \eta)$, и для вычисления этого математического ожидания можно применить метод расщепления (3.21).

Исследуем вопрос о выборе оптимальных параметров z_0 и K , используя построенную выше теорию оптимизации простейшего варианта метода расщепления. Применяя формулы (3.25), вычислим

$$A_1 = \mathbf{D}_\xi \mathbf{E}_\eta (q(\boldsymbol{\xi})|\xi) = p_2^2 p_1 (1 - p_1) = P \times p_2 (1 - p_1),$$

$$A_2 = \mathbf{E}_\xi \mathbf{D}_\eta (q(\boldsymbol{\xi})|\xi) = p_2 (1 - p_2) p_1 = P \times (1 - p_2).$$

Предположим теперь, что $t_2 = t_1 p_1$, то есть среднее время моделирования одной траектории «новой» частицы равно среднему времени блуждания до расщепления.

В этом случае величина трудоемкости $S^{(K)}$ равна

$$S^{(K)} = t_1 (1 + K p_1) \times P \times \left(p_2 (1 - p_1) + \frac{1 - p_2}{K} \right).$$

Оптимальное значение равно

$$K_{opt} \approx \sqrt{\frac{A_2 t_1}{A_1 t_2}} = \sqrt{\frac{1 - p_2}{P \times (1 - p_1)}};$$

(здесь, как и ранее, знак « \approx » означает, что берется ближайшее к этому значению натуральное число).

Подставляя полученное значение в $S^{(K)}$, получаем

$$S_0^{(K)} = t_1 \times P \times \left(\sqrt{p_2 (1 - p_1)} + \sqrt{p_1 (1 - p_2)} \right)^2.$$

Рассмотрев $S_0^{(K)}$ как функцию от $p_1 > 0$ (с учетом того, что $p_2 = P/p_1$), несложно получить, что минимум этой функции достигается при $p_1 = p_2 = \sqrt{P}$. Такой выбор p_1, p_2 и соотношение $t_2 = t_1 p_1$ определяют оптимальный параметр z_0 .

Таким образом, минимум трудоемкости равен

$$S_{opt}^{(K)} = 4t_1 P \sqrt{P} (1 - \sqrt{P}).$$

Максимальный выигрыш от введения расщепления равен

$$\frac{S^{(1)}}{S_{opt}^{(K)}} = \frac{t_1(1 + \sqrt{P})P(1 - P)}{4t_1P\sqrt{P}(1 - \sqrt{P})} = \frac{(1 + \sqrt{P})^2}{4\sqrt{P}};$$

здесь $S^{(1)}$ – трудоемкость алгоритма блуждания частиц без расщепления.

Если вероятность P мала, то

$$K \approx 1/\sqrt{P} \quad \text{и} \quad \frac{S^{(1)}}{S_{opt}^{(K)}} \approx \frac{1}{4\sqrt{P}},$$

т. е. выигрыш от расщепления может быть весьма ощутимым. Описание примера 3.3 закончено.

Для ряда приложений (прежде всего для задачи переноса излучения – см., в частности, только что рассмотренный пример 3.3) иногда используется *метод многократного расщепления*, когда переменное x разделяется на более чем две части (рис. 3.2). Однако для этого метода экономия времени вычисления не всегда окупает значительное усложнение расчетных программ и трудности в определении параметров.

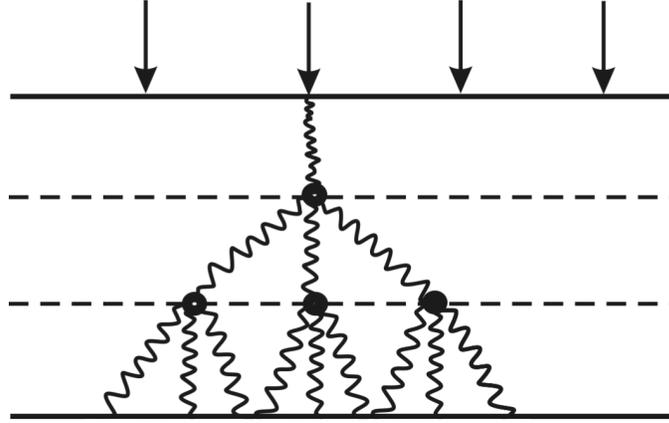


Рис. 3.2. Пример использования многократного расщепления в теории переноса частиц (излучения)

4. Принцип выборки по важности

4.1. Теорема о минимальной дисперсии. Рассмотрим снова *весовой метод Монте-Карло для приближения интеграла*

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_X \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})} f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta \approx \frac{1}{n} \left[\frac{g(\boldsymbol{\xi}_1)}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi}_1)} + \dots + \frac{g(\boldsymbol{\xi}_n)}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi}_n)} \right]; \quad (4.1)$$

здесь $X \subseteq \mathbb{R}^d$ и $f_{\boldsymbol{\xi}} > 0$ при $g(\mathbf{x}) \neq 0$ (см. также алгоритм 1.2 и формулу (3.12)).

Напомним, что при оптимизации алгоритма (4.1) следует минимизировать величину трудоемкости $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ (см. соотношение (1.18)), где t – среднее время получения выборочного значения $\zeta_i = g(\boldsymbol{\xi}_i)/f_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi}_i)$ оценителя (монте-карловской оценки) $\zeta = g(\boldsymbol{\xi}) = g(\boldsymbol{\xi})/f_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi})$ на ЭВМ, а $\mathbf{D}\zeta$ – это дисперсия:

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}\zeta^2 - (\mathbf{E}\zeta)^2 = \int_X g^2(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 = \int_X \frac{g^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})} - I^2 \quad (4.2)$$

(см. также соотношение (3.16)).

Найдем такую плотность $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$, для которой *дисперсия* (4.2) *минимальна*.

УТВЕРЖДЕНИЕ 4.1 (см., например, [9, 13]). *Минимальная дисперсия $(\mathbf{D}\zeta)^{(min)}$ получается в случае, когда плотность $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ пропорциональна модулю подынтегральной функции:*

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = f_{\boldsymbol{\xi}}^{(min)}(\mathbf{x}) = H|g(\mathbf{x})|, \quad \text{где } H = \frac{1}{\int_X |g(\mathbf{y})| d\mathbf{y}}, \quad (4.3)$$

и она равна

$$(\mathbf{D}\zeta)^{(min)} = \left(\int_X |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \right)^2 - I^2. \quad (4.4)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Соотношение (4.4) получается при прямой подстановке выражения (4.3) в соотношение (4.2) с учетом того, что $g^2(\mathbf{x})/|g(\mathbf{x})| = |g(\mathbf{x})|$.

Далее, используя формулы (4.2) и (4.4), получаем, что величина $(\mathbf{D}\zeta)^{(min)}$ действительно минимальна, так как для любой плотности

$f_{\xi}(\mathbf{x})$ разность

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\zeta - (\mathbf{D}\zeta)^{(min)} &= \left(\int_X \frac{g^2(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})} d\mathbf{x} - I^2 \right) - \\ &- \left(\left(\int_X |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \right)^2 - I^2 \right) = \int_X \frac{g^2(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})} d\mathbf{x} - \left(\int_X |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \right)^2 \end{aligned}$$

неотрицательна, так как равна дисперсии случайной величины $|g(\xi)|/f_{\xi}(\xi)$; здесь, как и ранее, случайный вектор ξ распределен согласно плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$. Утверждение 4.1 доказано.

Сформулируем также важное следствие утверждения 4.1 для случая знакопостоянной подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 4.2 (см., например, [9, 13]). *Предположим, что*

$$g(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \text{для } \mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^d. \quad (4.5)$$

Если

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) = f_{\xi}^{(min)}(\mathbf{x}) = Hg(\mathbf{x}), \quad \text{где } H = \frac{1}{I} \quad \text{и } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (4.6)$$

то $(\mathbf{D}\zeta)^{(min)} = 0$.

«Оптимальные» плотности (4.3) и (4.6) *практически никогда не используются в реальных вычислениях* по той причине, что задача вычисления нормирующей $H = 1/\int_X |g(\mathbf{y})| d\mathbf{y}$ из соотношений (4.3) и (4.6) с вычислительной точки зрения эквивалентна (для знакопостоянной функции – полностью совпадает) исходной проблеме вычисления величины I из соотношения (4.1).

Более того, в случае (4.5) алгоритм (4.1) попросту «вырождается» до тождества $I = (1/n) \times \sum_{i=1}^n I$.

4.2. Выборка по важности. Априорная оценка сверху для дисперсии. Несмотря на определенную «критику» плотностей (4.3) и (4.6), из утверждений 4.1 и 4.2 можно все-таки извлечь полезный вывод о том, что во многих случаях *можно достичь уменьшения трудоемкости $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ алгоритма (4.1), выбирая плотность $f_{\xi}(\mathbf{x})$ близкой (с точностью до нормирующего множителя H) к функции $|g(\mathbf{x})|$:*

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) \approx H|g(\mathbf{x})|. \quad (4.7)$$

При таком выборе плотности алгоритм (4.1) называется **методом выборки по важности** (см., например, [9, 13]), что соответствует англоязычному термину «*importance sampling*».

Такое название объясняется тем, что если плотность $f_{\xi}(\mathbf{x})$ пропорциональна модулю подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$, то в тех частях области интегрирования X , где $|g(\mathbf{x})|$ велико, и вклад от которых в интеграл I более существенен, моделируется больше случайных точек $\{\xi_i\}$ (рис. 4.1).

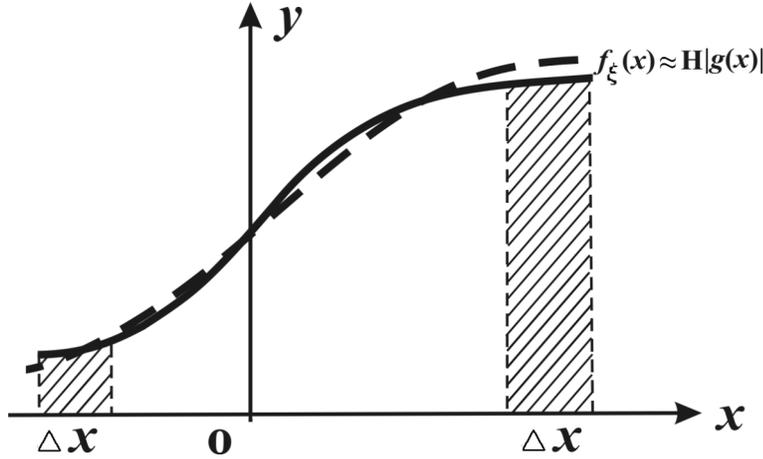


Рис. 4.1. К объяснению термина «выборка по важности»

Итак, принцип выборки по важности (4.7) позволяет получить алгоритм приближения (4.1) с малой дисперсией весового оценщика ζ . Покажем это для случая (4.5).

УТВЕРЖДЕНИЕ 4.3 (см., например, [9, 13]). Предположим, что в области интегрирования $X \subseteq \mathbb{R}^d$ плотность $f_{\xi}(\mathbf{x})$ такова, что $f_{\xi}(\mathbf{x}) > 0$ при $\mathbf{x} \in X$ и $f_{\xi}(\mathbf{x}) = 0$ при $\mathbf{x} \notin X$, а также выполнены неравенства

$$0 \leq m_1 \leq q(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})} \leq m_2 < +\infty, \quad \mathbf{x} \in X; \quad m_1, m_2 = \text{const}. \quad (4.8)$$

Тогда можно построить следующую верхнюю границу для дисперсии $D\zeta$:

$$D\zeta = Dq(\xi) \leq \frac{(m_2 - m_1)^2}{4}. \quad (4.9)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Используя свойства математического ожида-

ния (см., например, [14]), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \left(\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2 &= \mathbf{E} \left[(\zeta - \mathbf{E}\zeta) + \left(\mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right) \right]^2 = \\ &= \mathbf{D}\zeta + \left(\mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2 + 2\mathbf{E} \left[(\zeta - \mathbf{E}\zeta) \left(\mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right) \right] = \\ &= \mathbf{D}\zeta + \left(\mathbf{E}\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2. \end{aligned}$$

Тогда

$$\mathbf{D}\zeta \leq \mathbf{E} \left(\zeta - \frac{m_1 + m_2}{2} \right)^2 \leq \frac{(m_2 - m_1)^2}{4}.$$

Здесь мы использовали неравенство $m_1 \leq \zeta \leq m_2$ (ведь $\zeta = q(\boldsymbol{\xi})$ и $\boldsymbol{\xi} \in X$) и то обстоятельство, что линейная функция

$$\varphi(t) = t - (m_1 + m_2)/2, \quad m_1 \leq t \leq m_2$$

принимает минимальное и максимальное значение в точках $t_1 = m_1$ и $t_2 = m_2$ (т.е. в концах отрезка $[m_1, m_2]$). Утверждение 4.3 доказано.

Отметим, что из условия (4.8) следует соотношение (4.5).

Принципу выборки по важности (т.е. соотношению (4.7) для $g(\mathbf{x}) \geq 0$) соответствует случай $m_2 - m_1 \approx 0$; при этом $m_1 \approx m_2 \approx 1/H \approx I$.

Соотношения (4.8), (4.9) дают возможность *строить априорные оценки сверху для дисперсии $\mathbf{D}\zeta$* при применении принципа выборки по важности (4.1), (4.7) в случае (4.5).

Приведем пример применения соображений метода выборки по важности (здесь и далее такие примеры индексируются буквой «Д»).

ПРИМЕР 4.1 (Д; 1,5 балла; [13]). Пусть требуется приближенно вычислить четырехкратный интеграл

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \int_0^{+\infty} \int_0^1 \int_0^1 \left[\cos \left(\frac{\pi x^{(1)}}{2} \right) e^{-2x^{(2)}} (x^{(3)})^3 \times \right. \\ &\times \left. \arctg \left[(x^{(1)})^2 x^{(2)} + (x^{(3)})^3 (x^{(4)})^4 \right] \right] dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)} dx^{(4)}. \quad (4.10) \end{aligned}$$

В качестве плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ рассмотрим

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) &= f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = \\ &= \left[\frac{\pi}{2} \cos \left(\frac{\pi x^{(1)}}{2} \right) \right] \times \left[2e^{-2x^{(2)}} \right] \times \left[4(x^{(3)})^3 \right] \times 1, \end{aligned} \quad (4.11)$$

$0 < x^{(1)} < 1$; $x^{(2)} > 0$; $0 < x^{(3)} < 1$; $0 < x^{(4)} < 1$.

Тогда функция $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})/f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ имеет вид

$$q(\mathbf{x}) = q(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = \frac{1}{4\pi} \times \operatorname{arctg} \left[(x^{(1)})^2 x^{(2)} + (x^{(3)})^3 (x^{(4)})^4 \right].$$

Так как $0 < \operatorname{arctg} u < \pi/2$ для $u > 0$, то выполнены неравенства $m_1 \leq q(\mathbf{x}) \leq m_2$, где $m_1 = 0$ и $m_2 = 1/8$.

Имеем $I = \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi})$, где $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$, причем компоненты $\xi^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$ являются независимыми случайными величинами.

Для моделирования выборочных значений $\xi_i^{(1)}$ компоненты $\xi^{(1)}$ вектора $\boldsymbol{\xi}$, несложно получить формулу метода обратной функции распределения:

$$\int_0^{\xi_i^{(1)}} \frac{\pi}{2} \cos \left(\frac{\pi u}{2} \right) du = \alpha_{1,i}, \quad \sin \left(\frac{\pi u}{2} \right) \Big|_0^{\xi_i^{(1)}} = \alpha_{1,i} \quad \text{и} \quad \xi_i^{(1)} = \frac{2 \arcsin \alpha_{1,i}}{\pi}.$$

Проверка 2.1 для $\alpha_{1,i} = 0$ дает $\xi_i^{(1)} = (2/\pi) \arcsin 0 = 0$, а при $\alpha_{1,i} = 1$ имеем $\xi_i^{(1)} = (2/\pi) \arcsin 1 = 1$.

Компонента $\xi^{(2)}$ имеет табличное (экспоненциальное) распределение (2.18) с параметром $\lambda = 2$ (см. замечание 2.8), и для моделирования соответствующих выборочных значений $\xi_i^{(2)}$ следует использовать формулу (2.20).

Компонента $\xi^{(3)}$ также имеет табличное (степенное) распределение (2.21) с параметром $\lambda = 3$, и для моделирования соответствующих выборочных значений $\xi_i^{(3)}$ следует использовать формулу (2.22).

Наконец, компонента $\xi^{(4)}$ является стандартной (равномерно распределенной в интервале $(0, 1)$) случайной величиной.

Отсюда получаем следующий алгоритм метода Монте-Карло для приближенного вычисления интеграла (4.10).

АЛГОРИТМ 4.1. Численно моделируем выборочные значения компонент четырехмерного случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$ по формулам:

$$\xi_i^{(1)} = \frac{2 \arcsin \alpha_{1,i}}{\pi}, \quad \xi_i^{(2)} = -\frac{\ln \alpha_{2,i}}{2}, \quad \xi_i^{(3)} = \sqrt[4]{\alpha_{3,i}}, \quad \xi_i^{(4)} = \alpha_{4,i},$$

где $i = 1, \dots, n$, и $\alpha_{j,i} \in U(0, 1)$; $j = 1, 2, 3, 4$ – стандартные случайные числа. Вычисляем приближение интеграла:

$$I \approx \frac{1}{4\pi n} \sum_{i=1}^n \operatorname{arctg} \left[(\xi_i^{(1)})^2 \xi_i^{(2)} + (\xi_i^{(3)})^3 (\xi_i^{(4)})^4 \right].$$

Справедливо неравенство:

$$D\zeta \leq (m_2 - m_1)^2 / 4 \approx 3,91 \cdot 10^{-3}.$$

Число в правой части этого неравенства является достаточно малым. Поэтому построенный алгоритм 4.1 является эффективным (экономичным), а выбор плотности (4.11) соответствует принципу выборки по важности (4.7). Описание примера 4.1 закончено.

Из соотношения (4.7) следует, что в качестве плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ целесообразно выбирать классические (чаще всего – кусочно-полиномиальные) приближения модуля подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$ вида

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) = HL^{(M)}|g(\mathbf{x})| = H \sum_{m=1}^M w^{(m)}(\mathbf{g}) \chi^{(m)}(\mathbf{x}). \quad (4.12)$$

Здесь $\{\chi^{(m)}(\mathbf{x})\}$ – заданные «базисные» функции, согласованные с заданными узловыми точками $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$, коэффициенты $\{w^{(m)}(\mathbf{g})\}$ зависят от значений $\mathbf{g} = (|g(\mathbf{x}_1)|, \dots, |g(\mathbf{x}_M)|)$, а H – нормирующая константа. В этом случае соответствующий алгоритм выборки по важности можно причислить к *дискретно-стохастическим алгоритмам численного интегрирования* – см. [9, 17].

Здесь возникают требования «моделируемости» приближения $L^{(M)}|g(\mathbf{x})|$, связанные с необходимостью существования эффективного алгоритма реализации выборочных значений вектора ξ согласно плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$.

Из соотношения (4.12) следует, что для моделирования вектора ξ можно использовать *алгоритм метода дискретной суперпозиции* (см.

подраздел 11.1 данного пособия). При этом требуется неотрицательность коэффициентов $\{w^{(m)}(\mathbf{g})\}$. Кроме того, «базисные» функции $\{\chi^{(m)}(\mathbf{x})\}$ должны быть пропорциональными плотностям распределения случайных векторов, для которых имеются эффективные алгоритмы реализации выборочных значений (подробности см. в подразделе 11.4 данного пособия).

Проведенные исследования известных приближений вида (4.12) показали, что требованиям «моделируемости» наилучшим образом удовлетворяет конечно-элементная аппроксимация Стренга – Фикса [18].

4.3. Включение особенности в плотность. Возможность выбора плотности вида (4.7) позволяет также обеспечить конечность дисперсии (4.2) при наличии особенностей у подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$.

ПРИМЕР 4.2. Рассмотрим интеграл

$$I = \int_0^1 g(x) dx = \int_0^1 \frac{a(x)}{\sqrt{x}} dx,$$

где $a(x)$ – непрерывная на $[0, 1]$ функция такая, что $a(0) \neq 0$. Подынтегральная функция $g(x)$ имеет особенность (разрыв второго рода в нуле).

Если в качестве $f_\xi(x)$ выбрать плотность распределения стандартного случайного числа $\xi = \alpha$ (то есть $f_\xi(x) \equiv 1$, $0 < x < 1$), то оценка $\zeta^{(1)} = q^{(1)}(\xi) = a(\alpha)/\sqrt{\alpha}$ имеет бесконечную дисперсию:

$$\mathbf{D}\zeta^{(1)} = \int_0^1 \frac{a^2(x)}{x} dx - I^2 = +\infty,$$

и алгоритм 1.2 неприменим.

Однако можно выбрать плотность $f_\xi(x)$ таким образом, чтобы отношение $|g(x)|/f_\xi(x)$ (а с ним и дисперсия $\mathbf{D}q(\xi)$) были ограничены. Такой прием называют **включением особенности в плотность**.

Конкретнее, можно взять $f_\xi(x) = 1/(2\sqrt{x})$ (соответствующая моделирующая формула метода обратной функции распределения $\xi_0 = \alpha_0^2$), и тогда оценка $\zeta^{(2)} = q^{(2)}(\xi) = 2a(\xi)$ имеет уже конечную дисперсию

$$\mathbf{D}\zeta^{(2)} = 2 \int_0^1 \frac{a^2(x)}{\sqrt{x}} dx - I^2 < +\infty.$$

Описание примера 4.2 закончено.

Пример 4.2 очередной раз подтверждает тезис, сформулированный в подразделе 2.8: «удобство» моделирования случайного вектора ξ не

всегда означает эффективность (экономичность) соответствующего алгоритма 1.2) с оценителем (монте-карловской оценкой) $\zeta = q(\xi)$.

Эффективное включение особенностей в плотность возможно также в случае, когда подынтегральная функция включает обобщенные функции:

$$I = \int_X G(\mathbf{x}) \left(\sum_{j=1}^A g_j(\mathbf{x}) \delta(Y_j(\mathbf{x})) \right) d\mathbf{x}, \quad A = M \vee \infty. \quad (4.13)$$

Здесь функции $g_j(\mathbf{x})$ принимают положительные значения на гиперповерхностях S_j в \mathbb{R}^d , определяемых уравнениями $Y_j(\mathbf{x}) = 0$.

Обозначение $\delta(u)$ определяет *дельта-функцию Дирака*, такую, что для любой непрерывной функции $y(u)$ выполнено соотношение

$$\int_{\mathbb{R}} y(u) \delta(u - u_0) du = y(u_0).$$

Таким образом, соотношение (4.13) представляет собой интеграл по объединению гиперповерхностей S_j . Как правило, *теория «классических» (сеточных) кубатурных формул не дает удовлетворительных алгоритмов вычисления таких интегралов.*

Для понимания дальнейших рассуждений целесообразно рассмотреть обобщение теории непрерывных случайных величин, для которого принципиально понятие случайной величины ξ , распределенной согласно *дельта-плотности* $f_\xi(x) = \delta(x - a)$ (здесь $a = \text{const}$).

Это понятие означает, что с *вероятностью единица* $\xi \equiv a$, иными словами, «обычное» число a трактуется как случайная величина.

Такой подход позволяет рассматривать распределения *дискретных случайных величин* как смеси дельта-плотностей (см., например, [9, 13], а также подраздел 10.1 данного пособия).

По аналогии с этим подходом и следуя принципу выборки по важности (или методу включения особенности в плотность) для интеграла (4.13) можно рассмотреть *допустимую плотность* вида

$$f_\xi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^A p_j f_j(\mathbf{x}) \delta(Y_j(\mathbf{x}))$$

(см., например, [9, 13]). Здесь функции $f_j(\mathbf{x})$ являются плотностями распределения на гиперповерхностях S_j , а числа $\{p_j\}$ являются вероятностями (т. е. $p_j > 0$ и $\sum_{j=1}^A p_j = 1$).

Учитывая то, что для $\mathbf{x} \in S_j$ выполнено равенство $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = p_j f_j(\mathbf{x})$, перепишем интеграл (4.13) в виде (4.1):

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

Здесь

$$\zeta = \sum_{j=1}^A \frac{G(\boldsymbol{\xi}) g_j(\boldsymbol{\xi}) \delta(Y_j(\boldsymbol{\xi}))}{p_j f_j(\boldsymbol{\xi})}, \quad (4.14)$$

и случайный вектор $\boldsymbol{\xi}$ распределен согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$.

Таким образом, можно построить алгоритм (4.1) (или алгоритм 1.2), причем для моделирования выборочных значений $\boldsymbol{\xi}_i$ следует использовать метод дискретной суперпозиции (см., например, [9, 13], а также раздел 11 данного пособия).

АЛГОРИТМ 4.2. Моделируем номер m_i согласно вероятностям $\{p_j\}$; при этом выборочное значение $\boldsymbol{\xi}_i$ численно реализуется на гиперповерхности S_{m_i} согласно плотности $f_{m_i}(\mathbf{x})$. Соответствующий вклад в статистическую оценку (4.1) равен

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

По аналогии с утверждением 4.1 несложно показать, что минимальная дисперсия $\mathbf{D}\zeta$ оценителя (4.14) достигается, когда плотность $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ берется в виде

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = H \sum_{j=1}^A |G(\mathbf{x})| g_j(\mathbf{x}) \delta(Y_j(\mathbf{x})),$$

где H – нормирующая константа.

5. Методы уменьшения дисперсии весового оценителя интеграла

5.1. Метод выделения главной части. Следующие рассуждения дают один из наиболее эффективных методов уменьшения дисперсии $\mathbf{D}\zeta$ из соотношения (4.2); здесь ζ – весовой оценитель (монтекарловская оценка) интеграла I из соотношения (4.1); см., например, [9, 13].

Предположим, что *существует функция $g^{(0)}(\mathbf{x})$, близкая к $g(\mathbf{x})$ для $\mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^d$ и такая, что интеграл $I^{(0)} = \int_X g^{(0)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ может быть вычислен аналитически.*

Тогда для повышения эффективности алгоритма метода Монте-Карло (4.1) (или алгоритма 1.2) можно использовать стандартную технологию **выделения главной части** (см., например, [9, 13]), основанную на соотношении

$$I = I^{(0)} + \int_X [g(\mathbf{x}) - g^{(0)}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}.$$

Применим стандартный весовой алгоритм (4.1) (или алгоритм 1.2) для второго слагаемого последней суммы. Строим соответствующий оценитель и реализуем приближение интеграла:

$$I = \mathbf{E}\zeta^{(0)} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i^{(0)}, \quad \text{где} \quad \zeta^{(0)} = I^{(0)} + \frac{g(\boldsymbol{\xi}^{(0)}) - g^{(0)}(\boldsymbol{\xi}^{(0)})}{f_{\boldsymbol{\xi}^{(0)}}(\boldsymbol{\xi}^{(0)})},$$

а случайный вектор $\boldsymbol{\xi}^{(0)}$ распределен согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}^{(0)}}(\mathbf{x})$.

Последняя плотность $f_{\boldsymbol{\xi}^{(0)}}(\mathbf{x})$ может весьма значительно отличаться от плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ из исходного алгоритма (4.1).

Например, в случае, когда интегрирование ведется по многомерному единичному кубу $X = \Delta^{(d)} = (0, 1)^d$ и $g(\mathbf{x}) \approx g^{(0)}(\mathbf{x})$ (это означает, что разность $g(\mathbf{x}) - g^{(0)}(\mathbf{x})$ равномерно мала, т. е. близка к малой константе в кубе $\Delta^{(d)}$), вместо плотности (4.7) для получения малой дисперсии оценителя $\zeta^{(0)}$ можно взять плотность случайной величины $\boldsymbol{\xi}^{(0)} = \boldsymbol{\alpha}$, равномерно распределенной в кубе $\Delta^{(d)}$, выборочные значения которой легко моделируются на ЭВМ.

Так или иначе, *при $g(\mathbf{x}) \approx g^{(0)}(\mathbf{x})$ дисперсия случайной величины $\zeta^{(0)}$ может быть достаточно малой.*

ПРИМЕР 5.1 [5, 9]. Рассмотрим следующую тестовую задачу. Исследуем алгоритмы приближенного вычисления интеграла по единичному

двадцатимерному кубу $\Delta^{(20)}$ с известным значением:

$$I = \int_0^1 \dots \int_0^1 \left(e^{x^{(1)} \dots x^{(20)}} - 1 \right) dx^{(1)} \dots dx^{(20)} \approx 9,54 \cdot 10^{-7}.$$

Возьмем в качестве $f_{\xi}(\mathbf{x})$ плотность равномерного распределения в двадцатимерном единичном кубе $\Delta^{(20)}$: $f_{\xi}(\mathbf{x}) \equiv 1, \mathbf{x} \in \Delta^{(20)}$. Тогда, согласно формуле (4.1), имеем

$$I = \mathbf{E}\zeta, \quad \zeta = e^{\alpha^{(1)} \dots \alpha^{(20)}} - 1,$$

где $\alpha^{(i)} \in U(0, 1)$; $i = 1, \dots, 20$ – стандартные случайные числа.

Несложно подсчитать, что $\mathbf{D}\zeta \approx 3,0 \cdot 10^{-10}$.

Учитывая вид разложения экспоненты в ряд Тейлора в окрестности нуля

$$e^u = 1 + u + \frac{u^2}{2} + o(u^2), \quad (5.1)$$

целесообразно выделить главную часть

$$g^{(0)}(x^{(1)}, \dots, x^{(20)}) = x^{(1)} \times \dots \times x^{(20)},$$

при этом

$$I^{(0)} = 2^{-20} \quad \text{и} \quad \zeta^{(1)} = 2^{-20} + e^{\alpha^{(1)} \dots \alpha^{(20)}} - 1 - \alpha^{(1)} \times \dots \times \alpha^{(20)};$$

здесь $f_{\xi^{(0)}}(\mathbf{x}) \equiv f_{\xi}(\mathbf{x})$.

Заметим, что, с учетом соотношения (5.1),

$$\mathbf{D}\zeta^{(0)} \approx \frac{1}{4} \int_0^1 \dots \int_0^1 \left(x^{(1)} \times \dots \times x^{(20)} \right)^4 dx^{(1)} \dots dx^{(20)} = \frac{5^{-20}}{4} \approx 2,5 \cdot 10^{-15},$$

то есть дисперсия уменьшается на пять порядков. Описание примера 5.1 закончено.

При построении интегрируемой функции $g^{(0)}(\mathbf{x})$ можно использовать классические (чаще всего – кусочно-полиномиальные) приближения подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$ (в этом случае метод выделения главной части можно причислить к *дискретно-стохастическим алгоритмам численного интегрирования* [9, 17]). Здесь, в отличие от подходов, связанных с выборкой по важности (см. подраздел 4.2), не нужны дополнительные требования «моделируемости» (т. е. функция $g^{(0)}(\mathbf{x})$ не

должна быть пропорциональной плотности распределения случайного вектора $\xi^{(0)}$, для которого имеются эффективные алгоритмы численного моделирования).

5.2. Интегрирование по части области. Рассмотрим следующий аналог метода выделения главной части.

Пусть, как и в соотношении (4.1), интеграл представлен в виде

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_X q(\mathbf{x}) f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}; \quad q(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})}.$$

Предположим, что можно аналитически вычислить следующие интегралы по некоторому подмножеству X_2 области интегрирования $X \subseteq \mathbb{R}^d$:

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

при этом $0 < i_2 < 1$; здесь мы считаем, что $f_{\xi}(\mathbf{x}) = 0$ при $\mathbf{x} \notin X$.

В этом случае целесообразно представить исходный интеграл I в виде

$$\begin{aligned} I &= \int_X q(\mathbf{x}) f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = I_2 + \int_{X_1} q(\mathbf{x}) f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= I_2 + i_1 \times \int_{X_1} q(\mathbf{x}) f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta^{(1)}, \end{aligned}$$

где

$$X_1 = X \setminus X_2, \quad i_1 = 1 - i_2, \quad \zeta^{(1)} = I_2 + i_1 q(\xi^{(1)})$$

и $\xi^{(1)}$ – случайный вектор, распределенный в подобласти X_1 согласно плотности усеченного распределения $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{x}) = f_{\xi}(\mathbf{x})/i_1$; $\mathbf{x} \in X_1$.

Соответствующий алгоритм метода Монте-Карло

$$I \approx I_2 + \frac{i_1}{n} \sum_{i=1}^n q(\xi_i^{(1)}) \quad (5.2)$$

называется **методом интегрирования по части области** (см., например, [9, 13]).

Следующее утверждение показывает целесообразность использования метода (5.2) вместо (4.1) для уменьшения дисперсии оценителя (и, как правило, трудоемкости) весового метода Монте-Карло.

УТВЕРЖДЕНИЕ 5.1 (см., например, [5, 9]). *Справедливо следующее неравенство $\mathbf{D}\zeta^{(1)} \leq i_1 \times \mathbf{D}\zeta$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Используя соотношения вида (4.2), а также свойства интеграла и дисперсии (см., например, [14]), имеем

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

Рассмотрим разность

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

и покажем, что она неотрицательна. Заметим, что

$$\left(\int_{X_1} q(\mathbf{x}) f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 = (I - I_2)^2 \quad \text{и} \quad \int_{X_2} q^2(\mathbf{x}) f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \Delta + \frac{I_2^2}{i_2},$$

где $\Delta = \int_{X_2} \left(q(\mathbf{x}) - \frac{I_2}{i_2} \right)^2 f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \geq 0$. Поэтому

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

Утверждение 5.1 доказано.

Если подобласть X_2 близка к области интегрирования X , то *метод интегрирования по части области* превращается в *аналог метода выделения главной части* (здесь $g^{(0)}(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$ для $\mathbf{x} \in X_2$ и $g_0(\mathbf{x}) \equiv 0$ иначе).

Тем не менее выгода от применения метода интегрирования по части области имеется и в случае, когда множество X_2 значительно меньше, чем X , но в этом случае уменьшение дисперсии $\mathbf{D}\zeta$ может быть не таким значительным.

Если имеется алгоритм моделирования (реализации на ЭВМ) выборочного значения ξ_0 случайного вектора $\xi \in X$ согласно плотности $f_\xi(\mathbf{x})$, то для случайного вектора $\xi^{(1)} \in X_1 \subset X$ можно использовать следующий алгоритм метода исключения для моделирования усеченного распределения.

АЛГОРИТМ 5.1 (см., например, [9], а также алгоритм 11.14 из подраздела 11.6 данного пособия). 1. Моделируем ξ_0 согласно плотности $f_\xi(\mathbf{x})$.

2. Если $\xi_0 \in X_1$, то $\xi_0^{(1)} = \xi_0$, иначе снова повторяем пункт 1 и т. д.

При этом метод интегрирования по части области практически не дает выигрыша, так как уменьшение дисперсии вида $i_1 \times \mathbf{D}\zeta$ сочетается с необходимостью моделирования в среднем $\mathbf{P}\{\xi \in X\}/\mathbf{P}\{\xi \in X_1\} = 1/i_1$ выборочных значений вектора ξ .

Более предпочтительным является моделирование выборочного значения $\xi_0^{(1)}$ случайного вектора $\xi^{(1)}$ непосредственно в области X_1 согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{x})$ (см. подраздел 11.6 данного пособия).

Приведем пример применения метода интегрирования по части области.

ПРИМЕР 5.2 [5, 9, 17]. Пусть требуется вычислить объем \bar{G} трехмерной фигуры G , ограниченной поверхностью (в сферических координатах (r, ϕ, θ))

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

Обозначим через X_2 и X вписанный в G и описанный около G шары, радиусы и объемы которых равны соответственно $a - h$, $a + h$ и \bar{X}_2 , \bar{X} (рис. 5.1). Заметим, что искомая величина равна интегралу

$$\bar{G} = \int_X \chi^{(G)}(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}) dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)},$$

где $\chi^{(G)}(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)})$ – индикатор множества G .

Рассмотрим сначала весовой алгоритм 1.2 со случайным вектором $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, имеющим плотность равномерного распределения

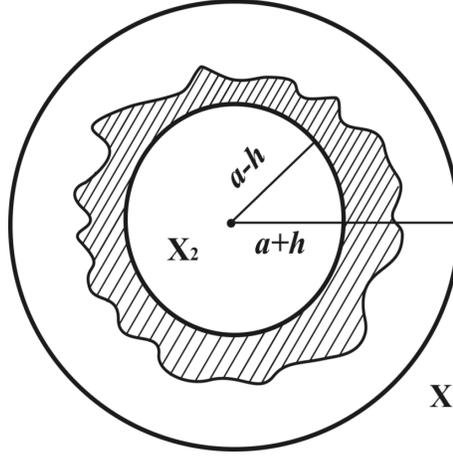


Рис. 5.1. Иллюстрация к примеру 5.2

в области X :

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{\bar{X}} = \frac{3}{4\pi(a+h)^3}, \quad \mathbf{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}) \in X.$$

Этот алгоритм дает приближение

$$\bar{G} = \mathbf{E}\zeta \approx \frac{\bar{X}}{n} \sum_{i=1}^n \chi^{(G)}(\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)}); \quad \zeta = \bar{X}\chi^{(G)}(\boldsymbol{\xi}). \quad (5.3)$$

Моделирующие формулы для выборочных значений компонент случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ имеют вид (см., например, [9], а также подраздел 6.4 данного пособия):

$$\xi_i^{(1)} = \rho_i \sin \varphi_i \sin \tilde{\theta}_i, \quad \xi_i^{(2)} = \rho_i \cos \varphi_i \sin \tilde{\theta}_i, \quad \xi_i^{(3)} = \rho_i \cos \tilde{\theta}_i; \quad (5.4)$$

$$\rho_i = (a+h)\alpha_{1,i}^{1/3}, \quad \varphi_i = 2\pi\alpha_{2,i}, \quad \cos \tilde{\theta}_i = 1 - 2\alpha_{3,i}; \quad \alpha_{j,i} \in U(0,1). \quad (5.5)$$

Заметим, что при получении значений $\chi^{(G)}(\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)})$ для вычисления приближения (5.3) переход к декартовым координатам (5.4) можно не осуществлять, а лишь проверять условие

$$\rho_i \leq a + ht(\varphi_i, \tilde{\theta}_i), \quad (5.6)$$

при выполнении которого $\chi^{(G)}(\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)}) = 1$, а иначе $\chi^{(G)}(\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)}) = 0$.

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

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

где $X_1 = X \setminus X_2 = \left\{ (x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}) : (a-h)^2 < (x^{(1)})^2 + (x^{(2)})^2 + (x^{(3)})^2 < (a+h)^2 \right\}$.

Рассмотрим соответствующую модификацию метода интегрирования по части области:

$$\bar{G} = \mathbf{E}\zeta^{(1)} \approx \bar{X}_2 + \frac{\bar{X}_1}{n} \sum_{i=1}^n \chi^{(G)}(\xi_i^{(1,1)}, \xi_i^{(1,2)}, \xi_i^{(1,3)}); \zeta^{(1)} = \bar{X}_2 + \bar{X}_1 \chi^{(G)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}), \quad (5.7)$$

где случайная точка $\boldsymbol{\xi}^{(1)} = (\xi^{(1,1)}, \xi^{(1,2)}, \xi^{(1,3)})$ распределена равномерно в X_1 согласно плотности

$$f_{\boldsymbol{\xi}^{(1)}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\bar{X}_1} = \frac{3}{4\pi[(a+h)^3 - (a-h)^3]}, \quad \mathbf{x} \in X_1.$$

По аналогии с реализацией равномерно распределенной случайной точки в шаре с помощью перехода к сферическим координатам можно получить формулы для моделирования случайных точек $(\xi_i^{(1,1)}, \xi_i^{(1,2)}, \xi_i^{(1,3)})$, равномерно распределенных в шаровом слое X_1 . Эти формулы совпадают с соотношениями (5.4) и (5.5) с той лишь разницей, что по-другому вычисляется компонента ρ_i :

$$\rho_i^{(1)} = \sqrt[3]{\alpha_{1,i}^{(1)}(a+h)^3 + (1 - \alpha_{1,i}^{(1)})(a-h)^3}. \quad (5.8)$$

При подсчете $\chi^{(G)}(\xi_i^{(1,1)}, \xi_i^{(1,2)}, \xi_i^{(1,3)})$ из (5.7) можно не использовать преобразование (5.4), а лишь проверять условие (5.6) для $\rho_i = \rho_i^{(1)}$.

Из формул (5.3) – (5.8) следует, что вычислительные затраты на реализацию приближений (5.3) и (5.7) практически одинаковы, в то время как

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{D}\left(\bar{X}\chi^{(G)}(\boldsymbol{\xi})\right) > \mathbf{D}\zeta^{(1)} = \mathbf{D}\left(\bar{X}_2 + \bar{X}_1\chi^{(G)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})\right),$$

так как

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

$\mathbf{D}(\bar{X}_2 + \bar{X}_1 \chi^{(G)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})) = \bar{X}_1(\bar{G} - \bar{X}_2) - (\bar{G} - \bar{X}_2)^2 = (\bar{G} - \bar{X}_2)(\bar{X} - \bar{G});$
здесь использовано равенство $\bar{X}_1 + \bar{X}_2 = \bar{X}$.

Таким образом,

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

Последняя величина имеет асимптотику $\frac{6h}{a}$ при $h \rightarrow 0$. Описание примера 5.2 закончено.

5.3. Выборка по группам. Рассмотрим следующее представление приближаемого интеграла (4.1):

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_X q(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{m=1}^M \int_{X_m} q(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}; \quad q(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})},$$

где X_m – это подмножества области интегрирования X , имеющие взаимные пересечения меры нуль, и такие, что $X = X_1 \cup \dots \cup X_M$.

Введем обозначения

$$p_m = \int_{X_m} f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad I_m = \int_{X_m} q(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad f_{\boldsymbol{\xi}^{(m)}}(\mathbf{x}) = \frac{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})}{p_m}$$

для $\mathbf{x} \in X_m$.

Предположим, что $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = 0$ для $\mathbf{x} \notin X$. Тогда $p_1 + \dots + p_M = 1$.

Кроме того,

$$I_1 + \dots + I_M = I \quad \text{и} \quad I_m = \mathbf{E} \left[p_m q(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) \right],$$

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

АЛГОРИТМ 5.2 (см., например, [9, 13]). Для каждого $m = 1, \dots, M$ приближенно вычисляем значения I_m согласно стандартному алгоритму 1.2 с числом n_m выборочных значений $\{\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}\}$ случайного вектора $\boldsymbol{\xi}^{(m)}$, распределенного согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}^{(m)}}(\mathbf{x})$:

$$I_m \approx \frac{p_m}{n_m} \sum_{i_m=1}^{n_m} q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}),$$

и используем приближение

$$I \approx Z_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \frac{p_m}{n_m} \sum_{i_m=1}^{n_m} q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}); \quad (5.9)$$

где

$$n = n_1 + \dots + n_M. \quad (5.10)$$

Алгоритм 5.2 определяет **метод выборки по группам** или **метод расслоенной выборки**.

Для $M = 2$ алгоритм 5.2 отличается от метода интегрирования по части области, так как для последнего считается, что интеграл I_2 известен, а для алгоритма 5.2 величина I_2 считается приближенно методом Монте-Карло с помощью численного моделирования значений $\{\boldsymbol{\xi}_{i_2}^{(2)}; i_2 = 1, \dots, n_2\}$.

Сравним выборочную дисперсию

$$\mathbf{D}Z_n = \frac{\mathbf{D}\zeta}{n}$$

оценителя $\zeta = q(\boldsymbol{\xi})$ стандартного весового алгоритма 1.2 приближения интеграла I (здесь моделируется n случайных точек $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$ во всей области интегрирования X согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$) и выборочную дисперсию $\mathbf{D}Z_n^{(M)}$ метода расслоенной выборки:

$$\mathbf{D}Z_n^{(M)} = \sum_{m=1}^M \left(\frac{p_m}{n_m}\right)^2 \sum_{i_m=1}^{n_m} \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}) = \sum_{m=1}^M \frac{p_m^2 \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})}{n_m}, \quad (5.11)$$

где

$$\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) = \frac{1}{p_m} \int_{X_m} q^2(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \left(\frac{I_m}{p_m}\right)^2. \quad (5.12)$$

При выводе соотношений (5.11), (5.12) использованы независимость величин $\{\boldsymbol{\xi}_{i_m}^{(m)}\}$ и свойства дисперсии (см., например, [14]).

Для корректности этого сравнения *принципиальным является соблюдение условия* (5.10).

УТВЕРЖДЕНИЕ 5.2 (см., например, [5, 9, 13]). *Минимум величины $\mathbf{D}Z_n^{(M)}$ равен*

$$d_n^2 = \frac{1}{n} \left[\sum_{m=1}^M p_m \sqrt{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})} \right]^2. \quad (5.13)$$

Эта величина не превышает значение выборочной дисперсии $\mathbf{D}Z_n$ для стандартного алгоритма 1.2 и реализуется для

$$n_m = \frac{np_m \sqrt{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})}}{\sum_{m'=1}^M p_{m'} \sqrt{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m')})}}. \quad (5.14)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Несложно убедиться в том, что при подстановке значений (5.14) в соотношение (5.11) получается число d_n^2 из формулы (5.13).

Чтобы показать минимальность этого числа среди различных значений (5.11), заметим, что величину d_n^2 можно представить в виде

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

Используя *неравенство Коши – Буняковского*

$$\left(\sum_{k=1}^K a_k b_k \right)^2 \leq \sum_{k=1}^K a_k^2 \times \sum_{k=1}^K b_k^2, \quad (5.15)$$

получаем

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

что и требовалось показать.

Осталось доказать, что $d_n^2 \leq \mathbf{D}Z_n$.

Умножая значения (5.12) на p_m и суммируя эти произведения по m , получаем

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

Используя в очередной раз *неравенство Коши – Буняковского* (5.15), получаем

$$I^2 = \left(\sum_{m=1}^M I_m \right)^2 = \left[\sum_{m=1}^M \left(\frac{I_m}{\sqrt{p_m}} \times \sqrt{p_m} \right) \right]^2 \leq$$

$$\leq \sum_{m=1}^M \frac{I_m^2}{p_m} \times \sum_{m=1}^M p_m = \sum_{m=1}^M \frac{I_m^2}{p_m}.$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} \mathbf{D}Z_n &= \frac{1}{n} \left[\int_X q^2(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - I^2 \right] \geq \\ &\geq \frac{1}{n} \left[\int_X q^2(\mathbf{x}) f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \sum_{m=1}^M \frac{I_m^2}{p_m} \right] = \frac{1}{n} \left[\sum_{m=1}^M p_m \mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)}) \right]. \end{aligned}$$

Последнее выражение равно значению $\mathbf{D}Z_n^{(M)}$ при условии, что

$$n_m = n p_m. \quad (5.16)$$

Поэтому

$$d_n^2 \leq \mathbf{D}Z_n^{(M)}|_{n_m=n p_m} \leq \mathbf{D}Z_n. \quad (5.17)$$

Утверждение 5.2 доказано.

Утверждение 5.2 показывает, что *оптимальная версия выборки по группам в определенной степени похожа на выборку по важности*: берется больше случайных узлов в тех «важных» подмножествах X_m области интегрирования, где большими являются значения p_m и $\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})$. Однако здесь распределение узлов задается не с помощью специального выбора плотности распределения, а с помощью определения чисел выборочных значений в X_m при ограничении (5.10).

Как это часто бывает, использование теоретически оптимальных значений (5.14) затруднено. Причин здесь как минимум две.

Первая из них связана с тем, что *величины $\{n_m\}$ должны быть целыми*. Решением этой проблемы является выбор целых чисел $\{n_m\}$, наиболее близких к значениям (5.14) и удовлетворяющих ограничению (5.10).

Вторая (более серьезная, принципиальная) трудность при использовании формул (5.14) связана с тем, что *величины дисперсий $\{\mathbf{D}q(\boldsymbol{\xi}^{(m)})\}$ неизвестны и не могут быть получены с помощью предварительных расчетов*.

Однако можно заметить, что при доказательстве утверждения 5.2 мы показали, что *метод расслоенной выборки дает уменьшение дисперсии по сравнению со стандартным алгоритмом 1.2 уже при условии*

$n_m = np_m$ – см. соотношения (5.16), (5.17). Соотношение (5.16) определяет *типическую выборку* – см., например, [15].

Получить типическую выборку на практике, как правило, несложно. Например, если интегрирование идет по одномерному единичному кубу $X = \Delta^{(d)}$ (как в примере 5.1), то можно взять в качестве $f_{\xi}(\mathbf{x})$ плотность равномерного распределения и разбить куб $\Delta^{(d)}$ на одинаковые подкубики X_m ; $m = 1, \dots, M$ объема $p_m = 1/M$. В этом все величины $\{n_m\}$ одинаковы и равны n/M , и надо лишь позаботиться о том, чтобы это число было целым.

На описанной технологии разбиения единичного куба для некоторых «крайних» случаев (в частности, при $n_1 = \dots = n_M = 1$) удается получить *оптимальные* (по порядку верхней оценки погрешности) *кубатурные формулы Н. С. Бахвалова* для подынтегральных функций «ограниченной» гладкости (см., в частности, [9, 17]). Эти конструкции в свое время послужили основой для создания *теории дискретно-стохастических методов численного интегрирования* [17].

В следующем тестовом примере показаны ситуации удачного и неудачного выбора чисел $\{n_m\}$ в методе выборки по группам.

ПРИМЕР 5.3 [5, 9, 17]. Рассмотрим тестовую задачу вычисления интеграла

$$I = \int_0^1 e^x dx = e - 1.$$

Сначала оценим величину I с использованием $n = 10$ точек, равномерно распределенных в интервале $(0, 1)$:

$$I \approx Z_{10} = \frac{e^{\alpha_1} + \dots + e^{\alpha_{10}}}{10}; \quad \alpha_i \in U(0, 1); \quad i = 1, \dots, 10.$$

Выборочная дисперсия этой оценки равна

$$\mathbf{D}Z_{10} = \frac{1}{10} \left[\int_0^1 e^{2x} dx - \left(\int_0^1 e^x dx \right)^2 \right] = \frac{\frac{e^2}{2} - \frac{1}{2} - (e - 1)^2}{10} \approx 0,02421.$$

Теперь разобьем $(0, 1)$ на два интервала $(0, 1/2)$ и $[1/2, 1)$ (т. е. здесь $M = 2$) и будем выбирать в них равномерно распределенные точки по формулам $\xi_{i_1}^{(1)} = 0,5\alpha_{i_1}$ и $\xi_{i_2}^{(2)} = 0,5(1 + \alpha_{i_2})$. Тогда $p_1 = p_2 = 1/2$ и

$$Z_{n_1+n_2}^{(2)} = \frac{1}{2n_1} \sum_{i_1=1}^{n_1} \exp \xi_{i_1}^{(1)} + \frac{1}{2n_2} \sum_{i_2=1}^{n_2} \exp \xi_{i_2}^{(2)},$$

причем $n_1 + n_2 = 10$.

Согласно формуле (5.11), дисперсия этой оценки равна

$$\mathbf{D}Z_{n_1+n_2}^{(2)} = \frac{\mathbf{D} \exp \xi^{(1)}}{4n_1} + \frac{\mathbf{D} \exp \xi^{(2)}}{4n_2},$$

где

$$\mathbf{D} \exp \xi^{(1)} = 2 \int_0^{1/2} e^{2x} dx - \left(2 \int_0^{1/2} e^x dx \right)^2 = e - 1 - 4(\sqrt{e} - 1)^2 \approx 0,03492,$$

$$\mathbf{D} \exp \xi^{(2)} = 2 \int_{1/2}^1 e^{2x} dx - \left(2 \int_{1/2}^1 e^x dx \right)^2 = e^2 - e - 4(e - \sqrt{e})^2 \approx 0,09493.$$

Согласно соотношению (5.14), оптимальное число n_1 следует выбирать близким к

$$5\sqrt{\mathbf{D} \exp \xi^{(1)}} / \left(\frac{1}{2} \sqrt{\mathbf{D} \exp \xi^{(1)}} + \frac{1}{2} \sqrt{\mathbf{D} \exp \xi^{(2)}} \right) \approx 3,775.$$

Возьмем $n_1 = 4$ и $n_2 = 6$. Тогда

$$\mathbf{D}Z_{4+6}^{(2)} = \frac{1}{16} \mathbf{D} \exp \xi^{(1)} + \frac{1}{24} \mathbf{D} \exp \xi^{(2)} \approx 0,006138,$$

что заметно (в четыре раза) меньше, чем $\mathbf{D}Z_{10}$.

Если же взять типическую выборку $n_1 = n_2 = 5$ (см. формулу (5.16)), то

$$\mathbf{D}Z_{5+5}^{(2)} = \frac{1}{20} \left(\mathbf{D} \exp \xi^{(1)} + \mathbf{D} \exp \xi^{(2)} \right) \approx 0,006493,$$

что также меньше, чем $\mathbf{D}Z_{10}$.

В качестве примера неудачного выбора n_1 и n_2 можно рассмотреть $n_1 = 9$ и $n_2 = 1$. Здесь

$$\mathbf{D}Z_{9+1}^{(2)} = \frac{1}{36} \mathbf{D} \exp \xi^{(1)} + \frac{1}{4} \mathbf{D} \exp \xi^{(2)} \approx 0,02470,$$

что уже больше, чем $\mathbf{D}Z_{10}$. Описание примера 5.3 закончено.

5.4. Краткий обзор методов уменьшения трудоемкости стандартного весового алгоритма метода Монте-Карло для вычисления интеграла. Подведем некоторые итоги.

В данном пособии (а также в учебниках [5, 9, 13, 17] и др.) представлен целый ряд технологий *уменьшения трудоемкости* $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ стандартного весового алгоритма 1.2 метода Монте-Карло для «методической» задачи численного приближения интеграла I .

В частности, к проблеме *уменьшения среднего времени t* моделирования выборочных значений $\zeta_i = q(\xi_i)$ относятся все вопросы, связанные с моделированием случайных векторов и величин (см., в частности, разделы 2, 3, 9–14 данного пособия). Как отмечено выше, к существенному изменению величины t (по сравнению со стандартным алгоритмом 1.2) может привести использование *метода расщепления* (см. подраздел 3.4), *метода выделения главной части* (см. подраздел 5.1) и др. К методам уменьшения величины t относятся также *геометрический метод*, *метод равномерной выборки* [5] и их эффективные *дискретностохастические модификации* [17].

В свою очередь, к методам *уменьшения дисперсии $\mathbf{D}\zeta$* можно отнести *метод условных математических ожиданий* (см. подраздел 3.3), *метод выборки по важности* (см. раздел 4), *метод выделения главной части* (см. подраздел 5.1), *метод интегрирования по части области* (см. подраздел 5.2), *выборку по группам* (см. подраздел 5.3). Сюда же можно добавить *метод многомерной симметризации* [5, 17], *метод с поправочным множителем* [5], а также их эффективные *дискретностохастические модификации* [17].

К сожалению, далеко не все методы из приведенного обширного списка могут быть эффективно использованы для проблемы построения рандомизированных алгоритмов численного решения прикладных (практически значимых) интегральных уравнений Фредгольма второго рода, к рассмотрению которой мы обратимся в следующих трех разделах данного пособия.

6. Применение прикладных цепей Маркова. Исторически важный пример: модель переноса частиц (особенности численной реализации)

6.1. «Естественность» использования траекторий обрывающихся цепей Маркова в качестве рандомизированных итерационных численных моделей. В подразделе 2.8 упомянуто о том, что при построении алгоритмов численного статистического моделирования используется компьютерная реализация траекторий *цепей Маркова*, для которых выполнен простейший вариант *марковского свойства*: распределение следующего состояния полностью определяется фиксированным значением предыдущего (см., например, [14], а также соотношения (2.25), (2.26)).

Следует особо выделить то обстоятельство, что в связи с ограниченностью компьютерной оперативной памяти на ЭВМ можно реализовать только итерационные рандомизированные алгоритмы «с малой памятью», то есть *свойство марковости является фундаментальным для численных рандомизированных итерационных моделей и алгоритмов.*

В классической теории вероятностей цепь Маркова

$$\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)}, \dots - \quad (6.1)$$

это *последовательность* случайных состояний (случайных величин, случайных векторов), принимающих значения в одной и той же области $X \subseteq \mathbb{R}^d$, при этом число этих состояний *бесконечно* (см., например, [14]). С точки зрения компьютерных вычислений это является определенным недостатком, так как, с одной стороны, требуется исследовать сходимость связанных с цепью (6.1) функционалов (усредненных характеристик) при $m \rightarrow \infty$, а с другой стороны, численно (на компьютере) удастся смоделировать *конечное* число выборочных значений состояний цепи Маркова (6.1).

В связи с этим появляется содержательная проблема правильной организации *обрыва* траекторий цепи Маркова, реализуемых на компьютере. Возможен «искусственный» обрыв цепи в фиксированный момент $m = s$; при этом приближаются только допредельные (неточные) значения требуемых функционалов.

Более продуктивной является идея использования *прикладной цепи Маркова* или *цепи Маркова, обрывающейся с вероятностью*

единица

$$\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)} \quad (6.2)$$

(см., например, [9, 13], а также подраздел 2.8 данного пособия, в частности, соотношение (2.28)) с *начальной плотностью* $\pi(x)$ (это плотность случайной величины $\xi^{(0)}$) и *переходной функцией*

$$p(x', x) = [1 - p^{(a)}(x')] \times r(x', x) \quad (6.3)$$

(см. также соотношение (2.29)); здесь $p^{(a)}(x')$ – *вероятность обрыва*, а $r(x', x) = r_{\xi^{(j)}}(x | \xi^{(j-1)} = x')$ – *условная вероятностная плотность* распределения случайной величины $\xi^{(j)}$ при фиксированном $\xi^{(j-1)}$ (одинаковая для всех $j = 1, \dots, N$).

Для моделирования траекторий прикладной цепи Маркова (6.2) следует использовать алгоритм 2.8.

В дальнейшем будем полагать, что

$$p^{(s)}(x') = 1 - p^{(a)}(x') \leq q < 1 \quad \text{или} \quad p^{(a)}(x') \geq 1 - q > 0;$$

при этом

$$\int_X p(x', x) dx = p^{(s)}(x') \leq q < 1; \quad (6.4)$$

это объясняет использование здесь термина *переходная функция* для $p(x', x)$ вместо термина *переходная плотность* для «классической» цепи Маркова (6.1).

Для дальнейших рассуждений важным будет рассмотрение последовательности функций

$$\psi^{(m)}(x) = \int_X p(x', x) \psi^{(m-1)}(x') dx' = \hat{K} \psi^{(m-1)}(x); \quad \psi^{(0)}(x) = \pi(x); \quad (6.5)$$

здесь $m = 1, 2, \dots$, а \hat{K} обозначает *интегральный оператор с ядром* $p(x', x)$ (см., например, [19]).

Важным является то обстоятельство, что при выполнении условия (6.4) оператор \hat{K} из (6.5) является *сжимающим оператором* в пространстве функций y из $\mathbb{L}_1(X)$ с нормой $\|y\|_{\mathbb{L}_1(X)} = \int_X |y(x)| dx$:

$$\|\hat{K}y_1 - \hat{K}y_2\|_{\mathbb{L}_1(X)} = \|\hat{K}(y_1 - y_2)\|_{\mathbb{L}_1(X)} \leq q \|y_1 - y_2\|_{\mathbb{L}_1(X)},$$

так как его норма в этом пространстве меньше единицы (см., например, [19]).

В свою очередь, рассмотрение функций (6.5) из пространства $\mathbb{L}_1(X)$ вполне естественно для многих практически важных приложений, так как функции $\pi(x), p(x', x)$ часто содержат интегрируемые особенности (вплоть до дельта-функций).

Учитывая соотношения (2.4)–(2.7), можно трактовать функцию $p(x', x) \times \psi^{(m-1)}(x')$ как аналог (с точностью до соотношений (6.3), (6.4)) совместной плотности распределения вектора $(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})$, а функцию $\psi^{(m)}(x)$ из (6.5) – как аналог «безусловной» плотности распределения случайной величины $\xi^{(m)}$.

В дальнейшем будем называть функции (6.5) **плотностями распределения состояний прикладной цепи Маркова** (т. е. слово «аналог» мы опускаем), а их бесконечную сумму

$$\psi(x) = \psi^{(0)}(x) + \psi^{(1)}(x) + \dots + \psi^{(m)}(x) + \dots \quad (6.6)$$

назовем **суммарной плотностью состояний прикладной цепи Маркова**.

В разделе 7 будет показано, что для функции (6.6) удается выписать *марковское интегральное уравнение Фредгольма второго рода* (см., например, [19]), что, в свою очередь, позволяет строить *весовые оценщики (монте-карловские оценки)*, нужные для приближенного вычисления *линейных функционалов* от решения этого уравнения.

Идеологию, терминологию и прикладные аспекты представленной в разделах 6–8 теории весовых оценщиков линейных функционалов от решений интегральных уравнений Фредгольма второго рода во многом определили реальные расчеты для практически важных «физических» конструкций, среди которых особое место занимает классическая **численная модель переноса малых частиц** (см., например, [9, 13, 20]). Эта модель достаточно подробно представлена в данном разделе.

Определенным дополнительным «оправданием» рассмотрения этой модели является то обстоятельство, что соответствующие вычислительные алгоритмы были в свое время использованы для содержательных расчетов, связанных с разработкой атомных устройств (бомб, реакторов и т. п.), сыгравших важную роль в развитии экономики и укреплении обороноспособности нашей страны.

6.2. Простейшая численная модель переноса частиц. Пусть имеется выпуклая область G (мы рассмотрим случай $G \subseteq \mathbb{R}^3$), вообще говоря, неоднородного вещества, в подобласти которой $G' \subseteq G$ (или на границе ∂G) расположен источник излучения – направленный или стохастический (рис. 6.1).

МОДЕЛЬ 6.1. Малые частицы излучения («**фотоны**» – в дальнейшем будем использовать этот термин без кавычек), двигаясь по прямой, сталкиваются с хаотично расположенными более крупными частицами вещества в слое.

В точке столкновения они либо поглощаются этими частицами, либо рассеиваются согласно некоторому стохастическому (вероятностному) закону распределения.

После рассеяния малая частица вновь движется по прямой вплоть до следующего столкновения.

Процесс продолжается вплоть до поглощения малой частицы; при этом внешность области G считается абсолютно поглощающим веществом (то есть вылет фотона за пределы области означает обрыв траектории).

Нас будут интересовать различные усредненные характеристики описанного процесса. В частности, весьма актуальной нередко является проблема вычисления вероятности P того, что частица излучения поглотится в области G (другими словами, это доля излучаемого потока малых частиц, остающаяся внутри области G). Именно эту характеристику мы возьмем в качестве основного примера в данном разделе.

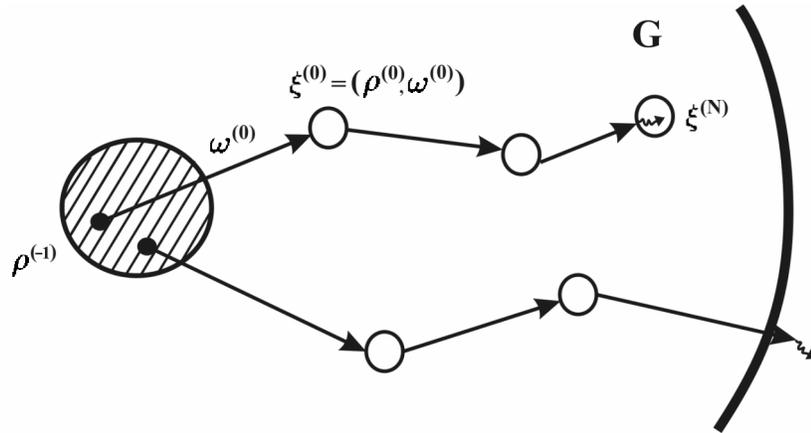


Рис. 6.1. Схема простейшего процесса переноса частиц (модель 6.1)

Важно отметить, что специально описанные (см. далее) точечные состояния столкновений фотонов с частицами вещества **образуют прикладную цепь Маркова**.

Соответствующий *алгоритм прямого моделирования* подразумевает реализацию n траекторий фотонов от «рождения» до «гибели» (поглощения) согласно алгоритму 2.8 и подсчет нужных характеристик процесса согласно стандартной схеме метода Монте-Карло (1.1) (см. алгоритм 1.1).

Для алгоритма 2.8 требуется определить начальную плотность и переходную функцию моделируемой прикладной цепи Маркова.

В дальнейших рассуждениях выборочные значения точек столкновений (состояний прикладной цепи Маркова) будем снабжать нижним индексом i , который будет обозначать номер траектории.

Каждая точка столкновения описывается трехкомпонентной случайной величиной ρ (с соответствующими индексами) в системе координат \mathbf{r} и единичным случайным вектором ω (в системе координат \mathbf{w}), определяющим направление прилета малой частицы в точку столкновения ρ . Для описания вектора ω в принципе можно обойтись двумя компонентами (в сферических координатах), но мы для простоты будем использовать три декартовых компоненты \mathbf{w} . Таким образом, точка столкновения $\xi = (\rho, \omega)$ (снабженная соответствующими индексами) имеет шесть компонент.

Особо подчеркнем, что мы будем описывать *простейшую* односкоростную «столкновительную» *модель*.

Отметим также, что, с одной стороны, описываемый здесь алгоритм прямого (имитационного) моделирования позволяет учитывать дополнительные эффекты – изменение скоростей и типов частиц, деление фотонов в точках столкновений, слипание фотонов и др. – с помощью соответствующего расширения фазового пространства (а точнее – *рандомизации*; см. подраздел 3.2).

С другой стороны, и в рассматриваемой далее относительно простой ситуации нам потребуется определенная изобретательность при реализации и описании численного алгоритма. В частности, будут использованы:

- *соображения рандомизации* (см. подраздел 3.2),
- *введение дельта-плотностей* для описания особенностей распределений (см. подраздел 4.3),
- *«геометрические» соображения*,
- *стандартные* (такие, как *метод обратной функции распределения* – см. подраздел 2.3) и *специальные методы численного моделирования случайных величин и векторов* (см. разделы 2, 10–13) и др.

6.3. Моделирование точки «рождения» и начального направления движения фотона. Случайный изотропный вектор. Для формирования плотности распределения $\pi(x)$ (здесь $x = (\mathbf{r}, \mathbf{w})$) начального состояния прикладной цепи Маркова $\xi^{(0)} = (\boldsymbol{\rho}^{(0)}, \boldsymbol{\omega}^{(0)})$, соответствующего первому столкновению фотона с частицей вещества, следует описать ситуацию «рождения» малой частицы и ее прямолинейный пробег до первого столкновения.

Определенные трудности могут возникнуть уже на стадии описания и численной реализации выборочных значений $\rho_i^{(-1)}$ и $\omega_i^{(0)}$ точки $\boldsymbol{\rho}^{(-1)}$ «рождения» фотона и начального случайного единичного вектора направления $\boldsymbol{\omega}^{(0)}$.

Рассмотрим (для примера) достаточно простой случай, когда источник частиц представляет собой трехмерный шар $B^{(3,\mathbf{c},R)} \subset G$ радиуса R с центром в точке $\mathbf{c} = (c^{(1)}, c^{(2)}, c^{(3)})$:

$$B^{(3,\mathbf{c},R)} = \left\{ \mathbf{r} = (r^{(1)}, r^{(2)}, r^{(3)}) : \sqrt{(r^{(1)} - c^{(1)})^2 + (r^{(2)} - c^{(2)})^2 + (r^{(3)} - c^{(3)})^2} \leq R \right\};$$

при этом точка $\boldsymbol{\rho}^{(-1)}$ распределена в этом шаре равномерно. Предположим также, что вектор $\boldsymbol{\omega}^{(0)}$ является *изотропным*.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 6.1 (см., например, [9]). *Случайный вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ называется изотропным, если точка $\tilde{\boldsymbol{\omega}} = \boldsymbol{\xi}/\|\boldsymbol{\xi}\|$ равномерно распределена на поверхности d -мерной сферы единичного радиуса с центром в начале координат и не зависит от длины $\|\boldsymbol{\xi}\| = \sqrt{(\xi^{(1)})^2 + \dots + (\xi^{(d)})^2}$.*

УТВЕРЖДЕНИЕ 6.1 (см., например, [1]). *Если точка $(\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ равномерно распределена в d -мерном шаре радиуса R*

$$B^{(d,\mathbf{0},R)} = \left\{ \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) : \|\mathbf{x}\| = \sqrt{(x^{(1)})^2 + \dots + (x^{(d)})^2} \leq R \right\} \quad (6.7)$$

согласно плотности распределения

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) = \begin{cases} \frac{1}{\bar{B}^{(d,\mathbf{0},R)}} & \text{при } (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) \in B^{(d,\mathbf{0},R)}, \\ 0 & \text{иначе} \end{cases} \quad (6.8)$$

(здесь

$$\bar{B}^{(d,\mathbf{0},R)} = \frac{\pi^{d/2} R^d}{\Gamma(d/2 + 1)} \quad (6.9)$$

объем шара $B^{(d,0,R)}$, то вектор $\xi = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ является изотропным и $\omega = \xi/\|\xi\|$.

В силу утверждения 6.1 и сделанных нами предположений, для моделирования выборочных значений $\rho_i^{(-1)}$ и $\omega_i^{(0)}$ требуется по сути один и тот же алгоритм моделирования случайной точки ξ из утверждения 6.1. Действительно,

$$\rho_i^{(-1)} = c + \xi_{1,i} \quad \text{и} \quad \omega_i^{(0)} = \frac{\xi_{2,i}}{\|\xi_{2,i}\|}, \quad (6.10)$$

где $\xi_{1,i}, \xi_{2,i}$ – выборочные значения случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, равномерно распределенного в шаре $B^{(3,0,R)}$ согласно плотности

$$f_{\xi}(u, v, w) = \begin{cases} \frac{1}{\bar{B}^{(3,0,R)}} = \frac{3}{4\pi R^3} & \text{при } (u, v, w) \in B^{(3,0,R)}, \\ 0 & \text{иначе;} \end{cases} \quad (6.11)$$

это частный случай плотности (6.8) для $d = 3$.

6.4. Моделирование точки, равномерно распределенной в многомерном шаре. В связи с утверждением 6.1 и формулами (6.10), (6.11) рассмотрим следующую проблему.

ПРОБЛЕМА 6.1. Построить алгоритм численного моделирования выборочных значений $(\xi_0^{(1)}, \dots, \xi_0^{(d)})$ случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$, равномерно распределенного в шаре $B^{(d,0,R)}$ (см. соотношение (6.7)) согласно плотности (6.8).

Заметим, что уже начиная с размерности $d = 2$ (в том числе для нужного нам случая $d = 3$ – см. формулы (6.10), (6.11)) решение проблемы 6.1 непосредственно в декартовых координатах не получается.

Действительно, рассмотрим случайную точку $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$, равномерно распределенную в круге $B^{(2,0,R)}$ (см. формулу (6.7)). Это означает, что совместная плотность распределения вектора ξ имеет вид

$$f_{\xi}(u, v) = \begin{cases} \frac{1}{\bar{B}^{(2,0,R)}} = \frac{1}{\pi R^2} & \text{при } (u, v) \in B^{(2,0,R)}, \\ 0 & \text{иначе;} \end{cases} \quad (6.12)$$

здесь $\bar{B}^{(2,0,R)} = \pi R^2$ – площадь круга $B^{(2,0,R)}$.

Рассмотрим одно из двух (эквивалентных, в силу симметрии графика функции (6.12) относительно осей координат $0u$ и $0v$) разложений вида (2.4), (2.5) и (2.6), (2.7) для плотности (6.12):

$$f_{\xi}(u, v) = f_{\xi^{(1)}}(u) \times f_{\xi^{(2)}}(v|u),$$

где

$$f_{\xi^{(1)}}(u) = \int_{-\sqrt{R^2-u^2}}^{\sqrt{R^2-u^2}} \frac{dv}{\pi R^2} = \frac{2}{\pi R^2} \sqrt{R^2-u^2}, \quad -R < u < R; \quad (6.13)$$

$$f_{\xi^{(2)}}(v|u) = \frac{f_{\xi}(u, v)}{f_{\xi^{(1)}}(u)} \equiv \frac{2}{\sqrt{R^2-u^2}}, \quad -\sqrt{R^2-u^2} < v < \sqrt{R^2-u^2}. \quad (6.14)$$

Для каждого фиксированного $u \in (-R, R)$ плотность (6.14) является элементарной: это плотность *равномерного распределения* в интервале $(-\sqrt{R^2-u^2}, \sqrt{R^2-u^2})$ с моделирующей формулой

$$\xi_0^{(2)} = -\sqrt{R^2-u^2} + 2\sqrt{R^2-u^2}\alpha_2,$$

см. табличную формулу (2.23); здесь $\alpha_2 \in U(0, 1)$ – стандартное случайное число.

Однако плотность (6.13) *не является элементарной*, так как уравнение метода обратной функции распределения (2.16) для этой плотности

$$\frac{2}{\pi R^2} \int_{-R}^{\xi_0^{(1)}} \sqrt{R^2-u^2} du = \alpha_1,$$

где $\alpha_1 \in U(0, 1)$, сводится к соотношению

$$\xi_0^{(1)} \sqrt{R^2 - (\xi_0^{(1)})^2} + R^2 \arcsin \left(\frac{\xi_0^{(1)}}{R} \right) + \frac{\pi R^2}{2} = \pi R^2 \alpha_1,$$

которое неразрешимо в элементарных функциях относительно $\xi_0^{(1)}$.

Таким образом, уже для $d = 2$ справедливо следующее замечание.

ЗАМЕЧАНИЕ 6.1. Прямое применение алгоритма 2.3 для моделирования случайной точки, равномерно распределенной в d -мерном шаре $B^{(d, \mathbf{0}, R)}$, $d > 1$, не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех без исключения компонент этой точки.

Для преодоления возникшей трудности можно использовать следующий факт.

УТВЕРЖДЕНИЕ 6.2 (теорема о замене случайных переменных; см., например, [9, 13]). Пусть $\mathbf{y} = \Phi(\mathbf{x})$ или

$$y^{(i)} = \Phi^{(i)}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}), \quad i = 1, \dots, d \quad (6.15)$$

это взаимно-однозначное дифференцируемое отображение области A в пространстве с координатами $\{x^{(i)}\} = \{x^{(1)}, \dots, x^{(d)}\}$ на область B в пространстве с координатами $\{y^{(j)}\} = \{y^{(1)}, \dots, y^{(d)}\}$. Если плотность случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ в A равна $f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$, то плотность распределения случайного вектора

$$\boldsymbol{\theta} = (\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(d)}) = \Phi(\boldsymbol{\xi}) \in B, \quad \text{где } \theta^{(i)} = \Phi^{(i)}(\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)}), \quad (6.16)$$

имеет вид

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{\theta}}(y^{(1)}, \dots, y^{(d)}) &= f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y}) = \\ &= f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}(\mathbf{y}), \dots, x^{(d)}(\mathbf{y})) \left| \frac{\partial (x^{(1)}(\mathbf{y}), \dots, x^{(d)}(\mathbf{y}))}{\partial (y^{(1)}, \dots, y^{(d)})} \right|. \end{aligned} \quad (6.17)$$

В правой части последнего соотношения (6.17) компоненты $x^{(i)}$ должны быть выражены через $\mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d)})$, а $\left| \frac{\partial (x^{(1)}(\mathbf{y}), \dots, x^{(d)}(\mathbf{y}))}{\partial (y^{(1)}, \dots, y^{(d)})} \right|$ есть якобиан перехода от координат $\{x^{(i)}\}$ к координатам $\{y^{(j)}\}$ – обратного к отображению Φ , описываемому соотношением (6.15).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть B' – произвольное борелевское подмножество области B , а A' – его прообраз для рассматриваемого отображения Φ , описываемого соотношением (6.15). По правилу замены переменных под знаком интеграла имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{\boldsymbol{\xi} \in A'\} &= \int_{A'} f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) dx^{(1)} \dots dx^{(d)} = \\ &= \int_{B'} f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}(\mathbf{y}), \dots, x^{(d)}(\mathbf{y})) \left| \frac{\partial (x^{(1)}(\mathbf{y}), \dots, x^{(d)}(\mathbf{y}))}{\partial (y^{(1)}, \dots, y^{(d)})} \right| dy^{(1)} \dots dy^{(d)}. \end{aligned}$$

В силу взаимной однозначности преобразования (6.15) имеем также

$$\mathbf{P}\{\boldsymbol{\xi} \in A'\} = \mathbf{P}\{\boldsymbol{\theta} \in B'\} = \int_{B'} f_{\boldsymbol{\theta}}(y^{(1)}, \dots, y^{(d)}) dy^{(1)} \dots dy^{(d)}.$$

Итак, для произвольного борелевского множества $B' \subseteq B$ имеем

$$\begin{aligned} &\int_{B'} f_{\boldsymbol{\theta}}(y^{(1)}, \dots, y^{(d)}) dy^{(1)} \dots dy^{(d)} = \\ &= \int_{B'} f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}(\mathbf{y}), \dots, x^{(d)}(\mathbf{y})) \left| \frac{\partial (x^{(1)}(\mathbf{y}), \dots, x^{(d)}(\mathbf{y}))}{\partial (y^{(1)}, \dots, y^{(d)})} \right| dy^{(1)} \dots dy^{(d)}, \end{aligned}$$

а значит, справедливо соотношение (6.17). Утверждение 6.2 доказано.

В обозначениях, используемых в формулировке утверждения 6.2, введем следующее понятие.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 6.1. *Взаимно-однозначное отображение Φ , описываемое соотношением (6.15), назовем **вычислимым моделируемым преобразованием декартовых координат для случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ с заданной совместной плотностью $f(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$, если в декартовых координатах $\{x^{(i)}\}$ для вектора ξ не удастся построить разложение (2.11) с моделируемыми (элементарными) условными плотностями $f_{\xi^{(i_1)}}(x^{(i_1)}), f_{\xi^{(i_2)}}(x^{(i_2)}|x^{(i_1)}), \dots, f_{\xi^{(i_d)}}(x^{(i_d)}|x^{(i_1)}, x^{(i_2)}, \dots, x^{(i_{d-1})})$ (и соответствующий эффективный алгоритм 2.3), а для вектора $\theta = \Phi(\xi)$ вида (6.16) такие разложение и эффективный вариант алгоритма 2.3 построить удастся; кроме того, обратное к (6.15) отображение можно представить в виде вычисляемых на компьютере композиций элементарных функций:***

$$x^{(i)} = (\Phi^{(i)})^{-1}(y^{(1)}, \dots, y^{(d)}), \quad i = 1, \dots, d. \quad (6.18)$$

Отметим, что построение вычисляемых моделируемых преобразований декартовых координат для случайных векторов ξ с различными многомерными распределениями представляет собой содержательную (часто непростую) исследовательскую задачу.

В частности, для рассматриваемой нами проблемы 6.1 вычисляемые моделируемые преобразования $\Phi(\mathbf{x}) = \{\Phi^{(i)}(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})\}$ вида (6.15) следует искать среди преобразований, дающих аналитическое описание многомерного шара $B^{(d, \mathbf{0}, R)}$ из соотношения (6.7).

Единственным известным преобразованием $\Phi(\mathbf{x})$ такого рода является переход от декартовых координат $\{x^{(i)}\}$ к **гиперсферическим координатам** $\{r, \phi\} = \{r, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(d-1)}\}$. Обратное к $\Phi(\mathbf{x})$ преобразование вида (6.18) описывается известными формулами (см., например, [21]):

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= r \sin \phi^{(1)} \sin \phi^{(2)} \times \dots \times \sin \phi^{(d-1)}, \\ &\dots \\ x^{(i)} &= r \cos \phi^{(i-1)} \sin \phi^{(i)} \times \dots \times \sin \phi^{(d-1)}; \quad i = 2, \dots, d-1, \\ &\dots \\ x^{(d)} &= r \cos \phi^{(d-1)}; \quad r \geq 0; \quad 0 \leq \phi^{(1)} < 2\pi, \quad 0 \leq \phi^{(i)} < \pi, \quad i = 2, \dots, d-1. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Якобиан этого (обратного к $\Phi(\mathbf{x})$) преобразования равен

$$\left| \frac{\partial (x^{(1)}(r, \phi), \dots, x^{(d)}(r, \phi))}{\partial (r, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(d-1)})} \right| = r^{d-1} \sin \phi^{(2)} \sin^2 \phi^{(3)} \times \dots \times \sin^{d-2} \phi^{(d-1)}. \quad (6.20)$$

Согласно утверждению 6.2, плотность случайного вектора

$$(\rho, \varphi^{(1)}, \dots, \varphi^{(d-1)}) = \Phi(\boldsymbol{\xi}) = \Phi(\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)}) \quad (6.21)$$

(здесь вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ имеет плотность распределения (6.8)) имеет вид

$$\begin{aligned} f_{(\rho, \varphi^{(1)}, \dots, \varphi^{(d-1)})}(r, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(d-1)}) &= \\ &= \frac{\Gamma(d/2 + 1) r^{d-1} \sin \phi^{(2)} \sin^2 \phi^{(3)} \times \dots \times \sin^{d-2} \phi^{(d-1)}}{\pi^{d/2} R^d}, \end{aligned} \quad (6.22)$$

$$0 \leq r < R; \quad 0 \leq \phi^{(1)} < 2\pi; \quad 0 \leq \phi^{(i)} < \pi, \quad i = 2, \dots, d-1.$$

Плотность (6.22) можно представить в виде произведения

$$\begin{aligned} f_{(\rho, \varphi^{(1)}, \dots, \varphi^{(d-1)})}(r, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(d-1)}) &= \left(\frac{dr^{d-1}}{R^d} \right) \times \left(\frac{1}{2\pi} \right) \times \left(\frac{\sin \phi^{(2)}}{2} \right) \times \\ &\times \left(\frac{2 \sin^2 \phi^{(3)}}{\pi} \right) \times \left(\frac{3 \sin^3 \phi^{(4)}}{4} \right) \times \left(\frac{8 \sin^4 \phi^{(5)}}{3\pi} \right) \times \dots \times \\ &\times \left(\frac{(i-1)! \sin^{i-1} \phi^{(i)}}{2^{i-1} \Gamma^2\left(\frac{i}{2}\right)} \right) \times \dots \times \left(\frac{(d-2)! \sin^{d-2} \phi^{(d-1)}}{2^{d-2} \Gamma^2\left(\frac{d-1}{2}\right)} \right); \end{aligned} \quad (6.23)$$

здесь использованы следующие формулы (см., например, [22, разделы 3.62, 8.33, 8.38]):

$$\int_0^\pi \sin^i u \, du = 2 \int_0^{\pi/2} \sin^i u \, du = 2^i \text{B}\left(\frac{i+1}{2}, \frac{i+1}{2}\right) = \frac{2^i \Gamma^2\left(\frac{i+1}{2}\right)}{i!};$$

$$\Gamma(u) = (u-1)\Gamma(u-1), \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi},$$

$$\Gamma(i+1) = i!, \quad \text{B}(\nu, \mu) = \frac{\Gamma(\nu)\Gamma(\mu)}{\Gamma(\nu+\mu)}, \quad \nu > 0, \quad \mu > 0;$$

при этом

$$\Gamma(\nu) = \int_0^{+\infty} t^{\nu-1} e^{-t} \, dt \quad -$$

гамма-функция, а

$$B(\nu, \mu) = \int_0^1 t^{\nu-1} (1-t)^{\mu-1} dt -$$

бета-функция.

Соотношение (6.23) означает, что *компоненты вектора* (6.21) *независимы*. Однако соответствующие эффективные (экономичные) моделирующие формулы удается построить только для размерностей $d = 2$ и $d = 3$.

Разберем эту ситуацию подробнее.

Для двумерного случая $d = 2$ рассмотрим взаимно однозначное преобразование $\Phi(u, v)$, описывающее переход от двумерных декартовых координат $\{u, v\}$ к **полярным координатам** $\{r, \phi\}$. Обратное к $\Phi(u, v)$ преобразование определяется следующим частным видом формул (6.19):

$$u = r \sin \phi, \quad v = r \cos \phi; \quad r \geq 0, \quad 0 \leq \phi < 2\pi. \quad (6.24)$$

Рассмотрим также случайный вектор

$$(\rho, \varphi) = \Phi(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}), \quad (6.25)$$

где вектор $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$ имеет плотность распределения (6.12).

Согласно утверждению 6.2, с учетом того, что якобиан $\left| \frac{\partial(u(r, \phi), v(r, \phi))}{\partial(r, \phi)} \right|$ равен r (это следствие соотношений (6.20), (6.24)), получаем, что плотность распределения вектора (6.25) равна

$$f_{(\rho, \varphi)}(r, \phi) = \frac{r}{\pi R^2}; \quad 0 \leq r < R, \quad 0 \leq \phi < 2\pi. \quad (6.26)$$

Выкладки, подтверждающие соотношение (6.23) для рассматриваемого случая $d = 2$, выглядят следующим образом:

$$f_\rho(r) = \int_0^{2\pi} \frac{r d\phi}{\pi R^2} = \frac{2r}{R^2}, \quad 0 \leq r < R; \quad (6.27)$$

$$f_\varphi(\phi|r) = \frac{f_{(\rho, \varphi)}(r, \phi)}{f_\rho(r)} \equiv \frac{1}{2\pi} = \int_0^r \frac{r dr}{\pi R^2} = f_\varphi(\phi), \quad 0 \leq \phi < 2\pi. \quad (6.28)$$

Следовательно, плотность (6.26) представима в виде

$$f_{(\rho, \varphi)}(r, \phi) = f_\rho(r) \times f_\varphi(\phi).$$

Это означает, что *компоненты случайного вектора* (ρ, φ) , определяемого соотношением (6.25), *независимы и распределены согласно элементарным плотностям* $f_\rho(r)$ и $f_\varphi(\phi)$ из соотношений (6.27), (6.28) соответственно. Решая соответствующие уравнения (2.16) метода обратной функции распределения, получаем моделирующие формулы

$$\rho_0 = R\sqrt{\alpha_1}, \quad \varphi_0 = 2\pi\alpha_2, \quad (6.29)$$

где $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0, 1)$ – стандартные случайные числа.

С учетом соотношений (6.24) и (6.29) получаем моделирующие формулы для выборочных значений компонент двумерного случайного вектора ξ , имеющего плотность распределения (6.12):

$$\xi_0^{(1)} = R\sqrt{\alpha_1} \sin 2\pi\alpha_2, \quad \xi_0^{(2)} = R\sqrt{\alpha_1} \cos 2\pi\alpha_2. \quad (6.30)$$

Таким образом, мы показали, что проблема 6.1 для случая $d = 2$ разрешима, а также то, что, согласно определению 6.1, *преобразование декартовых координат* $\{u, v\}$ *к полярным координатам* $\{r, \phi\}$ *является вычислимым моделируемым для двумерного случайного вектора* ξ *с распределением* (6.12).

Теперь исследуем возможности решения проблемы 6.1 для случая $d = 3$.

Рассмотрим случайную точку $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, имеющую плотность распределения (6.11).

Выкладки, аналогичные (6.13), (6.14), для плотности (6.11) подтверждают замечание 6.1 о том, что прямое применение алгоритма 2.3 для моделирования случайной точки, равномерно распределенной в трехмерном шаре $B^{(3,0,R)}$, не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех компонент этой точки.

По аналогии с двумерным случаем, применим утверждение 6.2 и рассмотрим взаимно однозначное преобразование $\Phi(u, v, w)$, описывающее переход от декартовых координат $\{u, v, w\}$ к **сферическим координатам** $\{r, \phi, \theta\}$. Обратное к $\Phi(u, v, w)$ преобразование определяется следующим частным случаем формул (6.19):

$$u = r \sin \phi \sin \theta, \quad v = r \cos \phi \sin \theta, \quad w = r \cos \theta; \quad r \geq 0, \quad 0 \leq \phi < 2\pi, \quad 0 \leq \theta < \pi. \quad (6.31)$$

Якобиан преобразования (6.31) равен

$$\left| \frac{\partial (u(r, \phi, \theta), v(r, \phi, \theta), w(r, \phi, \theta))}{\partial (r, \phi, \theta)} \right| = r^2 \sin \theta$$

(см. формулу (6.20)) и, согласно утверждению 6.2, плотность случайного вектора

$$(\rho, \varphi, \tilde{\theta}) = \Phi(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}) \quad (6.32)$$

(здесь вектор $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$ имеет плотность распределения (6.11)) имеет вид

$$f_{(\rho, \varphi, \tilde{\theta})}(r, \phi, \theta) = \frac{3r^2 \sin \theta}{4\pi R^3}; \quad 0 \leq r < R, \quad 0 \leq \phi < 2\pi, \quad 0 \leq \theta < \pi.$$

Реализуя выкладки типа (6.27), (6.28), получаем аналог соотношения (6.23):

$$f_{(\rho, \varphi, \tilde{\theta})}(r, \phi, \theta) = f_\rho(r) \times f_\varphi(\phi) \times f_{\tilde{\theta}}(\theta) = \left(\frac{3r^2}{R^3}\right) \times \left(\frac{1}{2\pi}\right) \times \left(\frac{\sin \theta}{2}\right). \quad (6.33)$$

Это означает, что компоненты случайного вектора $(\rho, \varphi, \tilde{\theta})$, определяемого соотношением (6.32), независимы и распределены согласно элементарным плотностям $f_\rho(r)$, $f_\varphi(\phi)$ и $f_{\tilde{\theta}}(\theta)$ из соотношения (6.33). Решая соответствующие уравнения (2.16) метода обратной функции распределения, получаем моделирующие формулы

$$\rho_0 = R\sqrt[3]{\alpha_1}, \quad \varphi_0 = 2\pi\alpha_2, \quad \cos \tilde{\theta}_0 = 1 - 2\alpha_3, \quad (6.34)$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \in U(0, 1)$ – стандартные случайные числа.

Декартовы координаты выборочного значения ξ_0 случайного вектора ξ , имеющего плотность распределения (6.11), равны

$$\xi_0^{(1)} = \rho_0 \sin \varphi_0 \sin \tilde{\theta}_0, \quad \xi_0^{(2)} = \rho_0 \cos \varphi_0 \sin \tilde{\theta}_0, \quad \xi_0^{(3)} = \rho_0 \cos \tilde{\theta}_0. \quad (6.35)$$

Формулы (6.34), (6.35) можно использовать при получении выборочных значений точки «рождения» малой частицы $\rho_i^{(-1)}$ и начального направления ее движения $\omega_i^{(0)}$ по формулам (6.10).

Таким образом, мы показали, что проблема 6.1 для случая $d = 3$ разрешима, а также то, что, согласно определению 6.1, преобразование декартовых координат $\{u, v, w\}$ к сферическим координатам $\{r, \phi, \theta\}$ является вычислимым моделируемым для трехмерного случайного вектора ξ с распределением (6.11).

Однако, начиная с $d = 4$, уже не все частные плотности распределения из разложения (6.23) являются элементарными: только три первые плотности дают моделирующие формулы метода обратной функции

распределения, полученные из уравнений типа (2.16):

$$\rho_0 = R\sqrt[4]{\alpha_1}, \quad \varphi_0^{(1)} = 2\pi\alpha_2, \quad \varphi_0^{(2)} = \arccos(1 - 2\alpha_3)$$

(см. аналог этих соотношений – формулы (6.34) – для случая $d = 3$), а вот для следующих компонент таких формул вывести не удастся; в частности, для компоненты $\varphi^{(3)}$ уравнение (2.16) имеет вид

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\varphi_0^{(3)}} \sin^2 u \, du = \alpha_4 \quad \text{или} \quad 2\varphi_0^{(3)} - \sin 2\varphi_0^{(3)} = 2\pi\alpha_4,$$

где $\alpha_4 \in U(0, 1)$. Последнее уравнение не разрешимо в элементарных функциях относительно $\varphi_0^{(3)}$.

Таким образом, преобразование $\Phi(\mathbf{x})$ декартовых координат $\{x^{(1)}, \dots, x^{(d)}\}$ к гиперсферическим координатам $\{r, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(d-1)}\}$ не является вычислимым моделируемым для случайного вектора ξ размерности $d \geq 4$ с распределением (6.8), и проблема 6.1 для этого случая осталась неразрешимой.

Тем не менее, далее в подразделе 13.2 будет представлено решение проблемы 6.1 для случая $d \geq 4$, основанное на специальных свойствах стандартного гауссовского распределения (1.12).

В качестве основного вывода этого подраздела заметим, что уже на стадии розыгрыша случайной точки «рождения» малой частицы (фотона) $\rho_i^{(-1)}$ и начального направления ее движения $\omega_i^{(0)}$ – даже для простейшей геометрии источника и изотропии начального направления – получились некоторые специальные (отличные от стандартного алгоритма 2.3) алгоритмы численного моделирования случайных векторов.

6.5. Моделирование длины свободного пробега и точек столкновения фотона. После «рождения» малая частица движется прямолинейно от точки $\rho_i^{(-1)}$ вдоль направления $\omega_i^{(0)}$ до точки первого столкновения $\rho_i^{(0)}$.

Для фиксации прямолинейности этого движения в плотность распределения первого столкновения должен быть включен соответствующий «ограничитель возможностей» (см. подраздел 4.3) – множитель

$$\delta\left(\mathbf{w} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right) - \quad (6.36)$$

дельта-функция по направлению.

Наконец, должна быть разыграна случайная величина

$$\lambda^{(m)} = |\boldsymbol{\rho}^{(m)} - \boldsymbol{\rho}^{(m-1)}|, \quad m = 0,$$

отражающая *длину свободного пробега* фотона (т. е. длину отрезка прямолинейного пути частицы, на котором она не испытывает столкновений).

При этом используется следующее предположение: вероятность того, что частица, вылетевшая из точки s , испытает столкновение в интервале $(s, s + \Delta s)$ (ось s совпадает с направлением движения частицы), равна

$$\Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} s) \Delta s + o(\Delta s). \quad (6.37)$$

Функция $\Sigma(\boldsymbol{\rho})$ ($\boldsymbol{\rho}$ обозначает координату частицы во «внешней» системе координат) предполагается заданной и называется *полным сечением взаимодействия частицы со средой*.

Из соотношения (6.37) получается следующее рассуждение [5]. Обозначим через $F_{\lambda^{(m)}}(u) = \mathbf{P} \{ \lambda^{(m)} < u \}$ функцию распределения длины свободного пробега.

Вероятность того, что частица испытает первое столкновение в интервале $(u, u + \Delta u)$ равна

$$F_{\lambda^{(m)}}(u + \Delta u) - F_{\lambda^{(m)}}(u) = [1 - F_{\lambda^{(m)}}(u)] \left[\Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} u) \Delta u + o(\Delta u) \right];$$

здесь $1 - F_{\lambda^{(m)}}(u)$ – это вероятность того, что частица долетит до точки u . Разделив последнее соотношение на Δu и перейдя к пределу при $\Delta u \rightarrow 0$, получим дифференциальное уравнение

$$\frac{dF_{\lambda^{(m)}}(u)}{du} = \Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} u) [1 - F_{\lambda^{(m)}}(u)]$$

с начальным условием $F_{\lambda^{(m)}}(0) = 0$.

Решением этого уравнения является функция *обобщенного экспоненциального распределения*

$$F_{\lambda^{(m)}}(u) = 1 - \exp \left[- \int_0^u \Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} s) ds \right];$$

соответствующая плотность распределения равна

$$f_{\lambda^{(m)}}(u) = \Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} u) \times \exp \left[- \int_0^u \Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} s) ds \right]. \quad (6.38)$$

Весьма интересным является вопрос о численном моделировании выборочных значений случайной величины, имеющей плотность распределения (6.38). В частности, имеется оригинальный алгоритм, который носит название *метод мажорантного (максимального) сечения*, идея которого состоит в следующем (см., например, [9, 23]).

Полагаем, что существует мажоранта функции сечения

$$\Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} s) \leq \sigma_m(s), \quad (6.39)$$

такая, что численное моделирование выборочных значений η_i случайной величины η согласно плотности

$$f_\eta(u) = \sigma_m(u) \exp \left[- \int_0^u \sigma_m(s) ds \right], \quad u > 0, \quad (6.40)$$

реализуется достаточно просто.

АЛГОРИТМ 6.1 (см., например, [9, 23]). 1. Полагаем сначала $i := 1$; $L := 0$.

2. Моделируем выборочное значение η_i случайной величины η , распределенной согласно плотности (6.40), а также стандартное случайное число α_i . Вычисляем $L := L + \eta_i$.

3. Если

$$\alpha_i < \frac{\Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} L)}{\sigma_m(L)}, \quad (6.41)$$

то $\lambda_0^{(m)} = L$, иначе полагаем $i := i + 1$ и повторяем пункт 2 и т. д.

Напомним, что знак «:=» означает *переприсваивание*, т. е. при $A := B$ числа или результаты вычислений в правой части B помещаются в ячейку памяти ЭВМ с именем A .

Обоснование алгоритма 6.1 связано со *свойством прорезживания* моделируемого в этом алгоритме пуассоновского потока $\tau_i^{(m)} = \eta_1 + \dots + \eta_i$ интенсивности $\sigma_m(s)$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 6.3 [23]. Если точки $\tau_i^{(m)}$ исключать условно независимо с вероятностями $1 - \sigma(\tau_i^{(m)})/\sigma_m(\tau_i^{(m)})$ (т. е. принимать с вероятностями $p(\tau_i) = \sigma(\tau_i^{(m)})/\sigma_m(\tau_i^{(m)})$), то отобранные точки τ_i реализуют пуассоновский поток интенсивности $\sigma(s)$.

Доказательство этого утверждения основано на том, что, с точностью до рассмотрения величин порядка $o(ds)$, вероятность появления отобранной точки в интервале $(s, s + ds)$ равна $p(s) \times \sigma_m(s) ds = \sigma(s) ds$ [23].

Моделирование обобщенного экспоненциального распределения (6.38) будет эффективным, если в алгоритме 6.1 количество проверок неравенства (6.41) будет относительно мало. Для этого мажоранта $\sigma_m(u)$ из соотношения (6.39) должна быть близка к $\sigma(u)$.

В частности, достаточно эффективным может оказаться выбор в качестве $\sigma_m(u)$ кусочно-постоянного приближения «сверху» для функции $\Sigma(\boldsymbol{\rho}^{(m-1)} + \boldsymbol{\omega}^{(m)} u)$. В этом случае функция (6.40) оказывается *составной плотностью* с частными плотностями усеченного экспоненциального распределения. Для моделирования выборочных значений η_i с таким распределением можно использовать соображения, представленные далее в подразделе 11.3 данного пособия.

Здесь мы ограничимся рассмотрением простейшего случая, предполагая, что вещество, заполняющее область G , *однородно*, что означает выполнение равенства $\Sigma(\boldsymbol{\rho}) \equiv \Sigma = \text{const}$.

В этом случае равенство (6.38) определяет плотность *экспоненциального (или показательного) распределения* (2.18) для $\lambda = \Sigma$, моделирующая формула для которой имеет вид (2.20):

$$\lambda_i^{(m)} = -\frac{\ln \alpha_{m,i}}{\Sigma} \quad (6.42)$$

для $m = 0$.

Используя соображения о *рандомизации (увеличении числа случайных параметров)* из подраздела 3.2, с помощью формул вида (2.4)–(2.7), (2.10) для совместной плотности компонент случайного вектора получаем, что плотность распределения вектора $(\boldsymbol{\rho}^{(-1)}, \xi^{(0)})$ (здесь $\xi^{(0)} = (\boldsymbol{\rho}^{(0)}, \boldsymbol{\omega}^{(0)})$) равна

$$\begin{aligned} f_{(\boldsymbol{\rho}^{(-1)}, \xi^{(0)})}(\mathbf{r}', x) &= f_{\boldsymbol{\rho}^{(-1)}}(\mathbf{r}') \times f_{\xi^{(0)}}(x | \boldsymbol{\rho}^{(-1)} = \mathbf{r}') = \\ &= \frac{1}{(4/3)\pi R^3} \times \frac{1}{4\pi} \times \delta\left(\mathbf{w} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right) \times \frac{\Sigma e^{-\Sigma|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} = \\ &= \frac{3\Sigma}{16\pi^2 R^3 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \times \delta\left(\mathbf{w} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right) \times e^{-\Sigma|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}; \quad x = (\mathbf{r}, \mathbf{w}); \quad \mathbf{w} \in S^{(3,0,1)}, \end{aligned}$$

где $S^{(3,0,1)}$ – трехмерная единичная сфера с центром в начале координат (здесь использовано то, что площадь этой сферы равна 4π). Появление в знаменателе множителя $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2$ связано с соответствующей нормировкой вдоль направления движения фотона.

Отсюда плотность распределения первого («нулевого») столкновения $\xi^{(0)} = (\boldsymbol{\rho}^{(0)}, \boldsymbol{\omega}^{(0)})$ (это начальное состояние соответствующей прикладной цепи Маркова (6.2)) имеет вид

$$\begin{aligned} \pi(x) &= \int f_{(\boldsymbol{\rho}^{(-1)}, \xi^{(0)})}(\mathbf{r}', x) d\mathbf{r}' = \\ &= \frac{3\Sigma}{16\pi^2 R^3} \int \delta\left(\mathbf{w} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right) \times \frac{e^{-\Sigma|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} d\mathbf{r}'; \quad x = (\mathbf{r}, \mathbf{w}). \end{aligned} \quad (6.43)$$

Получив распределение первого («нулевого») столкновения, попытаемся описать следующие состояния $\{\xi^{(m)} = (\boldsymbol{\rho}^{(m)}, \boldsymbol{\omega}^{(m)}); m = 1, \dots, N\}$ столкновений фотонов с частицами вещества.

Определим переходную функцию $p(x', x)$ соответствующей прикладной цепи Маркова (6.2).

Для этого проанализируем то, как происходит переход из $(m-1)$ -го состояния в m -е.

Во-первых, для реализованного состояния $\xi_i^{(m-1)}$ определяется, не произойдет ли в этой точке поглощения (обрыва) траектории. Это моделируется следующим образом. Полное сечение рассеяния разлагается в сумму

$$\Sigma(\mathbf{r}) = \Sigma^{(a)}(\mathbf{r}) + \Sigma^{(s)}(\mathbf{r}),$$

где $\Sigma^{(a)}(\mathbf{r})$ – сечение поглощения, $\Sigma^{(s)}(\mathbf{r})$ – сечение рассеяния; все эти неотрицательные функции предполагаются заданными.

Величина $p^{(a)}(\mathbf{r}) = \Sigma^{(a)}(\mathbf{r})/\Sigma(\mathbf{r})$ описывает вероятность того, что при столкновении частицы излучения с частицей вещества в точке $\mathbf{r} \in G$ происходит поглощение фотона частицей вещества (при этом траектория движения частицы излучения прерывается). Для $\mathbf{r} \in G^{(-)}$ (здесь $G^{(-)}$ – внешность области G) полагаем $p^{(a)}(\mathbf{r}) \equiv 1$. Соответственно, величина $p^{(s)}(\mathbf{r}) = \Sigma^{(s)}(\mathbf{r})/\Sigma(\mathbf{r}) = 1 - p^{(a)}(\mathbf{r})$ – это вероятность «выживания» фотона.

Розыгрыш события поглощения происходит согласно алгоритму 2.7.

Заметим, что в рассматриваемом нами случае однородной рассеивающей и поглощающей среды величины $\Sigma(\mathbf{r}), \Sigma^{(a)}(\mathbf{r}), \Sigma^{(s)}(\mathbf{r}), p^{(a)}(\mathbf{r}), p^{(s)}(\mathbf{r})$ являются константами.

Если реализовалось рассеяние, то происходит численное моделирование выборочного значения $\boldsymbol{\omega}_i^{(m)}$ нового направления движения фотона согласно условной плотности распределения $g(\mathbf{w}|x')$ (для однородной среды – $g(\mathbf{w}|\mathbf{w}')$), которую называют *индикатрисой рассеяния*.

Если рассеяние *изотропное*, то вне зависимости от x' (или \mathbf{w}') можно использовать формулы (6.34), (6.35) для $\rho_0 = 1$ (см. также формулу (13.6) из раздела 13 данного пособия); при этом $g(\mathbf{w}|x') \equiv 1/(4\pi)$.

В случае неанізотропного рассеяния пересчет координат направления пробега осуществляется по формулам, получающимся из специальных геометрических соображений (см., например, [5, 9, 20]):

$$\begin{aligned}\omega_i^{(m,1)} &= \omega_i^{(m-1,1)} \mu_i^{(m)} - \left(\omega_i^{(m-1,2)} \sin \theta_i^{(m)} + \right. \\ &+ \left. \omega_i^{(m-1,1)} \omega_i^{(m-1,3)} \cos \theta_i^{(m)} \right) \sqrt{\frac{1 - (\mu_i^{(m)})^2}{1 - (\omega_i^{(m-1,3)})^2}}, \\ \omega_i^{(m,2)} &= \omega_i^{(m-1,2)} \mu_i^{(m)} + \left(\omega_i^{(m-1,1)} \sin \theta_i^{(m)} - \right. \\ &- \left. \omega_i^{(m-1,2)} \omega_i^{(m-1,3)} \cos \theta_i^{(m)} \right) \sqrt{\frac{1 - (\mu_i^{(m)})^2}{1 - (\omega_i^{(m-1,3)})^2}}, \\ \omega_i^{(m,3)} &= \omega_i^{(m-1,3)} \mu_i^{(m)} + \left[1 - (\omega_i^{(m-1,3)})^2 \right] \cos \theta_i^{(m)} \sqrt{\frac{1 - (\mu_i^{(m)})^2}{1 - (\omega_i^{(m-1,3)})^2}}.\end{aligned}$$

Здесь $\mu^{(m)}$ – косинус угла между $\omega^{(m-1)}$ и $\omega^{(m)}$; а $\theta^{(m)}$ – азимутальный угол рассеяния, который в данном случае отсчитывается от плоскости, проходящей через $\omega^{(m-1)}$ и Oz ; т. е. θ – угол между плоскостями $(\omega^{(m-1)}; Oz)$ и $(\omega^{(m-1)}; \omega^{(m-1)})$.

Угол $\theta^{(m)}$ распределен равномерно в интервале $(0, 2\pi)$ и его можно моделировать по формуле $\theta_i^{(m)} = 2\pi\alpha_i^{(m)}$; при этом пара $(\cos \theta^{(m)}, \sin \theta^{(m)})$ является двумерным изотропным вектором (см. соотношения (6.29), (6.30) при $\rho_0 = 1$, а также формулу (13.3) из раздела 13 данного пособия).

Для моделирования случайных величин $\mu^{(m)}$ чаще всего используется *индикатриса Хенли – Гринштейна* (см., например, [9]), представляющая собой элементарную плотность вида

$$f_{\mu^{(m)}}(u) = \frac{1 - c_0^2}{2 (1 + c_0^2 - 2c_0 u)^{3/2}} \quad \text{при } u, c_0 \in (-1, +1). \quad (6.44)$$

Эта плотность подобрана таким образом, что

$$\mathbf{E}\mu^{(m)} = \int_{-1}^1 u f_{\mu^{(m)}}(u) du = c_0.$$

Для моделирования «рассеяния вперед» принимают $c_0 \lesssim 1$, а для «рассеяния назад» берут $c_0 \gtrsim -1$.

Моделирующую формулу для выборочных значений $\mu_i^{(m)}$ получаем, последовательно решая уравнение (2.16) метода обратной функции распределения для плотности (6.44) [24]:

$$\int_{-1}^{\mu_i^{(m)}} \frac{(1 - c_0^2) du}{2(1 + c_0^2 - 2c_0 u)^{3/2}} = \alpha_i,$$

$$\text{или} \quad \int_{-1}^{\mu_i^{(m)}} \frac{(1 - c_0^2) d(1 + c_0^2 - 2c_0 u)}{-4c_0(1 + c_0^2 - 2c_0 u)^{3/2}} = \alpha_i,$$

$$\text{или} \quad -\frac{1 - c_0^2}{4c_0} \int_{(1+c_0)^2}^{1+c_0^2-2c_0\mu_i^{(m)}} v^{-3/2} dv = \alpha_i,$$

$$\text{или} \quad \frac{1 - c_0^2}{2c_0} \int_{(1+c_0)^2}^{1+c_0^2-2c_0\mu_i^{(m)}} dv^{-1/2} = \alpha_i,$$

$$\text{или} \quad \frac{1}{\sqrt{1 + c_0^2 - 2c_0\mu_i^{(m)}}} - \frac{1}{1 + c_0} = \frac{2c_0\alpha_i}{1 - c_0^2},$$

$$\text{или} \quad \frac{1}{\sqrt{1 + c_0^2 - 2c_0\mu_i^{(m)}}} = \frac{2c_0\alpha_i + 1 - c_0}{1 - c_0^2},$$

$$\text{и, окончательно, } \mu_i^{(m)} = \frac{1}{2c_0} \left[1 + c_0^2 - \left(\frac{1 - c_0^2}{2c_0\alpha_i + 1 - c_0} \right)^2 \right].$$

Проверка 2.1 для $\alpha_i = 0$ дает $\mu_i^{(m)} = 1/(2c_0) \times [1 + c_0^2 - ((1 - c_0^2)/(2c_0 \times 0 + 1 - c_0))^2] = 1/(2c_0) \times (1 + c_0^2 - 1 - c_0^2 - 2c_0) = -1$, а для $\alpha_i = 1$ имеем $\mu_i^{(m)} = 1/(2c_0) \times [1 + c_0^2 - ((1 - c_0^2)/(2c_0 \times 1 + 1 - c_0))^2] = 1/(2c_0) \times (1 + c_0^2 - 1 - c_0^2 + 2c_0) = 1$.

После того, как направление $\omega_i^{(m)}$ выбрано, происходит моделирование длины свободного пробега по формуле (6.42).

Используя соображения о *рандомизации* (увеличении числа случайных параметров) из подраздела 3.2, с помощью формул вида (2.4)–(2.7), (2.10) для совместной плотности компонент случайного вектора получаем следующую переходную функцию $p(x', x)$ из соотношения (6.3):

$$p(x', x) = p^{(s)} \times g(\mathbf{w}|\mathbf{w}') \times \delta\left(\mathbf{w} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right) \times \frac{\Sigma e^{-\Sigma|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}. \quad (6.45)$$

Особо отметим, что при $p^{(s)} < 1$ для функции (6.45) выполнено соотношение (6.4), а также то, что функция (6.45) содержит интегрируемую особенность в виде дельта-функции по направлению, что подтверждает целесообразность рассмотрения соответствующих плотностей состояний (6.5) как функций из $\mathbb{L}_1(X)$ (см. рассуждения из подраздела 6.1).

6.6. Простейшая схема прямого численного моделирования.

На основании проведенного анализа прикладной цепи Маркова, описывающей перенос частиц, можно приближенно вычислять на ЭВМ значения нужных характеристик (функционалов) этого процесса.

По предложению, сформулированному в подразделе 6.2, в качестве основного примера возьмем вычисление вероятности P того, что малая частица поглотится внутри области G .

Введем случайную величину $\hat{\eta}$, которая равна единице в случае, если частица излучения поглотилась в области G , и равна нулю во всех остальных случаях. Заметим, что $\mathbf{E}\hat{\eta} = P$.

Рассмотрим алгоритм *прямого численного моделирования* для приближения этой величины.

АЛГОРИТМ 6.2. (см., например, [9, 13]). Численно реализуем n траекторий частиц и для i -й траектории ($i = 1, \dots, n$) делаем следующее.

1. Полагаем $m := 0$ и моделируем начальную координату точки «рождения» частицы $\rho_i^{(m-1)} = \rho_i^{(-1)}$ и начальное направление движения частицы $\omega_i^{(m)} = \omega_i^{(0)}$ по формулам (6.10), (6.34), (6.35).

2. Моделируем длину свободного пробега $\lambda_i^{(m)}$ частицы по формуле (6.42).

3. Проверяем, не вылетела ли частица из области G . Если вылет произошел, то заканчиваем траекторию и полагаем $\hat{\eta}_i = 0$.

4. Вычисляем координату $\mathbf{r} = \rho_i^{(m)}$ очередной точки столкновения, зная предыдущую координату $\mathbf{r}' = \rho_i^{(m-1)}$, направление движения $\mathbf{w}' = \omega_i^{(m)}$ и длину свободного пробега $\lambda_i^{(m)}$:

$$\rho_i^{(m)} = \rho_i^{(m-1)} + \lambda_i^{(m)} \omega_i^{(m)}.$$

5. Определяем тип столкновения (поглощение или рассеяние) согласно вероятности $p^{(a)}$ и алгоритму 2.7. Если реализовалось поглощение, то обрываем траекторию и полагаем $\hat{\eta}_i = 1$.

6. Если происходит рассеяние, то полагаем $t := t + 1$, а затем согласно индикатрисе

$$g(\mathbf{w} | \mathbf{w}' = \omega_i^{(m-1)})$$

выбираем новое направление движения частицы $\mathbf{w} = \omega_i^{(m)}$ и переходим на п. 2 для дальнейшего моделирования траектории.

Приближением искомой вероятности P поглощения частицы в области G будет среднее арифметическое вида (1.1):

$$P = \mathbf{E}\hat{\eta} \approx \frac{\hat{\eta}_1 + \dots + \hat{\eta}_n}{n}.$$

Для дальнейших рассуждений важно заметить, что

$$\hat{\eta} = \frac{h(\xi^{(N)})}{p^{(a)}} \quad \text{для } h(x) = p^{(a)} \times \chi^{(G)}(\mathbf{r}); \quad (6.46)$$

здесь $\xi^{(N)} = (\boldsymbol{\rho}^{(N)}, \boldsymbol{\omega}^{(N)})$ – случайная точка столкновения, в которой происходит поглощение моделируемой частицы (при этом N – случайный номер обрыва траектории частицы), а $\chi^{(G)}(\mathbf{r})$ – индикатор множества G :

$$\chi^{(G)}(\mathbf{r}) = 1 \quad \text{при } \mathbf{r} \in G \quad \text{и} \quad \chi^{(G)}(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{иначе.}$$

В теории методов Монте-Карло (во многом благодаря приводимому здесь примеру блуждания малых частиц) случайная величина (6.46) называется *оценителем (монте-карловской оценкой) по поглощению* для величины P (см., например, [5, 9], а также подраздел 7.5 данного пособия).

**7. Марковское интегральное уравнение.
 Линейные функционалы от решения
 интегрального уравнения Фредгольма
 второго рода. Основной весовой оценитель.
 Оценитель по поглощениям**

7.1. Интегральное уравнение для суммарной плотности столкновений. Для расширения спектра оценителей (монте-карловских оценок) типа (6.46) необходимо учесть следующие важные соображения.

Вернемся к материалам подраздела 6.1. Рассмотрим прикладную цепь Маркова (6.2) с начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной функцией (6.3) и связанные с ней соотношения (6.5), (6.6), в которых функции $\psi, \psi^{(0)}, \psi^{(1)}, \dots$ принадлежат пространству $\mathbb{L}_1(X)$; $X \subseteq \mathbb{R}^d$.

Индукцией по m из этих соотношений несложно получить, что

$$\psi(x) = \pi(x) + \hat{K}\pi(x) + \dots + \hat{K}^m\pi(x) + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} \hat{K}^m\pi(x), \quad (7.1)$$

где

$$\hat{K}^m\pi(x) = \int_X \dots \int_X \pi(y^{(0)})p(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \dots \times p(y^{(m-1)}, x) dy^{(0)} \dots dy^{(m-1)}. \quad (7.2)$$

Формулу (7.2) можно пояснить следующим образом. Аналог совместной плотности (2.27) состояний прикладной цепи Маркова $(\hat{\xi}^{(m-1)}, \xi^{(m)})$, где $\hat{\xi}^{(m-1)} = (\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m-1)})$, имеет вид

$$\hat{\psi}(\hat{\xi}^{(m-1)}, \xi^{(m)}) (y^{(0)}, y^{(1)}, \dots, y^{(m)}) = \pi(y^{(0)})p(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \dots \times p(y^{(m-1)}, y^{(m)}).$$

Тогда, согласно формуле (2.5), «безусловная» плотность $\psi^{(m)}(x) = \hat{K}\psi^{(m-1)}(x) = \hat{K}^m\pi(x)$ компоненты $\xi^{(m)}$ имеет вид (7.2).

При выполнении условия (6.4) интегральный оператор \hat{K} является сжимающим в пространстве $\mathbb{L}_1(X)$, а функция (7.1) представляет собой **функциональный ряд Неймана**, сходящийся к единственному решению **интегрального уравнения Фредгольма второго рода**

$$\psi(x) = \int_X p(x', x)\psi(x') dx' + \pi(x) \quad \text{или} \quad \psi = \hat{K}\psi + \pi; \quad (7.3)$$

здесь $p(x', x)$ – ядро интегрального оператора \hat{K} , а $\pi(x)$ – свободный член уравнения (7.3) (см., например, [19]).

То, что функция (7.1) является решением уравнения (7.3), подтверждается непосредственной подстановкой:

$$\hat{K}\psi + \pi = \hat{K}\left(\sum_{m=0}^{\infty} \hat{K}^m \pi\right) + \pi = \sum_{m=1}^{\infty} \hat{K}^m \pi + \pi = \sum_{m=0}^{\infty} \hat{K}^m \pi = \psi. \quad (7.4)$$

Уравнение (7.3), соответствующее прикладной цепи Маркова (6.2) будем называть **марковским интегральным уравнением**.

Практически важные величины, связанные с прикладной цепью Маркова (6.2), удастся записать в виде **линейного функционала от решения уравнения (7.3)** вида:

$$\hat{I}_h = (\psi, h) \stackrel{def}{=} \int_X \psi(x)h(x) dx, \quad (7.5)$$

где $h(x)$ – заданная, определяющая функционал (7.5) функция из пространства $\mathbb{L}_{\infty}(X)$, сопряженного пространству $\mathbb{L}_1(X)$ с нормой $\|h\|_{\mathbb{L}_{\infty}(X)} = \text{vrai sup}_{x \in X} |h(x)|$.

В том числе можно представить исследованную в разделе 6 величину P (вероятность того, что малая частица поглотится внутри области G) в виде функционала вида (7.5): $P = \hat{I}_h = (\psi, h)$, где $\psi(x)$ – решение марковского интегрального уравнения (7.3) с ядром (6.45) и свободным членом (6.43), а функция $h(x)$ имеет вид (6.46).

Заметим, что обозначение (ψ, h) из соотношения (7.5) «похоже» на определение **скалярного произведения** в гильбертовом функциональном пространстве $\mathbb{L}_2(X)$ (см., например, [19]). Однако использование термина «скалярное произведение» для дальнейших рассуждений некорректно, так как **пространство $\mathbb{L}_1(X)$ не является гильбертовым**.

7.2. Произвольное интегральное уравнение Фредгольма второго рода. Линейный функционал от его решения как сумма интегралов бесконечно возрастающей кратности. Приведенная здесь теория марковских интегральных уравнений (7.3) позволяет строить **весовые оценщики для линейных функционалов** вида (7.5)

$$I_h = (\varphi, h) \stackrel{def}{=} \int_X \varphi(x)h(x) dx \quad (7.6)$$

(для заданной функции $h(x) \in \mathbb{L}_{\infty}(X)$) от неизвестного решения

$\varphi(x) \in \mathbb{L}_1(X)$ общего (не обязательно марковского) интегрального уравнения Фредгольма второго рода вида (7.3)

$$\varphi(x) = \int_X k(x', x)\varphi(x') dx' + f(x) \quad \text{или} \quad \varphi = K\varphi + f; \quad (7.7)$$

здесь $k(x', x)$ – ядро интегрального оператора K , а $f(x) \in \mathbb{L}_1(X)$ – свободный член уравнения (7.7).

Наличие практически важных примеров уравнений (7.7), не являющихся марковскими, подтверждает, в частности, следующий пример.

ПРИМЕР 7.1 (см., например, [9]). Рассмотрим *трехмерную задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца* (см., например, [25]):

$$\Delta\varphi(x) - c\varphi(x) = -g(x), \quad \varphi(x)|_\Gamma = \psi(x) \quad (7.8)$$

в области $x \in D \subset \mathbb{R}^3$ с границей Γ ; здесь $c = \text{const} > 0$, а $\Delta\varphi(x) = \frac{\partial^2\varphi(x)}{(\partial x^{(1)})^2} + \frac{\partial^2\varphi(x)}{(\partial x^{(2)})^2} + \frac{\partial^2\varphi(x)}{(\partial x^{(3)})^2}$ – оператор Лапласа; $x = (x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)})$.

Предполагаются выполненными условия регулярности заданных функций $g(x)$, $\psi(x)$ и границы Γ , обеспечивающие существование и единственность решения $\varphi(x)$ краевой задачи (7.8), а также возможность его представления с помощью функции Грина для шара (см., например, [25]).

Для функции $\varphi(x)$ можно записать интегральное уравнение Фредгольма второго рода (7.7) с ядром

$$k(x', x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{cd(x)}}{\sinh(\sqrt{cd(x)})} \times \delta_x(x'), & x \notin \Gamma_\varepsilon; \\ 0, & x \in \Gamma_\varepsilon \end{cases} \quad (7.9)$$

и свободным членом

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \int_D \frac{\sinh(\sqrt{c}(d(x) - |x' - x|))}{|x' - x| \sinh(\sqrt{cd(x)})} g(x') dx', & x \notin \Gamma_\varepsilon; \\ \varphi(x), & x \in \Gamma_\varepsilon. \end{cases}$$

Здесь $d(x)$ – расстояние от точки x до границы Γ , а Γ_ε – ε -окрестность границы Γ , т.е. $\Gamma_\varepsilon = \{y \in D : d(y) < \varepsilon\}$. В свою очередь, $\delta_x(x')$ – обобщенная плотность, соответствующая равномерному распределению вероятностей на максимальной сфере $S^{(3,x,d(x))}$ с центром в точке x , лежащей в замыкании \bar{D} области D ($d(x)$ – радиус этой сферы), т.е.

$$\delta_x(x') = \begin{cases} \frac{1}{4\pi d^2(x)}, & x' \in S^{(3,x,d(x))}; \\ 0, & x' \notin S^{(3,x,d(x))}. \end{cases} \quad (7.10)$$

Особо отметим наличие интегрируемой особенности (7.10) в ядре (7.9) рассматриваемого здесь интегрального уравнения (7.7). Описание примера 7.1 окончено.

Как и для марковского уравнения (7.3), требуем, чтобы оператор K из соотношения (7.7) был *сжимающим*. Для простоты полагаем

$$\int_X |k(x', x)| dx \leq q < 1; \quad (7.11)$$

(это аналог соотношения (6.4)), хотя это соотношение можно ослабить, требуя, чтобы *спектральный радиус*

$$\rho(K) = \lim_{m \rightarrow \infty} \|K^m\|_{\mathbb{L}_1(X)}^{1/m} = \inf_m \|K^m\|_{\mathbb{L}_1(X)}^{1/m}$$

был меньше единицы (см., в частности, [9], а также утверждения 7.3, 7.4, 8.1–8.7 данного пособия).

По аналогии с соотношениями (7.1), (7.2) и (7.4) имеем, что при выполнении условия (7.11) решение уравнения (7.7) существует, единственно и представимо в виде ряда Неймана

$$\varphi(x) = \sum_{m=0}^{\infty} K^m f(x), \quad (7.12)$$

где

$$K^m f(x) = \int_X \dots \int_X f(y^{(0)}) k(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \dots \times k(y^{(m-1)}, x) dy^{(0)} \dots dy^{(m-1)}. \quad (7.13)$$

Далее нам потребуются следующие два классических результата.

УТВЕРЖДЕНИЕ 7.1 (теорема Леви; см., например, [19]). *Если $\theta^{(m)}(x) \geq 0$ при $m = 0, 1, 2, \dots$ и сумма интегралов Лебега по мере $\mu(x)$ конечна:*

$$\sum_{m=0}^{\infty} \int \theta^{(m)}(x) d\mu(x) < +\infty,$$

то

$$\int \left(\sum_{m=0}^{\infty} \theta^{(m)}(x) \right) d\mu(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \int \theta^{(m)}(x) d\mu(x).$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 7.2 (теорема Лебега; см., например, [19]). *Если последовательность функций $\{\Xi^{(n)}(x); n = 0, 1, 2, \dots\}$ сходится к $\Xi(x)$*

и для всех n выполнено неравенство $|\Xi^{(n)}(x)| \leq \Psi(x)$, где функция $\Psi(x)$ интегрируема по мере $\mu(x)$, то предельная функция интегрируема и

$$\int \Xi^{(n)}(x) d\mu(x) \rightarrow \int \Xi(x) d\mu(x).$$

Применим утверждения 7.1 и 7.2 для римановой меры $\mu(x) = x$ следующим образом. Во-первых, учтем, что из определения меры пространства $\mathbb{L}_1(X)$ следует, что существует и единственно решение $\Phi(x)$ уравнения

$$\Phi(x) = \int_X |k(x', x)| \Phi(x') dx' + |f(x)| \quad \text{или} \quad \Phi = K_1 \Phi + |f|;$$

при этом $\Phi(x) = \sum_{m=0}^{\infty} [K_1^m |f|](x)$.

Тогда из теоремы Леви (утверждение 7.1) для

$$\theta^{(m)}(x) = [K_1^m |f|](x) \times |h(x)|$$

следует, что

$$\begin{aligned} I_{|h|} &= \int_X \Phi(x) |h(x)| dx = \\ &= \int_X \left(\sum_{m=0}^{\infty} [K_1^m |f|](x) \right) |h(x)| dx = \sum_{m=0}^{\infty} \int_X [K_1^m |f|](x) |h(x)| dx. \end{aligned}$$

Далее можно применить соотношения (7.6), (7.12), (7.13) и теорему Лебега (утверждение 7.2) для

$$\Xi^{(n)}(x) = \sum_{m=0}^n ([K^m f](x) \times h(x)) \quad \text{и} \quad \Psi(x) = \Phi(x) \times |h(x)|$$

и получить

$$I_h = \int_X \left(\sum_{m=0}^{\infty} [K^m f](x) \right) h(x) dx = \sum_{m=0}^{\infty} \int_X [K^m f](x) h(x) dx = \sum_{m=0}^{\infty} (K^m f, h) \quad (7.14)$$

(см. также соотношение (1.9) из подраздела 1.6).

Здесь (с точностью до переобозначения $x = y^{(m)}$)

$$(K^m f, h) = \int_X \dots \int_X f(y^{(0)}) k(y^{(0)}, y^{(1)}) k(y^{(1)}, y^{(2)}) \times \dots$$

$$\times k(y^{(m-1)}, y^{(m)}) h(y^{(m)}) dy^{(0)} dy^{(1)} \dots dy^{(m)} \quad (7.15)$$

(см. также соотношение (1.10) из подраздела 1.6).

Таким образом, правая часть соотношения (7.14) представляет собой сумму интегралов (7.15) бесконечно возрастающей кратности.

Отметим также, что реализованная здесь техника обоснования соотношения (7.14) (с использованием теорем Леви и Лебега для вероятностной меры $\mu(x)$) будет применена далее в подразделе 7.4 при обосновании несмещенности основного оценщика (см. утверждение 7.3), а также в подразделе 8.5 при доказательстве утверждения 8.2 о дисперсии основного оценщика.

7.3. Использование метода выборки по важности. Случайные веса. Алгоритм 1.2 метода Монте-Карло для приближенного вычисления интегралов не позволяет вычислять сумму (7.14) из-за необходимости моделирования векторов ξ бесконечно возрастающей размерности.

Однако специальный вид подынтегральных функций из соотношений (7.15), в которых при переходе от номера m к номеру $m + 1$ происходит умножение на функцию двух переменных $k(y^{(m)}, y^{(m+1)})$ (и меняется аргумент функции $h(y^{(m+1)})$) и приведенные в разделе 4 соображения метода выборки по важности (который подразумевает выбор плотности распределения случайного вектора ξ , близкой к модулю подынтегральной функции – см. соотношение (4.7)) наводят на мысль об использовании для построения оценщиков интегралов (7.15) плотностей распределения векторов $\tilde{\xi}^{(m+1)} = (\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)})$ вида

$$\begin{aligned} f_{(\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(m)})}(y^{(0)}, y^{(1)}, \dots, y^{(m)}) &= \tilde{\pi}(y^{(0)}) r(y^{(0)}, y^{(1)}) \times \\ &\times r(y^{(1)}, y^{(2)}) \times \dots \times r(y^{(m-1)}, y^{(m)}), \end{aligned} \quad (7.16)$$

где $r(x', x) = r(x|x')$ – некоторая условная плотность. Учитывая соотношение (2.27) из подраздела 2.8, получаем, что вектор $\tilde{\xi}^{(m+1)}$ представляет собой отрезок «классической» (бесконечной) однородной цепи Маркова $\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \tilde{\xi}^{(2)}, \dots$ с начальной плотностью $\tilde{\pi}(x)$ и переходной плотностью $r(x', x)$. Численное моделирование траекторий такой цепи осуществляется согласно алгоритму 2.6.

Согласно соотношению (1.8) (или (4.1)), при выборе плотности вида (7.16) имеем

$$(K^m f, h) = \mathbf{E}_{\tilde{\xi}^{(m)}}, \quad (7.17)$$

где

$$\tilde{\zeta}^{(m)} = \frac{f(\tilde{\xi}^{(0)})k(\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}) \times \dots \times k(\tilde{\xi}^{(m-1)}, \tilde{\xi}^{(m)})}{\tilde{\pi}(\tilde{\xi}^{(0)})r(\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}) \times \dots \times r(\tilde{\xi}^{(m-1)}, \tilde{\xi}^{(m)})} \times h(\tilde{\xi}^{(m)}). \quad (7.18)$$

Для оценителей (7.18) удобно использовать рекуррентную запись

$$\tilde{\zeta}^{(m)} = \tilde{Q}^{(m)}h(\tilde{\xi}^{(m)}), \quad (7.19)$$

где

$$\tilde{Q}^{(0)} = \frac{f(\tilde{\xi}^{(0)})}{\tilde{\pi}(\tilde{\xi}^{(0)})}, \quad \tilde{Q}^{(i)} = \tilde{Q}^{(i-1)} \times \frac{k(\tilde{\xi}^{(i-1)}, \tilde{\xi}^{(i)})}{r(\tilde{\xi}^{(i-1)}, \tilde{\xi}^{(i)})} - \quad (7.20)$$

случайные веса; здесь $i = 1, \dots, m$.

7.4. Введение прикладных цепей Маркова. Основной оценитель (монте-карловская оценка по столкновениям).

По аналогии с приведенным ниже утверждением 7.3, используя формулы (7.6), (7.12)–(7.20) и утверждения 7.1 и 7.2 для соответствующих вероятностных мер, можно получить, что

$$I_h = \mathbf{E}\tilde{\zeta}, \quad \tilde{\zeta} = \sum_{m=0}^{\infty} \tilde{\zeta}^{(m)} = \sum_{m=0}^{\infty} \tilde{Q}^{(m)}h(\tilde{\xi}^{(m)}). \quad (7.21)$$

Отметим, что обоснование формулы (7.21) с помощью указанных формул и утверждений во многом аналогично приведенному выше обоснованию формулы (7.14) (см. также далее доказательство утверждения 7.3).

Определенным недостатком формулы (7.21) является то, что она содержит *бесконечную* сумму.

Для преодоления этого недостатка, по аналогии с «физическими» соображениями из теории переноса частиц (см., например, [9, 20], а также раздел 6 данного пособия), целесообразно рассмотреть *прикладную цепь Маркова* (или однородную цепь Маркова, обрывающуюся с вероятностью единица)

$$\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)}; \quad (7.22)$$

здесь N – случайный номер обрыва (см. также соотношение (6.2)).

Для вводимой прикладной цепи Маркова (7.22) определяются *начальная плотность* $\pi(x)$ (это плотность распределения случайной величины $\xi^{(0)}$) и *переходная функция*

$$p(x', x) = r(x', x) \times [1 - p^{(a)}(x')] \quad (7.23)$$

(см. также формулу (6.3)).

Напомним, что $r(x', x)$ – по-прежнему некоторая *условная вероятностная плотность*, а значение $0 \leq p^{(a)}(x') \leq 1$ играет роль *вероятности обрыва траектории*.

Численное моделирование траектории прикладной цепи Маркова реализуется согласно алгоритму 2.8 из подраздела 2.8 данного пособия.

Докажем следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 7.3 (см., например, [9]). *Если в уравнении (7.7) свободный член $f(x)$ принадлежит пространству $\mathbb{L}_1(X)$; $X \subseteq \mathbb{R}^d$, а функция $k(x', x)$ такова, что спектральный радиус интегрального оператора Фредгольма $K_1 : \mathbb{L}_1(X) \rightarrow \mathbb{L}_1(X)$ с ядром $|k(x', x)|$ меньше единицы, а также*

$$\pi(x) \neq 0 \text{ при } f(x) \neq 0 \text{ и } p(x', x) \neq 0 \text{ при } k(x', x) \neq 0, \quad (7.24)$$

то для функционала (7.6) справедливо представление:

$$I_h = (\varphi, h) = \mathbf{E}\zeta, \quad \zeta = \sum_{m=0}^N Q^{(m)} h(\xi^{(m)}), \quad (7.25)$$

где $h \in \mathbb{L}_\infty(X)$, а $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)}$ – однородная цепь Маркова (7.22), обрывающаяся с вероятностью единица, с начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной функцией $p(x', x)$ вида (7.23); случайные веса $Q^{(m)}$ определяются рекуррентно по аналогии с соотношениями (7.20):

$$Q^{(0)} = \frac{f(\xi^{(0)})}{\pi(\xi^{(0)})}; \quad Q^{(m)} = Q^{(m-1)} \times \frac{k(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}{p(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}. \quad (7.26)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим сначала случайную величину, представляющую собой бесконечную сумму:

$$\bar{\zeta} = \sum_{m=0}^{\infty} \Delta^{(m)} \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})|, \quad (7.27)$$

где

$$\Delta^{(m)} = \begin{cases} 1 & \text{до первого обрыва,} \\ 0 & \text{после первого обрыва,} \end{cases} \quad (7.28)$$

а случайные веса $\{\bar{Q}^{(m)}\}$ имеют вид

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

Несложно получить следующий аналог соотношения (7.17):

$$\begin{aligned}
\mathbf{E} \left[\Delta^{(m)} \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})| \right] &= \mathbf{E}_{(\xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)})} \mathbf{E} \left[\Delta^{(m)} \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})| \middle| \xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)} \right] = \\
&= \mathbf{E}_{(\xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)})} \left[\bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})| \mathbf{E} \left(\Delta^{(m)} \middle| \xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)} \right) \right] = \\
&= \mathbf{E}_{(\xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)})} \left[\bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})| \prod_{k=0}^{m-1} \left(1 - p(\xi^{(k)}) \right) \right] = \\
&= \overbrace{\int_X \dots \int_X}^{m+1} |h(x^{(m)})| \pi(x^{(0)}) \left[\prod_{k=0}^{m-1} r(x^{(k)}, x^{(k+1)}) \right] \times \quad (7.29) \\
&\quad \times \left[\prod_{k=0}^{m-1} \frac{|k(x^{(k)}, x^{(k+1)})|}{r(x^{(k)}, x^{(k+1)}) [1 - p(x^{(k)})]} \right] \frac{|f(x^{(0)})|}{\pi(x^{(0)})} \times \\
&\quad \times \left[\prod_{k=0}^{m-1} [1 - p(x^{(k)})] \right] dx^{(0)} \dots dx^{(m)} = \overbrace{\int_X \dots \int_X}^{m+1} |f(x^{(0)})| |h(x^{(m)})| \times \\
&\quad \times \left[\prod_{k=0}^{m-1} |k(x^{(k)}, x^{(k+1)})| \right] dx^{(0)} \dots dx^{(m)} = (K_1^m |f|, |h|),
\end{aligned}$$

так как

$$\mathbf{E} \left[\Delta^{(m)} \middle| \xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)} \right] = \mathbf{P} \left\{ \Delta^{(m)} = 1 \middle| \xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)} \right\} = \prod_{k=0}^{m-1} [1 - p(\xi^{(k)})].$$

Из условий утверждения 7.3 следует, что решение $\bar{\varphi}$ интегрального уравнения $\bar{\varphi} = K_1 \bar{\varphi} + |f|$ существует, единственно и представимо в виде ряда Неймана $\bar{\varphi}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} K_1^m |f|(x)$, и поэтому величина

$$\bar{I}_{|h|} = \sum_{m=0}^{\infty} (K_1^m |f|, |h|) = (\bar{\varphi}, |h|)$$

конечна.

Отсюда, используя теорему Леви (утверждение 7.1) для $\theta^{(m)} = \sum_{j=0}^m \Delta^{(j)} \bar{Q}^{(j)} |h(\xi^{(j)})|$ и соответствующей вероятностной меры $\mu(x)$, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \bar{\zeta} &= \mathbf{E} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \Delta^{(m)} \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})| \right] = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{E} \left[\Delta^{(m)} \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})| \right] = \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} (K_1^m |f|, |h|) = (\bar{\varphi}, |h|) = \bar{I}_{|h|} < +\infty. \end{aligned}$$

Теперь, по аналогии с соотношением (7.27), представим оценитель (7.25) в виде бесконечной суммы

$$\zeta = \sum_{m=0}^{\infty} \Delta^{(m)} Q^{(m)} h(\xi^{(m)}), \quad (7.30)$$

где случайные величины $\Delta^{(m)}$ определяются соотношением (7.28).

Заметим, что

$$\zeta = \lim_{n \rightarrow \infty} \Xi^{(n)}, \quad \text{где } \Xi^{(n)} = \sum_{m=0}^n \Delta^{(m)} Q^{(m)} h(\xi^{(m)}).$$

По аналогии с выкладками (7.29) получаем, что

$$\mathbf{E} \Xi^{(n)} = \sum_{m=0}^n (K^m f, h).$$

Кроме того, учитывая соотношения

$$|\Xi^{(n)}| \leq \sum_{m=0}^n \Delta^{(m)} \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})| \leq \bar{\zeta} \quad \text{и} \quad \mathbf{E} \bar{\zeta} < +\infty$$

и используя теорему Лебега (утверждение 7.2) для соответствующей вероятностной меры $\mu(x)$, получаем

$$\mathbf{E} \zeta = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{E} \Xi_n = \sum_{m=0}^{\infty} (K^m f, h) = (\varphi, h) = I_h.$$

Утверждение 7.3 доказано.

Случайная величина ζ из соотношения (7.25) называется **основным несмещенным** (так как $\mathbf{E}\zeta = I_h$) **весовым оценителем** или **монте-карловской оценкой по столкновениям** функционала I_h .

Отметим, что несколько странное, на первый взгляд, название *оценка «по столкновениям»* для случайной величины (7.25) (в общем случае неясно, что в выражении (7.25) отражает «столкновения») связано с «уважительным» отношением к исторически важной задаче переноса малых частиц, представленной в разделе 6 данного пособия.

Равенство (7.25) дает следующий способ вычисления функционала (7.6) согласно общей схеме метода Монте-Карло (1.1) (см. алгоритм 1.1 из подраздела 1.4 данного пособия).

АЛГОРИТМ 7.1 (см., например, [9, 13]). *Моделируем n траекторий*

$$\xi_j^{(0)}, \xi_j^{(1)}, \dots, \xi_j^{(N_j-1)}, \xi_j^{(N_j)}; \quad j = 1, \dots, n \quad (7.31)$$

прикладной цепи Маркова (7.22) с начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной функцией $p(x', x)$ вида (7.23) согласно алгоритму 2.8 и вычисляем среднее арифметическое вида (1.1):

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

а случайные веса $\{Q_j^{(m)}; m = 0, 1, \dots, N_j; j = 1, \dots, n\}$ подсчитываются по рекуррентным формулам вида (7.26):

$$Q_j^{(0)} = \frac{f(\xi_j^{(0)})}{\pi(\xi_j^{(0)})}; \quad Q_j^{(m)} = Q_j^{(m-1)} \times \frac{k(\xi_j^{(m-1)}, \xi_j^{(m)})}{p(\xi_j^{(m-1)}, \xi_j^{(m)})}. \quad (7.32)$$

Таким образом, нам удалось построить численный метод для приближенного вычисления функционала (7.6), представляющего собой бесконечную сумму (7.14) интегралов возрастающей кратности (7.15).

7.5. Оценитель по поглощениям. Другой стандартной монте-карловской оценкой для функционала $I_h = (\varphi, h)$ из (7.6) является случайная величина

$$\eta = \frac{Q^{(N)} h(\xi^{(N)})}{p^{(a)}(\xi^{(N)})}, \quad (7.33)$$

которая называется **оценителем по поглощениям**.

УТВЕРЖДЕНИЕ 7.4 (см., например, [9]). Если выполнены условия утверждения 7.3, а также

$$p^{(a)}(x) \neq 0 \quad \text{при} \quad h(x) \neq 0,$$

то $\mathbf{E}\eta = I_h$.

Доказательство утверждения 7.4 проводится в точности так же, как доказательство утверждения 7.3 с заменой соотношений (7.27) и (7.30) на соотношения

$$\bar{\eta} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\Delta^{(m)} - \Delta^{(m+1)}) \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(N)})|}{p^{(a)}(\xi^{(N)})} \quad \text{и}$$

$$\eta = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\Delta^{(m)} - \Delta^{(m+1)}) Q^{(m)} h(\xi^{(N)})}{p^{(a)}(\xi^{(N)})}$$

соответственно.

АЛГОРИТМ 7.2 (см., например, [9]). Моделируем n траекторий (7.31) прикладной цепи Маркова (7.22) с начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной функцией $p(x', x)$ вида (7.23) согласно алгоритму 2.8 и вычисляем среднее арифметическое вида (1.1):

$$I_h \approx Z_n^{(\eta)} = \frac{\eta_1 + \dots + \eta_n}{n}, \quad \text{где} \quad \eta_j = \frac{Q_j^{(N_j)} h(\xi_j^{(N_j)})}{p^{(a)}(\xi_j^{(N_j)})},$$

а случайные веса $Q_j^{(N_j)}$; $j = 1, \dots, n$ подсчитываются по рекуррентным формулам (7.32).

Основной оценитель (7.25) и соответствующий ему алгоритм 7.1 позволяет учесть больше информации о траекториях (7.31) прикладной цепи Маркова (7.22), чем оценитель по поглощениям (7.33) и алгоритм 7.2. Отметим также, что рассмотренные в разделе 6 алгоритм 6.2 и оценка (6.46) являются частными случаями алгоритма 7.2 и оценки (7.33) для оценки $P = \hat{I}_h = (\psi, h)$ – доли «физических» траекторий (полученных с помощью прямого моделирования – см. подраздел 8.3), имеющих состояния поглощения внутри рассматриваемой области G ; здесь $\psi(x)$ – решение марковского интегрального уравнения (7.3) с ядром (6.45) и свободным членом (6.43), а функция $h(x)$ имеет вид (6.46).

Величину $P = \hat{I}_h = (\psi, h)$ можно (и даже целесообразно) подсчитывать и с помощью использования основного оценителя (7.25) и алгоритма 7.1 (из общих «физических» соображений такая возможность не столь очевидна).

8. Использование и оптимизация алгоритма с основным оценителем. Функциональные алгоритмы

8.1. Сопряженное интегральное уравнение. Двойственное представление функционала. Метод сопряженных блужданий. При использовании оценителей вида (7.25) или (7.33) может оказаться полезным следующее соображение (см., например, [9]).

Помимо уравнения $\varphi = K\varphi + f$ из (7.7) целесообразно рассмотреть *сопряженное* (относительно функционала $I_h = (\varphi, h)$ из (7.6)) *интегральное уравнение*

$$\varphi^*(x) = \int_X k^*(x', x)\varphi^*(x') dx' + h(x) \quad \text{или} \quad \varphi^* = K^*\varphi^* + h; \quad (8.1)$$

здесь $\varphi^*, h \in \mathbb{L}_\infty(X)$, а ядро $k^*(x', x)$ интегрального оператора K^* таково, что $k^*(x', x) = k(x, x')$, где $k(x', x)$ – ядро исходного интегрального уравнения (7.7).

Справедливо следующее *двойственное представление функционала* (7.6):

$$I_h = (\varphi, h) = (\varphi^*, f), \quad (8.2)$$

где $\varphi(x)$ – решение, а $f(x)$ – свободный член исходного интегрального уравнения (7.7).

Для обоснования формулы (8.2) заметим, что непосредственно из уравнений (7.7) и (8.1) получаются равенства:

$$(\varphi, \varphi^*) = (K\varphi, \varphi^*) + (f, \varphi^*) = (\varphi, K^*\varphi^*) + (\varphi, h). \quad (8.3)$$

Кроме того заметим, что

$$\begin{aligned} (K\varphi, \varphi^*) &= \int_X \left[\int_X k(x', x)\varphi(x') dx' \right] \varphi^*(x) dx = \\ &= \int_X \varphi(x') \left[\int_X k^*(x, x')\varphi^*(x) dx \right] dx' = (\varphi, K^*\varphi^*). \end{aligned} \quad (8.4)$$

Из соотношений (8.3), (8.4) следует равенство (8.2).

Таким образом, вместо оценителя (7.25) для функционала (8.2) можно использовать случайную величину

$$\zeta^* = \sum_{m=0}^{N^*} Q^{*(m)} f(\xi^{*(m)}) \quad (8.5)$$

и следующий аналог алгоритма 7.1, который называют **методом сопряженных блужданий**.

АЛГОРИТМ 8.1 (см., например, [9, 13]). *Моделируем n траекторий*

$$\xi_j^{*(0)}, \xi_j^{*(1)}, \dots, \xi_j^{*(N_j^*-1)}, \xi_j^{*(N_j^*)}; \quad j = 1, \dots, n \quad (8.6)$$

прикладной цепи Маркова с начальной плотностью $\pi^(x)$ и переходной функцией $p^*(x', x)$ согласно алгоритму 2.8 и вычисляем среднее арифметическое вида (1.1):*

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

а веса $\{Q_j^{(m)}; m = 0, 1, \dots, N_j^*; j = 1, \dots, n\}$ подсчитываются по рекуррентным формулам вида (7.32):*

$$Q_j^{*(0)} = \frac{h(\xi_j^{*(0)})}{\pi^*(\xi_j^{*(0)})}; \quad Q_j^{*(m)} = Q_j^{*(m-1)} \times \frac{k(\xi_j^{*(m)}, \xi_j^{*(m-1)})}{p^*(\xi_j^{*(m-1)}, \xi_j^{*(m)})}. \quad (8.7)$$

8.2. Локальные оценители. В ряде задач (см., например, [9, 26], а также пример 7.1 и подраздел 8.6 данного пособия) требуется получить значение самого решения $\varphi(x)$ в заданной точке \tilde{x} .

Здесь можно использовать оценители (7.25) и (8.5) следующими двумя способами (см., например, [9]).

Первый способ связан с рассмотрением **функционального локального оценителя** вида

$$\varphi(\tilde{x}) = \mathbf{E}\zeta(\tilde{x}); \quad \zeta(\tilde{x}) = \sum_{m=0}^N Q^{(m)} k(\xi^{(m)}, \tilde{x}) + f(\tilde{x}), \quad (8.8)$$

где $\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)}$ – это прикладная цепь Маркова (7.22), а веса $\{Q^{(m)}\}$ имеют вид (7.26).

Идея построения оценителя (8.8) состоит в том, что первое слагаемое в правой части интегрального уравнения (7.7) имеет вид функционала (7.6):

$$\int_X k(x', x) \varphi(x') dx' = I_{h_x} = (\varphi, h_x); \quad h_x(x') = k(x', x).$$

Важным положительным качеством оценителя (8.8) является то, что он позволяет получать приближения значений функции $\varphi(x)$ одновременно в нескольких точках.

Однако препятствием к широкому использованию оценителя (8.8) является то, что в нем требуется осуществлять непосредственное вычисление ядра $k(x', x)$, а это на практике затруднено или невозможно из-за наличия интегрируемых особенностей (например, дельта-функций, как в ядре (6.45) марковского интегрального уравнения переноса частиц или в ядре (7.9) интегрального уравнения, получающегося при решении задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца).

Вторая идея вычисления значения $\varphi(\tilde{x})$ состоит в формальном представлении этого значения в виде функционала (7.6):

$$\varphi(\tilde{x}) = (\varphi, \hat{h}_{\tilde{x}}) = \int_X \varphi(x) \hat{h}_{\tilde{x}}(x) dx; \quad \hat{h}_{\tilde{x}}(x) = \delta(x - \tilde{x}).$$

Оценитель (7.25) для такого функционала непосредственно не применим из-за необходимости вычисления значений $\hat{h}_{\tilde{x}}(\xi^{(m)})$.

Можно попытаться применить двойственное представление (8.2) и оценитель (8.5), но и здесь дельта-функция $\delta(x - \tilde{x})$ сохраняется в начальных весах $Q_j^{*(0)}$ из (8.7).

Положение спасают соображения о *включении особенности в плотность* (см. подраздел 4.3 данного пособия). Выберем в качестве начальной плотности сопряженного блуждания $\pi^*(x) = \delta(x - \tilde{x})$. При этом $\xi^{*(0)} \equiv \tilde{x}$ и $Q^{*(0)} \equiv 1$.

Таким образом, получаем **локальный оценитель метода сопряженных блужданий**

$$\varphi(\tilde{x}) = \mathbf{E} \zeta^{*(\tilde{x})}; \quad \zeta^{*(\tilde{x})} = f(\tilde{x}) + \sum_{m=1}^{N^*} \tilde{Q}^{*(m)} f(\tilde{\xi}^{*(m)}); \quad (8.9)$$

здесь $(\tilde{\xi}^{*(0)}, \tilde{\xi}^{*(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{*(N^*)})$ – прикладная цепь Маркова с начальным состоянием $\xi^{*(0)} \equiv \tilde{x}$ и переходной функцией $p^*(x', x)$, а случайные веса $\{\tilde{Q}^{*(m)}; m = 0, 1, \dots, N^*\}$ имеют вид

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

В отличие от случайной величины (8.8), оценитель (8.9) позволяет строить аналог алгоритма 8.1 для приближения *только одного* значения $\varphi(\tilde{x})$. Тем не менее имеются практически значимые применения

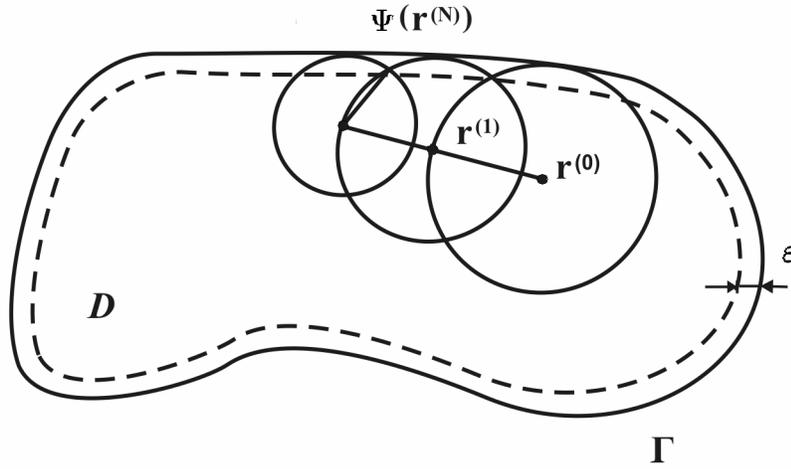


Рис. 8.1. Применение метода сопряженных блужданий (8.9): процесс «блуждания по сферам»

оценителя (8.9). В частности, на рис. 8.1 показана схема алгоритма «блуждания по сферам», представляющего собой частный случай аналога алгоритма 8.1 с оценителем (8.9) и предназначенного для решения краевых задач типа (7.8) (см. пример 7.1).

8.3. Использование прямого моделирования. Включение особенностей свободного члена и ядра интегрального уравнения в начальную плотность и переходную функцию используемой прикладной цепи Маркова. Несмотря на отмеченное в подразделе 7.2 разнообразие прикладных (практически значимых) интегральных уравнений вида (7.7), особое место во многих важных приложениях занимает оценка функционалов вида (7.5) от решения марковских интегральных уравнений (7.3), для которых

$$f(x) = \pi(x), \quad k(x', x) = p(x', x), \quad (8.10)$$

и поэтому $\varphi(x) = \psi(x)$ (см., в частности, практически важную модель переноса частиц, представленную в разделе 6 данного пособия).

В этом случае при использовании прикладной цепи Маркова (7.22) с распределением (8.10) для построения оценителей (7.25) и (7.33) получается ситуация **прямого моделирования**, при которой *все слу-*

чайные веса (7.26) равны единице и

$$I_h = \mathbf{E}\hat{\zeta} = \mathbf{E}\hat{\eta}; \quad \hat{\zeta} = \sum_{m=0}^N h(\xi^{(m)}); \quad \hat{\eta} = \frac{h(\xi^{(N)})}{p^{(a)}(\xi^{(N)})}. \quad (8.11)$$

В частности, оценка (6.46) является оценщиком (монте-карловской оценкой) по поглощениям $\hat{\eta}$ из (8.11) для вычисления величины $\hat{I}_h = P$ с помощью алгоритма 6.2 для случая прямого моделирования (8.10).

Определенной ценностью представленной в разделе 7 теории весовых оценщиков (7.25) и (7.33) состоит в том, что даже если свободный член $f(x)$ и ядро $k(x', x)$ исходного уравнения (7.7) являются начальной плотностью и переходной функцией некоторой прикладной цепи Маркова соответственно (а значит, уравнение (7.7) является марковским), но при этом моделирование траекторий этой цепи Маркова согласно алгоритму 2.8 затруднено, то можно использовать другую, удобную для моделирования, прикладную цепь Маркова (7.22), при этом отличие от прямого моделирования будет компенсироваться не единичными случайными весами в оценщиках (7.25), (7.33).

Однако произвол в выборе цепи (7.22) существенно ограничен в весьма распространенном на практике случае, когда функции $f(x)$ и $k(x', x)$ имеют особенности. Примерами такой ситуации являются, например, факты наличия дельта-функций в ядре (6.45) марковского интегрального уравнения переноса частиц и в ядре (7.9) интегрального уравнения, получающегося при решении задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца.

Упомянутые особенности отражают определенные «физические характеристики» моделируемых процессов. В частности, дельта-функция (6.36) из ядра (6.45) марковского интегрального уравнения переноса частиц (7.3) отражает *прямолинейность* движения фотона, а дельта-функция из ядра (7.9) подчеркивает то, что соответствующая функция Грина рассматривается на поверхности сферы.

Эти «физические особенности» должны учитываться при выборе прикладной цепи Маркова (7.22) для успешной реализации алгоритмов 7.1, 7.2, в первую очередь, для корректного подсчета весов (7.32). Конкретнее, нужно использовать соображения *включения особенности в плотность* (см. подраздел 4.3 данного пособия) подобно тому, как это делалось при построении оценщика (8.9): такие же, как в функциях $f(x)$ и $k(x', x)$, дельта-особенности должны присутствовать в плотности $\pi(x)$ и переходной функции $p(x', x)$ (и при подсчете весов (7.32) эти

дельта-функции формально «сокращаются»).

Поэтому при оценке функционалов от решения марковского интегрального уравнения (7.7), соответствующего модели переноса частиц из раздела 6, следует использовать переходную функцию $\bar{p}(x', x)$, отражающую прямолинейность движения модельных «частиц» с помощью включения в нее множителя (6.36). Варьировать (в определенных пределах) можно вероятность поглощения $p^{(a)}$, распределение длины свободного пробега (6.40) и индикатрису рассеяния $g(\mathbf{w}|\mathbf{w}')$.

Учет дельта-функции в ядре (7.9) обосновывает эффективность (и даже необходимость) применения процесса «блуждания по сферам», представленного на рис. 8.1.

8.4. Оптимизация алгоритмов 7.1, 7.2. Конечность среднего числа состояний прикладной цепи Маркова. Оптимальный выбор функций $\pi(x)$ и $p(x', x)$ для моделирования траекторий (7.31) при численной реализации алгоритмов 7.1, 7.2 производится по стандартному критерию минимальной трудоемкости $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ (см. формулу (1.18) из подраздела 1.9 данного пособия).

Здесь, в отличие от случая приближения одного интеграла, для которого удастся разработать целый спектр модификаций (в том числе дискретно-стохастических), позволяющих уменьшать величины t и $\mathbf{D}\zeta$ (см., например, [5, 9, 17], а также подраздел 5.4 данного пособия), часто приходится ограничиваться немногочисленными модификациями оценщиков (7.25), (7.33) и использовать при их сравнении подход из подраздела 1.10, подразумевающий приближенное вычисление величин t и $\mathbf{D}\zeta$ по выборочным значениям ζ_i ; $i = 1, \dots, \hat{n}$; $\hat{n} \ll n$ согласно формулам (1.19), (1.20) и (1.22).

Что касается теоретических результатов об оценке величин t и $\mathbf{D}\zeta$, то они носят характер «теорем существования». В этом и следующем подразделе приведены соответствующие утверждения (см. также [9]).

Величина t для алгоритмов 7.1, 7.2 связана со средней длиной $\mathbf{E}N$ траекторий цепи Маркова (7.22). Несложно доказать следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 8.1 (см., например, [9]). *Если переходная функция $p(x', x)$ прикладной цепи Маркова (7.22) является ядром интегрального оператора, спектральный радиус которого в пространстве $\mathbb{L}_1(X)$ меньше единицы, то $\mathbf{E}N < +\infty$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим марковское интегральное уравнение (7.3), соответствующее цепи (7.22), а также основной оценщик (7.25) для этой же цепи и функции $h(x) \equiv 1$.

Здесь все веса $Q^{(m)}$ тождественно равны единице (это частный случай *прямого моделирования*, рассмотренного в предыдущем подразделе 8.3) и, согласно соотношению (8.11),

$$\mathbf{E}\hat{\zeta} = \mathbf{E} \left[\sum_{m=0}^N h(\xi^{(m)}) \right] = \mathbf{E}N = I_h = (\psi, h) = \int_X \psi(x) dx < +\infty,$$

так как $\psi \in \mathbb{L}_1(X)$. Утверждение 8.1 доказано.

8.5. Теоремы о дисперсии основного оценителя и оценителя по поглощениям. Оптимальные плотности. Определенная трудность изучения дисперсий $\mathbf{D}\zeta$ и $\mathbf{D}\eta$ оценителей (7.25) и (7.33) связана с тем, что они задаются неявно, с помощью вспомогательного интегрального уравнения

$$\chi(x) = \int_X \frac{k^2(x', x) \chi(x') dx'}{p(x', x)} + \frac{f^2(x)}{\pi(x)} \quad \text{или} \quad \chi = K_p \chi + \frac{f^2}{\pi}. \quad (8.12)$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 8.2 (см., например, [9]). *Если функции $f(x)$, $h(x)$ и $f^2(x)/\pi(x)$ принадлежат пространству $\mathbb{L}_1(X)$, а спектральные радиусы интегральных операторов Фредгольма $K_1, K^*, K_p : \mathbb{L}_1(X) \rightarrow \mathbb{L}_1(X)$ (с ядрами $k_1(x', x) = |k(x', x)|$, $k^*(x', x) = k(x, x')$, $k_p(x', x) = k^2(x', x)/p(x', x)$ соответственно) меньше единицы, а также выполнены условия (7.24), то дисперсия основного оценителя (7.25) дается выражением*

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}\zeta^2 - (\mathbf{E}\zeta)^2 = (\chi, h[2\varphi^* - h]) - I_h^2, \quad (8.13)$$

где χ – решение уравнения (8.12), а φ^* – решение сопряженного уравнения (8.1).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Как и в доказательстве утверждения 7.3, соотношение вида (8.13) сначала доказывается с помощью теоремы Леви (утверждение 7.1) для оценителя $\tilde{\zeta}$ вида (7.27), для которого $\mathbf{E}\tilde{\zeta} = \hat{I}_{|h|} = (\bar{\varphi}, |h|)$ и функция $\bar{\varphi}$ является решением интегрального уравнения $\bar{\varphi} = K_1 \bar{\varphi} + |f|$.

С учетом соотношений (7.25), (7.26) несложно получить, что случайные величины

$$(Q^{(0)})^2 = \frac{f^2(\xi^{(0)})/\pi(\xi^{(0)})}{\pi(\xi^{(0)})} = (\bar{Q}^{(0)})^2 = \frac{|f^2(\xi^{(0)})|/\pi(\xi^{(0)})}{\pi(\xi^{(0)})};$$

$$\begin{aligned}
(Q^{(m)})^2 &= (Q^{(m-1)})^2 \times \frac{k^2(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})/p(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}{p(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})} = \\
&= (\bar{Q}^{(m)})^2 = (\bar{Q}^{(m-1)})^2 \times \frac{|k^2(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})|/p(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}{p(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}
\end{aligned}$$

являются случайными весами основных оценщиков функционалов от решения уравнения (8.12):

$$(\chi, H) = \mathbf{E} \left[\sum_{m=0}^N (\bar{Q}^{(m)})^2 H(\xi^{(m)}) \right] = \mathbf{E} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \Delta^{(m)} (\bar{Q}^{(m)})^2 H(\xi^{(m)}) \right], \quad (8.14)$$

где случайные величины (индикаторы обрыва траектории прикладной цепи Маркова (7.22)) $\Delta^{(m)}$ определяются соотношением (7.28).

Заметим, что исходное уравнение $\bar{\varphi} = K_1 \bar{\varphi} + |f|$ является сопряженным (относительно функционала $\bar{I}_{|h|} = (\bar{\varphi}, |h|) = (\bar{\varphi}^*, |f|)$) для уравнения $\bar{\varphi}^* = K_1^* \bar{\varphi}^* + |h|$ и потому можно выписать следующий аналог формулы (8.9):

$$\begin{aligned}
\bar{\varphi}^*(\tilde{x}) &= \mathbf{E} \left[|h|(\tilde{x}) + \sum_{s=1}^{\tilde{N}} \tilde{Q}^{(s)} |h(\tilde{\xi}^{(s)})| \right]; \\
\tilde{Q}^{(0)} &\equiv 1; \quad \tilde{Q}^{(s)} = \tilde{Q}^{(s-1)} \times \frac{|k(\tilde{\xi}^{(s-1)}, \tilde{\xi}^{(s)})|}{p(\tilde{\xi}^{(s-1)}, \tilde{\xi}^{(s)})};
\end{aligned}$$

здесь прикладная цепь Маркова $\tilde{\xi}^{(0)}, \tilde{\xi}^{(1)}, \dots, \tilde{\xi}^{(\tilde{N})}$ «стартует» из точки $\tilde{\xi}^{(0)} \equiv \tilde{x}$ и имеет переходную функцию $p(x', x)$.

Из последнего соотношения, взятого в случайной точке $\tilde{x} = \xi^{(m)}$, получается равенство

$$\begin{aligned}
\mathbf{E} \left[\sum_{s=m+1}^{\infty} \Delta^{(s)} \frac{\bar{Q}^{(s)}}{\bar{Q}^{(m)}} |h(\xi^{(s)})| \middle| \xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)}; \Delta^{(m)} \right] = \\
= \Delta^{(m)} [\bar{\varphi}^*(\xi^{(m)}) - |h(\xi^{(m)})|]. \quad (8.15)
\end{aligned}$$

Рассматривая конечные отрезки соответствующих бесконечных сумм положительных слагаемых и применяя теорему Леви (утверждение 7.1), а также учитывая соотношение (8.14) для $H(x) = |h^2(x)|$ и

$H(x) = 2|h(x)|[\bar{\varphi}^*(x) - |h(x)|]$, соотношение (8.15) и то, что $(\Delta^{(m)})^2 = \Delta^{(m)}$, получаем

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}\bar{\zeta}^2 &= \mathbf{E}\left[\sum_{m=0}^{\infty} \Delta^{(m)} \bar{Q}^{(m)} |h(\xi^{(m)})|\right]^2 = \mathbf{E}\left[\sum_{m=0}^{\infty} \Delta^{(m)} (\bar{Q}^{(m)})^2 |h^2(\xi^{(m)})|\right] + \\
&+ 2\mathbf{E}\left[\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{s=m+1}^{\infty} \Delta^{(m)} \Delta^{(s)} \bar{Q}^{(m)} \bar{Q}^{(s)} |h(\xi^{(m)})||h(\xi^{(s)})|\right] = (\chi, |h|^2) + \\
&\quad + 2 \sum_{m=0}^{\infty} \left[\mathbf{E}[\Delta^{(m)} (\bar{Q}^{(m)})^2 |h(\xi^{(m)})|] \times \right. \\
&\quad \left. \times \mathbf{E}\left(\sum_{s=m+1}^{\infty} \Delta^{(s)} \frac{\bar{Q}^{(s)}}{\bar{Q}^{(m)}} |h(\xi^{(s)})| \middle| \xi^{(0)}, \dots, \xi^{(m)}; \Delta^{(m)}\right) \right] = \\
&= (\chi, |h|^2) + 2\mathbf{E}\left[\sum_{m=0}^{\infty} \Delta^{(m)} (\bar{Q}^{(m)})^2 |h(\xi^{(m)})| [\bar{\varphi}^*(\xi^{(m)}) - |h(\xi^{(m)})|]\right] = \\
&= (\chi, |h|^2) + 2(\chi, |h|[\bar{\varphi}^* - |h|]) = (\chi, |h|[2\bar{\varphi}^* - |h|]).
\end{aligned} \tag{8.16}$$

Далее, по аналогии с доказательством утверждения 7.3, замечаем, что

$$\zeta^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \Xi^{(n)}, \quad \text{где } \Xi^{(n)} = \left[\sum_{m=0}^n \Delta^{(m)} Q^{(m)} h(\xi^{(m)}) \right]^2.$$

Имеем

$$|\Xi^{(n)}| \leq \bar{\zeta}^2 \quad \text{и} \quad \mathbf{E}\bar{\zeta}^2 = (\chi, |h|[2\bar{\varphi}^* - |h|]) < +\infty,$$

и поэтому, согласно теореме Лебега (утверждение 7.2) для соответствующей вероятностной меры $\mu(x)$, формулы и выкладки, аналогичные (8.14)–(8.16) для произвольных функций $k(x', x)$, $f(x)$ и $h(x)$, дают соотношение

$$\mathbf{E}\zeta^2 = (\chi, h[2\varphi^* - h]),$$

и, с учетом того, что $\mathbf{E}\zeta = I_h$, имеем

$$\mathbf{D}\zeta = \mathbf{E}\zeta^2 - (\mathbf{E}\zeta)^2 = (\chi, h[2\varphi^* - h]) - I_h^2.$$

Утверждение 8.2 доказано.

Аналогичным образом доказывается следующая теорема о дисперсии оценителя (7.33).

УТВЕРЖДЕНИЕ 8.3 (см., например, [9]). *Если выполнены условия утверждения 8.2 и $h^2(x)/p^{(a)}(x) \in \mathbb{L}_\infty(X)$, то*

$$\mathbf{D}\eta = \mathbf{E}\eta^2 - (\mathbf{E}\eta)^2 = \left(\chi, \frac{h^2}{p^{(a)}} \right) - I_h^2, \quad (8.17)$$

где функция $\chi(x)$ является решением уравнения (8.12).

Таким образом, формулы (8.13) и (8.17), представляющие дисперсии оценителей (7.25) и (7.33) функционала (7.5), являются намного более сложными и менее приспособленными для конструктивных применений на практике, чем соотношения (3.16), (4.2) для дисперсии оценителя многократного интеграла (4.1).

Иллюстрацией последнего комментария являются приводимые ниже (без доказательства) утверждения о минимальных дисперсиях оценителей (7.25) и (7.33) (аналоги утверждения 4.1).

УТВЕРЖДЕНИЕ 8.4 [8]. *В условиях утверждения 8.2 минимальная дисперсия (8.13) реализуется при*

$$\pi^{(opt,\zeta)}(x) = \frac{|f(x)||g(x)|}{(|f|, |g|)}; \quad p^{(opt,\zeta)} = \frac{|k(x', x)||g(x)|}{[\bar{K}^*|g|](x')}, \quad (8.18)$$

где \bar{K}^* – интегральный оператор с ядром $\bar{k}^*(x', x) = |k(x, x')|$, а функция $g(x)$ является решением следующего нелинейного интегрального уравнения:

$$g^2(x) = f(x)[2\varphi^*(x) - f(x)] + \frac{1}{1 - p^{(a)}(x)} \left[\int_X |k(x, x')||g(x')| dx' \right]^2. \quad (8.19)$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 8.5 [8]. *В условиях утверждения 8.3 минимальная дисперсия (8.17) реализуется при*

$$\pi^{(opt,\eta)}(x) = \frac{|f(x)||g(x)|}{(|f|, |g|)}; \quad p^{(opt,\eta)} = \frac{|k(x', x)||g(x)|}{|g(x')|}, \quad (8.20)$$

где функция $g(x)$ является решением уравнения (8.19).

Для случая неотрицательных функций $h(x)$, $k(x', x)$ и $f(x)$ (и, соответственно, $\varphi(x)$ и $\varphi^*(x)$) можно получить следующие аналоги утверждения 4.2 о нулевой дисперсии (4.2).

УТВЕРЖДЕНИЕ 8.6 (см., например, [9]). Если функции $k(x', x)$, $f(x)$ и $h(x)$ неотрицательны и выполнены условия утверждения 8.2, то дисперсия (8.13) при

$$\pi^{(opt,\zeta)}(x) = \frac{f(x)g(x)}{(f, g)}; \quad p^{(opt,\zeta)} = \frac{k(x', x)g(x)}{[K^*g](x')} \quad (8.21)$$

для $g(x) = \varphi^*(x)$ равна нулю: $\mathbf{D}\zeta = 0$; здесь $\varphi^*(x)$ – решение уравнения (8.1).

УТВЕРЖДЕНИЕ 8.7 (см., например, [9]). Если функции $k(x', x)$, $f(x)$ и $h(x)$ неотрицательны и выполнены условия утверждения 8.3, то дисперсия (8.14) при

$$\pi^{(opt,\eta)}(x) = \frac{f(x)g(x)}{(f, g)}; \quad p^{(opt,\eta)} = \frac{k(x', x)g(x)}{g(x')} \quad (8.22)$$

для $g(x) = \varphi^*(x)$ равна нулю: $\mathbf{D}\eta = 0$.

Заметим, что для неотрицательных функций $h(x)$, $k(x', x)$, $f(x)$ и для $p^{(a)}(x) \equiv 0$ функция $g(x) = \varphi^*(x)$ является решением уравнения (8.19).

Функция $g(x)$ из соотношений (8.18)–(8.22) называется **функцией ценности**, а выбор этой функции, обеспечивающий близость начальной плотности $\pi(x)$ и переходной функции $p(x', x)$ используемой прикладной цепи Маркова (7.22) к оптимальным выражениям (8.18), (8.20)–(8.22), определяет **метод выборки по важности**.

Как и в случае вычисления интегралов (см. раздел 4), следует отметить, что в рамках применения метода выборки по важности нахождение оптимальной функции $g(x)$ по сложности эквивалентно исходной задаче вычисления функционала. Поэтому в соотношениях (8.18), (8.20)–(8.22) в качестве g используют некоторое приближение этой функции:

$$\tilde{g}(x) = (1 + \varepsilon(x))g(x), \quad \text{где } |\varepsilon(x)| < \delta.$$

Например, в задаче переноса излучения через толстый слой вещества (см. раздел 6 данного пособия) в качестве \tilde{g} используется экспоненциальная асимптотика решения соответствующей сопряженной задачи.

Положительным свойством функции g из соотношений (8.18), (8.20)–(8.22) является то, что она может быть определена с точностью до постоянного множителя A (т. е. использование g и $A g$ эквивалентно).

При построении алгоритмов выборки по важности для случая $g(x) = \varphi^*(x)$ (см. утверждения 8.6, 8.7) следует также учесть, что здесь $\mathbf{P}\{N = \infty\} = 1$, и поэтому необходимо вводить слабое поглощение.

В заключение заметим, что для практического использования оценителей (7.25) и (7.33) при приближении функционалов (7.5) от решения марковского уравнения (7.6) важным является то обстоятельство, что применение прямого моделирования дает конечную дисперсию: при $\pi(x) = f(x)$ и $p(x', x) = k(x', x)$ имеем $\varphi(x) \equiv \bar{\varphi}(x) \equiv \chi(x)$ и

$$\mathbf{E}\zeta^2 = (\varphi, h(2\varphi^* - h)) \leq \|\varphi\|_{\mathbb{L}_1(X)} \|h\|_{\mathbb{L}_\infty(X)} \|2\varphi^* - h\|_{\mathbb{L}_\infty(X)} < +\infty;$$

$$\mathbf{E}\eta^2 = (\varphi, h^2/p_a) \leq \|\varphi\|_{\mathbb{L}_1(X)} \|h^2/p_a\|_{\mathbb{L}_\infty(X)} < +\infty,$$

а значит, и $\mathbf{D}\zeta < +\infty$, $\mathbf{D}\eta < +\infty$.

8.6. Функциональные оценители. Кроме вычисления функционалов (7.6) определенный интерес вызывает задача приближения решения $\varphi(x)$ уравнения (7.7) на компактном множестве $\hat{X} \subseteq \mathbb{R}^d$ (см., в частности, пример 7.1).

Определенной трудностью при решении этой задачи является то обстоятельство, что приближаемая функция $\varphi(x)$ задана в неявной (интегральной) форме (7.7) или (7.12). Это означает невозможность явно (с использованием композиций элементарных функций) вычисления как самой функции $\varphi(x)$ в фиксированном наборе точек

$$\mathbf{X}^{(M)} = \{x_1, \dots, x_M\}, \quad (8.23)$$

например, на аппроксимационной сетке (обозначим соответствующий набор значений как

$$\varphi^{(M)} = \{\varphi(x_1), \dots, \varphi(x_M)\}, \quad (8.24)$$

так и функционалов вида

$$\mathbf{F}^{(M)} = \left\{ (\varphi, \chi^{(1)}), \dots, (\varphi, \chi^{(M)}) \right\}; \quad (\varphi, \chi^{(i)}) \stackrel{def}{=} \int_X \varphi(y) \chi^{(i)}(y) dy \quad (8.25)$$

для заданного набора «базисных» функций

$$\Xi^{(M)} = \left\{ \chi^{(1)}(x), \dots, \chi^{(M)}(x) \right\} \quad (8.26)$$

и достаточно большого M .

Поэтому при построении алгоритмов аппроксимации функции $\varphi(x)$ (мы будем называть их **функциональными алгоритмами**) предполагается численное приближение величин (8.24) и (или) (8.25). Особо

будут выделены *рандомизированные* функциональные алгоритмы, в которых величины (8.24) и (8.25) приближаются методом Монте-Карло.

Для приближения функции $\varphi(x)$ используем представления классической теории численной аппроксимации функций (см., например, [16]), имеющих общий вид

$$\varphi(x) \approx L^{(M)}\varphi(x) = \sum_{i=1}^M w^{(i)}\chi^{(i)}(x) \quad (8.27)$$

для специально выбранного набора базисных функций (8.26) (вид этих функций определяет тип аппроксимации (8.27)) и коэффициентов

$$\mathbf{W}^{(M)} = \{w^{(1)}, \dots, w^{(M)}\}. \quad (8.28)$$

Выделим два типа функциональных алгоритмов, связанных с представлением (8.27): **проекционные** и **сеточные численные методы**.

Для *проекционных функциональных алгоритмов* базисные функции (8.26) из аппроксимации (8.27) представляют собой отрезок ряда (длины M) ортонормированных функций, для которых

$$(\chi^{(i)}, \chi^{(j)}) = \int_X \chi^{(i)}(y)\chi^{(j)}(y) dy = \delta^{(ij)}; \quad i, j = 1, \dots, M,$$

где $\delta^{(ij)}$ – это *символы Кронекера*: $\delta^{(ii)} = 1$ и $\delta^{(ij)} = 0$ при $i \neq j$.

Здесь коэффициенты (8.28) равны величинам (8.25), т. е. являются линейными функционалами вида (7.6) от приближаемого решения $\varphi(x)$ уравнения (7.7).

На этой основе (с учетом алгоритма 7.1) можно построить следующий **рандомизированный проекционный функциональный алгоритм**.

АЛГОРИТМ 8.2. *Моделируем n траекторий (7.31) прикладной цепи Маркова (7.22) и вычисляем значения*

$$\tilde{w}^{(i)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} \chi^{(i)}(\xi_j^{(m)}); \quad i = 1, \dots, M$$

(здесь веса $Q_j^{(m)}$ вычисляются по формулам (7.32)), а затем используем приближение

$$\varphi(x) \approx L^{(M)}\tilde{\varphi}(x) = \sum_{i=1}^M \tilde{w}^{(i)}\chi^{(i)}(x). \quad (8.29)$$

Идея алгоритма 8.2 была впервые предложена более полувека назад в работе А. С. Фролова и Н. Н. Ченцова [27], но более или менее интенсивное применение (во всяком случае, в российской науке) эта идея нашла лишь в последнее время.

Для *сеточных функциональных алгоритмов* коэффициенты (8.28) представляют собой некоторые комбинации значений (8.24) в точках достаточно регулярной сетки (8.23):

$$w^{(i)} = w^{(i)}(\varphi^{(M)}); \text{ чаще всего } w^{(i)} = \varphi(x_i). \quad (8.30)$$

Далее мы рассмотрим ряд способов получения приближений $\tilde{\varphi}^{(i)} \approx \varphi(x_i); i = 1, \dots, M$ значений (8.24) функции $\varphi(x)$ в узлах сетки (8.23) для последующего подсчета приближений коэффициентов (8.30) по формулам

$$\tilde{w}^{(i)} = w^{(i)}(\tilde{\varphi}^{(M)}) \text{ или } \tilde{w}^{(i)} = \tilde{\varphi}^{(i)}, \quad (8.31)$$

с целью последующего применения окончательного приближения (8.29).

Упомянем прежде всего **метод зависимых испытаний**, основанный на применении *функционального локального оценителя* (8.8).

АЛГОРИТМ 8.3 (см., например, [9, 26]). *Моделируем n траекторий (7.31) прикладной цепи Маркова (7.22) и получаем значения*

$$\tilde{\varphi}^{(i)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} k(\xi_j^{(m)}, x_i) + f(x_i); \quad i = 1, \dots, M,$$

а затем вычисляем коэффициенты (8.30) по формулам (8.31) и используем приближение (8.29).

Метод зависимых испытаний, обладая рядом несомненных преимуществ (простота построения, экономичность, сохранение гладкости решения для приближения (8.29), независимость погрешности от числа узлов сетки (8.23)), используется относительно редко, так как требует повышенной гладкости ядра $k(x', x)$ и свободного члена $f(x)$ уравнения (7.7) по переменной x (см., в частности, [9, 26, 27]).

Гораздо более широкое применение находит **функциональный метод сопряженных блужданий**, основанный на применении оценителей вида (8.9).

АЛГОРИТМ 8.4 (см., например, [9, 26]). *Для каждого узла $x_i; i = 1, \dots, M$ сетки (8.23) моделируем $n^{(i)}$ траекторий*

$$\xi_j^{(i,0)} \equiv x_i, \xi_j^{(i,1)}, \dots, \xi_j^{(i, N_j^{(i)}-1)}, \xi_j^{(i, N_j^{(i)})}; \quad j = 1, \dots, n^{(i)} \quad (8.32)$$

прикладной цепи Маркова с переходной функцией $p^{(i)}(x', x)$ и получаем значение

$$\tilde{\varphi}^{(i)} = \frac{1}{n^{(i)}} \sum_{j=1}^{n^{(i)}} \sum_{m=1}^{N_j^{(i)}} Q_j^{(i,m)} f(\xi_j^{(i,m)}) + f(x_i); \quad i = 1, \dots, M,$$

где

$$Q_j^{(i,0)} \equiv 1, \quad Q_j^{(i,m)} = Q_j^{(i,m-1)} \times \frac{k(\xi_j^{(i,m)}, \xi_j^{(i,m-1)})}{p^{(i)}(\xi_j^{(i,m-1)}, \xi_j^{(i,m)})}.$$

Затем вычисляем коэффициенты (8.30) по формулам (8.31) и используем приближение (8.29).

Весьма существенным недостатком алгоритма 8.4 является то обстоятельство, что для каждого x_i ; $i = 1, \dots, M$ приходится моделировать на ЭВМ индивидуальный набор траекторий (8.32).

Наконец, крайне важной видится возможность рассмотрения модификации проекционного функционального алгоритма 8.2, в которой рассматриваются дополнительные финитные функции

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}^{(M)}) = \{h^{(x_1)}(x), \dots, h^{(x_M)}(x)\}, \quad (8.33)$$

носители которых сосредоточены вблизи соответствующих узлов x_i регулярной сетки (8.23) так, что

$$\int_X \varphi(x) h^{(x_i)}(x) dx \approx \varphi(x_i). \quad (8.34)$$

Соотношения (8.34) позволяют приближенно вычислять значения (8.24) решения $\varphi(x)$ уравнения (7.7) в узлах сетки (8.23), используя соответствующие варианты основного весового оценителя (7.25).

АЛГОРИТМ 8.5 [26]. Моделируем n траекторий (7.31) прикладной цепи Маркова (7.22) и получаем значения

$$\tilde{\varphi}^{(i)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} h^{(x_i)}(\xi_j^{(m)}); \quad i = 1, \dots, M$$

(здесь веса $Q_j^{(m)}$ вычисляются по формулам (7.32)).

Затем вычисляем коэффициенты (8.30) по формулам (8.31) и используем приближение (8.29).

Алгоритм 8.5 назовем **проекционно-сеточным функциональным методом** (терминология здесь несколько отличается от книги [18], где *проекционно-сеточными* называются алгоритмы, соответствующие *сеточным* методам типа алгоритмов 8.3 и 8.4).

В книге [26] и статье [28] проекционно-сеточный функциональный алгоритм 8.5 построен и исследован для случая, когда функции (8.33) являются кусочно-постоянными, а в качестве функций (8.26) представлен *базис Стренга – Фикса с производящими функциями*, являющимися *B*-сплайнами нулевого и первого порядка (см. [18], а также формулу (8.37)); при этом получаются *метод гистограмм и многомерный аналог метода полигона частот* соответственно.

Отметим также возможности построения сеточных алгоритмов численного решения уравнения (7.7), основанных на применении *детерминированных и рандомизированных квадратурных и (или) кубатурных формул* как для непосредственного подсчета интегралов (7.15), так и для приближения первого члена $\int_X k(x', x)\varphi(x') dx'$ в правой части уравнения (7.7), но эти вычислительные конструкции являются крайне неэффективными для решения практически важных интегральных уравнений.

8.7. Условная оптимизация функциональных алгоритмов.

Определенным «слабым» (неразработанным) свойством проекционных функциональных алгоритмов (типа алгоритма 8.2) является отсутствие соображений *теории условной оптимизации* (см., в частности, [9, 26]).

В этой теории речь идет о согласованном выборе параметров *M* (число узлов (8.23) и базисных функций (8.26)) и *n* (число реализуемых на компьютере траекторий прикладной цепи Маркова) используемых функциональных алгоритмов, обеспечивающем заданный уровень погрешности (обозначим его γ) при минимальных вычислительных затратах $S(M, n)$.

Строится верхняя граница $UP(M, n)$ погрешности алгоритма $\delta(M, n)$, зависящая от параметров *M* и *n*:

$$\delta(M, n) \leq UP(M, n). \quad (8.35)$$

Эта функция двух переменных приравнивается величине γ .

Из уравнения вида

$$UP(M, n) = \gamma \quad (8.36)$$

один из параметров (например, *n*) выражается через другой: $n = \psi(M)$.

Это соотношение подставляется в выражение для затрат $S(M, n)$ (которое тоже зависит от параметров M и n ; как правило $S(M, n) = H \times M \times n$; $H = \text{const}$).

В результате получается функция $\tilde{S}(M)$ одного переменного M , которая исследуется на минимум с помощью известных приемов математического или численного анализа.

Найденные значения $M_{\min}(\gamma), n = \psi(M_{\min}\gamma)$ объявляются **условно-оптимальными параметрами** соответствующего функционального алгоритма.

«Условность» такого способа оптимизации связана с тем, что в левой части уравнения вида (8.36) используется не сама погрешность алгоритма $\delta(M, n)$, а ее верхняя граница $UP(M, n)$ (а вдруг эта граница неточная, грубая?!).

ПРИМЕР 8.1 (см., например, [9, 26]). Рассмотрим задачу условной оптимизации для метода зависимых испытаний (алгоритм 8.3). В качестве базисных функций (8.26) рассмотрим «абсолютно-устойчивые» финитные функции *мультилинейной аппроксимации* (или аппроксимации Стренга – Фикса [18] с производящей функцией $\beta^{(1)}(u)$, являющейся B -сплайном первого порядка) на регулярной сетке с шагом h по каждой координате:

$$\chi^{(i)}(x) = \beta^{(1)}\left(\frac{x^{(1)}}{h} - j_i^{(1)}\right) \times \dots \times \beta^{(1)}\left(\frac{x^{(d)}}{h} - j_i^{(d)}\right); \quad (8.37)$$

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

$$x = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) \quad x_i = (j_i^{(1)}h, \dots, j_i^{(d)}h); \quad j_i^{(k)} - \text{целые числа;}$$

здесь множество \hat{X} , на котором происходит приближение решения $\varphi(x)$ уравнения (7.7), представляет собой прямоугольный параллелепипед.

Для базиса (8.37) при использовании C -подхода к оценке погрешности (см. [9, 26]) рассматриваемого алгоритма 8.3 с вероятностью, близкой к единице, имеем

$$\begin{aligned} \delta(M, n) &= \|\varphi - L^{(M)}\tilde{\varphi}\|_{C(X)} \leq \|\varphi - L^{(M)}\varphi\|_{C(X)} + \|L^{(M)}\varphi - L^{(M)}\tilde{\varphi}\|_{C(X)} \leq \\ &\leq \tilde{H}_1 h^2 + \tilde{L} \max_{i=1, \dots, M} |\tilde{\varphi}^{(i)} - \varphi(x_i)| \leq UP(M, n) = \frac{H_1}{M^{2/d}} + \frac{H_2}{\sqrt{n}}; \quad (8.38) \end{aligned}$$

здесь \tilde{H}_1 , H_1 , $H_2 = \text{const}$, а \tilde{L} – константа Лебега [26] (для базиса (8.37) она равна единице).

Заметим, что порядок h^2 детерминированной компоненты $\|\varphi - L^{(M)}\varphi\|_{C(X)}$ (см. [9, 26, 28]) погрешности (8.38) обеспечивает выбор и последующее приближение простейших коэффициентов $w^{(i)} = \varphi(x_i)$ (см. второе из соотношений (8.30)).

Трудоёмкость рассматриваемого алгоритма 8.3 имеет вид $S(M, n) = H \times M \times n$; $H = \text{const}$. Зададим уровень погрешности γ и рассмотрим уравнение типа (8.36):

$$\frac{H_1}{M^{2/d}} + \frac{H_2}{\sqrt{n}} = \gamma. \quad (8.39)$$

Выразив n через M из соотношения (8.39): $n = H_2^2 / (\gamma - H_1/M^{2/d})^2$, получим функцию одного переменного

$$\tilde{S}(M) = \frac{HH_2^2 M}{(\gamma - H_1/M^{2/d})^2}.$$

Приравняв нулю производную

$$\frac{d\tilde{S}(M)}{dM} = \frac{HH_2^2}{(\gamma - H_1/M^{2/d})^3} \left(\gamma - \frac{H_1}{M^{2/d}} \times \frac{d+4}{d} \right),$$

получаем выражения для условно-оптимальных параметров и минимальной трудоёмкости:

$$M_{opt} = \left[\frac{H_1(d+4)}{d} \right]^{d/2} \gamma^{-d/2}; \quad n_{opt} = \frac{[H_2(d+4)]^2}{16} \gamma^{-2};$$

$$S_{opt} = \frac{HH_1^{d/2} H_2^2 (d+4)^{2+d/2}}{16d^{d/2}} \gamma^{-2-d/2}. \quad (8.40)$$

Заметим, что если нас интересует только порядок по γ величин M_{opt} , n_{opt} и S_{opt} , т. е. соотношения вида

$$M_{opt} \asymp \gamma^{-d/2}, \quad n_{opt} \asymp \gamma^{-2}, \quad S_{opt} \asymp \gamma^{-2-d/2},$$

и трудоёмкость $S(M, n)$ пропорциональна произведению $M \times n$, то достаточно приравнять детерминированную компоненту (в уравнении (8.39) это $H_1/M^{2/d}$) и стохастическую компоненту (в уравнении (8.39) это

H_2/\sqrt{n}) верхней границы погрешности $UP(M, n)$ и получить требуемый порядок из соотношения типа (8.39).

Кроме того, заметим, что в практических вычислениях содержательную проблему представляет собой выбор констант H, H_1, H_2 из соотношений (8.40). Описание примера 8.1 закончено.

Интересна (и весьма непросто разрешима) так называемая *задача полной оптимизации* [26], в которой при минимизации трудоемкости $S(M, n)$ кроме параметров M_{opt}, n_{opt} оптимальным образом выбираются начальная плотность $\pi(x)$ и переходная функция $p(x', x)$, определяющие используемую в расчетах прикладную цепь Маркова (7.22).

Проблемы проведения рассуждений по условной оптимизации проекционных методов (типа алгоритма 2.2) связаны с наличием «хвостов» $\{\chi^{(M+1)}(x), \chi^{(M+2)}(x), \dots\}$ бесконечных ортонормированных систем функций и необходимостью их оценки для построения верхних границ погрешности вида (8.35). Кроме того, проведенные в последнее время исследования показывают вполне определенную *численную неустойчивость* рандомизированных проекционных функциональных алгоритмов, что означает большое влияние ошибок при вычислении приближений коэффициентов (8.25), (8.28) на общую погрешность методов.

В этом смысле гораздо проще (и, возможно, эффективнее) использовать проекционно-сеточные методы (типа алгоритма 8.5), для которых нахождение условно-оптимальных параметров не является сверхсложной задачей.

Например, для *многомерного аналога полигона частот* (т. е. для алгоритма 8.5, в котором в качестве специальных функций (8.33) берутся кусочно-постоянные функции вида

$$h^{(x_i)}(x) = \begin{cases} \frac{1}{h^d} & \text{при } x \in G^{(x_i, h)}; \\ 0 & \text{иначе;} \end{cases}$$

$$G^{(x_i, h)} = \left\{ x = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) : x_i^{(s)} - h/2 \leq x^{(s)} \leq x_i^{(s)} + h/2; s = 1, \dots, d \right\},$$

где $x_i = (x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(d)})$, а в качестве базисных функций (8.26) выбраны функции (8.37)), можно получить следующие выражения для условно-оптимальных параметров

$$M_{opt} = \left[\frac{\hat{H}_1[(2\nu + 1)d + 4]}{(2\nu + 1)d} \right]^{d/2} \gamma^{-d/2},$$

$$n_{opt} = \frac{\hat{H}_2^2 \hat{H}_1^{d/2} [(2\nu + 1)d + 4]^{2+d/2}}{16[(2\nu + 1)d]^{d/2}} \times (2 \ln M_{opt} - \ln \ln M_{opt} + \hat{H}_3) \times \gamma^{-2-d/2}$$

для специально подобранных констант \hat{H}_1 , \hat{H}_2 , \hat{H}_3 и ν [26, 28].

В любом случае требуется дополнительный сравнительный анализ рандомизированных проекционных и проекционно-сеточных методов как с позиций теории условной оптимизации, так и с точки зрения эффективности их применения для численного решения интегральных уравнений Фредгольма второго рода (7.7), возникающих при исследовании актуальных прикладных задач.

8.8. Другие задачи теории и приложений алгоритмов численного статистического моделирования. Ограниченность данного пособия не позволяет «объять необъятное» и представить полноценный и подробный обзор теоретических разработок и актуальных приложений метода Монте-Карло.

Тем не менее, в пособии представлена методически важная задача вычисления многократного интеграла, а также основные проблемы решения практически значимых интегральных уравнений Фредгольма второго рода.

Вне подробного рассмотрения в данном пособии остались теоретические и прикладные аспекты *рандомизированных численных методов решения краевых задач математической физики и кинетических уравнений* (в том числе, нелинейных), *векторных алгоритмов метода Монте-Карло* и *алгоритмов с ветвлением траекторий, алгоритмов решения стохастических дифференциальных уравнений* (с приложениями в математической физике и финансовой математике), *смешанных дискретно-стохастических численных методов, специальных алгоритмов моделирования случайных процессов и полей* и многих других задач.

Для дополнительного изучения перечисленных тем можно использовать как материалы учебника [9], так и специальную литературу. Следует обратить особое внимание на работы представителей новосибирской школы методов Монте-Карло (фамилии этих специалистов перечислены в подразделе 1.2 данного пособия).

В оставшихся разделах и приложениях данного учебника будут представлены дополнительные детали, связанные с вопросами численного моделирования выборочных значений случайных величин.

В частности, будут рассмотрены:

– *алгоритмы реализации стандартных случайных чисел* на ЭВМ (раздел 9),

– численные методы моделирования дискретных случайных величин (раздел 10),

– альтернативные (отличные от стандартных) алгоритмы широкого применения (такие как метод дискретной суперпозиции и мажорантный метод исключения – раздел 11) для моделирования случайных величин и векторов,

– специальные (использующие специфические свойства конкретных распределений) методы (на примере гамма- и бета-распределений – раздел 12 – и гауссовского распределения – раздел 13) для моделирования случайных величин, векторов и функций.

Наконец, в материалах раздела 14 будут представлены технологии конструирования моделируемых плотностей распределения и формирования экзаменационных задач; эти материалы целесообразно использовать при проведении семинарских занятий дисциплины (если таковые предусмотрены) – см. приложение 3.

9. Генераторы стандартных случайных чисел

9.1. Мера управляемости численных итерационных процессов. В этом подразделе мы приведем некоторое «философское» основание использования итерационных алгоритмов (конкретнее, мультипликативного метода вычетов – см. далее формулы (9.4) и подразделы 9.3 – 9.6) для моделирования (реализации на ЭВМ) стандартных случайных чисел α_i (см., например, [9, 13], а также подраздел 2.4 данного пособия).

Рассмотрим численные математические модели систем, описываемых итерационным процессом

$$X_{n+1} = Y(X_n); \quad n = 0, 1, 2, \dots; \quad (9.1)$$

здесь X_n – некоторый вектор (величина), а $Y(\cdot)$ – некоторая (для векторного случая – многозначная) функция управления.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 9.1 [29]. Исследуемую систему и соответствующий ей итерационный процесс (9.1) назовем **управляемыми**, если существует одновременно непустое и конечное множество предельных состояний

$$\{\tilde{X}^{(1)}, \dots, \tilde{X}^{(L)}\}, \quad \tilde{X}^{(l)} = \lim_{n \in \tilde{N}^{(l)}} X_n; \quad (9.2)$$

здесь $\tilde{\mathbb{N}}^{(l)}$ – подпоследовательности множества натуральных чисел \mathbb{N} , причем $\bigcup_l \tilde{\mathbb{N}}^{(l)} = \mathbb{N}$.

Мерой управляемости итерационного процесса (9.1) назовем величину $\mu = 1/L$, где L – количество элементов множества предельных состояний (9.2).

Отметим, что чем меньше значение L , тем ближе мера μ к единице и тем более управляемым является процесс (9.1).

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.1 [29]. *Предельные состояния (9.2) итерационного процесса (9.1) образуют циклическую группу.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В силу того, что состояния (9.2) являются предельными, выполняются соотношения $Y(\tilde{X}^{(i)}) = \tilde{X}^{(j)}$, причем для случая $L > 1$ имеем $j \neq i$, иначе состояние $\tilde{X}^{(i)}$ является *единственным* предельным состоянием процесса (9.1). Утверждение 9.1 доказано.

Не ограничивая общности, можно считать, что

$$\tilde{X}^{(l+1)} = Y(\tilde{X}^{(l)}) \text{ при } l = 1, \dots, L-1 \text{ и } Y(\tilde{X}^{(L)}) = \tilde{X}^{(1)}. \quad (9.3)$$

Это означает, что введенная нами мера управляемости процесса (9.1) обратно пропорциональна порядку циклической группы равновесных состояний (9.3).

В данном разделе, в частности, будут приведены примеры последовательностей (9.1) с малым значением меры управляемости μ , которые широко используются для моделирования «неуправляемости» (хаоса, случайности).

Речь пойдет о *мультипликативном методе вычетов* по модулю $K = 2^m$ с множителем вида $Q = 5^{2p+1}$ для натуральных m и p :

$$x_{n+1} = \{x_n \times 5^{2p+1}\}; \quad x_0 = 2^{-m}; \quad (9.4)$$

здесь $\{A\}$ обозначает дробную часть числа A (см. также формулы (9.10), (9.11) и (9.13)).

Особо отметим, что последовательности вида (9.4) являются характерными примерами циклических групп вида (9.3) (см., например, [30]).

Конкретные значения для параметров K и Q обусловлены широким применением алгоритма (9.4) с достаточно большими значениями степеней m и $2p+1$ для реализации *датчиков псевдослучайных чисел*, используемых в алгоритмах метода Монте-Карло (см., например, [9, 13], а также подразделы 2.4, 9.3, 9.5 данного пособия).

Мультипликативный метод вычетов (9.4) по модулю $K = 2^m$ для выбранного множителя $Q = 5^{2p+1}$ обладает минимальной (для различных Q) мерой управляемости, равной $\mu = 1/2^{m-2}$ (см. далее подраз-

дел 9.5), что обуславливает целесообразность использования этого алгоритма в качестве численной модели случайной величины α , равномерно распределенной в интервале $(0, 1)$.

9.2. Двоичное представление случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$. Использование *стандартных случайных чисел* $\{\alpha_i\}$, представляющих собой выборочные значения случайной величины α , равномерно распределенной в интервале $(0, 1)$, является по сути единственным инструментом «воспроизведения случайности» на ЭВМ с целью применения численных алгоритмов метода Монте-Карло для решения методических и прикладных задач.

Случайная величина $\alpha \in U(0, 1)$ имеет функцию распределения

$$F_\alpha(x) = \mathbf{P}\{\alpha < x\} = \begin{cases} 0 & \text{для } x \in (-\infty, 0]; \\ x & \text{для } x \in (0, 1); \\ 1 & \text{для } x \in [1, +\infty) \end{cases} \quad (9.5)$$

(см. также формулу (2.12) и рис. 2.2) и характеристики $\mathbf{E}\alpha = 1/2$, $\mathbf{D}\alpha = 1/12$ (см. формулы (2.13)). Важным свойством этой случайной величины, которое активно используется при обосновании алгоритмов метода Монте-Карло, является то, что

$$\mathbf{P}\{\alpha \in (c, d) \subseteq (0, 1)\} = d - c, \quad (9.6)$$

см. также формулу (2.14) и рис. 2.3.

Значения $\{\alpha_i\}$ получаются на ЭВМ с помощью специальной программы или устройства, которое называется *генератором стандартных случайных (псевдослучайных) чисел*.

Важным для практического построения генераторов стандартных случайных чисел является следующее рассуждение (см., например, [9, 13]). Учтем первым делом то обстоятельство, что числа в компьютере имеют двоичное представление.

Поскольку $\alpha \in (0, 1)$, то двоичное представление каждого выборочного значения этой случайной величины имеет вид

$$\alpha = 0, \alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k)} \dots = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{(k)} 2^{-k}, \quad (9.7)$$

причем каждый разряд $\alpha^{(k)}$ мантииссы числа (9.7) равен нулю или единице.

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.2 (см., например, [9]). *Для того чтобы случайная величина α была равномерно распределенной в интервале $(0, 1)$,*

необходимо и достаточно, чтобы двоичные цифры $\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k)}, \dots$ из соотношения (9.7) представляли собой последовательность независимых бернуллиевских случайных величин с вероятностью успеха $1/2$:

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

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Необходимость. Поскольку случайная величина (9.7) равномерно распределена в $(0, 1)$, то $\alpha^{(k)} = 0$ при

$$0, \alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k-1)} 0 \leq \alpha < 0, \alpha^{(1)} \dots \alpha^{(k-1)} 1, \quad (9.8)$$

причем $\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k-1)}$ в (9.8) могут принимать значения 0 и 1. Длина интервала (9.8) равна 2^{-k} , и интервалы (9.8) для разных наборов $\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k-1)}$ не пересекаются, поэтому, используя соотношение (9.6), получаем

$$\mathbf{P}\{\alpha^{(k)} = 0\} = \sum_{\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k-1)}=0}^1 2^{-k} = 2^{k-1} \times 2^{-k} = \frac{1}{2}. \quad (9.9)$$

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

Докажем теперь независимость $\alpha^{(s)}$ и $\alpha^{(k)}$, где $1 \leq s < k$. Для этого рассмотрим вероятность $\mathbf{P}\{(\alpha^{(k)} = i) \cap (\alpha^{(s)} = j)\}$. Это число, очевидно, можно рассматривать как условную вероятность того, что выполнено соотношение типа (9.8) при условии, что $\alpha^{(s)}$ фиксировано. Тогда по аналогии с равенством (9.9) имеем

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

Аналогично

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

а это и означает независимость случайных цифр числа (9.7).

Достаточность. Очевидно, что дробь из правой части соотношения (9.7) принадлежит интервалу $(0, 1)$, поэтому

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

при $x \geq 1$.

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

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

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

здесь использована независимость случайных цифр $\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(k)}$.

Легко проверить, что $\mathbf{P} \{ \alpha^{(k)} < a_k \} = a_k / 2$. Поэтому

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

Таким образом, функция распределения случайной дроби из правой части соотношения (9.7) совпадает с функцией (9.5). Утверждение 9.2 доказано.

9.3. Два типа генераторов стандартных случайных чисел.

С одной стороны, доказанное утверждение 9.2 может повергнуть исследователя в некоторое уныние, так как оно говорит о том, что «настоящее» стандартное случайное число (9.7) имеет *бесконечную* мантиссу, воспроизвести которую на ЭВМ невозможно.

С другой стороны, можно отметить, что в вычислительной математике машинные ошибки, связанные с конечностью мантиссы, часто не учитываются (в качестве примера можно указать использование форматов вещественных чисел на ЭВМ). Для используемых на практике генераторов случайных чисел эффекты, связанные с конечностью мантиссы, как правило, незначительны.

Утверждение 9.2 обосновывает принцип работы так называемых **физических датчиков случайных чисел**. Это технические устройства (чаще всего «шумящие» электронные приборы), которые вырабатывают случайную последовательность двоичных цифр (условно: лампочка горит или не горит с вероятностью $1/2$; если вероятность не равна $1/2$, то целесообразно брать пары событий «да – нет» и «нет – да», а события «да – да», «нет – нет» отбрасывать).

К преимуществам такого способа получения случайных чисел относят быстроту реализации и неограниченность запаса случайных чисел.

Недостатком физических датчиков случайных чисел является то, что периодически требуется статистическая проверка вырабатываемых случайных чисел (поскольку даже сверхнадежное техническое устройство дает сбой). Кроме того, нет возможности воспроизвести расчеты. Следует тем не менее заметить, что существует немало вычислителей, которые предпочитают именно физические датчики случайных чисел, и работы по конструированию таких устройств продолжаются.

Большинство расчетов по методу Монте-Карло произведено и производится с помощью *генераторов псевдослучайных чисел*, представляющих собой некоторые вычислительные подпрограммы (чаще всего такие подпрограммы называются *RAND* или *RANDOM*).

Аргументами в пользу применения псевдослучайных чисел являются возможность воспроизводить расчеты, быстрота получения чисел, отсутствие внешних устройств и необходимости многократной проверки качества получаемых чисел, малая загруженность памяти ЭВМ.

Большинство известных алгоритмов реализации псевдослучайных чисел представляет собой *детерминированную дискретную последовательность* и имеет вид

$$\alpha_{n+1} = \psi(\alpha_n) \quad (9.10)$$

(это аналог формулы (9.1)), где начальное число α_0 задано. Областью значений функции $\psi(x)$ должен являться интервал $(0, 1)$.

Одно из соображений о том, каким образом следует выбирать функцию $\psi(x)$ из соотношения (9.10), состоит в следующем. Пары точек

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

с одной стороны, должны располагаться на кривой $y = \psi(x)$, а с другой – эти же точки должны (по свойствам «настоящих» стандартных случайных чисел) быть равномерно распределены в квадрате $\Delta^{(2)} = \{(x, y) : 0 < x < 1, 0 < y < 1\}$. Поэтому график функции $\psi(x)$ должен достаточно плотно заполнять этот квадрат.

Примером такой функции $\psi(x)$ может служить

$$\psi(x) = \{Qx\} \quad (9.11)$$

для большого целого положительного множителя Q ; здесь $\{A\}$ обозначает дробную часть числа A (рис. 9.1).

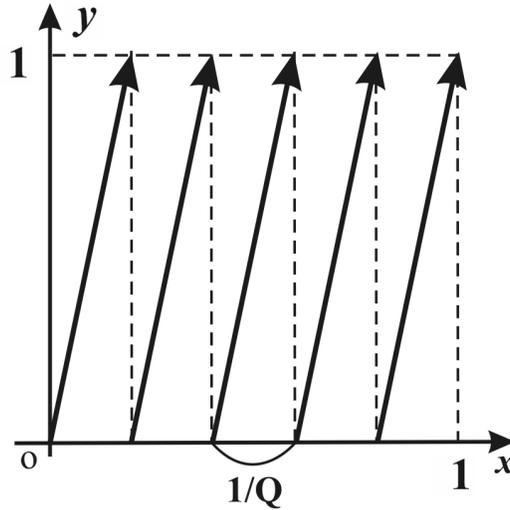


Рис. 9.1. График функции $\psi(x) = \{Qx\}$

Алгоритм (9.10) с функцией (9.11) (и с конечными мантиссами чисел $\{\alpha_n\}$ из последовательности (9.10)) называется **мультипликативным методом вычетов** и является одним из наиболее часто употребляемых алгоритмов при моделировании псевдослучайных чисел.

9.4. Два полезных свойства преобразования метода вычетов. Отметим следующее свойство преобразования (9.11).

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.3 (см., например, [9, 13]). *Случайная величина $\beta = \{Q\alpha\}$ равномерно распределена в интервале $(0, 1)$ для любого целого положительного числа Q .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Исследуем функцию распределения $F_\beta(x) = \mathbf{P}(\beta < x)$. Согласно определению дробной части числа, имеем $\beta \in [0, 1)$, и поэтому $F_\beta(x) = 0$ при $x < 0$ и $F_\beta(x) = 1$ при $x \geq 1$.

Если $x \in [0, 1)$ (см. рис. 9.2), то, используя соотношение (9.6), получаем

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

Сравнивая функции $F_\beta(x)$ и (9.5), делаем вывод о том, что случайная величина β равномерно распределена в интервале $(0, 1)$. Утвержде-

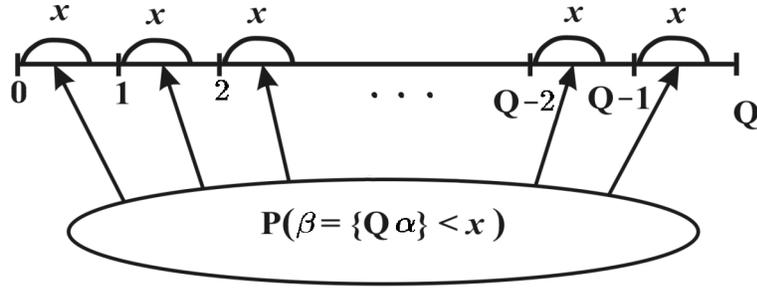


Рис. 9.2. Иллюстрация к доказательству утверждения 9.3

ние 9.3 доказано.

Таким образом, преобразование метода вычетов (9.11) сохраняет равномерное распределение в интервале $(0, 1)$.

Одним из существенных сомнений, связанных с использованием мультипликативного метода вычетов (9.10), (9.11) является то обстоятельство, что даже для «настоящих» («теоретических») стандартных случайных величин вида (9.7) члены последовательности

$$\beta(s+1) = \{Q\beta(s)\} = \{Q^{s+1}\beta(0)\}; \quad \beta(0) = \alpha \quad (9.12)$$

являются зависимыми случайными величинами. Поэтому весьма важным является следующее свойство преобразования (9.11).

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.4 (см., например, [9]). *Коэффициент корреляции*

$$r(\alpha, \tilde{\beta}) = r(\alpha, \beta(s)) \stackrel{def}{=} \mathbf{E} \left[\left(\frac{\alpha - \mathbf{E}\alpha}{\sqrt{\mathbf{D}\alpha}} \right) \left(\frac{\tilde{\beta} - \mathbf{E}\tilde{\beta}}{\sqrt{\mathbf{D}\tilde{\beta}}} \right) \right]$$

равен

$$r(\alpha, \tilde{\beta}) = \frac{1}{Q^s} = \frac{1}{\tilde{Q}},$$

где $\tilde{\beta} = \beta(s)$, $\tilde{Q} = Q^s$, для любых целых положительных чисел Q и s .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Индукцией по s , используя утверждение 9.3, несложно показать, что случайная величина $\tilde{\beta} = \{\tilde{Q}\alpha\} = \{Q^s\alpha\}$ является также стандартной. При этом $\mathbf{E}\alpha = \mathbf{E}\tilde{\beta} = 1/2$, $\mathbf{D}\alpha = \mathbf{D}\tilde{\beta} = 1/12$ (см. соотношения (2.13)), и коэффициент корреляции равен

$$r(\alpha, \tilde{\beta}) = \mathbf{E} \left[\left(\frac{\alpha - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \left(\frac{\tilde{\beta} - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \right] = \mathbf{E} \left[\left(\frac{\tilde{Q}\alpha - \tilde{Q}/2}{\tilde{Q}\sqrt{1/12}} \right) \left(\frac{\tilde{\beta} - 1/2}{\sqrt{1/12}} \right) \right] =$$

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

где $\gamma = [\tilde{Q}\alpha]$ (это целая часть числа $\tilde{Q}\alpha$). Случайная величина γ , принимающая значения $0, 1, \dots, \tilde{Q} - 1$ с равными вероятностями $1/\tilde{Q}$, и непрерывная величина $\tilde{\beta}$ независимы. Действительно,

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

здесь $k = 0, 1, \dots, \tilde{Q} - 1$ и $0 < c < d < 1$.

Таким образом,

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

Утверждение 9.4 доказано.

Отметим, что доказательство утверждения 9.4 существенно уточнено по сравнению с учебником [9].

Из утверждения 9.4 следует, что при $Q \gg 1$ коэффициент корреляции между соседними членами $\beta(s)$ и $\alpha = \beta(0)$ последовательности (9.12) невелик и убывает с ростом s степенным образом.

Отметим также, что утверждения 9.3 и 9.4 сформулированы для «настоящего» стандартного случайного числа α вида (9.7). Можно сформулировать аналоги этих утверждений в случае применения метода (9.10), (9.11) для чисел $\{\alpha_n\}$ с ограниченной мантиссой длины m . При этом для достаточно большого m при удачном подборе множителя Q статистические свойства членов последовательности (9.10), (9.11) и «настоящего» стандартного числа (9.7) близки (это показывают соответствующие статистические тесты – см., например, [5, 9, 23], а также следующие подразделы 9.5, 9.6 данного пособия).

9.5. Периодичность и мера управляемости метода вычетов.

Предположим, что начальный элемент последовательности (9.10), (9.11) равен $\alpha_0 = 2^{-m}$, а множитель имеет вид $Q = 5^{2p+1}$, где p – целое положительное число, т. е. справедливо представление

$$\alpha_n = k_n 2^{-m}; \quad k_0 = 1, \quad k_n \equiv k_{n-1} 5^{2p+1} \pmod{2^m}; \quad (9.13)$$

см. также формулу (9.4).

Приведем некоторые аргументы в пользу выбора множителя Q в виде $Q = 5^{2p+1}$. Сначала приведем следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.5 [5]. *Рассмотрим последовательность*

$$x_n = \frac{k_n}{K}, \text{ где } k_n \equiv Q k_{n-1} \pmod{K}, \quad (9.14)$$

а K, Q, k_n – натуральные числа и $n = 1, 2, \dots$ (запись (9.14) означает, что k_n равно остатку, полученному при делении $Q k_{n-1}$ на K). Если задать x_0 в форме несократимой дроби $x_0 = k_0/K$ и предположить, что K взаимно просто с Q , то все x_n из (9.14) будут несократимыми дробями.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Применим метод математической индукции по $n = 0, 1, 2, \dots$. Число x_0 является несократимой дробью со знаменателем K по условию.

Пусть теперь $n = s$ и $x_s = k_s/K$ – несократимая дробь. Имеем $Q x_s = Q k_s/K$. Согласно формуле (9.14)

$$Q k_s = r K + k_{s+1}, \quad (9.15)$$

где r – натуральное число.

Покажем, что k_{s+1} взаимно просто с K . Действительно, если допустить, что у k_{s+1} и K есть общий простой множитель h , то из (9.15) следует, что $Q k_s$ делится на h . Множитель Q делиться на h не может, так как по условию Q взаимно просто с K ; поэтому на h должно делиться k_s , но это противоречит индуктивному предположению о том, что k_s/K – несократимая дробь.

Итак, k_{s+1} взаимно просто с K , поэтому из равенства (9.15) имеем

$$x_{s+1} = \left\{ \frac{Q k_s}{K} \right\} = \left\{ r + \frac{k_{s+1}}{K} \right\} = \frac{k_{s+1}}{K},$$

т. е. утверждение верно и для $n = s + 1$. Утверждение 9.5 доказано.

Из утверждения 9.5 следует, что если положить в соотношениях (9.10), (9.11) $Q = 5^{2p+1}$; $K = 2^m$ и $x_0 = 1/K$ (как в соотношениях (9.4) и (9.13)), то члены последовательности α_n из (9.13) представляют собой двоичные дроби с длиной мантиссы m , причем m -е разряды этих дробей равны единице.

Существенный недостаток мультипликативного метода вычетов (9.13) связан с тем, что количество чисел, имеющих двоичную мантиссу

длины m и принадлежащих интервалу $(0, 1)$, является конечным (не более чем 2^m различных чисел), и поэтому **последовательность (9.13) является периодической**, т. е. рано или поздно (через $L \leq 2^m$ шагов) какое-нибудь значение α_L совпадет со значением α_0 , и тогда, в силу соотношений (9.10), (9.13), имеем

$$\alpha_{L+i} = \alpha_i \quad \text{при } i = 1, 2, \dots \quad (9.16)$$

Наименьшее число L , удовлетворяющее соотношению (9.16), называется *длиной периода*. Обычно для расчетов не рекомендуют использовать больше, чем $L/2$ чисел последовательности (9.13).

Стандартными методами теории чисел можно доказать следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.6 [6]. *Максимальная длина периода последовательности (9.14) при $K = 2^m$; $m \geq 3$ равна $L = 2^{m-2}$, причем она достигается для случая, когда остаток деления натурального множителя Q на 8 равен 3 или 5.*

Докажем также следующий простой факт.

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.7. *Остаток от деления чисел $Q(p) = 5^{2p+1}$ на 8 для всех $p = 0, 1, 2, \dots$ равен 5.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Применим метод математической индукции. Для $p = 0$ имеем, что число $Q(0) = 5^{2 \times 0 + 1} = 5$ при делении на 8 дает остаток 5.

Предположим, что для $p = k$ число $Q(k) = 5^{2k+1}$ при делении на 8 дает остаток 5. Для $p = k + 1$ имеем

$$Q(k + 1) = 5^{2(k+1)+1} = Q(k) \times 25 = 8 \times [3 \times Q(k)] + Q(k).$$

Первое слагаемое в последнем выражении делится на 8 нацело, а остаток от деления второго слагаемого на 8, согласно индуктивному предположению, равен 5. Таким образом, остаток от деления числа $Q(k + 1)$ на 8 равен 5. Утверждение 9.7 доказано.

Величина $Q = 5^{2p+1}$ в двоичном представлении оканчивается на 01, поэтому все α_n из соотношения (9.13) являются m -разрядными двоичными дробями, последние два разряда которых равны 01. Вследствие равенства $L = 2^{m-2}$ остальные $m - 2$ разряда «пробегают» все возможные комбинации. Поэтому в качестве α_0 можно выбрать любую m -разрядную двоичную дробь указанного типа.

Утверждения 9.5–9.7 показывают, что конструкция мультипликативного метода вычетов (9.13) позволяет (с помощью выбора достаточно большой длины мантииссы m) получать последовательности вида

(9.1) со сколь угодно малой мерой управляемости $\mu = 1/2^{m-2}$ (см. подраздел 9.1). Соответственно, последовательность (9.13) с малой мерой управляемости достаточно хорошо воспроизводит случайность, хаотичность, что в некоторой степени оправдывает введение определения *меры управляемости итерационных процессов* в подразделе 9.1.

Из утверждения 9.4 следует, что из-за желательной независимости (а лучше сказать, «малой» зависимости) стандартных случайных чисел α_n из (9.13) целесообразно выбирать натуральный параметр p также достаточно большим.

В новосибирской школе методов Монте-Карло для алгоритмов с числом испытаний n порядка 10^9 и меньше долгие годы вполне удовлетворительным считается генератор (9.13) с параметрами $m = 40$ и $p = 8$, прошедший всестороннее многолетнее тестирование.

В последнее время в связи с ростом мощностей современных вычислительных систем возникла потребность в генераторах с увеличенным периодом. В частности, для параллельных вычислений используется генератор (9.13) с параметрами $m = 128$ и $p = 50054$ [31].

Определенные трудности конкретной реализации формул (9.13) на компьютере связаны с тем, что нужно производить действия с числами, имеющими мантиссу длины m , превосходящую стандартный формат ЭВМ.

9.6. Тестирование генераторов стандартных случайных чисел. Применение мультипликативного метода вычетов в параллельных вычислениях. Окончательный вывод о качестве того или иного генератора случайных или псевдослучайных чисел следует из результатов тестирования этого генератора. Сразу следует заметить, что никакая, даже самая широкая, система тестов не является достаточной для того, чтобы объявить тот или иной генератор подходящим.

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

В связи с необходимостью применения генераторов для решения многомерных задач, одной из важнейших характеристик последовательностей $\{\alpha_n\}$ является *свойство d -равномерности*, смысл которого

состоит в том, что векторы

$$\boldsymbol{\alpha}_1^{(d)} = (\alpha_1, \dots, \alpha_d), \boldsymbol{\alpha}_2^{(d)} = (\alpha_{d+1}, \dots, \alpha_{2d}), \dots, \boldsymbol{\alpha}_n^{(d)} = (\alpha_{d(n-1)+1}, \dots, \alpha_{nd}) \quad (9.17)$$

должны с ростом n с вероятностью единица равномерно заполнять единичный d -мерный куб $\Delta^{(d)}$. Это означает, что частота попадания в любую прямоугольную подобласть куба стремится к объему этой области при $n \rightarrow \infty$.

Проверку этого свойства можно осуществлять, например, с помощью *критерия хи-квадрат* (см., например, [15]).

Область $\Delta^{(d)}$ разбивается на $r = s^d$ одинаковых достаточно малых кубов (при этом вводится равномерная сетка шага $1/s$ по каждой координате), подсчитываются частоты $\{\nu_i\}$ попадания векторов (9.17) в эти малые кубы и величина

$$\tilde{\chi}_{r-1}^2(n) = \sum_{i=1}^r \frac{(\nu_i - np_i)^2}{np_i}, \quad (9.18)$$

где $\{p_i = 1/r\}$ – «теоретические» вероятности попадания равномерно распределенных векторов (9.17) в соответствующие кубы разбиения. Согласно *теореме Пирсона* (см., например, [15]), справедливо соотношение

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

где

$$f_{\chi_{r-1}^2}(u) = \frac{u^{(r-1)/2-1} e^{-u/2}}{2^{(r-1)/2} \Gamma[(r-1)/2]}$$

является плотностью *хи-квадрат распределения с $(r-1)$ степенями свободы*, а $\Gamma(v) = \int_0^{+\infty} w^{v-1} e^{-w} dw$ – *гамма-функция*.

Задается *доверительная вероятность* (или *коэффициент доверия*) ε (чаще всего берут $\varepsilon = 0,95; 0,99; 0,999$) и из уравнения

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

находят (обычно с помощью соответствующих таблиц) величину $\chi^2(r-1, 1-\varepsilon)$, которую называют *доверительной границей с уровнем значимости $(1-\varepsilon)$* .

Доверительная граница сравнивается со значением $\tilde{\chi}_{r-1}^2(n)$ из равенства (9.18), и если $\tilde{\chi}_{r-1}^2(n) < \chi^2(r-1, 1-\varepsilon)$, то исследуемая выборка (9.17) считается удовлетворительной, а если $\tilde{\chi}_{r-1}^2(n) \geq \chi^2(r-1, 1-\varepsilon)$ – неудовлетворительной. Для критерия χ^2 рекомендуется выбирать n и r таким образом, чтобы выполнялось неравенство $n/r \geq 10$.

Для проверки свойства d -равномерности применяется также ряд других тестов. Прежде всего упомянем *тест « d -нормальности»*, основанный на переходе от векторов (9.17) к соответствующим d -мерным векторам независимых стандартных нормальных случайных величин. Весьма широкое применение имеют *спектральные тесты*, основанные на *критерии Вейля* (*волновой тест* и др.; см., например, [9]).

Учитывая утверждение 9.2, при проверке генераторов можно исследовать случайность цифр стандартных чисел α . Здесь проверяют частоту появления различных цифр в числах, реализуемых генератором (*тест «проверка частот»*); частоту различных двузначных чисел среди пар цифр, реализуемых подряд генератором (*тест «проверка пар»*); частоту различных интервалов между двумя последовательными нулями (*тест «проверка интервалов»*); частоту различных четырехзначных чисел среди четверок цифр, реализуемых подряд (*тест «проверка комбинаций»*); частоту появления q одинаковых цифр подряд (*тест «серий»* длины q) и др. В упомянутых тестах также активно используется критерий хи-квадрат.

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

Сформулируем ряд замечаний относительно использования генераторов стандартных случайных чисел в параллельных вычислениях по методу Монте-Карло (см. также [9, 31]).

Напомним (см. подраздел 1.11 данного пособия), что использование K одинаковых независимых процессоров путем распределения между ними независимых испытаний уменьшает трудоемкость статистического моделирования по сути в K раз (возможно эффективное использование и не одинаковых процессоров – см. формулу (1.23)).

Если число процессоров K (а значит, и число испытаний $n = n_1 + \dots + n_K$) велико, то необходимый объем выборки стандартных случайных чисел тоже велик, поэтому *целесообразно использование длиннопериодных псевдослучайных последовательностей*, для которых существует простой способ их разбиения на K частей необходимой длины. Метод вычетов (9.13) дает элементарный способ такого разбиения.

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

$$\alpha_0^{(k,\mu)} = u_{k,\mu}/2^m; \quad u_{k,\mu} = u_{k-1,\mu}Q^\mu \pmod{2^m}. \quad (9.19)$$

Такой способ распределения случайных чисел по процессорам называют *bf-генератором* (сокращение от «*big-frog*»-генератор; см. [9, 31]).

В отделе статистического моделирования в физике Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН реализован *bf*-генератор с $\mu = 10^{26}$ (в качестве исходного используется датчик (9.13) с параметрами $m = 128$ и $p = 50054$) [31]. Такой генератор позволяет распределять исходную последовательность примерно на 10^{12} процессоров, и соответствующих количеств псевдослучайных чисел для каждого процессора с избытком хватает для вычислительных потребностей. Подробное описание генератора, программы вычисления начальных значений (9.19), множителей $Q_\mu = Q^\mu \pmod{2^m}$, а также результаты тестирования датчика приведены в книге [31].

Отметим, что в случае, когда μ невелико и равно количеству псевдослучайных чисел, требующихся для построения одной траектории, использование чисел (9.19) в качестве начальных для каждой траектории определяет *lf-генератор* (сокращение от «*little-frog*»-генератор; см. [9, 31]). В отличие от обычного способа распределения случайных чисел «порядком» (т. е. в порядке обращения к генератору (9.13)) *lf*-генератор обеспечивает малое изменение результатов моделирования при малом изменении параметров задачи. В связи с этим *lf*-генератор более корректно проверяется решением типовых задач по сравнению с обычным генератором (9.13).

9.7. Использование квазислучайных чисел. Введем ряд определений и сформулируем ряд утверждений из работ [5, 32].

Рассмотрим d -мерный единичный куб $\Delta^{(d)}$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 9.2. *Последовательность точек $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$ называется **равномерно распределенной** в $\Delta^{(d)}$, если соотношение*

$$\int_{\Delta^{(d)}} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(\mathbf{x}_i)$$

выполнено для любой функции g , интегрируемой в $\Delta^{(d)}$ по Риману.

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.8. Для того чтобы последовательность точек $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$ была равномерно распределенной в $\Delta^{(d)}$, необходимо и достаточно, чтобы для любой подобласти $A \subseteq \Delta^{(d)}$ выполнялось равенство $\lim_{n \rightarrow \infty} [S_n(A)/n] = \bar{A}$; здесь \bar{A} – объем области A , а $S_n(A)$ – количество точек с номерами $1 \leq i \leq n$, принадлежащих A .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 9.3. **Отклонением** группы точек $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ называется величина $D_n = \sup_{\mathbf{x} \in \Delta^{(d)}} [S_n(P_{\mathbf{x}}) - nP_{\mathbf{x}}]$, где $P_{\mathbf{x}}$ – параллелепипед с диагональю $O\mathbf{x}$ (здесь O – начало координат), объемом $P_{\mathbf{x}}$ и с ребрами, параллельными координатным осям.

УТВЕРЖДЕНИЕ 9.9. Для того чтобы последовательность точек $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots$ была равномерно распределенной в $\Delta^{(d)}$, необходимо и достаточно, чтобы выполнялось равенство $\lim_{n \rightarrow \infty} (D_n/n) = 0$.

Чем быстрее убывает соотношение D_n/n , тем более равномерно распределена последовательность. Известно, что $1/2 \leq D_n \leq n$ [32], но неясно, каков наилучший порядок роста D_n при $n \rightarrow \infty$.

Достаточно подробно исследованы определяемые ниже последовательности Холтона и Соболя, для которых выполнено равенство $D_n = O(\ln^d n)$ (эти последовательности являются наиболее популярными примерами так называемых **квазислучайных чисел**).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 9.4. Пусть r_1, \dots, r_d – попарно взаимно простые числа (на практике обычно берут первые d простых чисел: $r_1 = 1$, $r_2 = 3$, $r_3 = 5, \dots$). **Последовательностью Холтона** называется множество точек в $\Delta^{(d)}$ с координатами

$$\mathbf{y}_i = (p_{r_1}(i), \dots, p_{r_d}(i)).$$

Здесь $p_r(i) = 0, a_1 a_2 \dots a_{m-1} a_m$ (это запись в r -ичной системе счисления) при $i = a_m a_{m-1} \dots a_2 a_1$ (это также запись в r -ичной системе счисления).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 9.5. Пусть в двоичной системе счисления $i = e_m e_{m-1} \dots e_2 e_1$. Для всех $j = 1, \dots, d$ определим

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

Здесь знаком $*$ обозначена операция поразрядного сложения по модулю два в двоичной системе. Числа $V_j^{(s)}$ берутся из специальных таблиц (подробности см. в [5, глава 7]). **ЛП $_{\tau}$ -последовательность И. М. Соболя** образуют точки

$$\mathbf{z}_i = (q_{i,1}, \dots, q_{i,d}).$$

В книге [5] отмечена возможность совместного использования квазислучайных и псевдослучайных чисел для повышения эффективности алгоритмов метода Монте-Карло, применяемых для решения задач высокой размерности. Замечено также, что можно ожидать большего эффекта от применения квазислучайных чисел тогда, когда используются экономичные (имеющие относительно небольшую величину трудоемкости) алгоритмы метода Монте-Карло.

Имеется достаточно много публикаций, в которых приводятся результаты тестовых вычислений интегралов с использованием квазислучайных чисел в алгоритме 1.2 для $X = \Delta^{(d)}$. В случаях, когда размерность интегралов (1.8) была относительно невелика ($d \leq 10$) и подынтегральные функции $g(\mathbf{x})$ были гладкими, получались значительные выигрыши по скорости сходимости к точному значению интеграла по сравнению с алгоритмом 1.2, в котором использовались псевдослучайные числа.

Как уже отмечалось в разделах 1, 4, 5 данного пособия, именно для таких же размерностей d и функций $g(\mathbf{x})$ оказываются эффективными *дискретно-стохастические методы*, описанные в книге [17]. При росте размерности задачи (вплоть до бесконечности – как в соотношениях (7.14), (7.15)) и «сложности» исходных данных (подынтегральной функции, области интегрирования) эффективность использования дискретно-стохастических модификаций и квазислучайных чисел заметно падает; в этих случаях используются «обычные» методы Монте-Карло с псевдослучайными числами.

9.8. Два важных замечания. В заключение этого раздела формулируем два важных замечания.

ЗАМЕЧАНИЕ 9.1. Как правило, генераторы псевдослучайных чисел, представленные в современных версиях языков программирования (*FORTRAN*, *СИ++* и др.), достаточно хорошо протестированы и дают статистически удовлетворительные результаты вычислений по методу Монте-Карло (во всяком случае, для задач, в которых используется умеренно большое количество выборочных значений случайных величин). Поэтому, несмотря на сформулированные выше замечания о возможных недостатках датчиков (конечность используемой мантииссы, периодичность и т. п.), в дальнейшем будем полагать, что используемый в расчетах генератор стандартных случайных чисел дает «настоящие» (теоретические) выборочные значения α_i случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 9.2. Мультипликативный метод вычетов (9.13), даже реализованный оптимально для используемого языка программирования,

является относительно трудоемким (по сравнению, например, с простым умножением чисел). Поэтому при оптимизации алгоритмов метода Монте-Карло целесообразно по-возможности уменьшать число обращений к подпрограмме типа *RANDOM*.

10. Моделирование дискретных случайных величин

10.1. Основные классы алгоритмов моделирования случайных величин и векторов. Способы представления распределения дискретной случайной величины. Как указано в подразделе 2.4 и в разделе 9 данного пособия, наличие экономичного генератора стандартных чисел позволяет получать на ЭВМ выборочные значения случайных величин и векторов с произвольными законами распределения.

ЗАМЕЧАНИЕ 10.1. Среди алгоритмов моделирования выборочных значений случайных величин и векторов будем выделять:

– *стандартные методы и их модификации*; для непрерывных случайных величин это метод обратной функции распределения (алгоритм 2.4) и поэтапный алгоритм моделирования случайного вектора (алгоритм 2.3); для дискретных случайных величин это представленные далее алгоритмы 10.1 и 10.4 и квантильный метод (алгоритм 10.6);

– *альтернативные алгоритмы широкого применения*; для непрерывных случайных величин это методы интегральной и дискретной суперпозиции (алгоритмы 3.1 и 11.1), мажорантный метод исключения (алгоритм 11.10), а также алгоритмы, основанные на переходе к новым системам координат (см. подразделы 6.4 и 13.1); для дискретных случайных величин это метод Уолкера (алгоритм 10.6);

– *специальные методы, основанные на свойствах конкретных распределений*; для непрерывных случайных величин (как примеры) это методы моделирования гамма- бета- и гауссовского распределений (см. разделы 12, 13); для дискретных случайных величин это алгоритмы 10.5 и 10.8.

Напомним, что непрерывные случайные величины принимают континуум значений из множеств типа интервал, прямоугольный параллелепипед, шар и т. п.

В этом разделе мы рассмотрим более «простые» (с точки зрения теории вероятностей, см., например, [14]) *дискретные случайные величины*, имеющие конечные или счетные множества значений. Необ-

ходимость численного моделирования выборочных значений таких случайных величин возникает, в частности, при *моделировании случайных событий* (см., например, алгоритм 2.7) и при реализации упомянутого здесь *метода дискретной суперпозиции* (см., в частности, алгоритмы 4.2 и 11.1).

Итак, рассмотрим дискретную случайную величину ξ , принимающую значения x_1, \dots, x_M и имеющую распределение

$$\mathbf{P}\{\xi = x_i\} = p_i; \quad p_i > 0, \quad \sum_{i=1}^M p_i = 1; \quad M \leq \infty. \quad (10.1)$$

В книгах [5, 9, 23] отмечено, что вместо «табличного» представления (10.1) распределения дискретной случайной величины ξ можно рассматривать *дельта-плотность* вида

$$f_\xi(u) = \sum_{i=1}^M p_i \delta(u - x_i), \quad (10.2)$$

где $\delta(u)$ – *дельта-функция Дирака*: $\int y(u)\delta(u - x_i) du = y(x_i)$ для любой непрерывной в точке x_i функции $y(u)$.

Более того, в этих же книгах отмечено, что представленный в следующем подпункте алгоритм моделирования дискретной случайной величины можно трактовать как специальный случай *метода обратной функции распределения* (см. алгоритм 2.4), если вместо функции $F_\xi^{-1}(x)$ рассматривать функцию $G(x) = \inf_{y: x < F_\xi(y)} y$ (ведь функция распределения случайной величины ξ с распределением (10.1) – кусочно-постоянна).

Однако такая трактовка годится только для частного случая

$$x_1 < x_2 < \dots < x_M, \quad (10.3)$$

а это условие не всегда обеспечивает экономичность алгоритма моделирования (см. далее утверждение 10.1).

Таким образом, для изучения вопросов моделирования дискретной случайной величины ξ удобнее использовать «табличное» представление распределения (10.1). Дельта-плотность (10.2) пригодится нам в разделе 11 для представления *метода дискретной суперпозиции*.

10.2. Стандартный алгоритм моделирования дискретной случайной величины для случая $M < \infty$ и его трудоемкость.

Рассмотрим сначала случай, когда число значений M случайной величины ξ с распределением (10.1) является конечным и «умеренно малым»; это означает, что числа $\{x_1, \dots, x_M\}$ и $\{p_1, \dots, p_M\}$ заданы явно. Случай $M \gg 1$ (вплоть до $M = \infty$) рассмотрен далее в подразделе 10.4.

В силу соотношений (10.1), численное моделирование того или иного выборочного значения $\xi_0 = x_m$ случайной величины ξ означает розыгрыш события с вероятностью p_m . Кроме того, из соотношений (10.1) следует, что интервал $(0, 1)$ можно разбить на полуинтервалы Δ_m длины p_m :

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

для $m = 1$ полагаем $R_{m-1} = R_0 = 0$.

Используя соответствующий генератор, численно моделируем выборочное значение $\alpha_0 \in U(0, 1)$ стандартного случайного числа. В силу соотношения (9.6) (или (2.14)) для $\alpha \in U(0, 1)$ имеем $\mathbf{P}\{\alpha \in \Delta_m\} = p_m$.

Таким образом, если $\alpha_0 \in \Delta_m$, то для данного испытания следует положить, что выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ равно $\xi_0 = x_m$.

Технически определение того номера m полуинтервала Δ_m , в который попало выборочное значение α_0 , осуществляется последовательным вычитанием из α_0 сумм R_m для $m = 1, 2, \dots$ до тех пор, пока разность $\alpha_0 - R_m$ не станет отрицательной (рис. 10.1).

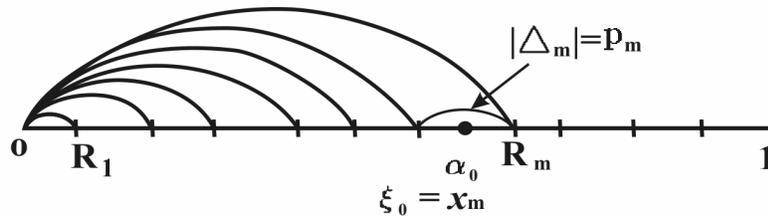


Рис. 10.1. Стандартный алгоритм моделирования дискретной случайной величины

Описанную операцию можно осуществлять без непосредственного вычисления сумм R_m , используя операцию переприсваивания.

АЛГОРИТМ 10.1 (см., например, [9, 13]). Моделируем выборочное значение $Q := \alpha_0 \in U(0, 1)$ (т. е. $Q := \text{RANDOM}$) и полагаем $t := 1$. Производим переприсваивание

$$Q := Q - p_m \quad (10.4)$$

(т. е. заносим новое значение $(\alpha_0 - p_1)$ в ячейку Q). Если новое Q не положительно, то в качестве t выбираем текущее его значение и полагаем $\xi_0 = x_m$, в противном случае делаем переприсваивания $t := t + 1$ и (10.4), производим проверку Q на положительность и т. д.

Важным примером дискретных случайных величин являются целочисленные случайные величины η , для которых

$$x_i = i, \quad \mathbf{P}\{\eta = i\} = p_i; \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (10.5)$$

Алгоритм 10.1 в этом случае имеет следующий вид.

АЛГОРИТМ 10.2 (см., например, [9, 13]). Моделируем значение $Q := \alpha_0 \in U(0, 1)$ и полагаем $t := 1$. Производим переприсваивание (10.4). Если новое значение Q не положительно, то полагаем $\eta_0 = t$, в противном случае делаем переприсваивания $t := t + 1$ и (10.4), производим проверку Q на положительность и т. д.

В качестве целочисленных можно также рассматривать случайные величины, принимающие всевозможные (не только натуральные, а еще 0 и отрицательные) значения из множества целых чисел \mathbb{Z} ; см., в частности, примеры и рассуждения подраздела 10.3. Однако чаще всего значения целочисленной случайной величины имеют смысл натурального числа (например, числа ветвлений траекторий – см. подразделы 3.4 и 10.3) или номера (как, например, в методе дискретной суперпозиции), т. е. используется распределение (10.5) и соответствующий алгоритм 10.2.

Оценим трудоемкость (затраты) стандартного алгоритма 10.1. Прежде всего сформулируем следующее замечание.

ЗАМЕЧАНИЕ 10.1. В подразделе 1.9 указано, что в формулах $s = t \times n$ и $S = t \times \mathbf{D}\zeta$ (см. также соотношения (1.16), (1.18)) для затрат и трудоемкости метода Монте-Карло (1.1) величина t является средним временем вычисления одного выборочного значения ζ_j . Слово *среднее* здесь принципиально, так как затраты на моделирование конкретных выборочных значений ζ_j чаще всего являются случайными.

Это проявляется уже на простейшем примере случайной величины ξ с дискретным распределением (10.1) (если ставится задача вычисления математического ожидания $\mathbf{E}\xi = \sum_{i=1}^M x_i p_i$ методом Монте-Карло, например, с целью тестирования генераторов стандартных случайных чисел).

Легко видеть, что в случае, когда $\xi_0 = x_m$, приходится осуществлять m проверок Q на положительность. Трудоемкость δ алгоритма 10.1 включает затраты на моделирование одного стандартного случайного числа $\alpha_0 \in U(0, 1)$ (эти затраты обозначим a) и на реализацию сравнений Q с нулем (затраты на каждое сравнение обозначим b).

Тогда средняя трудоемкость t алгоритма 10.1 равна

$$t = \mathbf{E}\delta = a + \left(\sum_{m=1}^M m p_m \right) \times b. \quad (10.6)$$

Заметим, что для целочисленной случайной величины η с распределением (10.5) величина t из (10.6) представима в виде

$$t_1 = a + b \mathbf{E}\eta. \quad (10.7)$$

При реализации алгоритмов 10.1 и 10.2 целесообразно (если это возможно) располагать вероятности p_i в порядке их убывания.

УТВЕРЖДЕНИЕ 10.1 [9, 23]. *Оптимальным порядком нумерации значений $\{x_1, \dots, x_M\}$ и вероятностей $\{p_1, \dots, p_M\}$ из (10.1), при котором средние затраты t из (10.6) минимальны, является такой, при котором*

$$p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_M. \quad (10.8)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассуждаем от противного. Пусть для некоторого распределения вероятностей $\{p'_1, \dots, p'_M\}$ соотношение (10.8) не выполнено, а величина $t' = a + \left(\sum_{m=1}^M m p'_m \right) \times b$ минимальна. Тогда найдутся такие номера s и k , для которых одновременно выполнено

$$s < k \quad \text{и} \quad p'_s < p'_k. \quad (10.9)$$

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

Рассмотрим разность

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

Из соотношения (10.9) следует, что $t' - t'' > 0$ и $t'' < t'$. Получили противоречие с тем, что величина t' минимальна. Утверждение 10.1 доказано.

Таким образом, использование аналога метода обратной функции распределения для случая (10.3) (см. подраздел 10.1) может дать не оптимальный вариант алгоритма 10.1, так как в этом случае могут быть не выполнены неравенства (10.8).

10.3. Случай малого числа значений. Теорема о минимальной дисперсии целочисленной случайной величины. Отметим, что в алгоритмах 10.1, 10.2 возможна следующая модификация.

Если $\alpha_0 - R_{M-1} > 0$, то последнее вычитание можно не производить, так как в этом случае $\alpha_0 \in \Delta_M$. Соответствующий аналог формулы (10.6) имеет вид

$$t = a + \left(\sum_{m=1}^{M-1} m p_m + (M-1) p_M \right) \times b.$$

Однако выигрыш от этой модификации сказывается только для малых M , так как при ее применении в алгоритмах 10.1, 10.2 требуется проводить сравнение текущего m с $(M-1)$.

Рассмотрим, в частности, случай $M = 2$. Здесь модифицированный алгоритм 10.1 приобретает следующий простой вид.

АЛГОРИТМ 10.3 (см., например, [9, 13]). *Моделируем значение $\alpha_0 \in U(0, 1)$. Если $\alpha_0 < p_1$, то $\xi_0 = x_1$, иначе $\xi_0 = x_2$.*

Справедлива также **формула С. А. Роженко** [23]:

$$\xi_0 = x_{[2-p_1+\alpha_0]}, \quad (10.10)$$

где $[A]$ обозначает целую часть числа A . Действительно, при $\alpha_0 < p_1$ число $2 - p_1 + \alpha_0$ принадлежит полуинтервалу $[1, 2)$ и $[2 - p_1 + \alpha_0] = 1$; иначе $2 - p_1 + \alpha_0 \in [2, 3)$ и $[2 - p_1 + \alpha_0] = 2$.

В случае, когда $x_1 = 1$ и $x_2 = 0$ величина ξ является **бернуллиевской случайной величиной** с вероятностью «успеха» p_1 (см., например, [14]).

Здесь уместно напомнить, что бернуллиевская случайная величина вводится для математической формализации изучения случайных событий. Если придать x_1 и x_2 «словесные» значения типа $x_1 = \{\text{событие } A \text{ случилось}\}$ и $x_2 = \{\text{событие } A \text{ не случилось}\}$, то

алгоритм 10.3 определяет *численное моделирование события A*. Частным случаем такого метода является алгоритм 2.7, где $A = \{\text{произошел обрыв траектории}\}$ и $p_1 = p^{(a)}(\xi_0^{(j-1)})$.

Наконец, важный случай появления дискретных случайных величин с двумя целыми значениями (типа бернуллиевских) возникает в следующей задаче оптимизации алгоритмов, связанных с расщеплением (ветвлением траекторий) – см. подраздел 3.4, статью [23] и книгу [33].

Рассмотрим множество $\Xi(r)$ дискретных случайных величин $\tilde{\kappa}$, принимающих значения из множества целых чисел \mathbb{Z} , с фиксированным математическим ожиданием $r = \mathbf{E}\tilde{\kappa}$ (это число предполагается нецелым: $r \notin \mathbb{Z}$) и конечной дисперсией (здесь используются обозначения из подраздела 3.4). Требуется найти величину κ , имеющую минимальную дисперсию среди всех $\tilde{\kappa} \in \Xi(r)$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 10.2 [23, 33]. *Случайная величина κ принимает два значения $K^{(0)} = [r]$ (это целая часть числа r) и $K^{(0)} + 1$ и имеет распределение:*

$$\mathbf{P}\{\kappa = K^{(0)} + 1\} = p_1 = r - K^{(0)}, \quad \mathbf{P}\{\kappa = K^{(0)}\} = p_2 = K^{(0)} + 1 - r. \quad (10.11)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Учитывая свойство дисперсии $\mathbf{D}\xi = \mathbf{D}(\xi + c)$; $c = \text{const}$ (см., например, [14]), для произвольной величины $\tilde{\kappa} \in \Xi(r)$ имеем

$$\mathbf{D}\tilde{\kappa} = \mathbf{D}\left(\tilde{\kappa} - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right) = \mathbf{E}\left(\tilde{\kappa} - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2 - \left(r - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2. \quad (10.12)$$

Вычитаемое в правой части (10.12) равно константе. Для $\tilde{\kappa} = \kappa$ уменьшаемое в правой части (10.12) равно

$$\mathbf{E}\left(\tilde{\kappa} - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2 = \left(K^{(0)} - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2 p_1 + \left((K^{(0)} + 1) - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2 p_2 = \frac{1}{4}.$$

Для любого другого $\tilde{\kappa} \in \Xi(r)$ с распределением $\mathbf{P}\{\tilde{\kappa} = z\} = p^{(z)}$; $z \in \mathbb{Z}$ имеем

$$\mathbf{E}\left(\tilde{\kappa} - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2 = \sum_z \left(z - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2 p^{(z)} > \left(\frac{1}{2}\right)^2 \sum_z p^{(z)} = \frac{1}{4},$$

так как $\sum_z p^{(z)} = 1$, а для $z \neq K^{(0)}, K^{(0)} + 1$ выполнено $\left(z - K^{(0)} - \frac{1}{2}\right)^2 > \left(\frac{1}{2}\right)^2$.

Таким образом, для всех $\tilde{\kappa} \in \Xi(r)$ таких, что $\tilde{\kappa} \neq \kappa$, имеем $\mathbf{D}\tilde{\kappa} > \mathbf{D}\kappa$. Утверждение 10.2 доказано.

Для моделирования выборочного значения κ_0 случайной величины κ с распределением (10.11) можно использовать алгоритм 10.3 или вариант формулы С. А. Роженко (10.10), имеющей следующий «компактный» вид: $\kappa_0 = [r + \alpha_0]$, где $\alpha_0 \in U(0, 1)$ – стандартное случайное число (к слову, формула (10.10) была «сочинена» именно в этом виде).

10.4. Случай большого числа значений. В случае $M \gg 1$ (вплоть до $M = \infty$) для задания распределения (10.1) вместо конкретных значений $\{x_i\}$ и вероятностей $\{p_i\}$ используются формулы их вычисления

$$x_i = \varphi(i); \quad p_i = \psi(i). \quad (10.13)$$

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

$$p_{i+1} = z(p_i), \quad \text{а конкретнее} \quad p_{i+1} = p_i \times r(i+1). \quad (10.14)$$

При реализации алгоритма 10.1 в случае бесконечного числа значений перед вычитанием соответствующей вероятности требуется вычислить ее по одной из формул (10.13) или (10.14).

АЛГОРИТМ 10.4 (см., например, [9, 13]). *Моделируем стандартное случайное число $Q := \alpha_0 \in U(0, 1)$ и полагаем $t := 1$ и $P := p_1$ (или $P := \psi(1)$). Производим переприсваивание*

$$Q := Q - P. \quad (10.15)$$

Если новое Q не положительно, то в качестве выборочного значения ξ_0 дискретной случайной величины ξ берем $\xi_0 = \varphi(t)$ для текущего t ; в противном случае полагаем $t := t+1$, производим пересчет вероятности $P := \psi(t)$ (или $P := z(P)$, или $P := P r(t)$) и переприсваивание (10.15) и вновь проверяем Q на положительность и т. д.

Средние затраты алгоритма 10.4 равны

$$t = a + \left(\sum_{i=m}^M m p_m \right) (b + c), \quad (10.16)$$

где c – средние затраты на пересчет вероятности.

В случае, когда пересчет вероятностей происходит по рекуррентным формулам (10.14) и вероятность p_1 задана, число t из равенства (10.16)

уменьшается на величину c . Для целочисленных случайных величин ξ с распределением (10.5) при $i = 1, 2, \dots$ формула (10.16) имеет вид

$$t_1 = a + (b + c)\mathbf{E}\eta. \quad (10.17)$$

Существует ряд способов понизить трудоемкость (10.16), к числу которых относится, в частности, расположение (если это возможно) вероятностей p_i в порядке убывания (см. утверждение 10.1).

В случае, когда пересчет вероятностей по одной из формул (10.13) или (10.14) является трудоемким (т.е. величина c велика), можно выбрать число M_0 так, чтобы сумма вероятностей $R_{M_0} = p_1 + p_2 + \dots + p_{M_0}$ была близка к единице и имелась возможность сохранить в оперативной памяти ЭВМ массив значений p_0, p_1, \dots, p_{M_0} . Тогда при $\alpha_0 < R_{M_0}$ реализуется алгоритм 10.1 (без пересчета вероятностей), а формулы (10.13) или (10.14) будут использоваться только при $\alpha_0 \geq R_{M_0}$, т.е. достаточно редко.

Существенно снижают затраты (10.6), (10.16) алгоритмов 10.1 и 10.4 для $M \gg 1$ рассмотренные далее в подразделах 10.6 и 10.7 *квантильный метод* и *метод Уолкера* (алгоритмы 10.6 и 10.8). В этих алгоритмах существенно используется *специальный алгоритм* моделирования *равномерного дискретного распределения* (алгоритм 10.5).

10.5. Специальный алгоритм моделирования равномерного дискретного распределения. Реализация выборочного значения ξ_0 дискретной случайной величины ξ с конечным числом значений заметно упрощается, когда все значения x_1, \dots, x_M равновероятны, т.е. в соотношениях (10.1) все p_i равны $1/M$ (такое распределение вероятностей называется *дискретным равномерным*). Здесь целесообразно применить следующий *специальный алгоритм* (см. замечание 10.1).

АЛГОРИТМ 10.5 (см., например, [9, 13]). *Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$ и полагаем*

$$\mu_0 = [\alpha_0 M] + 1 = [\alpha_0 M + 1] \quad (10.18)$$

(здесь $[A]$ обозначает целую часть числа A) и $\xi_0 = x_{\mu_0}$.

Для обоснования корректности моделирования номера μ_0 по формуле (10.18) мы должны показать, что $\mu = [\alpha M + 1]$ является целочисленной равномерно распределенной случайной величиной, т.е. для каждого $k = 1, 2, \dots, M$ выполнено равенство $\mathbf{P}\{\mu = k\} = 1/M$.

Используя определение целой части числа и соотношение (9.6), получаем

$$\mathbf{P}\{\mu = k\} = \mathbf{P}\{[\alpha M + 1] = k\} = \mathbf{P}\{k - 1 \leq \alpha M < k\} =$$

$$= \mathbf{P} \left\{ \frac{k-1}{M} \leq \alpha < \frac{k}{M} \right\} = \frac{k}{M} - \frac{k-1}{M} = \frac{1}{M},$$

что и требовалось доказать.

Для достаточно большого числа значений M преимущество алгоритма 10.5 по сравнению с алгоритмом 10.1 (где требуется порядка $M/2$ вычитаний вида (10.4)) вполне очевидно. Но наши исследования показали, что алгоритм 10.5 имеет преимущество и для малых M , в частности, он эффективней (экономичней) алгоритма 10.3 (здесь $M = 2$ и $p_1 = p_2 = 1/2$).

10.6. Квантильный алгоритм. Бинарный поиск. Алгоритм 10.5 позволяет также построить следующую эффективную *модификацию стандартного алгоритма* 10.1, которая называется **квантильным алгоритмом** и используется, как правило, для $M \gg 1$ (вплоть до $M = \infty$).

Зададим целое число K и разобьем интервал $(0, 1)$ на K равных частей $[(j-1)/K, j/K)$, $j = 1, \dots, K$.

Далее построим массив целых чисел $\{X_j\}_{j=1}^K$ такой, что

$$X_j = \min \left\{ k : R_k = p_1 + p_2 + \dots + p_k \geq \frac{j-1}{K} \right\}, \quad (10.19)$$

который называется *массивом нижних квантилей* (рис. 10.2).

Этот массив задает номер k элемента массива $\{R_i; i = 1, 2, \dots, M\}$, с которого следует начинать поиск «вверх» (т.е., как и в алгоритмах 10.1 и 10.4, вычитать величины R_q , $q = k, k+1, \dots$ из $\alpha_0 \in U(0, 1)$ до получения первого отрицательного значения) при $(j-1)/K \leq \alpha_0 < j/K$.

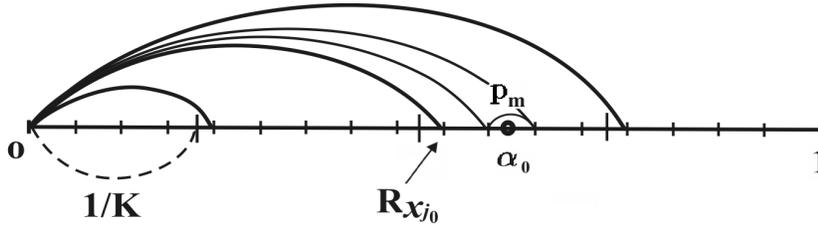


Рис. 10.2. Схема квантильного алгоритма

Окончательно моделирование дискретной случайной величины выглядит следующим образом.

АЛГОРИТМ 10.6 (см., например, [9, 13]). 1. Моделируем выборочное значение α_0 равномерно распределенной в интервале $(0, 1)$ случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$.

2. Вычисляем номер j_0 полуинтервала $[(j-1)/K, j/K)$, в который попадает α_0 по формуле типа (10.18): $j_0 = [K\alpha_0 + 1]$.

3. Реализуем последовательный поиск «снизу вверх» начиная с $R_{X_{j_0}}$.

Многочисленные тестовые вычисления показали, что при $M \lesssim N_0/2$ (здесь N_0 – максимальный суммарный объем массивов для компьютера и языка программирования, используемых в вычислениях) число K квантилей $[(j-1)/K, j/K)$ следует выбирать так, что $M/K \approx z$, где $2 \leq z \leq 3$. В этом случае затраты алгоритма 10.6 практически не растут с ростом M (а у стандартного алгоритма 10.1 затраты возрастают линейно при увеличении M). Эффект достигается за счет использования дополнительной оперативной компьютерной памяти для формирования массива нижних квантилей (10.19).

Последнее обстоятельство особо подчеркивает преимущество алгоритма 10.6 перед другой «популярной» модификацией стандартного алгоритма 10.1, которая носит название **метод деления отрезка пополам** (или **бинарный поиск**).

АЛГОРИТМ 10.7 (см., например, [9]). 1. Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$ и полагаем $s_1 := 1$, $s_2 := M + 1$.

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

3. Если $R_k = p_1 + \dots + p_k < \alpha_0$, то полагаем $s_1 := k$, иначе присваиваем $s_2 := k$.

4. Если $s_2 - s_1 > 1$, то идем на пункт 2, иначе полагаем $t = s_1$ и $\xi_0 = x_t$.

Можно показать, что при $2^r < M \leq 2^{r+1}$ для получения выборочного значения x_m требуется $(r+1)$ сравнений. Таким образом, затраты \hat{t} алгоритма 10.7 имеют порядок $\log_2 M$ (это медленнее, чем линейный рост затрат алгоритма 10.1, но все же *рост трудоемкости имеет место*).

Некоторое преимущество алгоритма 10.7 перед квантильным методом (алгоритм 10.6) и методом Уолкера (алгоритм 10.8) состоит в том, что он *не требует использования дополнительной оперативной компьютерной памяти*.

Особо подчеркнем, что квантильный метод (алгоритм 10.6) работает и в случае бесконечного числа значений случайной величины ξ (т. е. для $M = \infty$); здесь применяется пересчет вероятностей по формулам вида (10.13) или (10.14) и выбирается $K \approx N_0/2$.

Отметим также, что можно построить эффективную реализацию алгоритма 10.6 в случае, когда число M относительно мало и

$$N_0 > s = \frac{1}{\min_{i=1, \dots, M} p_i}.$$

Тогда можно взять число квантилей как целую часть $K = [s]$; при этом в каждом квантиле $[(j-1)/K, j/K)$ будет не более одного значения R_k и в пункте алгоритма 10.6 потребуется не более одного вычитания вида (10.4).

10.7. Метод перераспределения вероятностей (алгоритм Уолкера). С помощью алгоритма 10.5 можно сконструировать отличный от стандартного *альтернативный алгоритм широкого применения – метод Уолкера* [34], который применяется для конечных, но больших M , таких, что $M \lesssim N_0/2$, и требует проведения подготовительной работы (иногда весьма затратной).

Идею алгоритма проще всего объяснить графически. Изобразим распределение (10.1) в виде диаграммы, состоящей из столбцов единичной ширины и высоты $\tilde{p}_i = p_i$ (рис. 10.3).

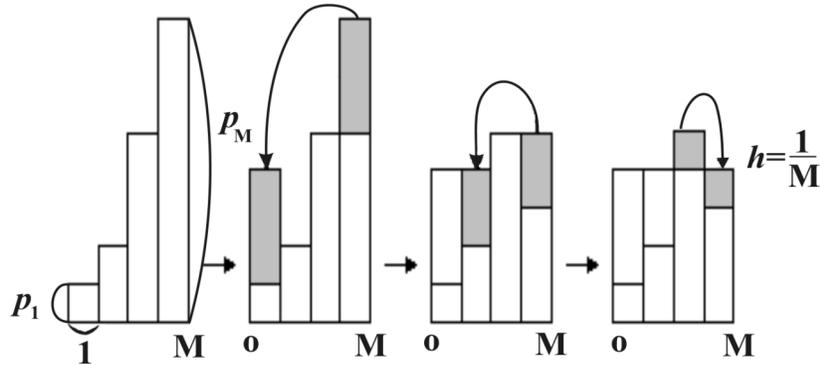


Рис. 10.3. Схема алгоритма Уолкера

Проведем на высоте $h = 1/M$ линию, параллельную основанию диаграммы. Часть столбцов диаграммы имеет высоту, большую h , а часть – меньшую h .

Далее проводим перераспределения частей столбцов диаграммы для тех столбцов, для высот которых выполнены неравенства

$$\tilde{p}_i > h = \frac{1}{M} \quad \text{или} \quad \tilde{p}_i < h = \frac{1}{M}; \quad (10.20)$$

столбцы с высотой $\tilde{p}_i = h$ остаются неизменными. Перераспределение происходит таким образом, чтобы все столбцы имели высоту h и в каждом из них были не более чем две доли исходных столбцов (рис. 10.3).

Процедура включает порядка M шагов. Если на данном шаге имеются столбцы, высоты которых удовлетворяют соотношениям (10.20), то выбирается столбец (например, s -й), для которого $\tilde{p}_s < h$ (такой столбец должен найтись, иначе $\sum_{i=1}^M \tilde{p}_i > 1$). Если же столбцов, удовлетворяющих неравенствам (10.20), нет, то процедура перераспределения заканчивается.

Кроме s -го столбца, для которого $\tilde{p}_s < h$, выбираем еще один столбец (например, l -й), высота которого $\tilde{p}_l > h$ (такой столбец тоже должен найтись, иначе $\sum_{i=1}^M \tilde{p}_i < 1$).

В силу того, что $\tilde{p}_l + \tilde{p}_s > \tilde{p}_l > h$, мы можем дополнить s -й столбец до высоты h частью l -го столбца (и делаем это). При этом \tilde{p}_l – высота l -го столбца – может остаться больше, чем h , или стать меньше, чем h (т.е. для него останется выполненным одно из соотношений (10.20), и он участвует в дальнейших шагах процедуры перераспределения), или равно h (в этом случае столбец не участвует в процедуре перераспределения).

В результате на описываемом шаге формируется ячейка $E_s = (F_s, l_s)$, включающая число $F_s = M\tilde{p}_s$ и номер l_s того столбца, из которого произошло дополнение s -го столбца до высоты h .

После описанного шага s -й столбец выбывает из процедуры перераспределения вероятностей, так как для него уже не выполнены строгие неравенства (10.20).

После не более чем M шагов все ячейки E_i , $i = 1, \dots, M$, будут сформированы (для столбцов, имевших исходную высоту h , вторые компоненты этих ячеек пусты), и подготовительная работа заканчивается (рис. 10.3). Суммарный объем требуемой оперативной памяти равен $2M$ (отсюда и ограничение $M \lesssim N_0/2$).

АЛГОРИТМ 10.8 (см., например, [9, 24]). 1. Моделируя первое стандартное случайное число $\alpha_1 \in U(0, 1)$ и используя формулу $t = [\alpha_1 M + 1]$ (это аналог соотношения (10.18)) выбираем номер ячейки $E_m = (F_m; l_m)$.

2. Моделируем второе стандартное случайное число $\alpha_2 \in U(0, 1)$. Если $\alpha_2 < F_m$, то $\xi_0 = x_m$, иначе $\xi_0 = x_{l_m}$.

Обоснование алгоритма 10.8 можно провести на основании утверждения 2.3. То, что происходит в алгоритме 10.8, можно трактовать

как розыгрыш равномерной точки ($\beta_0^{(1)} = M\alpha_1, \beta_0^{(2)} = h\alpha_2$) в прямоугольнике Δ единичной площади с длинами сторон M и h , получающемся на диаграмме после процедуры перераспределения (рис. 10.3). Для каждого i ($i = 1, \dots, M$) суммарная площадь частей исходного i -го столбца, являющихся подмножествами Δ , равна p_i , и поэтому (вследствие утверждения 2.3) в алгоритме 10.8 воспроизводится распределение (10.1): $\mathbf{P}\{\xi = x_i\} = p_i$.

ЗАМЕЧАНИЕ 10.2 [9]. Алгоритм 10.8 допускает следующую модификацию: на втором шаге алгоритма вместо $\alpha_2 \in U(0, 1)$ можно взять величину

$$\beta_0 = \frac{\alpha_1 - (m - 1)/M}{1/M} = M\alpha_1 - m + 1. \quad (10.21)$$

Обоснование такой замены следует из того, что случайная величина β_0 равномерно распределена на полуинтервале $[0, 1)$ для любого $\alpha_1 \in [(m - 1)/M, m/M)$, что, в свою очередь, следует из утверждения 2.4 (см. также обоснование *модифицированного метода суперпозиции* из подраздела 11.2 – см. замечание 11.3).

Целесообразность применения формулы (10.21) связана с тем, что реализация нового выборочного значения α_2 с помощью обращения к генератору типа *RANDOM* является относительно трудоемкой операцией (см. замечание 9.2).

Что касается сравнения квантильного метода (алгоритм 10.6) и метода Уолкера (алгоритм 10.8), то здесь многочисленные тестовые и прикладные вычисления показали, что, без учета подготовительной работы (формирования массива $\{X_j\}_{j=1}^K$ вида (10.19) в одном случае и массива $\{E_j = (F_j, l_j)\}_{j=1}^M$ – в другом), алгоритм Уолкера является более экономичным. Тем не менее, к несомненным достоинствам квантильного алгоритма следует отнести относительную простоту формирования массива (10.19) и определенную «универсальность», связанную с возможностью применения метода для больших M (вплоть до $M = \infty$).

10.8. Анализ использования специальных алгоритмов (на примере моделирования геометрического распределения). В подразделе 10.6 показано, что *специальный* алгоритм 10.5 моделирования *равномерного дискретного распределения* превосходит по эффективности (экономичности) *стандартный* алгоритм 10.1.

Специальные алгоритмы моделирования выборочных значений имеются и для целого ряда других дискретных распределений (10.1). Однако далеко не всегда эти алгоритмы являются заведомо более эффек-

тивными по сравнению со стандартным алгоритмом.

Для иллюстрации этого тезиса в качестве примера рассмотрим целочисленную случайную величину η из (10.5), имеющую **геометрическое распределение** (это частный случай *биномиального распределения*; см., например, [14]):

$$p_i = \mathbf{P}\{\eta = i\} = pq^{i-1}, \quad 0 < p < 1; \quad q = 1 - p; \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (10.22)$$

Соответствующая случайная величина η определяет количество испытаний Бернулли (с вероятностью «успеха» p) до получения первого «успеха».

Соотношение (10.22) представляет собой пример распределения дискретной случайной величины с *бесконечным* числом значений (см. подраздел 10.4). Стандартным методом моделирования случайной величины η является алгоритм 10.4. При его реализации для пересчета вероятностей целесообразно использовать мультипликативную рекуррентную формулу (10.14) при $r(i+1) = p_{i+1}/p_i \equiv q$.

Согласно формуле (10.17), затраты алгоритма 10.4 для распределения (10.22) равны величине $t_1 = a + (b+c)/p$.

Это, в свою очередь, следует из того, что

$$\mathbf{E}\eta = \sum_{i=1}^{\infty} i p_i = \sum_{i=1}^{\infty} i p q^{i-1} = \frac{1}{p}. \quad (10.23)$$

Действительно, разлагая функцию $1/(1-z)^2$ в ряд Тейлора в точке $z_0 = 0$ и полагая $z = q$, получаем

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

В попытках уменьшить величину t_1 можно сформулировать и обосновать следующий **специальный алгоритм моделирования геометрического распределения**.

АЛГОРИТМ 10.9 (см., например, [9, 24]). *Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$ и полагаем*

$$\eta_0 = \left[\frac{\ln \alpha_0}{\ln(1-p)} \right] + 1; \quad (10.24)$$

здесь, как и ранее, $[A]$ обозначает целую часть числа A .

Докажем, что случайная величина $\tilde{\eta} = \lfloor \ln \alpha / \ln(1-p) \rfloor + 1$ имеет распределение (10.22), т. е. $p_k = \mathbf{P}\{\tilde{\eta} = k\} = p q^{k-1}$ для $k = 1, 2, \dots$

Используя определение целой части числа и соотношение (9.6), получаем

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

что и требовалось доказать.

Сравнивая алгоритмы 10.4 и 10.9 для геометрического распределения (10.22), можно отметить, что несмотря на определенную «компактность» формулы (10.24) неверно говорить, что алгоритм 10.9 всегда экономичнее алгоритма 10.4. Для вероятности «успеха» p , близкой к единице, затраты t_1 из (10.17) относительно невелики, а в формуле (10.24) для любого p применяется трудоемкая операция логарифмирования. Поэтому для выбранного компьютера и данного языка программирования можно экспериментально найти число p_0 , для которого при $p \geq p_0$ более экономичным является алгоритм 10.4, а при $p < p_0$ – алгоритм 10.9. Проведенные нами расчеты дали $p_0 \approx 0,75$.

Описанная выше связь случайной величины η с комбинацией независимых бернуллиевских случайных величин $\{\gamma^{(s)}\}$ с вероятностью «успеха» p (здесь $\mathbf{P}\{\gamma^{(s)} = 1\} = p$; $\mathbf{P}\{\gamma^{(s)} = 0\} = q$ для всех $s = 1, 2, \dots$) позволяет моделировать выборочное значение η_0 с помощью реализации соответствующей комбинации выборочных значений $\{\gamma_0^{(s)}\}$; такой алгоритм называется **методом браковки**.

Так, для геометрического распределения

$$\eta_0 = \min \{s : \gamma_0^{(s)} = 1\}, \quad (10.25)$$

т. е. метод браковки состоит в последовательной проверке неравенства $\alpha_s < p$ (см. алгоритм 10.3) до тех пор, пока оно не окажется верным.

В силу замечания 9.2, методы браковки неэффективны из-за необходимости реализации большого количества стандартных случайных чисел $\{\alpha_s\}$, поэтому метод браковки (10.25) следует «забраковать».

11. Альтернативные алгоритмы широкого применения: метод дискретной суперпозиции и мажорантный метод исключения

11.1. Метод дискретной суперпозиции. В подразделе 3.1 был представлен алгоритм *метода интегральной суперпозиции (рандомизации)* (алгоритм 3.1) для моделирования выборочного значения ξ_0 случайного вектора (случайной величины) ξ , имеющей плотность распределения вида

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \int_V f_{\eta}(\mathbf{v}) f_{\xi}(\mathbf{u}|\mathbf{v}) d\mathbf{v}. \quad (11.1)$$

В алгоритме 3.1 сначала моделировалось выборочное значение η_0 вспомогательного вектора (величины) η , имеющего плотность распределения $f_{\eta}(\mathbf{u})$, согласно эффективному (экономичному) алгоритму (формуле) $\eta_0 = \psi_{\eta}(\bar{\alpha}_1)$, а затем получалось требуемое значение $\xi_0 = \psi_{\xi}(\bar{\alpha}_2; \eta_0)$, распределенное согласно плотности $f_{\xi}(\mathbf{u}|\eta_0)$ (здесь также предполагалось наличие соответствующего эффективного алгоритма или формулы для каждого фиксированного η_0); при этом $\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2 \in U(0, 1)$ – нужные наборы стандартных случайных чисел.

В замечании 3.2 было сказано о том, что наиболее частым является применение алгоритма 3.1 в случае, когда вспомогательный случайный вектор η представляет собой одномерную целочисленную случайную величину η с распределением (10.5).

В этом случае, формально подставляя в формулу (11.1) аналог соотношения (10.2) вида $f_{\eta}(v) = \sum_{i=1}^M p_i \delta(v - i)$, получаем

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(\mathbf{u}); \quad f_i(\mathbf{u}) = f_{\xi}(\mathbf{u}|\eta = i); \quad M \leq \infty. \quad (11.2)$$

Согласно требованиям, при которых применим алгоритм метода суперпозиции, должны существовать эффективные алгоритмы получения выборочных значений целочисленной случайной величины η (в рассматриваемом частном случае следует применять наиболее эффективный из алгоритмов, описанных в разделе 10, – как минимум, стандартный алгоритм 10.2) и вектора ξ согласно плотности $f_i(\mathbf{u})$ для любого i .

Таким образом, соотношение (11.2) представляет собой *взвешенную сумму (смесь) эффективно моделируемых плотностей* $\{f_i(\mathbf{u})\}$.

Метод суперпозиции для плотности (11.2) формулируется следующим образом.

АЛГОРИТМ 11.1 (см., например, [9, 13]). 1. Используя наиболее эффективный (экономичный) из алгоритмов моделирования целочисленной случайной величины с распределением (10.5) (см. алгоритмы 10.2–10.8), моделируем значение $\eta_0 = m$.

2. Моделируем выборочное значение ξ_0 случайного вектора (случайной величины) ξ согласно плотности $f_m(\mathbf{u})$.

Алгоритм 11.1 называется **методом дискретной суперпозиции** или просто **методом суперпозиции**.

Особо отметим, что на первом и втором шагах алгоритма 11.1 используются *разные наборы* стандартных случайных чисел.

ПРИМЕР 11.1 (В.2; 1 балл; см., например, [9, 13]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_\xi(u) = \frac{3}{8}(1+u^2), \quad -1 < u < 1. \quad (11.3)$$

Соотношение (11.3) представляет так называемый *закон Релея молекулярного рассеяния фотонов в атмосфере*, используемый в теории переноса излучения [10].

Решение задачи построения алгоритма метода дискретной суперпозиции для моделирования ξ_0 состоит из трех этапов.

Во-первых, следует убедиться в том, что *данная функция* (11.3) *не является плотностью элементарного распределения*. Для этого рассмотрим основное уравнение (2.16) метода обратной функции распределения: $\int_{-1}^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0$. Оно сводится к соотношению

$$\xi_0^3 + 3\xi_0 - 8\alpha_0 + 4 = 0, \quad (11.4)$$

которое не дает эффективной моделирующей формулы для ξ_0 .

Второй этап состоит в *выделении вероятностей и плотностей* для получения соотношения вида (11.2). Имеем

$$p_1 = \int_{-1}^1 \frac{3u}{8} du = \frac{3u}{8} \Big|_{-1}^1 = \frac{3}{4}; \quad p_2 = \int_{-1}^1 \frac{3u^2}{8} du = \frac{u^3}{8} \Big|_{-1}^1 = \frac{1}{4} \quad (11.5)$$

(см. далее замечание 11.1), и плотность (11.3) представима в виде

$$f_\xi(u) = p_1 f_1(u) + p_2 f_2(u); \quad f_1(u) \equiv \frac{1}{2}; \quad f_2(u) = \frac{3u^2}{2}; \quad -1 < u < 1. \quad (11.6)$$

Третий этап – вывод частных моделирующих формул метода обратной функции распределения для распределений с плотностями $f_1(u)$ и $f_2(u)$.

Функция $f_1(u)$ является плотностью равномерного распределения в интервале $(-1, 1)$, которой соответствует табличная моделирующая формула вида (2.23): $\xi_0 = -1 + 2\alpha_2$.

Для плотности $f_2(u)$ имеем уравнение вида (2.16):

$$\int_{-1}^{\xi_0} \frac{3u^2 du}{2} = \alpha_2, \text{ или } \frac{\xi_0^3}{2} - \frac{(-1)^3}{2} = \alpha_2, \text{ или } \xi_0 = \sqrt[3]{2\alpha_2 - 1}. \quad (11.7)$$

Проверка 2.1 для $\alpha_2 = 0$ дает $\xi_0 = \sqrt[3]{2 \times 0 - 1} = -1$, а для $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = \sqrt[3]{2 \times 1 - 1} = 1$.

Для моделирования номера плотности (первого или второго) используем алгоритм 10.3.

Искомый алгоритм метода дискретной суперпозиции выглядит следующим образом.

АЛГОРИТМ 11.2 (А). Если $\alpha_1 < 3/4$, то $\xi_0 = 2\alpha_2 - 1$, иначе $\xi_0 = \sqrt[3]{2\alpha_2 - 1}$.

Описание примера 11.1 закончено.

ЗАМЕЧАНИЕ 11.1 [13]. Пусть вместо представления (11.2) исходная плотность задана в виде

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^M h_i(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u} \in X, \quad (11.8)$$

где $h_i(\mathbf{u})$ – положительные (почти всюду в X) функции.

Вычисляя интегралы $p_i = \int_X h_i(\mathbf{u}) d\mathbf{u}$, перепишем плотность (11.8) в виде

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^M p_i \times \frac{h_i(\mathbf{u})}{p_i}. \quad (11.9)$$

Тогда функции $\{f_i(\mathbf{u}) = h_i(\mathbf{u})/p_i\}$ являются плотностями (ведь $f_i(\mathbf{u}) \geq 0$ и $\int_X f_i(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = 1$), а числа $\{p_i\}$ – вероятностями: они неотрицательны и $\sum_{i=1}^M p_i = 1$. Действительно,

$$1 = \int_X f_{\xi}(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \sum_{i=1}^M p_i \int_X \frac{h_i(\mathbf{u}) d\mathbf{u}}{p_i} = \sum_{i=1}^M p_i.$$

Таким образом, представление (11.9) плотности (11.8) имеет вид (11.2).

Замечание 11.1 обосновывает, в частности, переход от соотношения (11.3) к представлению (11.5), (11.6) в примере 11.1.

ЗАМЕЧАНИЕ 11.2 [13]. При описании примеров, связанных с построением алгоритмов метода дискретной суперпозиции для одномерных случайных величин ξ с плотностями распределения $f_\xi(u)$; $u \in (a, b)$, требуется представлять результаты интегрирования на трех этапах этого построения:

– при обосновании того, что исходная плотность не является элементарной (т. е. уравнение вида $\int_a^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0$ неразрешимо в элементарных функциях относительно ξ_0) – см., например, соотношение (11.4) в примере 11.1;

– при выделении вероятностей $p_i = \int_a^b h_i(u) du$ (см. замечание 11.1 и соотношение (11.5) в примере 11.1);

– при выводе формул метода обратной функции распределения для плотностей $\{f_i(u)\}$ – см., например, соотношение (11.7) в примере 11.1.

Однако несложно заметить, что *во всех трех случаях используются одни и те же первообразные* (с точностью до умножения на константы и подстановки различных пределов интегрирования). Учет этого обстоятельства позволяет существенно упростить соответствующие вычисления и выводы формул.

11.2. Модифицированный метод суперпозиции. В этом и следующем подразделах рассматривается численное моделирование выборочного значения ξ_0 *одномерной* случайной величины $\xi \in (a, b)$.

Предположим сначала, что плотность распределения ξ имеет вид (11.2):

$$f_\xi(u) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(u), \quad u \in (a, b); \quad (11.10)$$

причем функции $\{f_i(u)\}$ являются элементарными плотностями.

Предположим также, что значение ξ_0 моделируется с помощью алгоритма 11.1, при этом применяются:

– на первом шаге: стандартный алгоритм 10.2 или его модификации (алгоритмы 10.6 и 10.7), определяющие номер m полуинтервала

$$\Delta_m = \left[\sum_{i=1}^{m-1} p_i, \sum_{i=1}^m p_i \right),$$

в который попадает первое стандартное случайное число α_1 ;

– на втором шаге: экономичная формула метода обратной функции $\xi_0 = \psi_m(\alpha_2)$, получаемая из уравнения вида (2.16):

$$\int_a^{\xi_0} f_m(u) du = \alpha_2. \quad (11.11)$$

Согласно утверждению 2.4, случайная величина $\alpha_1 \in U(0, 1)$ равномерно распределена в Δ_m , и справедливо следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11.1 (см., например, [9, 24]). *Случайная величина $\beta(\alpha) = \left(\alpha - \sum_{i=1}^{m-1} p_i\right) p_m^{-1}$ равномерно распределена в интервале $(0, 1)$ для $\alpha \in U(0, 1)$ при условии, что $\alpha \in \Delta_m$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В силу того, что $\alpha \in \Delta_m$, имеем $\beta(\alpha) \in [0, 1)$, и поэтому $F_{\beta(\alpha)}(x) = \mathbf{P}\{\beta(\alpha) < x\} = 0$ при $x \leq 0$ и $F_{\beta(\alpha)}(x) = 1$ при $x \geq 1$.

Далее, для $0 < x < 1$, используя соотношение (9.6), получаем

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

т. е. функция $F_{\beta(\alpha)}(x)$ совпадает с функцией распределения $F_\alpha(x)$ стандартной случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$ (см. соотношения (2.12) и (9.5)). Утверждение 11.1 доказано.

Утверждение 11.1 обосновывает следующую модификацию алгоритма 11.1.

АЛГОРИТМ 11.3 (см., например, [9, 24]). *1. Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$ и, используя алгоритм 10.2 или его модификации (алгоритмы 10.6, 10.7 и др.), получаем значение $\eta_0 = t$.*

2. Моделируем выборочное значение ξ_0 по формуле $\xi_0 = \psi_m[\beta_0(\alpha_0)]$, полученной с помощью решения уравнения

$$\int_a^{\xi_0} f_m(u) du = \beta_0(\alpha_0), \quad \beta_0(\alpha_0) = \left(\alpha_0 - \sum_{i=1}^{m-1} p_i\right) p_m^{-1} \quad (11.12)$$

относительно переменной ξ_0 .

Модификация состоит в замене α_2 на $\beta_0(\alpha_0)$ в уравнении (11.11). Это позволяет ликвидировать одну из двух трудоемких операций обращения к генератору стандартных случайных чисел *RANDOM* (см. замечание 9.2).

ЗАМЕЧАНИЕ 11.3. В случае, если в формуле (11.10) все вероятности одинаковы: $p_1 = \dots = p_M = 1/M$, в первом пункте алгоритма 11.3 можно использовать алгоритм 10.5: $m = [M\alpha_0] + 1$, а во втором – число вида (10.21) из замечания 10.2: $\beta_0(\alpha_0) = M\alpha_0 - m + 1$.

К слову, это же число (10.21) можно использовать в модифицированном алгоритме 11.3 в случае, когда на первом шаге этого алгоритма используется метод Уолкера (алгоритм 10.8).

Для примера 11.1 при $m = 1$ величина $\beta_0(\alpha_0)$ равна $(4/3)\alpha_0$, а при $m = 2$ имеем $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - 3/4)/(1/4) = 4\alpha_0 - 3$, откуда получаем следующий модифицированный метод суперпозиции (алгоритм 11.3).

АЛГОРИТМ 11.2 (Б). Если $\alpha_0 < \frac{4}{3}$, то $\xi_0 = 2 \times \frac{4\alpha_0}{3} - 1 = \frac{8\alpha_0}{3} - 1$, иначе $\xi_0 = \sqrt[3]{2 \times (4\alpha_0 - 3) - 1} = \sqrt[3]{8\alpha_0 - 7}$.

ПРИМЕР 11.2 (В.2; 1,5 балла; [5, 9, 23]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

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

Эта функция не является плотностью элементарного распределения, так как соотношение $\int_0^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0$ равносильно уравнению

$$(\xi_0 - 1)^5 + 5\xi_0 = 12\alpha_0 - 1,$$

которое неразрешимо относительно ξ_0 .

Выделим вероятности (см. замечание 11.1):

$$p_1 = \int_0^2 \frac{5 du}{12} = \frac{5u}{12} \Big|_0^2 = \frac{5}{6}; \quad p_2 = \int_0^2 \frac{5(u-1)^4 du}{12} = \frac{(u-1)^5}{12} \Big|_0^2 = \frac{1}{6}.$$

Таким образом, плотность $f_\xi(u)$ представима в виде (11.6):

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

Функция $f_1(u)$ является плотностью равномерного распределения в интервале $(0, 2)$, которой соответствует табличная моделирующая формула вида (2.23): $\xi_0 = 2\alpha_2$.

Для плотности $f_2(u)$ имеем уравнение вида (2.16):

$$\int_0^{\xi_0} \frac{5(u-1)^4 du}{2} = \alpha_2, \text{ или } \frac{(\xi_0 - 1)^5}{2} - \frac{(-1)^5}{2} = \alpha_2,$$

$$\text{или } \xi_0 = 1 + (2\alpha_2 - 1)^{1/5}.$$

Проверка 2.1 для $\alpha_2 = 0$ дает $\xi_0 = 1 + (0 - 1)^{1/5} = 0$, а для $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = 1 + (2 - 1)^{1/5} = 2$.

Искомый алгоритм метода дискретной суперпозиции выглядит следующим образом.

АЛГОРИТМ 11.4(А). Если $\alpha_1 < 5/6$, то $\xi_0 = 2\alpha_2$, иначе $\xi_0 = 1 + (2\alpha_2 - 1)^{1/5}$.

Для модифицированного метода суперпозиции величина $\beta_0(\alpha_0)$ равна $(6/5)\alpha_0$ при $m = 1$ и $\beta_0(\alpha_0) = 6\alpha_0 - 5$ при $m = 2$, откуда получаем следующий алгоритм.

АЛГОРИТМ 11.4(Б). Если $\alpha_0 < 5/6$, то $\xi_0 = \frac{12\alpha_0}{5}$, иначе $\xi_0 = 1 + (12\alpha_0 - 11)^{1/5}$.

Модифицированный метод (алгоритм 11.4(Б)) имеет для этого примера преимущество по сравнению с алгоритмом 11.4(А), так как при его применении не требуется реализовывать второе стандартное случайное число $\alpha_2 \in U(0, 1)$ (а затраты на остальные операции у стандартного и модифицированного методов практически совпадают). Описание примера 11.2 закончено.

11.3. Моделирование случайных величин с составными плотностями. Рассмотрим случайную величину $\hat{\xi} \in [a, b]$, имеющую *составную плотность*

$$\hat{f}_{\hat{\xi}}(u) = \sum_{i=1}^M p_i \hat{f}_i(u) \chi^{[a_i, b_i)}(u), \quad u \in [a_1 = a, b_1) \cup [a_2, b_2) \cup \dots \cup [a_M, b_M = b). \quad (11.13)$$

Здесь $\chi^{(A)}(u)$ – индикатор множества A ; функции $\hat{f}_i(u)$ – это плотности случайных величин $\hat{\xi}^{(i)}$, распределенных в полуинтервалах $[a_i, b_i)$ (здесь $a_i < b_i \leq a_{i+1}$; для простоты полагаем, что $b_i = a_{i+1}$), а числа $\{p_i\}$ – это вероятности: $p_i > 0$; $\sum_{i=1}^M p_i = 1$.

Отличие распределения случайной величины ξ , имеющей плотность распределения (11.10), от случайной величины $\hat{\xi}$ с распределением (11.13) состоит в том, что случайные величины $\{\xi^{(i)}\}$, имеющие плотности распределения $\{f_i(u)\}$ из (11.10), принимают значения *на одном*

и том же интервале (a, b) , а случайные величины $\{\hat{\xi}^{(i)}\}$, имеющие плотности распределения $\{\hat{f}_i(u)\}$ из (11.13), распределены на разных, не пересекающихся полуинтервалах $\{[a_i, b_i)\}$, объединение которых составляет полуинтервал $[a, b)$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11.2. Составная плотность (11.13) является элементарной тогда и только тогда, когда плотности $\{\hat{f}_i(u)\}$ – элементарные (т. е. имеются моделирующие формулы $\hat{\xi}_0^{(i)} = \psi_i(\alpha_0)$).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Необходимость. Рассмотрим уравнение (2.16) для плотности (11.13):

$$\int_a^{\hat{\xi}_0} \hat{f}_{\hat{\xi}}(u) du = \alpha_0 \quad \text{или} \quad \int_a^{\hat{\xi}_0} \sum_{i=1}^M p_i \hat{f}_i(u) \chi^{[a_i, b_i)}(u) du = \alpha_0. \quad (11.14)$$

Найдем номер m такой, что $\alpha_0 \in \Delta_m = \left[\sum_{i=1}^{m-1} p_i, \sum_{i=1}^m p_i \right)$. В этом случае $\xi_0 \in [a_m, b_m)$ и уравнение (11.14) будет иметь вид

$$\int_{a_1}^{b_1} p_1 \hat{f}_1(u) du + \dots + \int_{a_{m-1}}^{b_{m-1}} p_{m-1} \hat{f}_{m-1}(u) du + \int_{a_m}^{\hat{\xi}_0} p_m \hat{f}_m(u) du = \alpha_0 \quad \text{или}$$

$$\int_{a_m}^{\hat{\xi}_0} \hat{f}_m(u) du = \left[\alpha_0 - \int_{a_1}^{b_1} p_1 \hat{f}_1(u) du - \dots - \int_{a_{m-1}}^{b_{m-1}} p_{m-1} \hat{f}_{m-1}(u) du \right] p_m^{-1} \quad (11.15)$$

или

$$\int_{a_m}^{\hat{\xi}_0} \hat{f}_m(u) du = \beta_0(\alpha_0), \quad \text{где} \quad \beta_0(\alpha_0) = \left(\alpha_0 - \sum_{i=1}^{m-1} p_i \right) p_m^{-1}. \quad (11.16)$$

Из утверждения 11.1 следует, что $\beta_0(\alpha_0)$ является стандартным случайным числом, а значит (в силу элементарности плотности $\hat{f}_m(u)$) уравнение (11.16) (как и в целом уравнение (11.14)) разрешимо относительно $\hat{\xi}_0$ в элементарных функциях и дает моделирующую формулу $\hat{\xi}_0 = \psi_m[\beta_0(\alpha_0)]$, что и требовалось доказать.

Достаточность. Производим рассуждения «от противного». Пусть хотя бы одна из плотностей $\{\hat{f}_i(u)\}$, например плотность $\hat{f}_m(u)$, не является элементарной, т. е. уравнение

$$\int_{a_m}^{\hat{\xi}_0^{(m)}} \hat{f}_m(u) du = \alpha_0 \quad (11.17)$$

неразрешимо относительно верхнего предела $\hat{\xi}_0^{(m)}$ для любой правой части $\alpha_0 \in (0, 1)$.

Рассмотрим уравнение (11.14). С вероятностью, равной p_m , может случиться событие $\alpha_0 \in \Delta_m = \left[\sum_{i=1}^{m-1} p_i, \sum_{i=1}^m p_i \right)$, и тогда $\xi_0 \in [a_m, b_m)$. Повторяя выкладки (11.15), приходим к уравнению (11.16) и, учитывая, что уравнение (11.17) неразрешимо для любой правой части из $(0, 1)$, получаем, что уравнение (11.14) в рассматриваемом случае неразрешимо и, значит, составная плотность (11.13) не является элементарной. Утверждение 11.2 доказано.

Сравнивая формулы метода обратной функции распределения (11.14)–(11.16) и алгоритм 11.3, получаем следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11.3 [9, 24]. *Метод обратной функции распределения для случайной величины $\hat{\xi}$ с составной плотностью вида (11.13) совпадает с модифицированным методом суперпозиции (алгоритм 11.3) с определением номера t согласно стандартному алгоритму 10.2 моделирования целочисленной случайной величины.*

Для небольших M утверждение 11.3 упрощает вывод формул метода обратной функции распределения для случайных величин с плотностью распределения вида (11.13).

ПРИМЕР 11.3 (А; 2,5 балла; [9, 24]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения $\hat{\xi}_0$ случайной величины $\hat{\xi}$, имеющей плотность распределения вида

$$\hat{f}_{\hat{\xi}}(u) = C[u^{\nu-1}\chi^{(0,1)}(u) + e^{-\lambda u}\chi^{[1,\infty)}(u)], \quad u > 0; \quad 0 < \nu < 1, \quad \lambda > 0, \quad (11.18)$$

где $C = \lambda/(\lambda\nu^{-1} + e^{-\lambda})$.

Распределение (11.18) будет использовано в разделе 12 при построении *мажорантного метода исключения для гамма-распределения* (см. алгоритм 12.4).

Выделим вероятности (см. замечание 11.1):

$$p_1 = \int_0^1 C u^{\nu-1} du = \frac{\lambda \nu^{-1}}{\lambda \nu^{-1} + e^{-\lambda}} = \frac{\lambda}{\lambda + \nu e^{-\lambda}};$$

$$p_2 = \int_1^{+\infty} C e^{-\lambda u} du = \frac{-e^{-\lambda u}}{\lambda \nu^{-1} + e^{-\lambda}} \Big|_1^{+\infty} = \frac{e^{-\lambda}}{\lambda \nu^{-1} + e^{-\lambda}}.$$

Перепишем плотность (11.18) в виде (11.13):

$$\hat{f}_{\hat{\xi}}(u) = p_1 \times \hat{f}_1(u) \times \chi^{(0,1)}(u) + p_2 \times \hat{f}_2(u) \times \chi^{[1,\infty)}(u).$$

Здесь функция $\hat{f}_1(u) = \nu u^{\nu-1}$, $0 < u < 1$ является степенной плотностью (2.21) при $\lambda = \nu - 1$; соответствующая моделирующая формула имеет вид (2.22): $\hat{\xi}_0^{(1)} = \tilde{\alpha}_0^{1/\nu}$, $\tilde{\alpha}_0 \in U(0, 1)$.

Функция $\hat{f}_2(u) = (\lambda e^{-\lambda u})/e^{-\lambda}$, $u \geq 1$ является плотностью усеченного экспоненциального распределения. По аналогии с примером 2.1 несложно получить моделирующую формулу $\hat{\xi}_0^{(2)} = 1 - \ln(1 - \tilde{\alpha}_0)/\lambda$.

Алгоритм 11.3 выглядит здесь следующим образом.

АЛГОРИТМ 11.5. *Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$.*

Если $\alpha_0 < p_1 = \lambda/(\lambda + \nu e^{-\lambda})$, то $\beta_0(\alpha_0) = \alpha_0/p_1$ и

$$\xi_0 = \beta_0^{1/\nu}(\alpha_0) = \left[\frac{\alpha_0 (\lambda + \nu e^{-\lambda})}{\lambda} \right]^{1/\nu},$$

иначе $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - p_1)/p_2$ и

$$\xi_0 = 1 - \frac{\ln [1 - \beta_0(\alpha_0)]}{\lambda} = - \frac{\ln [(1 - \alpha_0)(e^{-\lambda} + \lambda \nu^{-1})]}{\lambda}. \quad (11.19)$$

Проверка 2.1 для $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = 0$, для $\alpha_0 = p_1 = \lambda/(\lambda + \nu e^{-\lambda})$ получаем $\xi_0 = 1$, а для $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = +\infty$.

Заметим, что в отличие от формулы (2.20) замена $\alpha'_0 = 1 - \alpha_0$ в последнем соотношении невозможна, так как формула (11.19) верна только при условии $\alpha_0 \geq p_1$. Описание примера 11.3 закончено.

Для случая $M \gg 1$ (вплоть до $M = \infty$) использование вместо метода обратной функции распределения (11.14)–(11.16) эквивалентного (согласно утверждению 11.3) алгоритма 11.3 является по сути необходимым из-за возможности использования существенно более экономичного, чем алгоритм 10.2, метода выбора номера $\eta_0 = t$ (алгоритмы 10.5–10.7 и др.).

ПРИМЕР 11.4 (см., например, [9, 24]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения $\hat{\xi}_0$ случайной величины $\hat{\xi}$, имеющей **кусочно-постоянную плотность распределения**

$$\hat{f}_{\hat{\xi}}(u) = v_i, \quad a_i \leq u < b_i; \quad i = 1, \dots, M; \quad (11.20)$$

$$a = a_1 < b_1 = a_2 < b_2 < \dots < b_{M-1} = a_M < b_M = b;$$

значения $\{v_i\}$ в формуле (11.20) положительны.

Вычислим вероятности

$$p_i = \int_{a_i}^{b_i} v_i du = v_i(b_i - a_i); \quad i = 1, \dots, M \quad (11.21)$$

и представим плотность (11.20) в виде (11.13) с вероятностями (11.21) и частными плотностями равномерного распределения

$$\hat{f}_i(u) \equiv \frac{1}{b_i - a_i} \text{ и моделирующими формулами } \hat{\xi}_0^{(i)} = a_i + (b_i - a_i)\tilde{\alpha}_0; \quad (11.22)$$

см. замечание 2.8 и табличную формулу (2.23).

АЛГОРИТМ 11.6. 1. Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$ и, используя наиболее эффективный (экономичный) из методов моделирования целочисленной случайной величины с распределением (10.5), (11.21) (алгоритмы 10.2, 10.5 – 10.8), получаем значение $\eta_0 = m$.

2. Моделируем выборочное значение $\hat{\xi}_0$ по формуле вида (11.22):

$$\hat{\xi}_0 = a_m + (b_m - a_m)\beta_0(\alpha_0),$$

где $\beta_0(\alpha_0) = \left(\alpha_0 - \sum_{i=1}^{m-1} p_i\right) p_m^{-1}$ для алгоритмов 10.2, 10.6, 10.7 и $\beta_0(\alpha_0) = M\alpha_0 - m + 1$ для алгоритмов 10.5, 10.8 (см. замечание 11.3).

Описание примера 11.4 закончено.

Отметим, что идеология примера 11.4 является основой построения «универсального» алгоритма (типа алгоритма 11.6) для моделирования выборочного значения ξ_0 одномерной случайной величины ξ , распределенной на конечном интервале (a, b) с произвольной кусочно-непрерывной плотностью $f_\xi(u)$. Функция $f_\xi(u)$ может быть приближена функцией (11.20) с $v_i = f_\xi(a_i)$, и для $M \gg 1$ алгоритм 11.6 будет давать выборочное значение $\hat{\xi}_0$, близкое по распределению к ξ_0 .

Определенным «пределом» при увеличении M такого приближения может стать примитивное *табулирование* (дискретизация) непрерывного распределения с плотностью $f_\xi(u)$ (при этом пункт 2 в соответствующем алгоритме 11.6 пропадает).

Рассмотрим также следующий аналог примера 11.4.

ПРИМЕР 11.5 (см., например, [9, 24]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения $\hat{\xi}_0$ случайной величины $\hat{\xi}$, имеющей **кусочно-линейную плотность распределения**

$$\hat{f}_\xi(u) = v_{i-1} + (u - a_i) \frac{v_i - v_{i-1}}{b_i - a_i}, \quad a_i \leq u < b_i; \quad i = 1, \dots, M; \quad (11.23)$$

$$a = a_1 < b_1 = a_2 < b_2 < \dots < b_{M-1} = a_M < b_M = b;$$

значения $\{v_i\}$ в формуле (11.23) положительны.

Вычислим вероятности (это площади трапеций с основаниями v_{i-1} и v_i и высотой $b_i - a_i$):

$$p_i = \int_{a_i}^{b_i} \left(v_{i-1} + (u - a_i) \frac{v_i - v_{i-1}}{b_i - a_i} \right) du = \frac{(v_{i-1} + v_i)(b_i - a_i)}{2}; \quad i = 1, \dots, M. \quad (11.24)$$

Представим плотность (11.23) в виде (11.13) с вероятностями (11.24) и частными линейными плотностями

$$\hat{f}_i(u) = A_i u + B_i; \quad A_i = \frac{2(v_i - v_{i-1})}{(v_{i-1} + v_i)(b_i - a_i)^2}, \quad B_i = \frac{2(v_{i-1}b_i - v_i a_i)}{(v_{i-1} + v_i)(b_i - a_i)^2}.$$

Выведем формулу метода обратной функции распределения для плотности $\hat{f}_i(u)$:

$$\begin{aligned} \int_{a_i}^{\hat{\xi}_0^{(i)}} (A_i u + B_i) du &= \tilde{\alpha}_0, \text{ или } \left(A_i \frac{u^2}{2} + B_i u \right) \Big|_{a_i}^{\hat{\xi}_0^{(i)}} = \tilde{\alpha}_0, \\ \text{или } A_i (\hat{\xi}_0^{(i)})^2 + 2B_i \hat{\xi}_0^{(i)} - A_i a_i^2 - 2B_i a_i - 2\tilde{\alpha}_0 &= 0, \\ \text{или } \hat{\xi}_0^{(i)} &= \frac{-B_i + \sqrt{B_i^2 + A_i^2 a_i^2 + 2A_i B_i a_i + 2A_i \tilde{\alpha}_0}}{A_i} \\ \text{или } \hat{\xi}_0^{(i)} &= \frac{-B_i + \sqrt{(B_i + A_i a_i)^2 + 2A_i \tilde{\alpha}_0}}{A_i}, \quad \tilde{\alpha}_0 \in U(0, 1). \end{aligned} \quad (11.25)$$

АЛГОРИТМ 11.7. 1. Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$ и, используя наиболее эффективный (экономичный) из методов моделирования целочисленной случайной величины с распределением (10.5), (11.24) (алгоритмы 10.2, 10.5 – 10.8), получаем значение $\eta_0 = m$.

2. Моделируем выборочное значение $\hat{\xi}_0$ по формуле вида (11.25):

$$\hat{\xi}_0 = \frac{-B_m + \sqrt{(B_m + A_m a_m)^2 + 2A_m \beta_0(\alpha_0)}}{A_m},$$

где $\beta_0(\alpha_0) = \left(\alpha_0 - \sum_{i=1}^{m-1} p_i \right) p_m^{-1}$ для алгоритмов 10.2, 10.6, 10.7 и $\beta_0(\alpha_0) = M\alpha_0 - m + 1$ для алгоритмов 10.5, 10.8 (см. замечание 11.3).

11.4. Плотности распределения, пропорциональные приближениям неотрицательных функций. «Моделируемые» функциональные базисы. В ряде приложений алгоритмов численно-статистического моделирования нужно решать следующую задачу.

ПРОБЛЕМА 11.1. Построить алгоритм численного моделирования выборочного значения ξ_0 случайного вектора ξ , имеющего плотность распределения

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = C L^{(M)}g(\mathbf{u}), \quad C = \frac{1}{\int_X L^{(M)}g(\mathbf{v}) d\mathbf{v}}; \quad g(\mathbf{u}) \geq 0. \quad (11.26)$$

В формуле (11.26) $L^{(M)}g$ обозначает аппроксимацию (или интерполяцию) функции g

$$g(\mathbf{u}) \approx L^{(M)}g(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)}\chi^{(i)}(\mathbf{u}), \quad (11.27)$$

на компактном множестве $X \subset \mathbb{R}^d$ (см. также формулу (8.27)).

«Базисные» (как правило, полиномиальные) функции $\Xi^{(M)} = \{\chi^{(1)}, \dots, \chi^{(M)}\}$ и коэффициенты $W^{(M)} = \{w^{(1)}, \dots, w^{(M)}\}$ определенным образом связаны с узлами сетки $V^{(M)} = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_M\}$ (см. также формулу (8.30)).

В частности, коэффициенты $W^{(M)}$ являются, как правило, комбинациями значений $\{g(\mathbf{v}_1), \dots, g(\mathbf{v}_M)\}$; чаще всего $w^{(i)} = g(\mathbf{v}_i)$ (см. формулу (8.30)); реже в качестве $w^{(i)}$ рассматриваются функционалы $(g, \chi^{(i)})$ (см. формулу (8.25)).

Заметим, что кусочно-постоянная и кусочно-линейная плотности (11.20) и (11.23) (из примеров 11.4 и 11.5) являются частными случаями плотности вида (11.26), (11.27), где $w^{(i)} = g(a_i)$ и $\chi^{(i)}(u) = \hat{f}_i(u)$ (т.е. речь идет о кусочно-постоянном и кусочно-линейном приближении неотрицательной функции одного переменного $g(x)$).

В качестве примера ситуаций, где требуется решение проблемы 11.1, можно упомянуть [17, 23]:

– приближение «сложных» плотностей, т.е. замена «немоделируемых» плотностей на близкие «моделируемые»;

– построение эффективных дискретно-стохастических алгоритмов выборки по важности для вычисления многократного интеграла (здесь $g(\mathbf{u})$ из соотношений (11.26), (11.27) является модулем подынтегральной функции);

– практически полезное использование гистограмм и полигонов частот в качестве плотностей для моделирования тех или иных параметров прикладных моделей (здесь пригодны приближения (11.26), (11.27) в виде (11.20) и (11.23));

– построение мажорант в виде сеточных приближений «сверху» исходной «немоделируемой» плотности в мажорантном методе исключения (см. следующие подразделы 11.5, 11.6) и др.

Пусть для плотности (11.26), (11.27) выполнены соотношения

$$\chi^{(i)}(\mathbf{u}) \geq 0 \quad \text{для } \mathbf{u} \in \mathbb{R}^d \quad \text{и } w^{(i)} \geq 0, \quad i = 1, \dots, M. \quad (11.28)$$

Тогда можно записать эту плотность в виде

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(\mathbf{u}); \quad f_i(\mathbf{u}) = \frac{\chi^{(i)}(\mathbf{u})}{Y_i}, \quad Y_i = \int \chi^{(i)}(\mathbf{w}) d\mathbf{w}, \quad p_i = C w^{(i)} Y_i. \quad (11.29)$$

Выберем функциональный базис $\Xi^{(M)}$ таким образом, что для случайных величин $\xi^{(i)}$, распределенных согласно плотностям $\{f_i\}$ из соотношения (11.29), имеются эффективные алгоритмы численного статистического моделирования. Тогда возникает следующий алгоритм метода суперпозиции (см. алгоритм 11.1).

АЛГОРИТМ 11.8. 1. Используя наиболее эффективный (экономичный) из алгоритмов моделирования целочисленной случайной величины с распределением (10.5), (11.29) (см. алгоритмы 10.2–10.8), выбираем номер $\eta_0 = m$.

2. Моделируем выборочное значение ξ_0 согласно плотности $f_m(\mathbf{u})$.

В связи с решением проблемы 11.1 с помощью алгоритма 11.8 можно сформулировать следующие требования к функциональному базису $\Xi^{(M)}$:

а) базисные функции $\chi^{(i)}(\mathbf{u})$ и коэффициенты $\{w^{(i)}\}$ должны быть неотрицательными (см. соотношение (11.28));

б) моделирование выборочных значений $\xi_0^{(i)}$, распределенных согласно соответствующим плотностям $\{f_i(\mathbf{u})\}$ является эффективным (экономичным);

в) функция $f_{\xi}(\mathbf{u})$ близка к функции $Cg(\mathbf{u})$ в некоторой функциональной норме;

г) аппроксимация (11.27) устойчива.

Требования в и г являются «традиционными» для теории аппроксимации функций (см., например, [16]), а требования а, б специфичны

именно для перечисленных выше приложений. Будем называть «*моделируемыми*» функциональные базисы $\Xi^{(M)}$, удовлетворяющие требованиям *a* и *б*.

Сразу отметим, что далеко не все классические аппроксимационные базисы являются «моделируемыми». Например, функции *базиса Лагранжа* $\chi^{(i)}(u) = \prod_{j=1, j \neq i}^M (u - v_j) / (v_i - v_j)$, $u \in \mathbb{R}$ (см., например, [16]) являются знакопеременными (т. е. требования *a* и *б* не выполняются). Обладая весьма хорошими аппроксимационными свойствами, аппроксимация Лагранжа имеет весьма неважные свойства устойчивости (особенно для равномерной сетки). Аналогичные недостатки имеют *тригонометрические базисы*.

Наиболее удачной для использования в дискретно-стохастических численных процедурах (к которым относится, в частности, алгоритм 11.8) оказалась конечно-элементная *аппроксимация Стрэнга – Фикса* [9, 17, 24, 26]. В одномерном случае хорошие свойства «моделируемости» имеет *базис Бернштейна* [24].

11.5. Общая схема метода исключения. Мажорантный метод исключения и его обоснование. Если внимательно проанализировать представленные выше соображения о численном моделировании выборочных значений ξ_0 случайных векторов (случайных величин) ξ (см. прежде всего рассуждения из подраздела 2.8), то может сформироваться вполне справедливое мнение о том, что для весьма большого класса распределений нет экономичных версий как стандартных алгоритмов 2.3, 2.4, так и альтернативных и специальных методов (типа алгоритмов 2.1, 11.1 и др.) моделирования значения ξ_0 .

После рассмотрения представленной в этом подразделе вычислительной технологии (алгоритма *мажорантного метода исключения*) эта «брешь» будет закрыта и сформируется вывод о том, что *в принципе на компьютере можно получить выборочное значение ξ_0 для любого распределения* (как минимум, мажорантным методом исключения – см. также замечание 2.4), правда, соответствующий алгоритм может оказаться не слишком экономичным (эффективным).

Итак, в этом подразделе речь пойдет о так называемых *методах исключения* (иногда применяются термины *методы отбора* и *методы отказов*, которые также соответствуют, хотя и в меньшей степени, английскому термину *rejection technique*), широко применяемых в алгоритмах численного статистического моделирования (и не только для моделирования случайных величин и векторов).

Суть этих методов состоит в следующем. Пусть случайный вектор

(случайная точка) θ распределен в некотором множестве \tilde{G} и дано подмножество $G \subseteq \tilde{G}$.

АЛГОРИТМ 11.9 (см., например, [9, 13]). *Проводится некоторое статистическое испытание T и считается, что T состоялось, если численная реализация θ_0 вектора θ принадлежит G , и T не состоялось, если $\theta_0 \notin G$.*

Назовем *трудоемкостью* \tilde{s} алгоритма 11.9 средние затраты на построение выборочных значений θ_j вектора θ до реализации T .

Очевидно, что величина \tilde{s} пропорциональна математическому ожиданию целочисленной случайной величины η , имеющей *геометрическое распределение* с параметром (вероятностью «успеха») $p = \mathbf{P}\{\theta \in G\}$ (см. формулу (10.22) из подраздела 10.8).

Согласно формуле (10.23) имеем

$$\tilde{s} \sim s = \mathbf{E}\eta = \frac{1}{p} = \frac{1}{\mathbf{P}\{\theta \in G\}}. \quad (11.30)$$

Очевидно, что $s \geq 1$. Оптимизация алгоритма 11.9 связана с приближением величины s к единице.

В подавляющем числе случаев алгоритм 11.9 применяется в следующей ситуации.

Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования выборочного значения ξ_0 случайного вектора (случайной величины) ξ , распределенного в области $X \in \mathbb{R}^d$ согласно плотности $f_{\xi}(\mathbf{u})$, которая пропорциональна заданной неотрицательной функции $g(\mathbf{u})$, т. е.

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \frac{g(\mathbf{u})}{\bar{G}}, \quad \mathbf{u} \in X, \quad \bar{G} = \int_X g(\mathbf{u}) d\mathbf{u}. \quad (11.31)$$

Предполагается, что ни один из рассмотренных ранее методов не дает эффективного алгоритма моделирования значения ξ_0 . Надежду на построение требуемого моделирующего алгоритма дает следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11.4 (см., например, [9, 13]). *Пусть точка (ξ, η) равномерно распределена в области*

$$G = \{\mathbf{u} \in X, 0 < v < g(\mathbf{u})\}, \quad (11.32)$$

т. е. в «подграфике» функции $g(\mathbf{u})$ (обозначение $(\xi, \eta) \in U(G)$); при этом $\xi \in X$ и $\eta \in (0, g(\xi))$. Тогда случайный вектор ξ распределен согласно плотности (11.31) (рис. 11.1).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. То, что $(d+1)$ -мерная точка (ξ, η) равномерно распределена в области (11.32), означает, что совместная плотность $f_{(\xi, \eta)}(\mathbf{u}, v)$ тождественно равна $1/\bar{G}$ при $(\mathbf{u}, v) \in G$ и нулю иначе.

Согласно формуле (2.5) для $\xi^{(1)} = \xi$ и $\xi^{(2)} = \eta$ имеем

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

Утверждение 11.4 доказано.

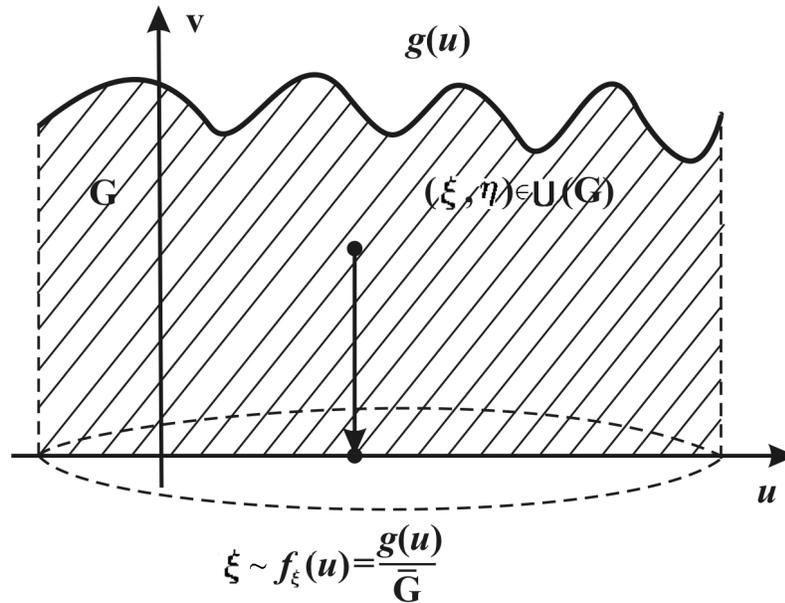


Рис. 11.1. Иллюстрация к утверждению 11.4

Таким образом, если получить выборочное значение (ξ_0, η_0) точки (ξ, η) , равномерно распределенной в G , то значение ξ_0 будет искомым – распределенным согласно плотности (11.31).

Возникает вопрос: каким образом можно реализовать точку, равномерно распределенную в «подграфике» заданной функции? Ответ на этот вопрос дает следующее утверждение, которое является по сути обратным утверждению 11.4.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11.5 (см., например, [9, 13]). Пусть случайный вектор $\xi^{(1)}$ распределен согласно плотности

$$f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u}) = \frac{g^{(1)}(\mathbf{u})}{\bar{G}^{(1)}}, \quad \bar{G}^{(1)} = \int_X g^{(1)}(\mathbf{u}) d\mathbf{u}, \quad (11.33)$$

а условное распределение при фиксированном значении $\xi^{(1)} = \xi_0^{(1)}$ случайной величины η является равномерным в интервале $(0, g^{(1)}(\xi_0^{(1)}))$. Тогда случайная точка $(\xi^{(1)}, \eta)$ равномерно распределена в «подграфике»

$$G^{(1)} = \{\mathbf{u} \in X, 0 < v < g^{(1)}(\mathbf{u})\} \quad (11.34)$$

функции $g^{(1)}(\mathbf{u})$, т. е. $(\xi^{(1)}, \eta) \in U(G^{(1)})$ (рис. 11.2).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. То, что случайная величина η условно равномерно распределена в интервале $(0, g^{(1)}(\xi_0^{(1)}))$ означает, что ее условная плотность $f_{\eta}(v|\mathbf{u} = \xi_0^{(1)})$ тождественно равна $1/g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$ при $v \in (0, g^{(1)}(\xi_0^{(1)}))$ и нулю иначе.

Согласно формуле (2.4) для $\xi^{(1)} = \xi^{(1)}$ и $\xi^{(2)} = \eta$ имеем, что плотность распределения случайной точки $(\xi^{(1)}, \eta)$ равна

$$f_{(\xi^{(1)}, \eta)}(\mathbf{u}, v) = f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})f_{\eta}(v|\mathbf{u}) = \frac{g^{(1)}(\mathbf{u})}{\bar{G}^{(1)}} \times \frac{1}{g^{(1)}(\mathbf{u})} \equiv \frac{1}{\bar{G}^{(1)}}$$

при $(\mathbf{u}, v) \in G^{(1)}$ и нулю иначе, т. е. $(\xi^{(1)}, \eta) \in U(G^{(1)})$. Утверждение 11.5 доказано.

Если в утверждении 11.5 выбрать $\xi^{(1)} = \xi$ (тогда $g^{(1)}(\mathbf{u}) = g(\mathbf{u})$ и «подграфики» (11.32) и (11.34) тоже совпадают), то в совокупности с утверждением 11.4 получаем логический круг: нам нужно получить выборочное значение (ξ_0, η_0) случайной точки (ξ, η) , равномерно распределенной в «подграфике» G (и тогда компонента ξ_0 является искомым выборочным значением, так как имеет требуемое распределение с плотностью (11.31)), но для этого нужно смоделировать выборочное значение ξ_0 вектора ξ согласно плотности (11.31).

Имеется еще, однако, утверждение 2.3, из которого следует, что если погрузить «подграфик» G в область $G^{(1)}$ в системе координат $(\mathbf{u}, v) \in \mathbb{R}^l$; $l = d + 1$ (т. е. $G \subseteq G^{(1)}$) и реализовать выборочное значение $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ случайного вектора $(\xi^{(1)}, \eta)$, равномерно распределенного в $G^{(1)}$, то при условии $(\xi_0^{(1)}, \eta_0) \in G$ пара $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно

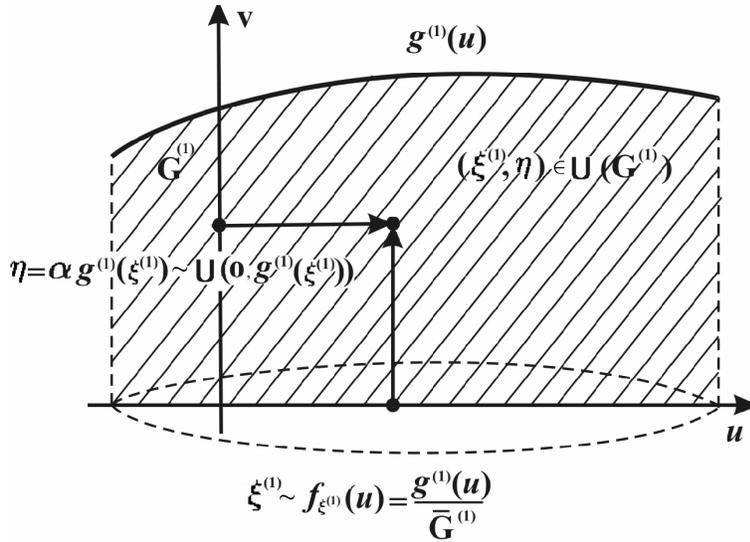


Рис. 11.2. Иллюстрация к утверждению 11.5

распределена в G . Тогда, согласно утверждению 11.4, вектор $\xi_0^{(1)}$ имеет требуемое распределение с плотностью (11.31).

Конструирование области $G^{(1)}$ связано с расширением «подграфика» G в направлении оси v (рис. 11.3). Другими словами, рассматривается мажоранта $g^{(1)}(\mathbf{u})$ функции $g(\mathbf{u})$, такая, что $g(\mathbf{u}) \leq g^{(1)}(\mathbf{u})$ при $\mathbf{u} \in X$.

Главное требование к мажоранте $g^{(1)}(\mathbf{u})$ таково, что для плотности (11.33) имеется эффективный алгоритм (формула) вида $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$ для моделирования выборочного значения случайного вектора $\xi^{(1)}$ согласно одному из вариантов алгоритма 2.3 (здесь $\bar{\alpha}_1$ – соответствующий набор стандартных случайных чисел). Это дает **мажорантный метод исключения** (рис. 11.3).

АЛГОРИТМ 11.10 (см., например, [9, 13]). 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ случайного вектора (случайной величины) $\xi^{(1)}$ согласно плотности (11.33): $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$, а также значение $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$ (см. формулу (2.23)).

Согласно утверждению 11.5, точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распреде-

лена в области $G^{(1)}$, т. е. $(\xi_0^{(1)}, \eta_0) \in U(G^{(1)})$.

2. Если

$$\eta_0 < g(\xi_0^{(1)}), \quad (11.35)$$

то пара $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ принадлежит области G и, согласно утверждению 2.3, равномерно распределена в этой области: $(\xi_0^{(1)}, \eta_0) \in U(G)$, и тогда, согласно утверждению 11.4, величину $\xi_0^{(1)}$ можно принять в качестве искомого выборочного значения, имеющего нужную плотность распределения (11.31): $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$.

В случае, когда неравенство (11.35) не выполнено, повторяем пункт 1 данного алгоритма и т. д.

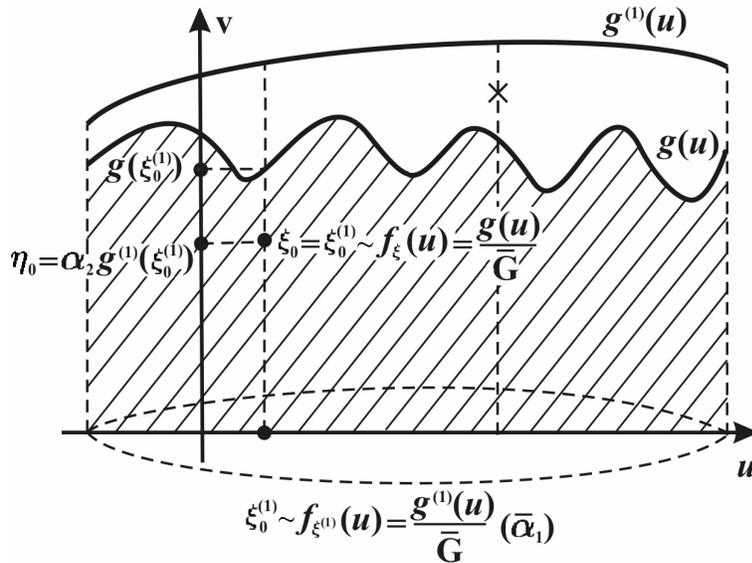


Рис. 11.3. Схема мажорантного метода исключения

Согласно формуле (11.30) и утверждению 2.3, трудоемкость (затраты) \tilde{s} алгоритма 11.10 пропорциональна величине

$$s = \frac{1}{\mathbf{P}\{(\xi^{(1)}, \eta) \in G\}} = \frac{\bar{G}^{(1)}}{\bar{G}}. \quad (11.36)$$

Таким образом, мажоранту $g^{(1)}(\mathbf{u})$ функции $g(\mathbf{u})$ следует подбирать

так, чтобы объемы (площади) $\bar{G}^{(1)}$ и \bar{G} были близки, т. е. близкими должны быть сами функции: $g^{(1)}(\mathbf{u}) \gtrsim g(\mathbf{u})$.

ПРИМЕР 11.6 (Γ ; 1 балл; см., например, [9, 13]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения $f_\xi(u)$, пропорциональную функции

$$g(u) = \left(1 + \frac{\sin u}{2}\right) e^{-u}, \quad u > 0. \quad (11.37)$$

Заметим, что плотность $f_\xi(u) = g(u)/\bar{G}$; $\bar{G} = \int_0^{+\infty} g(u) du$ не является элементарной. Действительно, если записать соответствующее уравнение типа (2.16) $\int_0^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0$ и проинтегрировать по частям, то получатся уравнения

$$\frac{1}{\bar{G}} \left[-e^{-u} - \frac{(\cos u + \sin u) e^{-u}}{4} \right] \Big|_0^{\xi_0} = \alpha_0 \quad \text{или}$$

$$4e^{-\xi_0} + (\sin \xi_0 + \cos \xi_0) e^{-\xi_0} + 4\bar{G}\alpha_0 - 5 = 0,$$

которые неразрешимы относительно ξ_0 .

Из последних соотношений, заменяя ξ_0 на $+\infty$, а α_0 — на единицу, получаем $\bar{G} = 5/4$.

В силу того, что $|\sin u| \leq 1$, в качестве мажоранты функции (11.37) можно взять функцию $g^{(1)}(u) = 3e^{-u}/2$, $u > 0$.

Легко вычислить интеграл $\bar{G}^{(1)} = \int_0^{+\infty} g^{(1)}(u) du = 3/2$.

Следовательно, пропорциональная мажоранте $g^{(1)}(u)$ плотность случайной величины $\xi^{(1)}$ (см. соотношения (11.33)) имеет вид $f_{\xi^{(1)}}(u) = e^{-u}$, $u > 0$. Это частный случай экспоненциальной плотности (2.18) с параметром $\lambda = 1$ и моделирующей формулой

$$\xi_0^{(1)} = -\ln \alpha_1 \quad (11.38)$$

(см. соотношение (2.20)). Отсюда получаем следующий алгоритм метода исключения.

АЛГОРИТМ 11.11. 1. Моделируем выборочное значение (11.38), а также величину

$$\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)}) = 3\alpha_2 \exp(-\xi_0^{(1)})/2 \in U[0, g^{(1)}(\xi_0^{(1)})]$$

(см. формулу (2.23)). Точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в «подграфике» функции $g^{(1)}(u)$: $(\xi_0^{(1)}, \eta_0) \in U(G^{(1)})$.

2. Проверяем неравенство $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ или

$$3\alpha_2 < 2 + \sin \xi_0^{(1)}. \quad (11.39)$$

Если неравенство (11.39) выполнено, то точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ принадлежит «подграфику» функции $g(u)$ из (11.37) и является равномерно распределенной в этом множестве: $(\xi_0^{(1)}, \eta_0) \in U(G)$. Тогда в качестве выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ берем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$.

Если неравенство (11.39) не выполнено, то повторяем пункт 1 и т.д.

Трудоёмкость s этого алгоритма (т.е. среднее число попыток розыгрыша пар $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ до выполнения неравенства (11.39)) равна величине $s = \bar{G}^{(1)}/\bar{G} = 3/2 : 5/4 = 1,2$ (см. соотношение (11.30)). Эта величина близка к единице, и поэтому алгоритм 11.11 можно считать достаточно эффективным (экономичным).

Описание примера 11.6 закончено.

11.6. Замечания о построении мажорант. Двусторонний метод исключения. Моделирование усеченных распределений. Наиболее простой вариант мажорантного метода исключения получается в случае, когда функция $g(\mathbf{u})$ определена на ограниченном множестве X в \mathbb{R}^d и существует (известна) константа H , такая, что $g(\mathbf{u}) \leq H$ при $\mathbf{u} \in X$. В качестве мажоранты здесь можно выбрать $g^{(1)}(\mathbf{u}) \equiv H$. При этом на первом этапе алгоритма 11.10 выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ вектора $\xi^{(1)}$ моделируется согласно равномерному распределению в множестве X .

В одномерном случае для $X = (a, b) \subset \mathbb{R}$; $-\infty < a < b < +\infty$ алгоритм 11.10 выглядит здесь следующим образом.

АЛГОРИТМ 11.12 (см., например, [9]). 1. Моделируем $\xi_0^{(1)} = a + \alpha_1(b - a)$ и $\eta_0 = \alpha_2 H$ (оба раза использована формула вида (2.23)).

2. Если $\eta_0 \leq g(\xi_0^{(1)})$, то в качестве выборочного значения ξ_0 случайной величины $\xi \in (a, b)$ принимаем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т.д.

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

Важное обобщение алгоритма 11.12 связано с использованием кусочно-постоянных мажорант (см. подразделы 11.3, 11.4), когда интервал (a, b) разбит на полуинтервалы $\Delta_i = (u_{i-1}, u_i]$, $i = 1, \dots, M$ точками $a = u_0 < u_1 < \dots < u_{M-1} < u_M = b$, и для каждого Δ_i известна константа H_i такая, что $g(u) \leq H_i$ при $u \in \Delta_i$.

Если $g^{(1)}(u) \equiv H_i$ при $u \in \Delta_i$, то на первом этапе алгоритма 11.10 требуется моделировать выборочное значение $\xi_1^{(0)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ согласно кусочно-постоянной плотности (здесь следует использовать алгоритм 11.6).

Следующая модификация алгоритма 11.10 эффективна в достаточно распространенном случае, когда требуется моделировать выборочное значение случайного вектора ξ , плотность которого пропорциональна функции $g(\mathbf{u})$, вычисление значений которой весьма трудоемко.

В этом случае помимо мажоранты $g^{(1)}(\mathbf{u})$ строим миноранту $g^{(2)}(\mathbf{u})$, такую, что

$$0 \leq g^{(2)}(\mathbf{u}) \leq g(\mathbf{u}) \leq g^{(1)}(\mathbf{u}); \quad \mathbf{u} \in X. \quad (11.40)$$

АЛГОРИТМ 11.13 (см., например, [9, 24]). 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$ согласно плотности (11.33), а также значение $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$.

2. Вместо неравенства (11.35) проверяем сначала соотношение $\eta_0 < g^{(2)}(\xi_0^{(1)})$.

Если оно выполнено, то пара (ξ_1, η) принадлежит «подграфику» функции $g^{(2)}(\mathbf{u})$, а значит, и области G . Тогда можно положить, что выборочное значение ξ_0 случайного вектора ξ , распределенного согласно плотности (11.31), равно $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$.

В случае же $\eta_0 \geq g^{(2)}(\xi_0^{(1)})$ проверяем неравенство (11.35). Если оно выполнено, то $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяется пункт 1 данного алгоритма и т. д.

В связи с соотношением (11.40) алгоритм 11.13 называют **двусторонним методом исключения**.

В случае, когда все три функции из неравенства (11.40) близки: $g^{(2)}(\mathbf{u}) \lesssim g(\mathbf{u}) \lesssim g^{(1)}(\mathbf{u})$, а миноранта $g^{(2)}(\mathbf{u})$ и мажоранта $g^{(1)}(\mathbf{u})$ легко вычислимы, проверка (11.40), связанная с трудоемким вычислением значения $g(\xi_0^{(1)})$, будет происходить относительно редко, и двусторонний метод может дать существенный выигрыш по сравнению с «односторонним» алгоритмом 11.10.

В качестве функций $g^{(2)}(\mathbf{u})$ и $g^{(1)}(\mathbf{u})$ часто используются кусочно-постоянные приближения снизу и сверху для функции $g(\mathbf{u})$.

Теперь напомним алгоритм 5.1 из подраздела 5.3, с помощью которого можно моделировать случайные векторы (случайные величины) с усеченными распределениями.

Рассмотрим случайный вектор $\xi^{(1)}$, распределенный в области $Y \in \mathbb{R}^d$ согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 11.1 (см., например, [9]). *Случайный вектор ξ имеет усеченное распределение вектора $\xi^{(1)}$, если он распределен в подобласти $X \subset Y$ и его плотность распределения $f_{\xi}(\mathbf{u})$ пропорциональна в X плотности $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$:*

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = H f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u}) = \frac{f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})}{\int_X f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{w}) d\mathbf{w}}, \quad \mathbf{u} \in X \subset Y. \quad (11.41)$$

В случае, когда имеется эффективный алгоритм моделирования выборочного значения $\xi_0^{(1)}$ случайного вектора $\xi^{(1)}$, можно использовать следующий алгоритм исключения для моделирования выборочного значения вектора ξ , имеющего усеченное распределение (11.41).

АЛГОРИТМ 11.14 (см., например, [9, 24], а также алгоритм 5.1 из подраздела 5.3 данного пособия). *1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ случайного вектора $\xi^{(1)}$ в области Y согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$.*

2. Если $\xi_0^{(1)} \in X$, то принимаем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяется пункт 1 данного алгоритма и т. д.

Несложно понять, что алгоритм 11.14 является частным случаем алгоритма 11.10 в области Y , в котором для функции (11.41) рассмотрена мажоранта $H f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$ для всех $\mathbf{u} \in Y$. В этом случае при $\mathbf{u} \in X$ имеем $f_{\xi}(\mathbf{u}) = H f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$, а при $\mathbf{u} \in Y \setminus X$ выполнено $f_{\xi}(\mathbf{u}) = 0 < H f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$.

Моделирование значения случайной величины η_0 не требуется (см. пункт 1 алгоритма 11.10), так как при $\xi_0^{(1)} \in X$ неравенство (11.35) заведомо выполнено, а при $\xi_0^{(1)} \in Y \setminus X$ – заведомо не выполнено.

Трудоёмкость алгоритма 11.14 пропорциональна величине $s = H$ (см. соотношения (11.30), (11.41)).

Заметим, что во многих случаях для моделирования выборочного значения ξ_0 случайного вектора ξ с усеченным распределением вида (11.41) удастся построить более эффективную, чем алгоритм 11.14, чис-

ленную процедуру, не связанную с включением области X в множество Y (см., в частности, пример 5.2).

Более того, для одномерного случая удается доказать следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11.6. *Если плотность $f_{\xi^{(1)}}(u)$ случайной величины $\xi^{(1)} \in (A, B)$ (здесь $-\infty \leq A < B \leq +\infty$) является элементарной, то для любых a и b , таких, что $A \leq a < b \leq B$, усеченная плотность распределения*

$$f_{\xi}(u) = H f_{\xi^{(1)}}(u) = \frac{f_{\xi^{(1)}}(u)}{\int_a^b f_{\xi^{(1)}}(w) dw}, \quad u \in (a, b) \quad (11.42)$$

случайной величины $\xi \in (a, b)$ также является элементарной.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Элементарность плотности $f_{\xi^{(1)}}(u)$ означает, что при решении основного уравнения (2.16) метода обратной функции распределения вида $\int_A^{\xi_0^{(1)}} f_{\xi^{(1)}}(u) du = \alpha_0$ удается перейти к уравнению с первообразной $\tilde{F}(u)|_A^{\xi_0^{(1)}} = \alpha_0$ и разрешить его относительно верхнего предела: $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\alpha_0)$; здесь функции $\tilde{F}(u)$ и $\psi^{(1)}(u)$ представляют собой композиции элементарных функций.

Теперь рассмотрим уравнение (2.16) для плотности (11.42):

$$\int_a^{\xi_0} f_{\xi}(u) du = \alpha_0, \quad \text{или} \quad \int_A^{\xi_0} H f_{\xi^{(1)}}(u) du = \alpha_0 - \int_A^a H f_{\xi^{(1)}}(u) du, \quad \text{или}$$

$$\int_A^{\xi_0} f_{\xi^{(1)}}(u) du = \alpha_0 [\tilde{F}(b) - \tilde{F}(a)] - \tilde{F}(a) + \tilde{F}(A), \quad \text{или}$$

$$\xi_0 = \psi^{(1)}(\alpha_0 [\tilde{F}(b) - \tilde{F}(a)] - \tilde{F}(a) + \tilde{F}(A))$$

(здесь использовано соотношение $1/H = \int_a^b f_{\xi^{(1)}}(u) du = \tilde{F}(b) - \tilde{F}(a)$), т.е. для выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ с плотностью (11.42) удалось вывести моделирующую формулу, представляющую собой композицию элементарных функций от стандартного случайного числа $\alpha_0 \in U(0, 1)$. Утверждение 11.6 доказано.

ПРИМЕР 11.7 ($A; 0,5$ балла; [9, 24]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_{\xi}(u) = \frac{\lambda e^{-\lambda u}}{1 - e^{-\lambda A}}, \quad 0 < u < A, \quad \lambda > 0. \quad (11.43).$$

С учетом примера 2.1 и определения 11.1, распределение (11.43) можно назвать *усеченным экспоненциальным распределением*. Это распределение широко используется в приложениях (например, оно позволяет реализовать так называемое *блуждание без вылета* при моделировании переноса частиц – см. раздел 6 данного пособия).

Алгоритм 11.14 здесь выглядит следующим образом.

АЛГОРИТМ 11.15. 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ согласно табличной формуле (2.20): $\xi_0^{(1)} = -\frac{\ln \alpha_0}{\lambda}$.

2. Если $\xi_0^{(1)} \leq A$, то в качестве выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ принимаем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоёмкость этого алгоритма пропорциональна величине $s = \frac{1}{1-e^{-\lambda A}}$. При малых A это значение может быть достаточно большим.

С другой стороны, непосредственно решая уравнение (2.16) метода обратной функции распределения, по аналогии с примером 2.1 получаем следующую моделирующую формулу:

$$\xi_0 = -\frac{\ln [1 - \alpha_0(1 - e^{-\lambda A})]}{\lambda}.$$

Проверка 2.1 для $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = -\ln [1 - 0 \times (1 - e^{-\lambda A})]/\lambda = 0$, а для $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = -\ln [1 - 1 \times (1 - e^{-\lambda A})]/\lambda = -\ln e^{-\lambda A}/\lambda = A$.

Последнее соотношение для ξ_0 ненамного сложнее формулы (2.20), и не требует процедуры исключения, как в алгоритме 11.15. Описание примера 11.7 закончено.

11.7. Сравнительный анализ моделирующих алгоритмов для случайной величины с полиномиальной плотностью распределения. Вопросы соотношения стандартного алгоритма (*метода обратной функции распределения*), рассмотренного в разделе 2, и альтернативных алгоритмов широкого применения (*метода дискретной суперпозиции, мажорантного метода исключения*), рассмотренных в данном разделе 11, удобно обсуждать на следующем примере.

ПРИМЕР 11.8 (А, В, Г; 0,5 балла; [9, 13]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей *полиномиальную плотность распределения*

$$f_\xi(u) = \sum_{m=0}^M c_m u^m, \quad 0 < u < 1 \quad (11.44)$$

(см. также формулу (2.17) из подраздела 2.6 данного пособия).

Здесь используются различные алгоритмы в зависимости от вида коэффициентов $\{c_m\}$.

Так, *метод обратной функции распределения* (см. алгоритм 2.4) заведомо реализуем для $M = 0$ (при этом $f_\xi(u) \equiv 1$, $0 < u < 1$ и $\xi_0 = \alpha_0$), для $M = 1$ (при этом $\xi_0 = (-c_0 + \sqrt{c_0^2 + 2c_1\alpha_0})/c_1$), а также для случая $c_m = (m + 1)$ и $c_j = 0$ при $j \neq m$ (см. пример 2.2); при этом

$$f_\xi(u) = (m + 1)u^m \quad \text{и} \quad \xi_0 = \alpha_0^{1/(m+1)} = \sqrt[m+1]{\alpha_0}. \quad (11.45)$$

В общем случае (при $M > 1$ и при наличии достаточно большого числа ненулевых коэффициентов c_m) попытка применить метод обратной функции распределения приводит к уравнению $\frac{1}{m+1} \sum_{m=0}^M c_m \xi_0^{m+1} = \alpha_0$, которое, как правило, неразрешимо относительно ξ_0 и нужно пытаться использовать альтернативные алгоритмы моделирования (метод суперпозиции, метод исключения и др. – см. замечание 2.4 из подраздела 2.6 данного пособия).

Для случая $c_m \geq 0$, в частности, удается представить плотность (11.44) в виде

$$f_\xi(u) = \sum_{m=0}^M p_m f_m(u); \quad p_m = \frac{c_m}{m+1}, \quad f_m(u) = (m+1)u^m, \quad (11.46)$$

и построить следующий *модифицированный метод дискретной суперпозиции* (см. алгоритм 11.3).

АЛГОРИТМ 11.16. 1. *Моделируем стандартное случайное число $\alpha_0 \in U(0, 1)$ и, используя наиболее эффективный (экономичный) из методов моделирования целочисленной случайной величины с распределением (10.5) при $p_i = c_i/(i+1)$; $i = 0, 1, \dots$ (алгоритмы 10.2, 10.5–10.8), получаем значение $\eta_0 = t$.*

2. *Моделируем выборочное значение ξ_0 по формуле вида (11.45): $\xi_0 = \sqrt[m+1]{\beta_0(\alpha_0)}$, где $\beta_0(\alpha_0) = \left(\alpha_0 - \sum_{i=1}^{m-1} p_i\right) p_m^{-1}$ для алгоритмов 10.2, 10.6, 10.7 и $\beta_0(\alpha_0) = M\alpha_0 - t + 1$ для алгоритмов 10.5, 10.8 (см. замечание 11.3).*

В случае наличия отрицательных чисел среди коэффициентов $\{c_m\}$ величины $\{p_m\}$ из соотношения (11.46) нельзя считать вероятностями, так как они не являются положительными числами (хотя соотношение $\sum_{m=0}^M p_m = 1$ выполнено в любом случае).

Для функции (11.44) можно построить мажоранту

$$f_{\xi}(u) \leq g^{(1)}(u) = \sum_{m=0}^M c_m^+ u^m, \quad (11.47)$$

где $c_m^+ = c_m$ при $c_m \geq 0$ и $c_m^+ = 0$ при $c_m < 0$ (т.е. мы убираем из суммы (11.44) слагаемые с отрицательными коэффициентами c_m ; при этом сама сумма увеличивается).

Тогда можно предложить следующий алгоритм *мажорантного метода исключения* (см. алгоритм 11.10).

АЛГОРИТМ 11.17. 1. Моделируем выборочное значение случайной величины $\xi_0^{(1)}$, распределенной согласно плотности

$$f_{\xi^{(1)}}(u) = \sum_{m=0}^M p_m^+ f_m(u), \quad \text{где}$$

$$p_m^+ = \frac{c_m^+}{(m+1) \int_0^1 g^{(1)}(w) dw} = \frac{c_m^+}{(m+1) \sum_{j=0}^M (c_j^+ / (j+1))},$$

при этом используем метод дискретной суперпозиции – алгоритм 11.16 (здесь используется одно стандартное случайное число α_1 , обозначенное в алгоритме 11.16 как α_0).

2. Моделируем также значение $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$.

3. Проверяем неравенство $\eta_0 < f_{\xi}(\xi_0^{(1)})$. Если оно выполнено, то полагаем, что выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ равно $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункты 1, 2 и т. д.

Трудоемкость этого алгоритма (среднее число повторений пунктов 1 и 2 до выполнения неравенства $\eta_0 < f_{\xi}(\xi_0^{(1)})$) пропорциональна величине $s^{(1)} = \int_0^1 g^{(1)}(w) dw = \sum_{m=0}^M [c_m^+ / (m+1)]$ (см. соотношение (11.36)).

Выбор мажоранты вида (11.47) неоднозначен. Можно, например, рассмотреть функцию $g^{(2)}(u) = \sum_{i=0}^N |c_i| u^i$ и использовать для нее алгоритм 11.17 с заменой $\xi^{(1)}$ на $\xi^{(2)}$.

Такой выбор мажоранты заведомо хуже, чем (11.47), так как $g^{(2)}(u) > g^{(1)}(u)$ и $s^{(2)} = \int_0^1 g^{(2)}(w) dw = \sum_{m=0}^M [|c_m| / (m+1)] > s^{(1)}$.

Однако несложно построить пример, в котором мажоранта (11.47) не является лучшей.

Рассмотрим случайную величину ξ с квадратичной плотностью распределения $f_\xi(u) = 6u - 6u^2$, $0 < u < 1$. В этом случае функция $g^{(1)}(u)$ из соотношения (11.47) равна $g^{(1)}(u) = 6u$ и трудоемкость соответствующего алгоритма 11.17 пропорциональна величине $s^{(1)} = \int_0^1 6u \, du = 3$ (это очень много!).

С другой стороны, для метода исключения с постоянной мажорантой (т. е. для *метода Неймана* – см. алгоритм 11.12 из подраздела 11.6)

$$g^{(3)}(u) \equiv \max_{u \in (0,1)} f_\xi(u) = f_\xi\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2}$$

имеем $s^{(3)} = 3/2$. Эта величина в два раза меньше, чем $s^{(1)}$.

Однако и этот вариант выбора мажоранты может быть не лучшим, так как есть варианты построения более близких к функции (11.44) кусочно-постоянных мажорант (см. тот же подраздел 11.6) и т. п.

Описание примера 11.8 закончено.

12. Моделирование бета- и гамма-распределений

12.1. Бета- и гамма-распределения и их частные случаи.

Существует достаточно устойчивое (и в целом – ошибочное) мнение ученых, занимающихся вопросами конструирования прикладных вероятностных моделей (в том числе компьютерных), о том, что если требуется ввести одномерный случайный параметр, распределенный *в конечном интервале*, то (с точностью до линейного преобразования) следует использовать случайную величину $\beta^{(\mu, \nu)}$, имеющую плотность **бета-распределения**

$$f_\beta^{(\mu, \nu)}(u) = \frac{u^{\mu-1} (1-u)^{\nu-1}}{B(\mu, \nu)}, \quad 0 < u < 1 \quad (12.1)$$

со специально подобранными положительными параметрами $\mu > 0$ и $\nu > 0$; здесь $B(\mu, \nu) = \int_0^1 t^{\mu-1} (1-t)^{\nu-1} dt$ – *бета-функция* (см., например, [22]).

Если же требуется ввести случайный параметр, распределенный *в полубесконечном интервале (полуоси)*, то (с точностью до линейного преобразования) рассматривается (и тоже – не вполне оправдано) случайная величина $\gamma^{(\lambda, \nu)}$, имеющая плотность **гамма-распределения**

$$f_\gamma^{(\lambda, \nu)}(u) = \frac{\lambda^\nu u^{\nu-1} e^{-\lambda u}}{\Gamma(\nu)}, \quad u > 0 \quad (12.2)$$

со специально подобранными положительными $\lambda > 0$ и $\nu > 0$; здесь $\Gamma(\nu) = \int_0^{+\infty} t^{\nu-1} e^{-t} dt$ – *гамма-функция* (см., например, [22]).

Наконец, если требуется использовать случайный параметр, распределенный на всей числовой прямой, то чаще всего используется (с точностью до линейного преобразования) случайная величина $\xi^{(0,1)}$, имеющая плотность *стандартного нормального (гауссовского) распределения* – см. формулу (1.12), а также соотношение (13.2) и раздел 13.

В этом разделе мы изучим алгоритмы численного моделирования выборочных значений $\beta_0^{(\mu,\nu)}$ и $\gamma_0^{(\lambda,\nu)}$ случайных величин с распределениями (12.1) и (12.2). Сразу отметим, что, как и в примере 11.8, для этих распределений можно построить целый спектр моделирующих алгоритмов: от стандартного метода обратной функции распределения до альтернативных алгоритмов широкого применения (мажорантных методов исключения, алгоритмов метода дискретной суперпозиции) и специальных методов (использующих специальные свойства гамма- и бета-распределений).

Метод обратной функции распределения для плотностей (12.1) и (12.2) применим только тогда, когда один из параметров μ и ν (или оба сразу) равен единице; при этом получаются распределения с другими названиями.

Так, при $\mu = \nu = 1$ плотность бета-распределения (12.1) превращается в плотность *равномерного распределения* в интервале $(0, 1)$

$$f_{\beta}^{(1,1)}(u) = f_{\alpha}(u) \equiv 1, \quad 0 < u < 1, \quad \text{с моделирующей формулой } \beta_0^{(1,1)} = \alpha_0,$$

где $\alpha_0 \in U(0, 1)$ – стандартное случайное число.

При $\nu = 1$ и $\mu \neq 1$ вместо плотности бета-распределения (12.1) получаем плотность *степенного распределения* (2.21) для $\lambda = \mu - 1$, т. е. $f_{\beta}^{(\mu \neq 1, 1)}(u) = \mu u^{\mu-1}$, $0 < u < 1$ с табличной моделирующей формулой вида (2.22):

$$\beta_0^{(\mu \neq 1, 1)} = \alpha_0^{1/\mu}. \quad (12.3)$$

Аналог степенного распределения получается и в случае $\mu = 1$ и $\nu \neq 1$; здесь плотность (12.1) имеет вид $f_{\beta}^{(1, \nu \neq 1)}(u) = \nu(1-u)^{\nu-1}$, $0 < u < 1$, а моделирующая формула –

$$\beta_0^{(1, \nu \neq 1)} = 1 - \alpha_0^{1/\nu}. \quad (12.4)$$

Наконец, для $\nu = 1$ плотность гамма-распределения (12.2) превращается в элементарную плотность *экспоненциального распределения*, т. е.

$f_{\gamma}^{(\lambda,1)}(u) = \lambda e^{-\lambda u}$, $u, \lambda > 0$ (см. также формулу (2.18)) с моделирующей формулой вида (2.20):

$$\gamma_0^{(\lambda,1)} = -\frac{\ln \alpha_0}{\lambda}. \quad (12.5)$$

Для $\mu \neq 1, \nu \neq 1$ плотности (12.1), (12.2) *не являются элементарными* (в этом причина ошибочности их широкого использования). Здесь для построения моделирующих алгоритмов требуются специальные подходы (они описаны далее в подразделах 12.2–12.4).

Отметим, что еще (кроме случая $\nu = 1$) имеются случаи, когда плотность гамма-распределения (12.2) имеет *специальные названия*.

Так, при целом положительном $\nu = n > 1$ соотношение (12.2) иногда называют *распределением Эрланга* [14]. Учитывая, что

$$\Gamma(n) = (n-1)!, \quad n \in \mathbb{N} \quad (12.6)$$

(см., например, [22]), плотность (12.2) в этом случае можно представить в виде

$$f_{\gamma}^{(\lambda,n)}(u) = \frac{\lambda^n u^{n-1} e^{-\lambda u}}{(n-1)!}, \quad u > 0, \quad n > 1, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (12.7)$$

При $\lambda = 1/2$, $\nu = d/2$ и целом положительном $d \in \mathbb{N}$ соотношение (12.2) является плотностью распределения случайной величины $\chi^{2(d)}$, имеющей χ^2 -*распределение с d степенями свободы*:

$$f_{\gamma}^{(1/2,d/2)}(u) = f_{\chi^{2(d)}}(u) = \frac{u^{d/2-1} e^{-u/2}}{2^{d/2} \Gamma(d/2)}, \quad u > 0. \quad (12.8)$$

Для дальнейших рассуждений полезной окажется формула, связывающая случайные величины с бета- и гамма-распределениями (12.1) и (12.2) [14]:

$$\beta^{(\mu,\nu)} = \frac{\gamma^{(\lambda,\mu)}}{\gamma^{(\lambda,\mu)} + \gamma^{(\lambda,\nu)}}; \quad (12.9)$$

здесь случайные величины $\gamma^{(\lambda,\mu)}$ и $\gamma^{(\lambda,\nu)}$ имеют гамма-распределение (12.2) и независимы.

В дальнейшем нам будет также полезна формула, связывающая значения бета- и гамма-функций

$$B(\mu,\nu) = \frac{\Gamma(\mu)\Gamma(\nu)}{\Gamma(\mu+\nu)} = B(\nu,\mu) \quad (12.10)$$

и свойства гамма-функции (12.6) и

$$\Gamma(\nu) = (\nu - 1)\Gamma(\nu - 1) \quad \text{для } \nu > 1; \quad (12.11)$$

см., например, [22].

Заметим также, что с помощью замены переменных $w = 1 - u$ несложно показать, что

$$\beta^{(\mu, \nu)} = 1 - \beta^{(\nu, \mu)}. \quad (12.12)$$

12.2. Моделирование бета- и гамма-распределений для целых параметров. Рассмотрим распределение (12.1) для целых $\mu, \nu \in \mathbb{N}$ при $\mu \geq 2, \nu \geq 2$.

Здесь нам понадобятся следующие дополнительные рассуждения.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 12.1 [35]. Пусть $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(n)}$ – набор независимых, одинаково распределенных случайных величин. **Вариационным рядом** $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(n)}$ называется упорядоченный по возрастанию набор случайных величин $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(n)}$. При этом r -й член $\xi^{r(n)}$ вариационного ряда называется **r -й порядковой статистикой**.

В частности, $\xi^{1(n)} = \min \{\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(n)}\}$ и $\xi^{n(n)} = \max \{\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(n)}\}$.

Справедливо следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 12.1 [5]. Пусть случайные величины $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(n)}$ имеют функцию распределения $F_\xi(u)$ и плотность $f_\xi(u)$. Тогда r -я порядковая статистика $\xi^{r(n)}$ имеет плотность распределения

$$f^{r(n)}(u) = n C_{n-1}^{r-1} F_\xi^{r-1}(u) [1 - F_\xi(u)]^{n-r} f_\xi(u), \quad (12.13)$$

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

Рассмотрим случай $\{\xi^{(i)} = \alpha^{(i)} \in U(0, 1)\}$, т.е. величины $\xi^{(i)}$ имеют плотность распределения $f_\alpha(u) \equiv 1$ и функцию распределения $F_\alpha(u) = u$ при $0 < u < 1$ (см. соотношения (2.12) и (9.5)). Здесь плотность (12.13) порядковой статистики $\xi^{r(n)} = \alpha^{r(n)}$ имеет вид

$$\hat{f}^{r(n)}(u) = n C_{n-1}^{r-1} u^{r-1} (1 - u)^{n-r}, \quad u \in (0, 1). \quad (12.14)$$

Сравнивая формулы (12.1) и (12.14) (с учетом соотношений (12.6), (12.10), (12.11)) для рассматриваемого случая $\mu, \nu \in \mathbb{N}$, получаем, что $\beta^{(\mu, \nu)} = \alpha^{\mu(\mu+\nu-1)}$ – это μ -я порядковая статистика из $(\mu + \nu - 1)$ стандартных случайных величин.

Для численного моделирования (т.е. для получения выборочного значения $\beta_0^{(\mu, \nu)} = \alpha_0^{\mu(\mu+\nu-1)}$) случайной величины $\beta^{(\mu, \nu)} = \alpha^{\mu(\mu+\nu-1)}$

можно использовать следующую процедуру – **алгоритм, основанный на моделировании порядковых статистик, для бета-распределения с целыми параметрами.**

Предполагаем, что имеется эффективный алгоритм выбора максимального элемента \tilde{A}_K и номера K соответствующей ячейки массива $\tilde{A} = (\tilde{a}^{(1)}, \dots, \tilde{a}^{(\mu)})$, состоящего из μ компонент.

АЛГОРИТМ 12.1 [9, 24]. 1. Моделируем μ выборочных значений $A = (\alpha_1, \dots, \alpha_\mu)$ стандартной случайной величины α , параллельно выбирая максимальный элемент A_K получаемого массива A . Полагаем сначала $\beta_0^{(\mu, \nu)} := A_K$.

2. Для $s = \mu + 1, \dots, \mu + \nu - 1$ моделируем выборочные значения α_s . Если $\alpha_s < A_K$, то заменяем K -ю компоненту массива A : $\alpha_K := \alpha_s$ и находим максимальный элемент A_K и номер K для преобразованного массива A . Полагаем $\beta_0^{(\mu, \nu)} := A_K$.

Недостатком алгоритма 12.1 является необходимость проведения большого числа сравнений (порядка $O(\mu \times [\mu + \nu - 1])$).

В работе [36] нами были подробно изучены возможные модификации алгоритма 12.1. Удалось выяснить, что для больших целых μ, ν к существенному уменьшению числа сравнений может привести использование *доверительных интервалов*.

В этой же работе [36] было показано, что алгоритм 12.1 и его возможные модификации превосходит по эффективности следующая **формула, основанная на моделировании гамма-распределения, для бета-распределения с целыми параметрами:**

$$\beta_0^{(\mu, \nu)} = \alpha_0^{\mu(\mu+\nu-1)} = \frac{\ln \prod_{i=1}^{\mu} \alpha_i}{\ln \prod_{i=1}^{\mu+\nu} \alpha_i}. \quad (12.15)$$

Алгоритм (12.15) базируется на формулах (12.5), (12.9) и на следующей **формуле, основанной на свойстве безграничной делимости, для гамма-распределения с целым параметром (распределения Эрланга):**

$$\gamma_0^{(\lambda, \nu)} = -\frac{\ln \alpha_1}{\lambda} - \dots - \frac{\ln \alpha_\nu}{\lambda} = -\frac{\ln \prod_{i=1}^{\nu} \alpha_i}{\lambda}. \quad (12.16)$$

При обосновании формулы (12.16) используется следующее важное свойство гамма-распределения (12.2).

УТВЕРЖДЕНИЕ 12.2 [14]. Если случайные величины $\gamma^{(\lambda, \nu_1)}$ и $\gamma^{(\lambda, \nu_2)}$ независимы, то $\gamma^{(\lambda, \nu_1)} + \gamma^{(\lambda, \nu_2)} = \gamma^{(\lambda, \nu_1 + \nu_2)}$; равенство означает здесь совпадение распределений соответствующих случайных величин.

Сформулированное свойство тесно связано со следующим понятием.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 12.2 (см., например, [37]). *Распределение случайной величины ξ называется **безгранично делимым**, если для любого натурального $n \in \mathbb{N}$ справедливо представление $\xi = \xi^{(1)} + \dots + \xi^{(n)}$, где $\xi^{(j)}$, $j = 1, \dots, n$ – независимые и одинаково распределенные случайные величины.*

Индукцией по n несложно показать, что из утверждения 12.2 следует *безграничная делимость гамма-распределения (12.2)*: здесь можно взять $\xi^{(j)} = [\gamma^{(\lambda, \nu/n)}]^{(j)}$.

В частности, для $n = \nu \in \mathbb{N}$ имеем $\gamma^{(\lambda, \nu)} = \sum_{j=1}^{\nu} [\gamma^{(\lambda, 1)}]^{(j)}$, что в совокупности с соотношениями (12.5), (12.9) обосновывает моделирующие формулы (12.15), (12.16).

Следующие рассуждения из работ [5, 9, 23] существенно уточняют основной вывод работы [36] (см. также книгу [24]) о том, что формула (12.15) является наиболее эффективной (экономичной) для моделирования бета-распределения с целыми параметрами μ и ν .

Сформулируем следующее вспомогательное утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 12.3 [5, 9]. *Пусть случайная величина $\tilde{\zeta}$ распределена в интервале $(0, A)$, $0 < A \leq +\infty$ с плотностью $\tilde{f}_{\tilde{\zeta}}(u)$ такой, что $\tilde{f}_{\tilde{\zeta}}(A) = 0$, и для некоторого $a > -1$ функция $\tilde{f}_{\tilde{\zeta}}(u) u^{-a}$ абсолютно непрерывна и монотонно убывает при $u > 0$.*

Предположим также, что случайная величина $\tilde{\xi}^{(1)}$ распределена с плотностью $f_{\tilde{\xi}^{(1)}}(u) = (a + 1) u^a$ при $0 < u < 1$, а величина $\tilde{\xi}^{(2)}$ распределена с плотностью

$$f_{\tilde{\xi}^{(2)}}(u) = \frac{-u^{a+1} (\tilde{f}_{\tilde{\zeta}}(u) u^{-a})'}{a + 1} \quad \text{при } 0 < u < A;$$

здесь штрих обозначает производную.

Тогда справедливо представление $\tilde{\zeta} = \tilde{\xi}^{(1)} \times \tilde{\xi}^{(2)}$.

Применим утверждение 12.3 для $\tilde{f}_{\tilde{\zeta}}(u) = f_{\beta}^{(\mu, \nu)}(u)$, $A = 1$ и $a = \mu - 1$. Тогда $\tilde{\zeta} = \beta^{(\mu, \nu)} = \xi^{(1)} \times \hat{\xi}^{(2)}$, где случайная величина $\xi^{(1)}$ распределена с плотностью $f_{\xi^{(1)}}(u) = \mu u^{\mu-1}$, $0 < u < 1$, а $\hat{\xi}^{(2)}$ распределена с плотностью

$$\hat{f}_{\hat{\xi}^{(2)}}(u) = \frac{-u^{a+1} (\tilde{f}_{\tilde{\zeta}}(u) u^{-a})'}{a + 1} = \frac{u^{\mu} (1 - u)^{\nu-2}}{B(\mu + 1, \nu - 1)};$$

здесь использованы соотношения (12.6), (12.10), (12.11).

Вновь применяем утверждение 12.3 для $\tilde{f}_{\tilde{\zeta}}(u) = \hat{f}_{\hat{\xi}^{(2)}}(u)$, $A = 1$ и $a = \mu$. Тогда $\tilde{\zeta} = \hat{\xi}^{(2)} = \xi^{(2)} \times \hat{\xi}^{(3)}$, где случайная величина $\xi^{(2)}$ распределена с плотностью $f_{\xi^{(2)}}(u) = (\mu + 1)u^\mu$, $0 < u < 1$, а $\hat{\xi}^{(3)}$ распределена с плотностью

$$\hat{f}_{\hat{\xi}^{(3)}}(u) = \frac{u^{\mu+1}(1-u)^{\nu-3}}{B(\mu+2, \nu-3)}, \quad 0 < u < 1.$$

Этот процесс продолжаем до тех пор, пока индекс j плотности $\hat{f}_{\hat{\xi}^{(j)}}$ не станет равным ν ; при этом показатель степени при $(1-u)$ в плотности $\hat{f}_{\hat{\xi}^{(\nu)}}$ будет равен нулю. Получаем представление

$$\beta^{(\mu, \nu)} = \xi^{(1)} \times \dots \times \xi^{(\nu)},$$

где случайные величины $\xi^{(i)}$ распределены со *степенными плотностями* вида (2.21):

$$f_{\xi^{(i)}}(u) = (\mu + i - 1)u^{\mu+i-2}, \quad 0 < u < 1.$$

Согласно формуле (2.22) (или (12.3)) для $\xi^{(i)}$ имеем моделирующие формулы $\xi_0^{(i)} = \alpha_0^{1/(\mu+i-1)}$; $i = 1, \dots, \mu$. Таким образом получается **формула, основанная на моделировании степенного распределения, для бета-распределения с целым параметром ν** :

$$\beta_0^{(\mu, \nu)} = \prod_{i=1}^{\nu} \alpha_i^{1/(\mu+i-1)}. \quad (12.17)$$

Формула (12.17) может быть эффективнее формулы (12.15) как минимум для случая $\mu \gg \nu$, так как в формуле (12.17) имеется только ν обращений к датчику стандартных случайных чисел, а в формуле (12.15) – $(\mu + \nu)$ таких обращений (см. замечание 9.2).

В случае $\mu \ll \nu$ (для $\mu \in \mathbb{N}$, $\mu \geq 2$) с учетом соотношений (12.12), (12.17) целесообразно использовать моделирующую формулу

$$\beta_0^{(\mu, \nu)} = 1 - \beta_0^{(\nu, \mu)} = 1 - \prod_{i=1}^{\mu} \alpha_i^{1/(\nu+i-1)}. \quad (12.18)$$

12.3. Случай нецелых параметров: «точные» формулы и методы суперпозиции. Забегая вперед, отметим, что *наиболее эффективными (экономичными) методами численного моделирования гамма- и бета-распределений с нецелыми параметрами μ и ν являются алгоритмы мажорантного метода исключения* (см. далее подраздел 12.4).

Тем не менее, для случая нецелых μ и ν известен ряд «точных» (не связанных с применением мажорантного метода исключения) формул и алгоритмов.

Так, например, рассуждения с использованием утверждения 12.3 для получения формул (12.17) и (12.18) позволяют сформулировать следующие рекомендации.

Для случая нецелого параметра $\mu > 0$ и целого параметра $\nu \geq 2$, $\nu \in \mathbb{N}$ конструктивной «точной» моделирующей формулой для бета-распределения является (12.17).

Для случая нецелого параметра $\nu > 0$ и целого параметра $\mu \geq 2$, $\mu \in \mathbb{N}$ конструктивной «точной» моделирующей формулой для бета-распределения является (12.18).

Отметим, однако, что когда нецелый параметр (μ или ν) велик, а целый невелик (близок к двойке), то вместо формул (12.17) или (12.18) целесообразней использовать мажорантный метод исключения (см. далее алгоритмы 12.6, 12.7).

В самом «трудном» случае, когда μ и ν одновременно не являются целыми числами, можно вновь учесть формулы (12.17), (12.18) и предложить *метод дискретной суперпозиции для моделирования бета-распределения*, который строится следующим образом (см. также [9, 23]).

Пусть $s = [\nu] + 1 - \nu$, где $[\nu]$ обозначает целую часть числа ν . Представим плотность $f_{\beta}^{(\mu, \nu)}(u)$ следующим образом:

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

и разложим $(1-u)^{-s}$ по формуле Тейлора – Маклорена (см., например, [21]):

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

здесь $i = 1, 2, \dots$. В последнем соотношении использовано свойство гамма-функции (12.11).

Следовательно,

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

$$= \sum_{i=0}^{\infty} p_i f_{\beta}^{(i+\mu, [\nu]+1)}(u), \quad (12.19)$$

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

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{[\nu]!}{B(\mu, \nu) \mu(\mu+1) \times \dots \times (\mu + [\nu])}; \\ p_i &= \frac{\Gamma(i+\mu) \Gamma([\nu]+1) \Gamma(s+i)}{\Gamma(i+\mu+[\nu]+1) B(\mu, \nu) i! \Gamma(s)} = \\ &= \frac{[\nu]! s(s+1) \times \dots \times (s+i-1)}{B(\mu, \nu) i! (i+\mu)(i+\mu+1) \times \dots \times (i+\mu+[\nu])}; \quad i = 1, 2, \dots; \end{aligned} \quad (12.20)$$

здесь использованы свойства гамма- и бета-функций (12.6), (12.10), (12.11).

Из формулы (12.19) получается следующий алгоритм метода дискретной суперпозиции.

АЛГОРИТМ 12.2 (см., например, [9, 24]). 1. Моделируем стандартное случайное число $\tilde{\alpha}_0$ и, используя наиболее эффективный (экономичный) из методов моделирования целочисленной случайной величины с распределением (10.5), (12.20) (алгоритмы 10.2, 10.6), получаем значение $\eta_0 = k$.

2. Моделируем выборочное значение $\beta_0^{(\mu, \nu)}$ согласно плотности $f_{\beta}^{(k+\mu, [\nu]+1)}(u)$ с использованием соответствующего варианта формулы (12.17):

$$\beta_0^{(\mu, \nu)} = \prod_{i=1}^{[\nu]+1} \alpha_i^{1/(k+\mu+i-1)}.$$

Недостатком этого метода является то, что выбор номера k плотности $f_{\beta}^{(k+\mu, [\nu]+1)}(u)$ весьма трудоемок. Это связано с тем, что таких номеров k бесконечно много (и такие эффективные методы, как алгоритмы 10.5, 10.8, неприменимы) и скорость убывания последовательности соответствующих им вероятностей p_k с ростом k невелика. Также определенные сложности вызывает то, что нужно вычислять бета-функцию от дробных переменных, причем делать это с высокой точностью [36].

Согласно формуле (10.17), трудоемкость стандартного алгоритма 10.2 выбора значения k целочисленной случайной величины η по вероятностям $\{p_i\}$ из соотношений (12.20) пропорциональна величине $\mathbf{E}\eta$.

Можно показать, что $\mathbf{E}\eta = +\infty$ при $[\nu] = 0$. Поэтому в случае $\mu > 1$, $0 < \nu < 1$ следует воспользоваться заменой переменных $w = 1 - u$ и формулой (12.12) и строить алгоритм 12.2 для моделирования случайной величины $\beta^{(\nu, \mu)}$ (у которой параметры μ и ν меняются местами).

В случае $0 < \mu < 1$, $0 < \nu < 1$ можно провести дополнительную рандомизацию и реализовать соответствующий метод суперпозиции на основе соотношения

$$\begin{aligned} f_{\beta}^{(\mu, \nu)}(u) &= u f_{\beta}^{(\mu, \nu)}(u) + (1 - u) f_{\beta}^{(\mu, \nu)}(u) = \\ &= \frac{\mu}{\mu + \nu} f_{\beta}^{(\mu+1, \nu)}(u) + \frac{\nu}{\mu + \nu} f_{\beta}^{(\mu, \nu+1)}(u); \end{aligned} \quad (12.21)$$

здесь использован вид плотности $f_{\beta}^{(\mu, \nu)}(u)$ (см. соотношение (12.1)) и свойства (12.10) и (12.11).

При моделировании бета-распределения с нецелыми параметрами можно попытаться воспользоваться формулой (12.9) и использовать соответствующие моделирующие формулы для гамма-распределения.

Определенным препятствием здесь является то обстоятельство, что **моделирование гамма-распределения (12.2) с нецелым параметром ν** также является проблематичным.

В случае $\nu \notin \mathbb{N}$ представляем параметр в виде суммы целой и дробной части: $\nu = [\nu] + \{\nu\}$ и, используя утверждение 12.2, представляем случайную величину $\gamma^{(\lambda, \nu)}$ в виде суммы двух независимых случайных величин

$$\gamma^{(\lambda, \nu)} = \gamma^{(\lambda, [\nu])} + \gamma^{(\lambda, \{\nu\})} \quad (12.22)$$

(при $0 < \nu < 1$ первое слагаемое в этой сумме отсутствует).

Для случайной величины $\gamma^{(\lambda, [\nu])}$ из соотношения (12.22) имеется моделирующая формула вида (12.16): $\gamma_0^{(\lambda, [\nu])} = -(1/\lambda) \times \ln \prod_{i=1}^{[\nu]} \alpha_i$.

Остается нерешенной **проблема моделирования** случайной величины $\gamma^{(\lambda, \{\nu\})}$ из соотношения (12.22), имеющей **гамма-распределение с параметром, меньшим единицы**.

Рассмотрим сначала **алгоритм Йонка**, представляющий собой достаточно редкий пример применения **метода интегральной суперпозиции** (см. подраздел 3.1 данного пособия).

Заметим, что для любого $t > 0$ справедлива цепочка равенств

$$t^{\{\nu\}-1} = t^{\{\nu\}-1} \int_0^{+\infty} f_{\gamma}^{(1, 1-\{\nu\})}(y) dy =$$

$$= \int_0^{+\infty} \frac{t^{-1}}{t^{-\{\nu\}}} \frac{e^{-y} y^{-\{\nu\}} dy}{\Gamma(1 - \{\nu\})} = \int_0^{+\infty} e^{-tv} \frac{v^{-\{\nu\}}}{\Gamma(1 - \{\nu\})} dv;$$

здесь использована замена $v = y/t$.

Полагая $t = \lambda u$, получаем представление

$$\begin{aligned} f_{\gamma}^{(\lambda, \{\nu\})}(u) &= \frac{\lambda^{\{\nu\}} u^{\{\nu\}-1} e^{-\lambda u}}{\Gamma(\{\nu\})} = \frac{\lambda e^{-\lambda u}}{\Gamma(\{\nu\})} \int_0^{+\infty} e^{-\lambda uv} \frac{v^{-\{\nu\}}}{\Gamma(1 - \{\nu\})} dv = \\ &= \int_0^{+\infty} f_{\gamma}(u|v) f_{\eta}(v) dv, \end{aligned} \quad (12.23)$$

где

$$\begin{aligned} f_{\eta}(v) &= \frac{1}{\Gamma(\{\nu\})\Gamma(1 - \{\nu\})} \times \frac{v^{-\{\nu\}}}{v+1}, \quad v > 0, \\ f_{\gamma}(u|v) &= \lambda(v+1) e^{-\lambda u(v+1)}, \quad u > 0. \end{aligned} \quad (12.24)$$

Представление (12.23) дает возможность применить *метод интегральной суперпозиции* (см. алгоритм 3.1).

АЛГОРИТМ 12.3 (*алгоритм Йонка*; см., например, [24]). 1. Численно моделируем стандартное случайное число α_1 и реализуем выборочное значение $\eta = \eta_0$ согласно плотности (12.24).

2. Моделируем значение $\gamma_0^{(\lambda, \{\nu\})}$ согласно экспоненциальной плотности $f_{\gamma}(u|\eta_0) = \lambda(\eta_0 + 1) e^{-\lambda u(\eta_0 + 1)}$ (см. пример 2.1 и соотношение (2.20)):

$$\gamma_0^{(\lambda, \{\nu\})} = \frac{-\ln \alpha_2}{\lambda(\eta_0 + 1)}.$$

Для моделирования величины η_0 согласно плотности (12.24) в пункте 1 сформулированного алгоритма 12.3 рассмотрим преобразование $w = g(v) = v/(v+1)$. Обратное преобразование имеет вид $v = w/(1-w)$.

Тогда, согласно утверждению 6.2, случайная величина $\tilde{\beta} = g(\eta)$ имеет плотность

$$\begin{aligned} f_{\tilde{\beta}}(w) &= \frac{1}{\Gamma(\{\nu\})\Gamma(1 - \{\nu\})} \times \frac{\left(\frac{w}{1-w}\right)^{-\{\nu\}}}{\left(\frac{w}{1-w}\right) + 1} \times \left(\frac{w}{1-w}\right)' = \\ &= \frac{w^{-\{\nu\}} (1-w)^{\{\nu\}} (1-w)}{\Gamma(1 - \{\nu\})\Gamma(\{\nu\}) (1-w)^2} = \frac{w^{(1-\{\nu\})-1} (1-w)^{\{\nu\}-1}}{B(1 - \{\nu\}, \{\nu\})}. \end{aligned}$$

«Круг замкнулся»: мы получили плотность бета-распределения с параметрами $(1 - \{\nu\})$ и $\{\nu\}$, т. е. самый «неприятный» случай, где требуется дополнительная рандомизация вида (12.21) и т. п.

Тем не менее, если удастся смоделировать выборочное значение $\tilde{\beta}_0$ случайной величины $\tilde{\beta}$, то, учитывая, что $\eta_0 = \tilde{\beta}_0/(1 - \tilde{\beta}_0)$, получается моделирующая формула

$$\gamma_0^{(\lambda, \{\nu\})} = \frac{-\ln \alpha_2}{\lambda(\eta_0 + 1)} = \frac{(\tilde{\beta}_0 - 1) \ln \alpha_2}{\lambda}.$$

Суммируя рассуждения данного раздела, констатируем, что *оба метода суперпозиции для бета- и гамма-распределений с нецелыми параметрами (алгоритмы 12.2 и 12.3) являются неэффективными (затратными, трудоемкими)*. Здесь рекомендуется использовать мажорантные методы исключения, представленные в следующем подразделе 12.4.

12.4. Случай нецелых параметров: методы исключения.

Начнем с гамма-распределения. Учитывая соотношения (12.16), (12.22), займемся построением *мажорантного метода исключения* (алгоритм 11.10) *для моделирования случайной величины $\gamma^{(\lambda, \{\nu\})}$, имеющей гамма-распределение с параметром $\{\nu\}$, меньшим единицы*.

Для функции $g(u) = u^{\{\nu\}-1} e^{-\lambda u}$, пропорциональной плотности (12.2), Г. А. Михайловым была предложена следующая составная мажоранта (см., например, [23]):

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

В свою очередь, для моделирования случайной величины $\xi^{(1)}$ с составной плотностью, пропорциональной функции $g^{(1)}(u)$ (см. соотношение (11.18)) в примере 11.3 из подраздела 11.3 данного пособия был построен алгоритм 11.5 метода обратной функции распределения.

Отсюда получаем следующий алгоритм *мажорантного метода исключения*.

АЛГОРИТМ 12.4 (алгоритм Г. А. Михайлова; см., например, [9, 23, 24]). 1. Моделируем выборочное значение согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(u) = C g^{(1)}(u)$:

$$\xi_0^{(1)} = \begin{cases} (\alpha_1(\lambda + \{\nu\}e^{-\lambda})/\lambda)^{1/\{\nu\}} & \text{при } \alpha_1 \leq \lambda/(\lambda + \{\nu\}e^{-\lambda}), \\ -(1/\lambda) \ln((1 - \alpha_1)(e^{-\lambda} + \lambda\{\nu\}^{-1})) & \text{иначе} \end{cases}$$

(см. алгоритм 11.5). Моделируем также значение $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$.

2. Если выполнено условие $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$, то полагаем $\gamma_0^{(\lambda, \{\nu\})} = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Согласно формуле (11.36), трудоемкость алгоритма 12.4 пропорциональна величине

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

Например, для $\{\nu\} = 1/2$ имеем $s = (2\lambda + e^{-\lambda})/(\lambda\sqrt{\pi})$. Заметим также, что при $\lambda = 1$ величина s монотонно растет от $s = 1$ (при $\{\nu\} \downarrow 0$) до $s = 1 + e^{-1} \approx 1,36$ (при $\{\nu\} = 1$). В частности, при $\{\nu\} = 1/2$ имеем $s \approx 1,33$.

Заметим также, что алгоритм Г. А. Михайлова (алгоритм 12.4) заметно эффективнее (экономичнее) алгоритма Йонка (алгоритм 12.3).

Это связано в том числе и с тем, что в алгоритме Йонка требуется моделировать бета-распределение (12.1) с нецелыми (а конкретнее, заключенными между нулем и единицей) параметрами μ и ν .

В подобных случаях эффективными оказываются различные **варианты мажорантного метода исключения** (алгоритм 11.10) для моделирования случайной величины $\beta^{(\mu, \nu)}$, имеющей бета-распределение с нецелыми параметрами μ и ν .

Плотность бета-распределения (12.1) пропорциональна функции

$$g(u) = u^{\mu-1} (1-u)^{\nu-1}, \quad 0 < u < 1. \quad (12.25)$$

Способы построения мажорант для функции (12.25) весьма разнообразны, причем эти построения и эффективность соответствующих алгоритмов метода исключения существенно зависят от значений параметров μ и ν .

Так, для описанного выше «сложного» случая $0 < \mu < 1$, $0 < \nu < 1$ можно построить мажоранту

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

Действительно,

$$\begin{aligned} u^{\mu-1} (1-u)^{\nu-1} &= [u + (1-u)] u^{\mu-1} (1-u)^{\nu-1} = \\ &= u^\mu (1-u)^{\nu-1} + u^{\mu-1} (1-u)^\nu \leq (1-u)^{\nu-1} + u^{\mu-1}. \end{aligned}$$

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

$$u^t < 1, \quad (1-u)^t < 1. \quad (12.26)$$

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

АЛГОРИТМ 12.5 (см., например, [9, 24]). 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$, распределенной согласно плотности

$$f_{\xi^{(1)}}(u) = C g^{(1,1)}(u) = \frac{\mu\nu}{\mu + \nu} g^{(1,1)}(u) = p_1 f_1(u) + p_2 f_2(u);$$

$$p_1 = \frac{\nu}{\mu + \nu}, \quad f_1(u) = \mu u^{\mu-1}; \quad p_2 = \frac{\mu}{\mu + \nu}, \quad f_2(u) = \nu(1-u)^{\nu-1}$$

(здесь используется модифицированный метод суперпозиции – алгоритм 11.3): если $\alpha_1 < \frac{\mu}{\mu + \nu}$, то $\xi_0^{(1)} = \left(\frac{\alpha_1(\mu + \nu)}{\nu} \right)^{1/\nu}$, иначе $\xi_0^{(1)} = 1 - \left(\frac{\alpha_1(\mu + \nu) - \nu}{\mu} \right)^{1/\nu}$.

2. Моделируем также величину $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1,1)}(\xi_0^{(1)})$.

3. Если $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$, то $\beta_0^{(\nu, \mu)} = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункты 1 и 2 и т. д.

Трудоёмкость алгоритма 12.5 пропорциональна величине

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

Например, для $\mu = \nu \approx 1/2$ имеем $s^{(1)} \approx 4/\pi \approx 1,27$.

Теперь рассмотрим случаи, когда параметры μ и ν достаточно велики.

Для случая $\mu \geq \nu > 1$ с учетом соотношений (12.26) в качестве мажоранты функции (12.25) можно взять

$$g(u) \leq g^{(1,2)}(u) = u^{\mu-1}(1-u)^{[\nu]-1}, \quad 0 < u < 1; \quad (12.27)$$

здесь $[A]$ – соответственно целая часть числа A .

Плотность $f_{\xi^{(1)}}(u)$, пропорциональная функции $g^{(1,2)}(u)$ из соотношения (12.27), является плотностью бета-распределения с целым вторым параметром. Для моделирования случайной величины $\xi^{(1)}$ следует использовать формулу (12.17).

Отсюда возникает следующий мажорантный метод исключения.

АЛГОРИТМ 12.6. 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ по формуле $\xi_0^{(1)} = \prod_{i=1}^{[\nu]} \alpha_i^{1/(\mu+i-1)}$. Моделируем также величину $\eta_0 = \tilde{\alpha}_0 g^{(1,2)}(\xi_0^{(1)})$.

2. Если $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ (или $\tilde{\alpha}_0 < (1 - \xi_0^{(1)})^{\{\mu\}}$), то $\beta_0^{(\mu,\nu)} = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Аналогично для случая $1 < \mu \leq \nu$ выбираем мажоранту

$$g(u) \leq g^{(1,3)}(u) = u^{[\mu]-1}(1-u)^{\nu-1}, \quad 0 < u < 1. \quad (12.28)$$

Плотность $f_{\xi^{(1)}}(u)$, пропорциональная функции $g^{(1,3)}(u)$ из соотношения (12.28), является плотностью бета-распределения с целым первым параметром. Для моделирования случайной величины $\xi^{(1)}$ следует использовать формулу (12.18).

Отсюда возникает следующий мажорантный метод исключения.

АЛГОРИТМ 12.7. 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ по формуле $\xi_0^{(1)} = 1 - \prod_{i=1}^{[\mu]} \alpha_i^{1/(\nu+i-1)}$. Моделируем также величину $\eta_0 = \tilde{\alpha}_0 g^{(1,3)}(\xi_0^{(1)})$.

2. Если $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ (или $\tilde{\alpha}_0 < (\xi_0^{(1)})^{\{\mu\}}$), то $\beta_0^{(\mu,\nu)} = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоёмкости алгоритмов 12.6 и 12.7 пропорциональны величинам $s^{(2)} = B(\mu, [\nu])/B(\mu, \nu)$ и $s^{(3)} = B([\mu], \nu)/B(\mu, \nu)$ соответственно. Эти величины относительно невелики (близки к единице).

Например, для $\mu \approx \nu \approx 2,5$ имеем

$$\begin{aligned} s^{(2)} \approx s^{(3)} &\approx \frac{\Gamma(2,5)\Gamma(2)}{\Gamma(4,5)} \times \frac{\Gamma(5)}{\Gamma(2,5)\Gamma(2,5)} = \\ &= \frac{4!}{(7/2)(5/2)(3/2)^2(1/2)^2\pi} = \frac{1536}{315\pi} \approx 1,55; \end{aligned}$$

здесь использованы соотношения (12.6), (12.10), (12.11) и $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

Однако следует учитывать, что при реализации величины $\xi_0^{(1)}$ в пунктах 1 алгоритмов 12.6, 12.7 требуется $[\nu]$ (или $[\mu]$) обращений к датчику случайных чисел (см. замечание 9.2).

Отметим также, что для нецелых значений μ и ν вычисление значений $g(\xi_0^{(1)})$ в алгоритмах 12.5–12.7 может оказаться трудоёмким. В этом случае можно использовать двусторонний метод исключения (алгоритм 11.13) с кусочно-постоянными мажорантой и минорантой.

13. Моделирование гауссовских случайных величин, векторов, процессов и полей

13.1. Использование изотропного вектора случайной длины. Рассмотрим вопрос о моделировании выборочных значений $\xi_i^{(m,\sigma^2)}$ случайной величины $\xi^{(m,\sigma^2)}$, имеющей плотность *гауссовского (нормального) распределения*

$$f_{\xi}^{(m,\sigma^2)}(u) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(u-m)^2/(2\sigma^2)}, \quad -\infty < u < +\infty \quad (13.1)$$

с параметрами (m, σ^2) : $m = \mathbf{E}\xi^{(m,\sigma^2)}$, $\sigma^2 = \mathbf{D}\xi^{(m,\sigma^2)}$.

Заметим, что для получения значений $\xi_i^{(m,\sigma^2)}$, распределенных согласно плотности (13.1), достаточно моделировать значения $\xi_i^{(0,1)}$ *стандартной гауссовской (нормальной) случайной величины* $\xi^{(0,1)}$, имеющей плотность распределения

$$f_{\xi}^{(0,1)}(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2}, \quad -\infty < u < +\infty, \quad (13.2)$$

а затем использовать преобразование $\xi_i^{(m,\sigma^2)} = m + \sigma\xi_i^{(0,1)}$.

Заметим также, что, в отличие от бета- и гамма-распределений (12.1), (12.2), ни при каких значениях параметров m и σ^2 (в том числе для $m = 0$ и $\sigma^2 = 1$) *плотность* (13.1) *не является элементарной* (см. рассуждения подраздела 2.6), и приходится конструировать *специальные* (отличные от стандартного *метода обратной функции распределения* – см. алгоритм 2.4) *алгоритмы моделирования выборочных значений* $\xi_i^{(0,1)}$.

Для построения таких алгоритмов используется следующий факт.

УТВЕРЖДЕНИЕ 13.1 (см., например, [9]). *Если ξ – d -мерный изотропный случайный вектор (см. определение 6.1), квадрат длины которого имеет χ^2 -распределение с d степенями свободы (см. формулу (12.8)), то его компоненты $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)}$ независимы и нормальны с параметрами $(0, 1)$ (т. е. распределены согласно плотности (16.2)).*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим d -мерную «сферическую» систему координат $\{r, w^{(1)}, \dots, w^{(d-1)}\}$, в которой компонента r описывает расстояние от описываемой точки до начала декартовых координат, а компоненты $\{w^{(1)}, \dots, w^{(d-1)}\}$ описывают точку d -мерной единичной сферы. В качестве примера такой системы координат можно рассмотреть, в частности, *гиперсферические координаты* (6.19).

В рассматриваемой системе координат случайный вектор ξ имеет компоненты $(\hat{\chi}^{(d)}, \tilde{\phi}^{(1)}, \dots, \tilde{\phi}^{(d-1)})$, где $(\tilde{\phi}^{(1)}, \dots, \tilde{\phi}^{(d-1)})$ – случайная точка, равномерно распределенная на d -мерной единичной сфере, а $\hat{\chi}^{(d)} = \sqrt{\chi^{2(d)}}$. Здесь $\chi^{2(d)}$ – случайная величина, имеющая χ^2 -распределение с d степенями свободы (см. формулу (12.8)).

Функция распределения случайной величины $\hat{\chi}^{(d)}$ имеет вид:

$$\begin{aligned} F_{\hat{\chi}^{(d)}}(r) &= \mathbf{P}\{\hat{\chi}^{(d)} < r\} = \mathbf{P}\{\chi^{2(d)} < r^2\} = \int_0^{r^2} \frac{t^{d/2-1} e^{-t/2}}{2^{d/2} \Gamma(d/2)} dt = \\ &= \frac{1}{2^{d/2} \Gamma(d/2)} \int_0^{r^2} t^{d/2-1} e^{-t/2} dt, \quad r \geq 0. \end{aligned}$$

Дифференцируя полученную функцию по r , получаем плотность

$$f_{\hat{\chi}^{(d)}}(r) = \frac{1}{2^{d/2} \Gamma(d/2)} (r^2)^{d/2-1} e^{-r^2/2} (2r) = \frac{1}{2^{d/2-1} \Gamma(d/2)} r^{d-1} e^{-r^2/2}.$$

В силу изотропности вектора $(\hat{\chi}^{(d)}, \tilde{\phi}^{(1)}, \dots, \tilde{\phi}^{(d-1)})$ и очевидной независимости компоненты $\hat{\chi}^{(d)}$ и вектора $(\tilde{\phi}^{(1)}, \dots, \tilde{\phi}^{(d-1)})$, плотность распределения вектора ξ в рассматриваемой d -мерной «сферической» системе координат имеет вид

$$f_{\xi}^{(1)}(r, w^{(1)}, \dots, w^{(d-1)}) = \frac{1}{2^{d/2-1} \Gamma(d/2)} r^{d-1} e^{-r^2/2} \times \frac{1}{\hat{S}_d} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} r^{d-1} e^{-r^2/2},$$

где $\hat{S}_d = (2\pi^{d/2})/\Gamma(d/2)$ – «площадь» поверхности d -мерной единичной сферы (на самом деле это объем размерности $(d-1)$).

Якобиан перехода от сферических координат $\{r, w^{(1)}, \dots, w^{(d-1)}\}$ к декартовым координатам $\{\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)})\}$ равен

$$\left| \frac{\partial(r(\mathbf{x}), w^{(1)}(\mathbf{x}), \dots, w^{(d-1)}(\mathbf{x}))}{\partial(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})} \right| = \frac{1}{r^{d-1}(\mathbf{x})} = \frac{1}{[(x^{(1)})^2 + \dots + (x^{(d)})^2]^{(d-1)/2}},$$

так как из соображений подобия бесконечно малый «декартовый» объем $dV(\mathbf{x})$ выражается в «сферических» координатах следующим образом:

$$dV(\mathbf{x}) = r^{d-1}(\mathbf{x}) dr(\mathbf{x}) dw^{(1)}(\mathbf{x}) \dots dw^{(d-1)}(\mathbf{x}).$$

Используя утверждение 6.2, получаем плотность распределения вектора ξ в декартовых координатах:

$$\begin{aligned} f_{\xi}(\mathbf{x}) &= f_{\xi}^{(1)}(r(\mathbf{x}), w^{(1)}(\mathbf{x}), \dots, w^{(d-1)}(\mathbf{x})) \left| \frac{\partial(r(\mathbf{x}), w^{(1)}(\mathbf{x}), \dots, w^{(d-1)}(\mathbf{x}))}{\partial(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})} \right| = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left[(x^{(1)})^2 + \dots + (x^{(d)})^2 \right]^{(d-1)/2} e^{-\left[(x^{(1)})^2 + \dots + (x^{(d)})^2 \right]/2} \times \\ &\quad \times \frac{1}{\left[(x^{(1)})^2 + \dots + (x^{(d)})^2 \right]^{(d-1)/2}} = \prod_{i=1}^d \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(x^{(i)})^2/2} \right]. \end{aligned}$$

Из последнего соотношения следует, что $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)}$ независимы и одинаково распределены согласно плотности (13.2). Утверждение 13.1 доказано.

Таким образом, для получения d независимых значений $\xi_i^{(0,1)}$ можно использовать следующий алгоритм.

АЛГОРИТМ 13.1 (см., например, [9, 23]). 1. Моделируем выборочное значение $\tilde{\rho}_0$ случайной величины $\tilde{\rho}$, имеющей гамма-распределение с параметрами $\lambda = 1/2$ и $\nu = d/2$, а также выборочное значение $(\omega_0^{(1)}, \dots, \omega_0^{(d)})$ единичного d -мерного изотропного случайного вектора (см. определение 6.1).

2. Полагаем $\xi_i^{(0,1)} = \sqrt{\tilde{\rho}_0} \times \omega_0^{(i)}$; $i = 1, \dots, d$.

Алгоритм 13.1 имеет ограниченное применение по следующим причинам. Во-первых, алгоритм неэффективен для нечетных $d = 2k - 1$, $k = 1, 2, \dots$ по той причине, что затруднено моделирование гамма-распределения с нецелым параметром (см. подразделы 12.3, 12.4).

Во-вторых, для больших четных $d = 2k$ (начиная с $k = 2$) имеются трудности с моделированием единичного изотропного вектора.

Как показано в подразделах 6.3, 6.4, здесь, согласно утверждению 6.1, построение соответствующего алгоритма сводится к решению проблемы 6.1, связанной с моделированием точки, равномерно распределенной в d -мерном шаре $B^{(d, \mathbf{0}, R)}$ фиксированного радиуса R (см. соотношение (6.7)). В этих же подразделах 6.3 и 6.4 показано, что проблема 6.1 эффективно разрешима только для размерностей $d = 1, 2, 3$ (с помощью перехода к полярным координатам – для $d = 2$ и к сферическим координатам – для $d = 3$).

Поэтому **алгоритм 13.1** по сути *применяется только для размерности* $d = 2$.

Здесь распределение случайной величины $\tilde{\rho}$ является экспоненциальным (это гамма-распределение с параметром $\nu = 1$ – см. формулы (2.18), (12.2)) для $\lambda = 1/2$ и моделируется по формуле (12.5) (или (2.20)):

$$\tilde{\rho}_0 = -2 \ln \alpha_0; \quad \alpha_0 \in U(0, 1).$$

В свою очередь, моделирующие формулы для двумерного единичного изотропного случайного вектора имеют вид:

$$\omega_0^{(1)} = \sin 2\pi\alpha_0, \quad \omega_0^{(2)} = \cos 2\pi\alpha_0; \quad \alpha_0 \in U(0, 1) \quad (13.3)$$

(см. формулы (6.30) для случая $\rho_0 = R\sqrt{\alpha_1} = 1$).

Таким образом, в двумерном случае алгоритм 13.1 сводится к знаменитым (и наиболее употребляемым) **формулам Бокса – Мюллера** (см., например, [9, 13]):

$$\xi_1^{(0,1)} = \sqrt{-2 \ln \alpha_1} \sin 2\pi\alpha_2, \quad \xi_2^{(0,1)} = \sqrt{-2 \ln \alpha_1} \cos 2\pi\alpha_2; \quad \alpha_1, \alpha_2 \in U(0, 1), \quad (13.4)$$

дающим сразу пару выборочных значений стандартной гауссовской (нормальной) случайной величины $\xi^{(0,1)}$.

13.2. Решение проблемы 6.1. Альтернативные алгоритмы моделирования d -мерного изотропного случайного вектора и стандартной гауссовской (нормальной) случайной величины. Полученные нами формулы (13.4) помогают решить проблему 6.1 о построении алгоритма моделирования выборочного значения ξ_0 случайной точки ξ , равномерно распределенной в d -мерном шаре $B^{(d,0,R)}$ (см. соотношение (6.7)) для $d \geq 4$ (в подразделе 6.4 для этого случая построить такой алгоритм с помощью перехода к гиперсферическим координатам не удалось).

Из рассуждений подраздела 6.4 и доказательства утверждения 13.1 следует, что моделируемый вектор ξ можно представить в виде

$$\xi = \rho \times \omega,$$

где ω – единичный изотропный случайный вектор, а случайная величина ρ (длина вектора), распределенная согласно степенной плотности $f_\rho(r) = dr^{d-1}/R^d$; при этом величины ω и ρ независимы.

Используя известное из теории вероятностей представление $\chi^{2(d)} = (\xi^{1(0,1)})^2 + \dots + (\xi^{d(0,1)})^2$, несложно доказать обратное (по отношению к утверждению 13.1) утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 13.2 (см., например, [9, 24]). Если случайные величины $\eta^{(1)}, \dots, \eta^{(d)}$ независимы и распределены нормально с параметрами $(0, 1)$ (т. е. согласно плотности (13.2)), то вектор $\boldsymbol{\eta} = (\eta^{(1)}, \dots, \eta^{(d)})$ является изотропным.

Используя это утверждение, а также формулы Бокса – Мюллера (13.4) и аналог формулы (2.22), получаем искомый алгоритм, решающий проблему 6.1 для случая $d \geq 4$.

АЛГОРИТМ 13.2 (см., например, [9, 24]). Пусть $d = 2k$; $k = 2, 3, \dots$. Моделируем k пар значений по формулам Бокса – Мюллера (13.4)

$$\eta_0^{(1,i)} = \sqrt{-2 \ln \alpha_1^{(i)}} \sin \alpha_2^{(i)}, \quad \eta_0^{(2,i)} = \sqrt{-2 \ln \alpha_1^{(i)}} \cos \alpha_2^{(i)}; \quad i = 1, \dots, k$$

(здесь $\{\alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)} \in U(0, 1); i = 1, \dots, k\}$ – стандартные случайные числа) и формируем выборочное значение d -мерного единичного изотропного случайного вектора

$$\boldsymbol{\omega}_0 = \left(\frac{\eta_0^{(1,1)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \frac{\eta_0^{(2,1)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \dots, \frac{\eta_0^{(1,i)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \frac{\eta_0^{(2,i)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \dots, \frac{\eta_0^{(1,k)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \frac{\eta_0^{(2,k)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|} \right); \quad (13.5)$$

$$\|\boldsymbol{\eta}_0\| = \sqrt{\left(\eta_0^{(1,1)}\right)^2 + \left(\eta_0^{(2,1)}\right)^2 + \dots + \left(\eta_0^{(1,k)}\right)^2 + \left(\eta_0^{(2,k)}\right)^2}.$$

Моделируем также выборочное значение $\rho_0 = R \sqrt[d]{\alpha_0}$ и полагаем $\boldsymbol{\xi}_0 = \rho_0 \boldsymbol{\omega}_0$.

Для нечетной размерности $d = 2k + 1$; $k = 2, 3, \dots$ целесообразно моделировать (согласно формулам (13.4) и алгоритму 13.2) сразу два выборочных значения изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\eta}$ и получать соответствующую пару значений вектора $\boldsymbol{\xi}$.

Суммируя рассуждения подразделов 6.4, 10.3, 10.6, 13.1, 13.2, получаем следующие **наиболее эффективные формулы моделирования выборочного значения $\boldsymbol{\omega}_0 = (\omega_0^{(1)}, \dots, \omega_0^{(d)})$ для d -мерного единичного изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\omega}$:**

– для $d = 1$ это формула $\omega_0 = 2[2\alpha_0] - 1$ (это следствие формулы (10.18)) или формула $\omega_0 = 2[\alpha_0 + 1/2] - 1$ (это следствие формулы С. А. Роженко (10.10));

– для $d = 2$ это формула (13.3);

– для $d = 3$ это формулы

$$\omega_0^{(1)} = 1 - 2\alpha_1, \quad \omega_0^{(2)} = \sqrt{1 - \left(\omega_0^{(1)}\right)^2} \sin 2\pi\alpha_2,$$

$$\omega_0^{(3)} = \sqrt{1 - \left(\omega_0^{(1)}\right)^2} \cos 2\pi\alpha_2, \quad (13.6)$$

где $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0, 1)$ – стандартные случайные числа (это следствие формул (6.34), (6.35));

– для $d \geq 4$ это формулы типа (13.5).

В качестве альтернативного к перечисленным выше формулам моделирования единичного изотропного вектора часто рассматривается следующий **алгоритм метода исключения**, основанный на утверждениях 2.3 и 6.1.

АЛГОРИТМ 13.3 (см., например, [9, 24]). *Моделируем d независимых значений, равномерно распределенных в интервале $(-R, R)$ (согласно формуле (2.23)):*

$$\zeta_1 = R(2\alpha_1 - 1), \dots, \zeta_d = R(2\alpha_d - 1); \alpha_i \in U(0, 1), i = 1, \dots, d. \quad (13.7)$$

Проверяем неравенство $d_\zeta^2 = \zeta_1^2 + \dots + \zeta_d^2 < R^2$ (здесь $d_\zeta > 0$). Если оно выполнено, то, в силу утверждения 2.3, $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_d)$ – точка, равномерно распределенная в d -мерном шаре $B^{(d,0,R)}$, и тогда, согласно утверждению 6.1,

$$\omega_0 = \left(\frac{\zeta_1}{d_\zeta}, \dots, \frac{\zeta_d}{d_\zeta} \right);$$

иначе вновь реализуем вектор (13.7) и т. д.

В силу утверждения 2.3 и формулы (11.30), трудоемкость \tilde{s} алгоритма 13.3 пропорциональна отношению объемов d -мерного куба (с ребром $2R$) и d -мерного шара $B^{(d,0,R)}$ радиуса R :

$$\tilde{s} \sim s = \frac{(2R)^d}{\pi^{d/2} R^d / \Gamma(d/2 + 1)} = (4/\pi)^{d/2} \times \Gamma(d/2 + 1).$$

Например, для $d = 2k$ имеем $s = (4/\pi)^k \times k!$. Эта величина очень быстро возрастает.

По сути алгоритм 13.3 используется только в случае $d = 2$ (здесь $s \approx 1, 27$, а для $d = 3$ уже $s \approx 1, 91$). Однако, как показали наши исследования, и при $d = 2$ алгоритм 13.3 оказывается менее экономичным, чем формулы (13.3).

Упомянем также еще один «плохой» (неэффективный) способ моделирования выборочного значения $\xi_0^{(0,1)}$ стандартной гауссовской (нормальной) случайной величины $\xi^{(0,1)}$, основанный на *центральной предельной теореме* (см., например, [14], а также утверждение 1.2).

Здесь используются соотношения (2.13) и приближенная формула:

$$\xi_0^{(0,1)} \approx \xi_0^{(n)} = \sqrt{\frac{12}{n}} \sum_{i=1}^n \left(\alpha_i - \frac{1}{2} \right); \quad \alpha_i \in U(0, 1), \quad i = 1, \dots, n. \quad (13.8)$$

Согласно центральной предельной теореме, случайная величина $\xi^{(n)}$, соответствующая выборочному значению $\xi_0^{(n)}$ из (13.8), асимптотически нормальна, кроме того, $\mathbf{E}\xi^{(n)} = 0$, $\mathbf{D}\xi^{(n)} = 1$.

Формула (13.8) особенно удобна для $n = 12$:

$$\xi_0^{(0,1)} \approx \xi_0^{(12)} = \sum_{i=1}^{12} \alpha_i - 6.$$

Соотношения типа (13.8), в частности, «обрубают хвосты» распределения стандартной нормальной случайной величины $\xi^{(0,1)}$ (например, $|\xi^{(12)}| \leq 6$), и поэтому такие формулы обычно используют в случаях, когда большие значения величины $|\xi^{(0,1)}|$ не играют существенной роли.

Недостатком формулы (13.8) является также необходимость реализации достаточно большого количества стандартных случайных чисел $\alpha_i \in U(0, 1)$ (см. замечание 9.2).

13.3. Моделирование гауссовского случайного вектора с заданной корреляционной структурой. Заметное место в теории и приложениях численного статистического моделирования занимают *специальные численные модели случайных процессов и полей*. В частности, в новосибирской школе методов Монте-Карло такие конструкции используются для описания метеорологических полей, для моделирования облаков и морской поверхности, для представления стохастических сред различной природы и др.

Чаще всего используются численные траектории *гауссовских случайных процессов и полей*. Это связано со свойством *безграничной делимости нормального (гауссовского) распределения* (см. определение 12.2) и с использованием *центральной предельной теоремы* (см. утверждение 1.2).

В описанных приложениях в ряде случаев применяются численные модели *дискретных случайных процессов и полей*. В качестве важной частной задачи здесь рассматривается проблема *моделирования выборочного значения* $\eta_0 = (\eta_0^{(1)}, \dots, \eta_0^{(d)})$ *случайного вектора* η , *имеющего многомерное нормальное распределение с*

плотностью

$$f_{\boldsymbol{\eta}}(u^{(1)}, \dots, u^{(d)}) = \frac{|\mathbf{R}^{-1}|}{(2\pi)^{d/2}} \exp \left[\frac{\sum_{i,j=1}^d R_{ij}^{(-1)} (u^{(i)} - m^{(i)}) (u^{(j)} - m^{(j)})}{2} \right] \quad (13.9)$$

(см., например, [37]). Здесь заданы *вектор математических ожиданий* $\mathbf{m} = (m^{(1)}, \dots, m^{(d)})$ и *корреляционная матрица*

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & \dots & R_{1d} \\ R_{21} & R_{22} & \dots & R_{2d} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ R_{d1} & R_{d2} & \dots & R_{dd} \end{pmatrix}, \quad (13.10)$$

где $R_{ij} = \mathbf{E}[(\eta^{(i)} - m^{(i)}) (\eta^{(j)} - m^{(j)})]$; при этом матрица $\mathbf{R}^{-1} = \{R_{ij}^{(-1)}\}$ является обратной к матрице (13.10).

АЛГОРИТМ 13.4 (см., например, [9]). *Используя формулы Бокса – Муллера (13.4), моделируем выборочное значение* $\boldsymbol{\xi}_0 = (\xi_0^{(1)}, \dots, \xi_0^{(d)})$ *вектора* $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$, *состоящего из независимых стандартных нормальных величин* $\xi^{(i)}$.

Полагаем $\boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{A} \boldsymbol{\xi}_0 + \mathbf{m}$, *где* \mathbf{A} *– нижняя треугольная матрица*

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{d1} & a_{d2} & \dots & a_{dd} \end{pmatrix}.$$

Элементы матрицы \mathbf{A} определяются с помощью следующей *рекуррентной процедуры*. Поскольку $\eta^{(1)} = a_{11}\xi^{(1)} + m^{(1)}$, то

$$a_{11} = \sqrt{R_{11}} = \sqrt{\mathbf{D}\eta^{(1)}}. \quad (13.11)$$

Далее имеем $\eta^{(2)} = a_{21}\xi^{(1)} + a_{22}\xi^{(2)} + m^{(2)}$ и поэтому

$$\mathbf{E}[a_{11}\xi^{(1)}(a_{21}\xi^{(1)} + a_{22}\xi^{(2)})] = R_{12}, \quad \mathbf{E}(a_{21}\xi^{(1)} + a_{22}\xi^{(2)})^2 = R_{22}.$$

Следовательно,

$$a_{21} = \frac{R_{12}}{a_{11}} = \frac{R_{12}}{\sqrt{R_{11}}}, \quad a_{22} = \sqrt{R_{22} - \frac{R_{12}^2}{R_{11}}}. \quad (13.12)$$

Общая рекуррентная формула такова:

$$a_{ij} = \frac{R_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{ik} a_{jk}}{\sqrt{R_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}^2}}, \quad (13.13)$$

причем $\sum_{k=1}^0 a_{ik} a_{jk} = 0$, $1 \leq j \leq i \leq d$.

Формула (13.13) проверяется путем рассмотрения величины $\mathbf{E}[(\eta^{(i)} - m^{(i)})(\eta^{(j)} - m^{(j)})]$ сначала для $i = j$, а затем для $j < i$.

Под знаком радикала в знаменателе выражения (13.13) стоит главный минор порядка j корреляционной матрицы (13.10). Если эта матрица оценивается статистически, то возможны отрицательные значения главных миноров. В этом случае целесообразно найти такую ортогональную матрицу \mathbf{Q} , что $\mathbf{R} = \mathbf{Q} \mathbf{diag}(r_1, r_2, \dots, r_d) \mathbf{Q}^T$ (здесь T – знак транспонирования), а для моделирования использовать уточненную корреляционную матрицу

$$\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{Q} \mathbf{diag}(|r_1|, |r_2|, \dots, |r_d|) \mathbf{Q}^T.$$

Если $r_i = 0$, то осуществляется замена $r_i \rightarrow \varepsilon > 0$.

Дополнительно отметим, что выполнено равенство $\mathbf{R} = \mathbf{A} \mathbf{A}^T$, которое принято называть *разложением Холесского*.

ПРИМЕР 13.1 [9]. Пусть требуется построить моделирующие формулы для выборочного значения $\boldsymbol{\eta}_0 = (\eta_0^{(1)}, \eta_0^{(2)}, \eta_0^{(3)})$ трехмерного нормального случайного вектора $\boldsymbol{\eta}$ с параметрами

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \end{pmatrix}.$$

Используем алгоритм 13.4. Здесь для матрицы \mathbf{A} преобразования $\boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{A} \boldsymbol{\xi}_0 + \mathbf{m}$, согласно формулам (13.11) и (13.12) (примененным для a_{11}, a_{22} и для a_{32}, a_{33} соответственно), имеем

$$a_{12} = a_{13} = a_{21} = a_{31} = a_{23} = 0, \quad a_{11} = \sqrt{R_{11}} = 3, \quad a_{22} = \sqrt{R_{22}} = 2,$$

$$a_{32} = \frac{R_{23}}{\sqrt{R_{22}}} = 1, \quad a_{33} = \sqrt{R_{33} - \frac{R_{23}^2}{R_{22}}} = \sqrt{2},$$

и тогда

$$\eta_0^{(1)} = 3\xi_0^{(1)} + 3, \quad \eta_0^{(2)} = 2\xi_0^{(2)} + 2, \quad \eta_0^{(3)} = \xi_0^{(2)} + \sqrt{2}\xi_0^{(3)} + 4,$$

где значения $\xi_0^{(1)}, \xi_0^{(2)}, \xi_0^{(3)}$ моделируются по формулам Бокса – Мюллера (13.4). Описание примера 13.1 закончено.

13.4. Общие сведения из теории случайных функций. Продолжая рассуждения о численном моделировании случайных процессов и полей, отметим следующее.

Имеются определенные трудности изучения и использования теории случайных процессов и полей, которые связаны, прежде всего, с тем обстоятельством, что само понятие *случайной функции* является во многом более сложным для изучения математическим объектом, чем понятие *случайной величины*. Здесь уместно сравнение понятий «функция» и «вещественное число» (в смысле объема и сложности изучения) в «обычном» (нестохастическом) математическом анализе.

Традиционные (неспециализированные) курсы теории вероятностей посвящены, как правило, изучению только случайных величин (см, например, [14]). В связи с этим нам необходимо ввести начальные понятия теории случайных процессов и полей [38, 39].

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.1 (см, например, [39]). *Случайной функцией* называется семейство случайных величин $\xi(\mathbf{x}) = \xi(\mathbf{x}, \omega)$, заданных на одном вероятностном пространстве $\Omega \subseteq \mathbb{R}^s$ (как правило, $s = 1$) с σ -алгеброй $A^{(0)}$ точечных или борелевских множеств из \mathbb{R}^s и мерой $\mathbf{P}(A)$, $A \subseteq \Omega$ и зависящих от параметра \mathbf{x} , принимающего значения из некоторого множества X . Если X есть счетное множество в \mathbb{R} , то $\xi(x)$ – *случайный процесс с дискретным временем* (примерами таких процессов служат *случайные последовательности, цепи Маркова, мартингалы* и др.), а если $X = (a, b) \subseteq \mathbb{R}$, то $\xi(x)$ – *случайный процесс с непрерывным временем*. Если X является подмножеством \mathbb{R}^l , то $\xi(\mathbf{x})$ называют *случайным полем размерности l* .

В дальнейшем для случайных процессов и полей с непрерывным временем в качестве X будем рассматривать выпуклую ограниченную область с границей в \mathbb{R}^l (для процессов это просто отрезок $[a, b]$). Отметим также, что если значения $\xi(\mathbf{x})$ принадлежат \mathbb{R}^s при $s > 1$, то ко всем введенным понятиям добавляется прилагательное «векторный» (*векторный случайный процесс, векторное случайное поле* и т. п.) и используется обозначение $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x})$.

Если зафиксировать $\omega_0 \in \Omega$, то мы получаем неслучайную функцию $\xi(\mathbf{x}, \omega_0) = \xi_0(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in X$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.2 (см, например, [39]). *Функция $\xi_0(\mathbf{x})$ называется траекторией, или выборочной функцией, или реализацией*

случайной функции $\xi(\mathbf{x})$.

Таким образом, в роли случайных величин выступают функции.

Рассмотрим пространство $\mathbb{G}(X)$ функций $g(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in X$, в котором с вероятностью единица лежат траектории случайной функции $\xi(\mathbf{x})$. Обозначим через $A_{\mathbb{G}}^{(0)}$ σ -алгебру подмножеств из $\mathbb{G}(X)$, порожденную (с помощью операций объединения и пересечения) так называемыми цилиндрическими множествами вида

$$A = \{g(\mathbf{x}) \in \mathbb{G}(X) : g(\mathbf{x}_1) \in Y_1, \dots, g(\mathbf{x}_K) \in Y_K\}$$

для всевозможных значений K и $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_K$ из X и борелевских множеств Y_1, \dots, Y_K из \mathbb{R} (рис. 13.1).

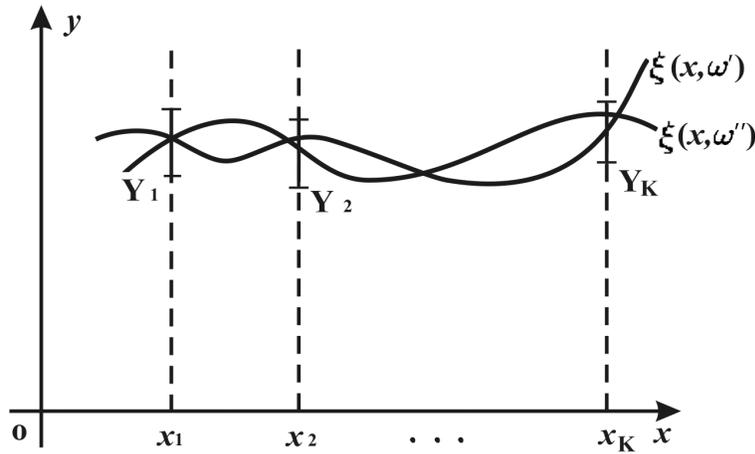


Рис. 13.1. Иллюстрация к определению цилиндрического множества

Если случайная функция $\xi(\mathbf{x}, \omega)$ задана, то она определяет измеримое отображение пространства Ω с σ -алгеброй $A^{(0)}$ в пространство $\mathbb{G}(X)$ с σ -алгеброй $A_{\mathbb{G}}^{(0)}$, так как, очевидно, $\xi^{-1}(A) = \{\omega : \xi(\mathbf{x}, \omega) \in A\} \in A^{(0)}$ для любого цилиндрического множества A , и поэтому $\xi^{-1}(B) \in A^{(0)}$ для любого $B \in A_{\mathbb{G}}^{(0)}$. Это отображение индуцирует *распределение случайной функции* $\mathbf{P}_{\xi}\{B\}$ на $\mathbb{G}(X)$, определяемое равенствами $\mathbf{P}_{\xi}\{B\} = \mathbf{P}\{\xi^{-1}(B)\}$ для всевозможных $B \in A_{\mathbb{G}}^{(0)}$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.3 (см, например, [39]). *Пространство $\mathbb{G}(X)$ с σ -алгеброй $A_{\mathbb{G}}^{(0)}$ и мерой $\mathbf{P}_{\xi}\{B\}$ называется **выборочным вероятностным пространством**.*

Еще раз подчеркнем, что элементарный исход « $\tilde{\omega}$ » для выборочного вероятностного пространства отождествляется с траекторией процесса; не следует путать его с элементом ω из пространства элементарных событий Ω , которому принадлежит значение случайной величины $\xi(\mathbf{x}_0)$ для фиксированного \mathbf{x}_0 .

Для случайных функций с непрерывным временем в качестве $\mathbb{G}(X)$ будем рассматривать *пространство* $\mathbb{C}(X)$. Это множество непрерывных на X функций, причем σ -алгебра $A_{\mathbb{C}}^{(0)}$ совпадает в этом пространстве с σ -алгеброй, порожденной множествами, открытыми относительно равномерной метрики

$$\rho_{\mathbb{C}}(g_1, g_2) = \sup_{\mathbf{x} \in X} |g_1(\mathbf{x}) - g_2(\mathbf{x})|, \quad g_1, g_2 \in \mathbb{C}(X).$$

При определении и моделировании случайных функций важным также является следующее понятие. Если при рассмотрении случайной функции $\xi(\mathbf{x})$ зафиксировать значения $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_K$ из X , то мы получим многомерную случайную величину (случайный вектор) $(\xi(\mathbf{x}_1), \dots, \xi(\mathbf{x}_K))$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.4 (см, например, [39]). *Распределения случайных векторов $(\xi(\mathbf{x}_1), \dots, \xi(\mathbf{x}_K))$ для различных K и различных наборов $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_K$ называют **конечномерными распределениями случайной функции**.*

Случайная функция, как правило, задается своими конечномерными распределениями. При этом они должны удовлетворять специальным *условиям согласованности* [38, 39]. Кроме того, следует учитывать, что если не дается дополнительной информации о свойствах траекторий функции, то данный набор конечномерных распределений задает *целый класс стохастически эквивалентных случайных функций*. Однако если потребовать, чтобы траектории случайной функции принадлежали пространству $\mathbb{C}(X)$, то конечномерные распределения определяют случайную функцию однозначно.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.5 (см, например, [39]). *Функция $m(\mathbf{x}) = \mathbf{E}\xi(\mathbf{x})$ называется **функцией математического ожидания** случайной функции, а функция двух переменных*

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathbf{E}[\xi(\mathbf{x}_1) - m(\mathbf{x}_1)][\xi(\mathbf{x}_2) - m(\mathbf{x}_2)] \quad - \quad (13.14)$$

***корреляционной функцией**. Для комплекснозначных функций $\xi(\mathbf{x})$ эта функция имеет вид*

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathbf{E}[\xi(\mathbf{x}_1) - m(\mathbf{x}_1)][\xi(\mathbf{x}_2) - m(\mathbf{x}_2)]^*, \quad (13.15)$$

где знак «*» обозначает комплексное сопряжение. Выражение $\mathbf{D}(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ определяет **функцию дисперсии** случайной функции.

В некоторых работах функция вида (13.14) (или (13.15)) называется *автокорреляционной функцией, ковариационной функцией, автоковариационной функцией*.

Функции $m(\mathbf{x})$ и $R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ являются усредненными характеристиками одномерных и двумерных распределений и, вообще говоря, полностью не задают случайную функцию. Имеется один важный (в том числе, для данного раздела) частный случай, когда функции $m(\mathbf{x})$ и $R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ полностью определяют случайное поле $\xi(\mathbf{x})$ (случайный процесс $\xi(x)$).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.6 (см, например, [39]). *Действительное случайное поле (процесс) называется **гауссовским**, если все его согласованные конечномерные распределения являются гауссовскими (см. формулу (13.9)). Комплекснозначное случайное поле $\xi(\mathbf{x}) = \xi_1(\mathbf{x}) + i\xi_2(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^l$ называется **гауссовским**, если пара $(\xi_1(\mathbf{x}), \xi_2(\mathbf{x}))$ образует действительное двумерное гауссовское поле.*

На практике во многих случаях имеется информация только о функции математического ожидания и корреляционной функции изучаемого случайного поля. Поэтому достаточно часто делается *предположение о гауссовости* этого поля. В связи с этим в литературе по численному статистическому моделированию (и в данном разделе) особое внимание уделяется построению моделей именно гауссовских случайных функций (см. далее подраздел 13.5, а также книги [7–9, 26, 40]). Важным аргументом в пользу использования гауссовских случайных моделей является возможность применения центральной предельной теоремы (см., например, [14, 39], а также утверждение 1.2) при изучении сходимости конечномерных распределений конструируемых моделей (см. далее подраздел 13.5).

Приведем еще одно важное понятие.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.7 (см, например, [39]). *Случайный процесс $\xi(x)$, $x \in \mathbb{R}$ называется **стационарным (в узком смысле)**, если при любых K и x_1, \dots, x_K из X распределение многомерной случайной величины $(\xi(x_1 + u), \dots, \xi(x_K + u))$ не зависит от u . При этом $m(x) = \text{const}$, а корреляционная функция $R(x_1, x_2) \equiv R(u)$ зависит только от разности $u = x_1 - x_2$. Последние два свойства определяют **стационарность в широком смысле** случайных процессов и полей, причем для полей вместо термина «стационарность в широком смысле» используют термин **однородность**.*

13.5. Основные идеи построения численных моделей однородных гауссовских случайных полей. Основой представленных в этом подразделе численных моделей служат конструкции *корреляционной теории стационарных (в широком смысле) случайных функций*.

При внимательном рассмотрении эта теория по своей сути является вероятностным аналогом теории гильбертова пространства $\mathbb{L}_2(X)$ (где вместо модуля $|f(\mathbf{x})|$ в области значений «обычных» функций рассматривается конструкция $\mathbf{E}|\xi(\mathbf{x})|^2$ для случайных функций – получается «математический анализ в средневекторном» [9, 25]); при этом роль скалярного произведения выполняет корреляционная функция (см. формулы (13.14) и (13.15)).

Здесь нам потребуются соображения о преобразовании Фурье в упомянутом «математическом анализе в средневекторном». Для компактности обозначений приведем эти соображения для случая комплекснозначных случайных функций. Прежде всего упомянем *теорему Бознера – Хинчина*.

УТВЕРЖДЕНИЕ 13.3 (см, например, [39]). *Для того чтобы функция $R(\mathbf{u})$ была корреляционной функцией комплекснозначного однородного случайного поля (стационарного в широком смысле случайного процесса) с непрерывным временем, необходимо и достаточно, чтобы она допускала представление вида*

$$R(\mathbf{u}) = \int_{\Lambda} e^{i(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})} F(d\boldsymbol{\lambda}), \quad (13.16)$$

где $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})$ обозначает скалярное произведение векторов \mathbf{u} и $\boldsymbol{\lambda}$ из \mathbb{R}^l : $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = u^{(1)}\lambda^{(1)} + \dots + u^{(l)}\lambda^{(l)}$, а $F(\boldsymbol{\lambda})$ – некоторую конечную меру на борелевских множествах *спектрального пространства* $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^l$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.8 (см, например, [39]). *Соотношение (13.16) называется спектральным разложением корреляционной функции $R(\mathbf{u})$. Мера $F(\boldsymbol{\lambda})$ из (13.16) называется спектральной мерой. Если спектральная мера абсолютно непрерывна $F(A) = \int_A f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}$, то функцию $f(\boldsymbol{\lambda})$ называют спектральной плотностью.*

Согласно приводимому ниже утверждению 13.4, для комплекснозначных стационарных в широком смысле случайных функций с непрерывными траекториями справедливо соотношение

$$\xi(\mathbf{x}) = m + \int_{\Lambda} e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{t})} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}), \quad (13.17)$$

где $m \equiv \mathbf{E} \xi(\mathbf{x})$, а $\Psi(\boldsymbol{\lambda})$ – случайная функция с некоррелированными приращениями и нулевым средним такая, что для любых борелевских множеств A_1 и A_2 из Λ выполнено

$$\mathbf{E} \int_{A_1} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \left(\int_{A_2} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \right)^* = F(A_1 \cap A_2). \quad (13.18)$$

Интеграл в (13.17) понимается как предел в среднеквадратическом соответствующих интегральных сумм (см. далее утверждение 13.4).

В дальнейшем полагаем $m(\mathbf{x}) \equiv 0$ и $\mathbf{D}(\mathbf{x}) \equiv 1$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 13.9 (см, например, [39]). *Соотношение (13.17) называется спектральным представлением стационарной случайной функции $\xi(\mathbf{x})$.*

Для вещественнозначных случайных функций $\xi(\mathbf{x})$ спектральная плотность $f(\boldsymbol{\lambda})$ является четной по каждой координате функции:

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{\lambda}) &= f(\lambda^{(1)}, \dots, \lambda^{(i-1)}, \lambda^{(i)}, \lambda^{(i+1)}, \dots, \lambda^{(l)}) = \\ &= f(\lambda^{(1)}, \dots, \lambda^{(i-1)}, -\lambda^{(i)}, \lambda^{(i+1)}, \dots, \lambda^{(l)}). \end{aligned}$$

Кроме того, мнимая часть $\Psi(\boldsymbol{\lambda})$ – нечетная, а действительная часть – четная функция от $\boldsymbol{\lambda}$, т. е. для симметричных относительно начала координат областей A_1 и A_2 ($\boldsymbol{\lambda} \in A_1 \iff -\boldsymbol{\lambda} \in A_2$) выполнено $\int_{A_1} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) = \left(\int_{A_2} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \right)^*$, причем для сохранения некоррелированности необходимо, чтобы случайные величины

$$\psi^{(1)} = \operatorname{Re} \int_{A_1} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \quad \text{и} \quad \psi^{(2)} = \operatorname{Im} \int_{A_1} d\Psi(\boldsymbol{\lambda})$$

были независимы для любого $\boldsymbol{\lambda} \in \Lambda$ и

$$\mathbf{E}\psi^{(1)} = \mathbf{E}\psi^{(2)} = 0, \quad \mathbf{D}\psi^{(1)} = \mathbf{D}\psi^{(2)} = \frac{1}{2} \int_{A_1} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}.$$

Тогда выражения (13.16) и (13.17) имеют вид:

$$\begin{aligned} R(\mathbf{u}) &= \int_{\Lambda} \cos(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} = 2 \int_{\Lambda_+} \cos(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}, \\ \xi(\mathbf{x}) &= \int_{\Lambda_+} \cos(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) d\Psi^{(1)}(\boldsymbol{\lambda}) + \int_{\Lambda_+} \sin(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) d\Psi^{(2)}(\boldsymbol{\lambda}), \end{aligned} \quad (13.19)$$

где $\Lambda_+ = \{\boldsymbol{\lambda} = (\lambda^{(1)}, \dots, \lambda^{(l)}) : \lambda^{(i)} \geq 0\}$, а $\Psi^{(1)}(\boldsymbol{\lambda})$ и $\Psi^{(2)}(\boldsymbol{\lambda})$ – вещественные случайные функции с некоррелированными приращениями и совпадающими дисперсиями приращений, причем

$$\Psi(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{\Psi^{(1)}(\boldsymbol{\lambda}) - \Psi^{(2)}(\boldsymbol{\lambda})}{2} \quad \text{при } \boldsymbol{\lambda} \in \Lambda_+.$$

Последние соотношения показывают, что в вещественнозначном случае формулы для спектрального разложения корреляционной функции и для спектрального представления случайной функции действительно являются более громоздкими, чем в комплекснозначном случае.

Утверждение о существовании спектрального представления (13.17) формулируется следующим образом.

УТВЕРЖДЕНИЕ 13.4 (см, например, [39]). *Если $\Lambda_1, \dots, \Lambda_n$ – разбиение спектрального пространства Λ на простые пространственно-односвязные области такие, что $\Lambda_i \cap \Lambda_j = \emptyset$ при $i \neq j$; $\Lambda_n = \{|\boldsymbol{\lambda}| \geq t_n\}$, а $\Lambda_1, \dots, \Lambda_{n-1}$ разбивают область $\{|\boldsymbol{\lambda}| < t_n\}$ так, что при $n \rightarrow \infty$ одновременно выполнено*

$$t_n \rightarrow +\infty \quad \text{и} \quad \max_{1 \leq k \leq n-1} \text{diam } \Lambda_k \rightarrow 0, \quad (13.20)$$

то имеет место соотношение

$$\int_{\Lambda} e^{i(\mathbf{t}, \boldsymbol{\lambda})} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) = \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \left(e^{i(\mathbf{t}, \boldsymbol{\lambda}_k)} \int_{\Lambda_k} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \right) \quad \text{или} \quad (13.21)$$

$$\mathbf{E} \left[\int_{\Lambda} e^{i(\mathbf{t}, \boldsymbol{\lambda})} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) - \sum_{k=1}^n \left(e^{i(\mathbf{t}, \boldsymbol{\lambda}_k)} \int_{\Lambda_k} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \right) \right]^2 \rightarrow 0 \quad \text{при } n \rightarrow \infty;$$

здесь $\boldsymbol{\lambda}_k \in \Lambda_k$.

Утверждение 13.4 доказывается с помощью предельного перехода от случая конечного спектра (который соответствует стохастической интегральной сумме из правой части равенства (13.21)).

Утверждение 13.4 наводит на мысль *использовать в качестве численной модели однородного случайного поля $\xi(\mathbf{x})$ с нулевым средним и единичной дисперсией допредельную интегральную сумму*

$$\xi_n(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^n \theta_k e^{i(\mathbf{t}, \boldsymbol{\lambda}_k)}, \quad \theta_k = \int_{\Lambda_k} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}). \quad (13.22)$$

Модель такого вида мы назовем *спектральной*.

Обычно спектральная модель (13.22) используется для моделирования *только гауссовских случайных полей*. Это связано с тем, что моделируемые на ЭВМ выборочные значения θ_k из (13.22) *независимы*, а в этом случае при выполнении условий (13.20) конечномерные распределения модели (13.22) сходятся к гауссовским распределениям вида (13.9) при $n \rightarrow \infty$ (это следует из центральной предельной теоремы для случайных функций [38, 39]).

Поэтому уже в допредельных выражениях вида (13.22) берут

$$\theta_k = \sqrt{p_k} \tilde{\xi}_k^{(0,1)}, \quad p_k = \int_{\Lambda_k} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda}. \quad (13.23)$$

Здесь $\tilde{\xi}_k^{(0,1)}$ – независимые стандартные нормальные комплексные случайные величины.

Для вещественнозначных функций вида (13.19) аналог модели (13.22), (13.23) имеет вид

$$\xi_n(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^n \sqrt{p_k} [\xi_k^{1(0,1)} \cos(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}_k) + \xi_k^{2(0,1)} \sin(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}_k)]; \quad \boldsymbol{\lambda}_k \in \Lambda_k. \quad (13.24)$$

Заметим также, что если для моделирования пары значений $\xi_k^{1(0,1)}, \xi_k^{2(0,1)}$ использовать формулы Бокса – Мюллера (13.4), то соотношение (13.24) приобретает следующий, удобный для непосредственных вычислений на ЭВМ, вид:

$$\xi_n(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^n (-2 p_k \ln \alpha_{k,1})^{1/2} \cos((\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{x}) - 2 \pi \alpha_{k,2}); \quad \alpha_{k,1}, \alpha_{k,2} \in U(0, 1). \quad (13.25)$$

Модели (13.22)–(13.25) воспроизводят одномерное распределение: при фиксированном \mathbf{x}_0 случайная величина $\xi_n(\mathbf{x}_0)$ имеет гауссовское распределение (ведь выражения (13.22), (13.24) представляют собой линейные комбинации стандартных гауссовских случайных величин). Несложно убедиться в том, что $\mathbf{E}\xi_n(\mathbf{x}_0) = 0$ и $\mathbf{D}\xi_n(\mathbf{x}_0) = 1$.

Многомерные распределения полей (13.22)–(13.25) являются гауссовскими, однако эти распределения не совпадают с соответствующими конечномерными распределениями поля $\xi(\mathbf{x})$. Можно лишь утверждать, что при $n \rightarrow \infty$ и $p_k \rightarrow 0$ все конечномерные распределения моделей (13.22)–(13.25) сходятся к соответствующим распределениям гауссовского случайного поля $\xi(\mathbf{x})$ [9, 26].

В качестве иллюстрации несовпадения конечномерных распределений полей $\xi_n(\mathbf{x})$ и $\xi(\mathbf{x})$ можно использовать соотношения (13.16) и

$$R_{\xi_n}(\mathbf{u}) = \sum_{k=1}^n p_k e^{i(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_k)},$$

показывающие, что характеристики двумерных распределений этих полей – корреляционные функции $R_{\xi_n}(\mathbf{u})$ и $R(\mathbf{u})$, вообще говоря, не равны.

Тем не менее, имеется прием (предложенный в свое время Г. А. Михайловым), позволяющий добиться совпадения корреляционных функций $R_{\xi_n}(\mathbf{u})$ и $R(\mathbf{u})$.

В каждом элементе Λ_k разбиения спектрального пространства реализуем выборочное значение $\boldsymbol{\lambda}_k$, распределенное согласно усеченному распределению:

$$\boldsymbol{\lambda}_k \sim f_k(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{f(\boldsymbol{\lambda})}{p_k}. \quad (13.26)$$

Для полученного набора $\{\boldsymbol{\lambda}_1, \dots, \boldsymbol{\lambda}_n\}$ моделируем траекторию случайного поля $\xi_n(\mathbf{x})$ по формуле (13.22).

Соотношения (13.22), (13.26) определяют *рандомизированную спектральную модель однородного гауссовского случайного поля*.

Учитывая соотношение (13.26) и описанные выше свойства случайной меры $\Psi(\boldsymbol{\lambda})$ (в частности, соотношение (13.18)), имеем:

$$\begin{aligned} R_{\xi_n}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\lambda}, \Psi} \left(\sum_{k,j=1}^n e^{i(\boldsymbol{\lambda}_k, \mathbf{x}_1) - i(\boldsymbol{\lambda}_j, \mathbf{x}_2)} \int_{\Lambda_k} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \left(\int_{\Lambda_j} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \right)^* \right) = \\ &= \mathbf{E}_{\boldsymbol{\lambda}, \Psi} \left(\sum_{i=1}^n e^{i(\boldsymbol{\lambda}_i, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \left| \int_{\Lambda_i} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \right|^2 \right) = \sum_{k=1}^n \left(\mathbf{E}_{\Psi} \left| \int_{\Lambda_k} d\Psi(\boldsymbol{\lambda}) \right|^2 \times \right. \\ &\quad \left. \times \int_{\Lambda_k} e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \frac{f(\boldsymbol{\lambda})}{p_k} d\boldsymbol{\lambda} \right) = \sum_{k=1}^n \int_{\Lambda_k} e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} = \\ &= \int_{\Lambda} e^{i(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} f(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} = R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \end{aligned}$$

Условное одномерное распределение рандомизированной модели (13.22), (13.26) при фиксированных значениях $\{\boldsymbol{\lambda}_1, \dots, \boldsymbol{\lambda}_n\}$ является

стандартным гауссовским; следовательно, одномерное распределение рандомизированного поля $\xi_n(\mathbf{x})$ тоже стандартно.

Аналогичные соображения показывают, что многомерные распределения рандомизированной модели (13.22), (13.26) не являются гауссовскими. Поле $\xi_n(\mathbf{x})$ однородно, но не эргодично. Эти недостатки ослабевают при $n \rightarrow \infty$ и при равномерном измельчении спектрального пространства Λ .

Отметим также, что в книге [40] представлены содержательные примеры использования спектральных моделей вида (13.24), (13.25) (в частности, для моделирования морской поверхности, кучевой облачности и др.).

14. Технологии конструирования моделируемых вероятностных плотностей. Экзаменационные и домашние задания

14.1. Формирование «банка» моделируемых плотностей. Экзаменационные задачи. Семестровое домашнее задание. Возвращаясь к рассуждениям подраздела 2.8, отметим, что при использовании практически всех алгоритмов численного статистического моделирования происходит *выбор или конструирование моделируемых вероятностных распределений*.

В связи с этим целесообразно заняться созданием «банка» (объемного набора) распределений, допускающих построение эффективных алгоритмов численного моделирования.

Формированию этого набора могут существенно помочь представленные в этом разделе *технологии конструирования моделируемых вероятностных плотностей*.

Исторически эти технологии разрабатывались для создания *экзаменационных задач* данного курса. Задачи создавались по пяти темам:

- А) «Метод обратной функции распределения»,
- Б) «Моделирование двумерного вектора»,
- В) «Метод дискретной суперпозиции»,
- Г) «Мажорантный метод исключения»,
- Д) «Выборка по важности».

Кроме того, опыт преподавания теории методов Монте-Карло на физическом и механико-математическом факультетах Новосибирского государственного университета показал полезность выполнения студен-

тами следующего творческого домашнего задания по перечисленным темам А–Д.

СЕМЕСТРОВОЕ ДОМАШНЕЕ ЗАДАНИЕ [13, 41]. *Приведите к примеров d -мерных случайных величин, выборочные значения которых целесообразно получать:*

А) методом обратной функции распределения, $k = 2, d = 1$;

Б) стандартным методом моделирования многомерной случайной величины, $k = 2, d = 2$;

В.1) методом интегральной суперпозиции, $k = 1, d = 1$;

В.2) методом дискретной суперпозиции, $k = 2, d = 1$;

Г.1) мажорантным методом исключения, $k = 2, d = 1$;

Г.2) мажорантным методом исключения, $k = 1, d = 2$.

Опишите соответствующие алгоритмы, а для пунктов Г.1, Г.2 оцените сверху трудоемкость построенных алгоритмов.

Д) Приведите три примера четырехкратных интегралов, которые целесообразно вычислять методом Монте-Карло с использованием выборки по важности. Оцените сверху дисперсию соответствующих стохастических оценок метода Монте-Карло.

Примеры выполнения задания и рекомендации по конструированию таких примеров приведены далее в материалах данного раздела 14.

Задачи оцениваются от нуля до трех баллов (таким образом, максимальный суммарный балл за все задание – 39). Примеры такого оценивания приведены в тексте данного пособия после заголовков примеров и задач. Студенты, набравшие 20 и более баллов, заслуживают поощрения в конце семестра (допуск до досрочного экзамена, отсутствие задачи в экзаменационном билете и т. п.). Лучшие примеры, составленные студентами, могут быть использованы преподавателем при подготовке экзаменационных задач.

Если курс подразумевает семинары, то содержание данного раздела целесообразно обсуждать на этих семинарах (в связи с этим материал раздела 14 дан «с избытком» – по объему больше того, что можно разобрать за два академических часа). Возможный план таких семинаров приведен в приложении 3. Особо отметим, что целесообразным является организация одного из семинаров в компьютерном классе с целью изучения «правильности» полученных студентами в ходе выполнения домашнего задания моделируемых распределений (с помощью построения гистограмм этих распределений).

14.2. Технология последовательных (вложенных) замен. Решение и конструирование задач по теме «Метод обратной функции распределения». Первым делом рассмотрим возможности конструирования *элементарных* одномерных плотностей $f_\xi(u)$ непрерывной случайной величины $\xi \in (a, b)$ (см. подраздел 2.6 данного пособия), для которых уравнение

$$\int_a^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0, \quad \alpha_0 \in U(0, 1) \quad (14.1)$$

(см. также соотношение (2.16)) разрешимо относительно верхнего предела интеграла ξ_0 в элементарных функциях:

$$\xi_0 = \psi_\xi(\alpha_0), \quad (14.2)$$

где $\psi_\xi(\cdot)$ – композиция элементарных функций или преобразований, эффективно реализуемых на ЭВМ, а $\alpha_0 \in U(0, 1)$ – стандартное случайное число. Здесь возможно эффективное применение следующей **технологии последовательных (вложенных) замен**.

ТЕХНОЛОГИЯ А [9, 13]. Пусть $f_\eta(v)$ – плотность случайной величины η , имеющей элементарное распределение в интервале (c, d) , т. е. из соотношения вида (14.1)

$$\int_c^{\eta_0} f_\eta(v) dv = \alpha_0, \quad \alpha_0 \in U(0, 1)$$

для соответствующего выборочного значения η_0 случайной величины η можно получить формулу вида (14.2): $\eta_0 = \psi_\eta(\alpha_0)$, где $\psi_\eta(w)$ – простая композиция элементарных функций.

Рассмотрим взаимно-однозначное преобразование, задаваемое монотонно возрастающей дифференцируемой функцией $\varphi(u) \uparrow$ и переводящее интервал (a, b) в интервал (c, d) ; при этом $\varphi(a) = c$, $\varphi(b) = d$. Полагаем также, что саму функцию $\varphi(u)$, ее производную $\varphi'(u)$ и обратную к функции $\varphi^{-1}(y)$ можно представить в виде простых композиций элементарных функций.

Пусть случайная величина ξ имеет плотность распределения

$$f_\xi(u) = f_\eta(\varphi(u)) \varphi'(u), \quad u \in (a, b). \quad (14.3)$$

При сделанных выше предположениях можно утверждать, что $f_\xi(u)$ является плотностью элементарного распределения, т. е. уравнение (14.1) разрешимо относительно ξ_0 в элементарных функциях, и справедлива формула $\xi_0 = \varphi^{-1}[\psi_\eta(\alpha_0)]$.

Действительно, записывая уравнение (14.1) для плотности (14.3), имеем

$$\int_a^{\xi_0} f_\eta(\varphi(u)) \varphi'(u) du = \alpha_0, \quad \text{или} \quad \int_{\varphi(a)}^{\varphi(\xi_0)} f_\eta(v) dv = \alpha_0,$$

$$\text{или} \quad \varphi(\xi_0) = \psi_\eta(\alpha_0), \quad \text{или} \quad \xi_0 = \varphi^{-1}(\psi_\eta(\alpha_0)). \quad (14.4)$$

Название *технология последовательных (вложенных) замен* для технологии А здесь связано с тем, что, полученную плотность (14.3) можно взять в качестве исходной плотности $f_\eta(v)$ и осуществить еще одно взаимно-однозначное преобразование типа $\varphi(u)$. С помощью таких вложенных замен можно получать неограниченное количество новых плотностей элементарных распределений (см. приведенные здесь примеры, а также замечание 2.5).

Заметим, что при обосновании элементарности плотности (14.3) используется по сути фрагмент доказательства одномерной версии утверждения 6.2 (теоремы о замене случайных переменных).

ЗАМЕЧАНИЕ 14.1. При применении технологии А можно применять не возрастающую, а *убывающую* функцию $\varphi(x) \downarrow: (a, b) \rightarrow (c, d)$, для которой $\varphi(a) = d$, $\varphi(b) = c$. При этом аналог плотности (14.3) строится по формуле

$$f_\xi(u) = f_\eta(\varphi(u)) |\varphi'(u)|, \quad u \in (a, b), \quad (14.5)$$

а аналог выкладок, приводящих к моделирующей формуле (14.4), выглядит следующим образом:

$$\int_a^{\xi_0} f_\eta(\varphi(u)) |\varphi'(u)| du = \alpha_0, \quad \text{или} \quad \int_{\varphi(\xi_0)}^{\varphi(a)} f_\eta(v) dv = \alpha_0, \quad \text{или}$$

$$1 - \int_c^{\varphi(\xi_0)} f_\eta(v) dv = \alpha_0, \quad \text{или} \quad \varphi(\xi_0) = \psi_\eta(1 - \alpha_0), \quad \text{или} \quad \xi_0 = \varphi^{-1}(\psi_\eta(\alpha'_0)),$$

$$(14.6)$$

где $\alpha'_0 = 1 - \alpha_0$.

Иллюстрацией применения технологии А является выбор плотности

$$f_{\mu^{(m)}}(u) = \frac{1 - c_0^2}{2(1 + c_0^2 - 2c_0 u)^{3/2}} \quad \text{при} \quad u, c_0 \in (-1, +1) \quad (14.7)$$

случайного косинуса угла рассеяния $\mu^{(m)}$ в *индикатрисе Хенъи – Гринштейна* (см. подраздел 6.5 и формулу (6.44)). Здесь исходным является

аналог усеченного распределения Парето с плотностью

$$f_{\eta}(v) = [c^s d^s / (d^s - c^s)] s v^{-s-1}, \quad 0 < c < v < d, \quad s > 0$$

при $c = (1 - |c_0|)^2$, $d = (1 + |c_0|)^2$, $s = 1/2$ (для классического *распределения Парето* $c = 1, d = +\infty$) и с моделирующей формулой $\eta_0 = cd / \sqrt[2]{d^s - (d^s - c^s)\alpha_0}$. Использована замена $v = \varphi(u) = 1 + c_0^2 - 2c_0u$, приводящая к плотности (14.7) и моделирующей формуле

$$\mu_0^{(m)} = \frac{1}{2c_0} \left[1 + c_0^2 - \left(\frac{1 - c_0^2}{2c_0\alpha_0 + 1 - c_0} \right)^2 \right],$$

см. подраздел 6.5.

Продemonстрируем еще один пример применения технологии А.

ПРИМЕР А1 (1 балл; [9, 13]). Пусть требуется построить формулу метода обратной функции распределения для выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_{\xi}(u) = \exp u \times \exp(-\exp u), \quad -\infty < u < +\infty. \quad (14.8)$$

Это плотность *экстремального (точнее, минимального) распределения* (см., например, [35]), описывающая одно из трех возможных асимптотических распределений линейных комбинаций вида

$$a_n \min \{ \eta^{(1)}, \dots, \eta^{(n)} \} + b_n \quad (14.9)$$

при $a_n \neq 0$, $n \rightarrow \infty$; здесь a_n, b_n – числовые последовательности, а $\{ \eta^{(i)} \}$ – независимые одинаково распределенные случайные величины.

Выведем моделирующую формулу для выборочного значения ξ_0 . Решая уравнение (14.1) для плотности (14.8), последовательно получаем:

$$\int_{-\infty}^{\xi_0} \exp u \exp(-\exp u) du = \alpha_0, \quad \int_0^{\exp \xi_0} \exp(-v) dv = \alpha_0,$$

$$-\exp(-\exp \xi_0) + 1 = \alpha_0 \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \ln(-\ln \alpha_0'), \quad (14.10)$$

где $\alpha_0' = 1 - \alpha_0$.

В этом разделе, как и ранее, мы будем следовать замечанию 2.9 и **для каждой формулы, полученной методом обратной функции распределения** (кроме табличных – см. замечание 2.8) **проводить проверку 2.1**, связанную с подстановкой в формулу вида (14.2)

$\alpha_0 = 0$ (при этом должно получиться $\xi_0 = a$) и $\alpha_0 = 1$ (при этом должно получиться $\xi_0 = b$).

В частности, для полученной в этом примере формулы (14.10) проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\alpha'_0 = 1$ и $\xi_0 = \ln(-\ln 1) = -\infty$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\alpha'_0 = 0$ и $\xi_0 = \ln(-\ln 0) = +\infty$.

Применение технологии А для плотности (14.8) можно описать следующим образом. Исходным являлось *экспоненциальное распределение* (2.18) для случая $\lambda = 1$, т. е. $f_\eta(v) = e^{-v}$, $v > 0$; соответствующая моделирующая формула имеет вид (2.20): $\eta_0 = -\ln \alpha'_0$. Затем использована замена $v = \varphi(u) = e^u$, $-\infty < u < +\infty$.

Заметим также, что два других (отличных от (14.8)) возможных асимптотических распределения линейных комбинаций вида (14.9) (см., например, [35]) также являются элементарными. Это *распределение Вейбулла* с плотностью

$$f_{\xi^{(1)}}(u) = u^{c-1} \exp(-u^c), \quad u > 0, \quad c > 0 \quad (14.11)$$

и моделирующей формулой $\xi_0^{(1)} = (-\ln \alpha_0)^{1/c}$, а также распределение с плотностью

$$f_{\xi^{(2)}}(u) = c(-u)^{c-1} \exp(-(-u)^c), \quad u < 0, \quad c > 0 \quad (14.12)$$

и моделирующей формулой $\xi_0^{(2)} = -(-\ln \alpha_0)^{1/c}$.

Применение технологии А для плотностей (14.11) и (14.12) можно описать следующим образом. Исходным, как и для распределения с плотностью (14.8), являлось экспоненциальное распределение (2.18): $f_\eta(v) = e^{-v}$, $v > 0$ с моделирующей формулой (2.20): $\eta_0 = -\ln \alpha_0$. Затем использованы замены: для плотности (14.11) $v = \varphi(u) = u^c$, $u > 0$, а для плотности (14.12) $v = \varphi(u) = (-u)^c$, $u < 0$. Описание примера А1 закончено.

Теперь разберем *экзаменационные задачи по теме «Метод обратной функции распределения»*. Эти задачи сконструированы согласно технологии А. Соответственно, при их решении нужно найти функцию $\varphi(u)$, определяющую нужную замену переменных, и проделать выкладки вида (14.4) или (14.6). Окончательные моделирующие формулы следует проверять (как минимум с помощью проверки 2.1 – см. замечание 2.9), а также представлять в наиболее экономичном для расчетов виде (см. замечания 2.6, 2.7).

ПРИМЕР А2 (1,5 балла). Рассмотрим характерный пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА А1(1). *Сформулируйте метод обратной функции распределения и продемонстрируйте его на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения*

$$f_{\xi}(u) = 3 \sin 2u \sin^4 u, \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}. \quad (14.13)$$

РЕШЕНИЕ. Преобразуя соответствующее уравнение (14.1) для плотности (14.13), последовательно получаем

$$\int_0^{\xi_0} 3 \sin 2u \sin^4 u \, du = \alpha_0, \quad \int_0^{\xi_0} 6 \sin^5 u \cos u \, du = \alpha_0, \quad \sin^6 u \Big|_0^{\xi_0} = \alpha_0,$$

$$\sin^6 \xi_0 = \alpha_0 \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \arcsin \sqrt[6]{\alpha_0}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = \arcsin \sqrt[6]{0} = 0$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = \arcsin \sqrt[6]{1} = \pi/2$. Решение задачи А1(1) закончено.

Применение технологии А для плотности (14.13) можно описать следующим образом. Исходным являлось степенное распределение (2.21): $f_{\eta}(v) = 6v^5$; $0 < v < 1$ с моделирующей формулой (2.22): $\eta_0 = \sqrt[6]{\alpha_0}$, а затем использовано преобразование, описываемое *возрастающей* функцией $\varphi(u) \uparrow = \sin u$; $0 < u < \pi/2$. Кроме того, использована формула двойного угла $\sin 2u = 2 \sin u \cos u$.

Рассмотрим также следующий аналог задачи А1(1).

ЗАДАЧА А1(2) [13]. *Сформулируйте метод обратной функции распределения и продемонстрируйте его на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения*

$$f_{\xi}(u) = 3 \sin 2u \cos^4 u, \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}. \quad (14.14)$$

РЕШЕНИЕ. Преобразуя соответствующее уравнение (14.1) для плотности (14.14), последовательно получаем

$$\int_0^{\xi_0} 3 \sin 2u \cos^4 u \, du = \alpha_0, \quad \int_0^{\xi_0} 6 \cos^5 u \sin u \, du = \alpha_0, \quad -\cos^6 u \Big|_0^{\xi_0} = \alpha_0,$$

$$\cos^6 \xi_0 = 1 - \alpha_0 \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \arccos \sqrt[6]{\alpha'_0}, \quad \text{где} \quad \alpha'_0 = 1 - \alpha_0.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\alpha'_0 = 1$ и $\xi_0 = \arccos \sqrt[6]{1} = 0$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\alpha'_0 = 0$ и $\xi_0 = \arccos \sqrt[6]{0} = \pi/2$. Решение задачи А1(2) закончено.

Применение технологии А для плотности (14.14) практически полностью аналогично задаче А1(1), только на сей раз использована убывающая функция $\varphi(u) \downarrow = \cos u$; $0 < u < \pi/2$. Таким образом, задача А1(2) является иллюстрацией для замечания 14.1 и соответствующих формул (14.5), (14.6). Описание примера А2 закончено.

ПРИМЕР А3 (1,5 балла). Рассмотрим еще один пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА А2 [13]. *Сформулируйте метод обратной функции распределения и продемонстрируйте его на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения*

$$f_{\xi}(u) = \frac{5 \ln^4 5u}{u}, \quad \frac{1}{5} < u < \frac{e}{5}. \quad (14.15)$$

РЕШЕНИЕ. Преобразуя соответствующее уравнение (14.1) для плотности (14.15), последовательно получаем

$$\int_{1/5}^{\xi_0} \frac{5 \ln^4 5u}{u} du = \alpha_0, \quad \int_1^{5\xi_0} 5 \ln^4 w d(\ln w) = \alpha_0, \quad \ln^5 5u \Big|_{1/5}^{\xi_0} = \alpha_0,$$

$$\ln^5 5\xi_0 = \alpha_0, \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \frac{e^{\sqrt[5]{\alpha_0}}}{5}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = e^{\sqrt[5]{0}}/5 = 1/5$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = e^{\sqrt[5]{1}}/5 = e/5$. Решение задачи А3 закончено.

Применение технологии А для плотности (14.15) можно описать следующим образом. Исходным являлось степенное распределение (2.21): $f_{\eta}(v) = 5v^4$; $0 < v < 1$ с моделирующей формулой (2.22): $\eta_0 = \sqrt[5]{\alpha_0}$, а затем использовано преобразование, описываемое функцией $\varphi(u) = \ln 5u$; $0 < u < e/5$. Описание примера А3 закончено.

ПРИМЕР А4 (1,5 балла). Рассмотрим заключительный пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА А3 [13]. *Сформулируйте метод обратной функции распределения и продемонстрируйте его на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения*

$$f_{\xi}(u) = \frac{4u^3}{\sqrt{4u^4 + 9}}, \quad 0 < u < \sqrt{2}. \quad (14.16)$$

РЕШЕНИЕ. Преобразуя соответствующее уравнение (14.1) для плотности (14.16), последовательно получаем

$$\int_0^{\xi_0} \frac{4u^3 du}{\sqrt{4u^4 + 9}} = \alpha_0, \quad \frac{1}{4} \int_9^{4\xi_0^4+9} \frac{dw}{\sqrt{w}} = \alpha_0, \quad \left. \frac{\sqrt{4u^4 + 9}}{2} \right|_0^{\xi_0} = \alpha_0,$$

$$\sqrt{4\xi_0^4 + 9} = 2\alpha_0 + 3, \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \sqrt[4]{\frac{(2\alpha_0 + 3)^2 - 9}{4}} = \sqrt[4]{\alpha_0^2 + 3\alpha_0}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = \sqrt[4]{0^2 + 3 \times 0} = 0$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = \sqrt[4]{1^2 + 3 \times 1} = \sqrt{2}$. Решение задачи А3 закончено.

Применение технологии А для плотности (14.16) можно описать следующим образом. Исходным являлось степенное распределение $f_\eta(v) = 1/(4\sqrt{v})$; $9 < v < 25$ с моделирующей формулой $\eta_0 = (2\alpha_0 + 3)^2$, а затем использовано преобразование, описываемое функцией $\varphi(u) = 4u^4 + 9$; $0 < u < 1/\sqrt{2}$. Описание примера А4 закончено.

Теперь обсудим **выполнение пункта А семестрового домашнего задания (СДЗ)**. Можно заметить, что приводимые до этого примеры по этому пункту – примеры 2.1, 2.2, 11.7, А1–А4 (за исключением плотности (14.7) и соответствующей ей моделирующей формулы) – имели относительно низкие оценки СДЗ. Причина в том, что соответствующие примеры представляли либо *табличные плотности* (как в примерах 2.1, 2.2 – см. замечание 2.8), либо *экзаменационные задачи* (как в примерах А2–А4).

Важными при выполнении СДЗ являются следующие соображения.

ЗАМЕЧАНИЕ 14.2 [13] При выполнении СДЗ элементарные плотности нужны не только в пункте А, непосредственно посвященном методу обратной функции распределения, но и *во всех остальных пунктах*. Так, для каждого примера пунктов Б, В.1 СДЗ при использовании технологии Б (см. далее подразделы 14.3, 14.4) требуются две элементарные плотности (одна из которых – с параметром); также два моделируемых распределения, сосредоточенных на одном и том же интервале, нужны при применении технологии В (см. далее подраздел 14.4) в пункте В.2; элементарная плотность, пропорциональная мажоранте, выбирается при применении технологии Г (см. далее подраздел 14.5) в пункте Г.1 СДЗ, а в соответствующем двумерном случае (пункт Г.2 СДЗ) требуются два элементарных распределения; наконец, в пункте Д СДЗ в каждом примере выбираются по четыре элементарных плотности распределения (для компонент используемого четырехмерного случайного вектора).

Итого требуется около трех десятков элементарных плотностей, причем для получения высокой оценки за задание следует стремиться к тому, чтобы все эти функции были разными и отличались от элементарных плотностей, используемых в известных пособиях.

Такую возможность дает последовательное применение преобразований $\varphi(u)$ в технологии А (недаром это технология последовательных, вложенных замен). Здесь, однако, не следует использовать более трех вложенных замен (желательно, чтобы и сами плотности, и моделирующие формулы оставались «обозримыми», компактными).

Приведем примеры плотностей, которые можно оценить высокими баллами в рамках СДЗ.

ПРИМЕР А5 (2,5 балла; [13]). Пусть требуется построить формулу метода обратной функции распределения для выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_\xi(u) = \frac{3\sqrt{3} \cos u}{\pi(\sin^2 u + \sin u + 1)}, \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}. \quad (14.17)$$

Выведем моделирующую формулу для ξ . Решая уравнение (14.1) для плотности (14.17), последовательно получаем:

$$\int_0^{\xi_0} \frac{3\sqrt{3} \cos u \, du}{\pi(\sin^2 u + \sin u + 1)} = \alpha_0, \quad \int_0^{\xi_0} \frac{3\sqrt{3} d(\sin u + 1/2)}{\pi[(\sin u + 1/2)^2 + 3/4]} = \alpha_0,$$

$$\frac{6}{\pi} \int_{1/2}^{\sin \xi_0 + 1/2} \frac{d(2v/\sqrt{3})}{(2v/\sqrt{3})^2 + 1} = \alpha_0, \quad \frac{6}{\pi} \int_{1/\sqrt{3}}^{2(\sin \xi_0 + 1/2)/\sqrt{3}} \frac{dw}{w^2 + 1} = \alpha_0,$$

$$\frac{6}{\pi} \operatorname{arctg} \left[\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\sin \xi_0 + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{6}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{3}} = \alpha_0,$$

$$\operatorname{arctg} \left[\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\sin \xi_0 + \frac{1}{2} \right) \right] = \frac{\pi}{6} (\alpha_0 + 1)$$

и, наконец,

$$\xi_0 = \arcsin \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \operatorname{tg} \left(\frac{\pi}{6} (\alpha_0 + 1) \right) - \frac{1}{2} \right]. \quad (14.18)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = \arcsin [(\sqrt{3}/2) \operatorname{tg}(\pi/6) - 1/2] = \arcsin 0 = 0$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = \arcsin [(\sqrt{3}/2) \operatorname{tg}(\pi/3) - 1/2] = \arcsin 1 = \pi/2$.

Схема «сочинения» плотности (14.17) такова. Берем исходную плотность

$$f_{\theta}(w) = \frac{6}{\pi(w^2 + 1)}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} < w < \sqrt{3}$$

с моделирующей формулой $\theta_0 = \text{tg}[\pi(\alpha_0 + 1)/6]$. Используя линейное преобразование $\varphi^{(1)}(v) = (2/\sqrt{3})(v + 1/2)$, получаем плотность

$$f_{\eta}(v) = \frac{4\sqrt{3}}{\pi[(2(v + 1/2)/\sqrt{3})^2 + 1]}, \quad 0 < v < 1$$

и моделирующую формулу $\eta_0 = (\sqrt{3} \text{tg}[\pi(\alpha_0 + 1)/6] - 1)/2$. Наконец, преобразование $\varphi^{(2)}(u) = \sin u$ дает плотность (14.17) и моделирующую формулу (14.18). Описание примера А5 закончено.

Отметим, что порядок преобразований при «сочинении» плотности является обратным к порядку замен при выводе элементарной моделирующей формулы. В дальнейшем, если плотность конструируется согласно технологии А, мы будем приводить только вывод моделирующих формул, не формулируя достаточно очевидных соображений о «сочинении» плотности.

Внимание: *при выполнении семестрового домашнего задания не нужно описывать процедуры «сочинения» элементарных плотностей на основе последовательных замен $\varphi(u)$, т. е. соответствующие примеры должны быть оформлены, как следующие примеры А6 и А7.*

ПРИМЕР А6 (3 балла; [13]). Пусть требуется построить формулу метода обратной функции распределения для выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_{\xi}(u) = \frac{3}{(u + 3)\sqrt{9 - u^2}}, \quad 0 < u < 3.$$

Решая уравнение (14.1) для заданной плотности, последовательно получаем:

$$\int_0^{\xi_0} \frac{3 du}{(u + 3)\sqrt{9 - u^2}} = \alpha_0, \quad \int_0^{\xi_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3 + u}{3 - u}} \times \frac{6}{(u + 3)^2} du = \alpha_0,$$

$$\int_0^{\xi_0} \frac{1}{2\sqrt{\frac{3-u}{3+u}}} d\left(-\frac{3-u}{3+u}\right) = \alpha_0, \quad - \int_1^{(3-\xi_0)/(3+\xi_0)} \frac{dv}{2\sqrt{v}} = \alpha_0,$$

$$-\sqrt{\frac{3-\xi_0}{3+\xi_0}} + 1 = \alpha_0, \quad \frac{3-\xi_0}{3+\xi_0} = (\alpha'_0)^2, \quad \text{где } \alpha'_0 = 1 - \alpha_0,$$

и, наконец,

$$\xi_0 = \frac{3(1 - (\alpha'_0)^2)}{1 + (\alpha'_0)^2}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\alpha'_0 = 1$ и $\xi_0 = 3(1 - 1^2)/(1 + 1^2) = 0$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\alpha'_0 = 0$ и $\xi_0 = 3(1 - 0^2)/(1 + 0^2) = 3$. Описание примера А6 закончено.

ПРИМЕР А7 (3 балла; [13]). Пусть требуется построить формулу метода обратной функции распределения для выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_\xi(u) = \frac{8 \sin u \cos u}{(\sin u + 1)^3}, \quad 0 < u < \pi/2.$$

Решая уравнение (14.1) для заданной плотности, последовательно получаем:

$$\begin{aligned} \int_0^{\xi_0} \frac{8 \sin u \cos u \, du}{(\sin u + 1)^3} &= \alpha_0, & \int_0^{\xi_0} \frac{8 \sin u \, d \sin u}{(\sin u + 1)^3} &= \alpha_0, \\ \int_0^{\sin \xi_0} \frac{((8v + 8) - 8) \, dv}{(v + 1)^3} &= \alpha_0, & \int_0^{\sin \xi_0} \frac{8 \, d(v + 1)}{(v + 1)^2} - \int_0^{\sin \xi_0} \frac{8 \, d(v + 1)}{(v + 1)^3} &= \alpha_0, \\ \left(\frac{4}{(\sin \xi_0 + 1)^2} - 4 \right) + \left(-\frac{8}{\sin \xi_0 + 1} + 8 \right) &= \alpha_0, & t^2 - 2t - C &= 0, \end{aligned}$$

где $t = 1/(\sin \xi_0 + 1)$ и $C = (\alpha_0 - 4)/4$. Дискриминант последнего квадратного уравнения равен $D = 4 + \alpha_0 - 4 = \alpha_0$. Тогда получаем

$$\frac{1}{\sin \xi_0 + 1} = \frac{2 \pm \sqrt{\alpha_0}}{2} \quad \text{или} \quad \sin \xi_0 = \frac{2}{2 \pm \sqrt{\alpha_0}} - 1 = \frac{\mp \sqrt{\alpha_0}}{2 \pm \sqrt{\alpha_0}}.$$

Знак «минус» в последнем выражении не годится, так как из условий задачи следует, что $\sin \xi_0$ неотрицателен. Поэтому

$$\xi_0 = \arcsin \left(\frac{\sqrt{\alpha_0}}{2 - \sqrt{\alpha_0}} \right).$$

Проверка 2.1 при $\alpha_0 = 0$ дает $\xi_0 = \arcsin [\sqrt{0}/(2 - \sqrt{0})] = \arcsin 0 = 0$, а при $\alpha_0 = 1$ имеем $\xi_0 = \arcsin [\sqrt{1}/(2 - \sqrt{1})] = \arcsin 1 = \pi/2$. Описание примера А7 закончено.

14.3. Технология распределенного (взвешенного) параметра. Решение и конструирование задач по теме «Моделирование двумерного вектора». Рассмотрим возможности построения совместных плотностей $f_{(\xi,\eta)}(u, v)$ двумерных векторов (ξ, η) с зависимыми компонентами, для которых удастся построить эффективные алгоритмы моделирования выборочных значений (ξ_0, η_0) .

Согласно утверждению 2.1 и формулам (2.4)–(2.7), для плотности $f_{(\xi,\eta)}(u, v)$ справедливы два представления

$$f_{(\xi,\eta)}(u, v) = f_{\xi}(u)f_{\eta}(v|u); \quad f_{\xi}(u) = \int f_{(\xi,\eta)}(u, v) dv, \quad f_{\eta}(v|u) = \frac{f_{(\xi,\eta)}(u, v)}{f_{\xi}(u)}; \quad (14.19)$$

$$f_{(\xi,\eta)}(u, v) = f_{\eta}(v)f_{\xi}(u|v); \quad f_{\eta}(v) = \int f_{(\xi,\eta)}(u, v) du, \quad f_{\xi}(u|v) = \frac{f_{(\xi,\eta)}(u, v)}{f_{\eta}(v)}. \quad (14.20)$$

Представлению (14.19) соответствует алгоритм моделирования значений (ξ_0, η_0) типа алгоритма 2.1: *сначала моделируем выборочное значение ξ_0 согласно плотности $f_{\xi}(u)$, а затем реализуем выборочное значение η_0 согласно плотности $f_{(\xi,\eta)}(\xi_0, v)/f_{\xi}(\xi_0)$.*

Аналогично для представления (14.20) используется алгоритм 2.2: *сначала моделируется выборочное значение η_0 согласно плотности $f_{\eta}(v)$, а затем реализуется выборочное значение ξ_0 согласно плотности $f_{(\xi,\eta)}(u, \eta_0)/f_{\eta}(\eta_0)$.*

При конструировании задач по моделированию двумерного вектора нужно иметь возможность получать вектор с *зависимыми* компонентами (для случая независимых компонент получается «двойное» упражнение по теме «Метод обратной функции распределения»), причем желательно, чтобы методы типа алгоритмов 2.1 и 2.2 были бы не равнозначны в смысле эффективности моделирования (нужно, чтобы только один из них был экономичным).

Такие свойства алгоритмов можно получить с помощью следующей **технологии распределенного («взвешенного») параметра**, основанной на соображениях о рандомизации параметра из подраздела 3.2 данного пособия.

ТЕХНОЛОГИЯ Б [13]. *Рассмотрим элементарную плотность распределения $f_{\eta}(v; \lambda)$, $v \in (c, d)$, зависящую от параметра λ , допустимые значения которого принадлежат интервалу (A, B) .*

Элементарность распределения означает существование простой (элементарной) формулы $\eta_0 = \psi_{\eta}(\alpha_0; \lambda)$, $\alpha_0 \in U(0, 1)$ для получения

выборочного значения случайной величины η (здесь $\psi_\eta(\cdot)$ – композиция элементарных функций).

Рассмотрим также еще одну элементарную плотность $f_\xi(v)$ случайной величины ξ , принимающей значения в интервале $(a, b) \subseteq (A, B)$; при этом имеется соответствующая элементарная моделирующая формула $\xi_0 = \psi_\xi(\alpha_0)$, $\alpha_0 \in U(0, 1)$.

Теперь поставим задачу построения эффективного (экономичного) алгоритма моделирования выборочного значения (ξ_0, η_0) двумерного случайного вектора (ξ, η) , имеющего плотность распределения

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = f_\xi(u) \times f_\eta(v; u), \quad (u, v) \in G = \{(u, v) : a < u < b; c < v < d\}. \quad (14.21)$$

Это результат формального умножения плотностей $f_\xi(u)$ и $f_\eta(v; u)$ (здесь происходит подстановка переменной u вместо параметра λ).

В представлении (14.19) для плотности (14.21) имеем

$$f_\eta(v|u) = f_\eta(v; u).$$

Для этого представления получаем эффективный алгоритм 2.1:

$$\xi_0 = \psi_\xi(\alpha_1), \quad \eta_0 = \psi_\eta(\alpha_2; \xi_0); \quad \alpha_1, \alpha_2 \in U(0, 1). \quad (14.22)$$

Для представления (14.20) плотности (14.21) эффективных формул типа (14.22) построить, как правило, не удастся.

ЗАМЕЧАНИЕ 14.3 [13]. Если составителю моделируемой плотности двумерного вектора хочется, чтобы эффективный алгоритм давало бы представление (14.20), нужно выбрать элементарную плотность распределения компоненты ξ вида $f_\xi(u; \lambda)$, $u \in (a, b)$, зависящую от параметра λ , допустимые значения которого принадлежат интервалу (C, D) ; этой плотности должна соответствовать моделирующая формула $\xi_0 = \psi_\xi(\alpha_0; \lambda)$.

Далее выбирается элементарная плотность $f_\eta(v)$; $v \in (c, d) \subseteq (C, D)$ с моделирующей формулой $\eta_0 = \psi_\eta(\alpha_0)$, $\alpha_0 \in U(0, 1)$.

Ставится задача построения эффективного алгоритма реализации выборочного значения (ξ_0, η_0) двумерного случайного вектора (ξ, η) , имеющего плотность распределения

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = f_\eta(v) \times f_\xi(u; v), \quad (u, v) \in G = \{(u, v) : a < u < b; c < v < d\}. \quad (14.23)$$

Этот алгоритм эквивалентен следующему аналогу алгоритма 2.2:

$$\eta_0 = \psi_\eta(\alpha_1), \quad \xi_0 = \psi_\xi(\alpha_2; \eta_0); \quad \alpha_1, \alpha_2 \in U(0, 1). \quad (14.24)$$

Примером применения технологии Б (точнее, ее версии из замечания 14.3) является плотность

$$f_{(\xi,\eta)}(u,v) = \frac{1}{2}ve^{-uv}, \quad u > 0, \quad 0 < v < 2 \quad (14.25)$$

из примера 2.3 (см. подраздел 2.7 данного пособия). Здесь плотность $f_{\xi}(u; \lambda) = \lambda e^{-\lambda u}$, $u > 0$, представляет собой табличную экспоненциальную плотность (2.18) с моделирующей формулой (2.20). Также табличной является и плотность $f_{\eta}(v) \equiv 1/2$; $v \in (0, 2) \subset (0, +\infty)$ (это плотность равномерного распределения (2.23)). Соответствующая совместная плотность (14.25) имеет вид (14.23).

Соответствующая версия алгоритма (14.24) имеет следующий простой вид: $\eta_0 = 2\alpha_1$; $\xi_0 = -(\ln \alpha_2)/\eta_0$. Представление (14.19) для плотности (14.25) не дает эффективного (экономичного) алгоритма моделирования выборочного значения (ξ_0, η_0) (подробности см. в описании примера 2.3).

Отметим, что технология Б активно используется на практике при выборе переходных функций прикладных цепей Маркова (см., в частности, рассуждения из раздела 6 данного пособия).

Теперь разберем *экзаменационные задачи по теме «Моделирование двумерного вектора»*. Эти задачи сконструированы согласно технологии Б или ее аналогу из замечания 14.3.

ЗАМЕЧАНИЕ 14.4. При решении экзаменационных задач по теме «Моделирование двумерного вектора» следует понять, какое из представлений данной в задаче совместной плотности $f_{(\xi,\eta)}(u,v)$ – (14.19) или (14.20) – дает эффективный алгоритм моделирования. Это понимание тесно связано с ответом на вопрос «По какой переменной функция $f_{(\xi,\eta)}(u,v)$ может быть проинтегрирована аналитически?», ответ на который вполне очевиден.

Можно отметить, что в выбранном представлении (14.19) или (14.20) одна плотность, как правило, является табличной (с точностью до обозначений параметров λ, a, b) – см. замечание 2.8; здесь можно использовать формулы (2.20), (2.22), (2.23), не представляя преобразования соответствующего уравнения (14.1) и результаты проверки 2.1.

ПРИМЕР Б1 (1,5 балла). Рассмотрим характерный пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА Б1 [13]. *Сформулируйте стандартный метод моделирования случайного вектора и продемонстрируйте его на примере дву-*

мерного вектора (ξ, η) , имеющего плотность распределения

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = \frac{e^{-4uv}}{v^4}, \quad u > 0, \quad v > \frac{1}{2}. \quad (14.26)$$

РЕШЕНИЕ. Согласно замечанию 14.4, нужно определить, какое из представлений данной плотности $f_{(\xi, \eta)}(u, v)$ из соотношения (14.26) дает эффективный алгоритм моделирования. Очевидно, что интегрирование этой функции по переменной v затруднено, и поэтому представление (14.19) не дает простых алгоритмов моделирования выборочного значения (ξ_0, η_0) случайного вектора (ξ, η) .

Рассмотрим представление (14.20). Имеем

$$f_{\eta}(v) = \int_0^{+\infty} \frac{e^{-4uv}}{v^4} du = \frac{1}{4v^5} \times (-e^{-4vu}) \Big|_0^{+\infty} = \frac{1}{4v^5}, \quad v > \frac{1}{2},$$

$$f_{\xi}(u|v) = \frac{f_{(\xi, \eta)}(u, v)}{f_{\eta}(v)} = 4ve^{-4vu}, \quad u > 0.$$

Выведем формулу метода обратной функции распределения для компоненты η . Преобразуя соответствующее уравнение (14.1) (см. также соотношение (2.16)), последовательно получаем:

$$\int_{1/2}^{\eta_0} \frac{dv}{4v^5} = \alpha_1, \quad -\frac{1}{16v^4} \Big|_{1/2}^{\eta_0} = \alpha_1, \quad \frac{1}{16\eta_0^4} = 1 - \alpha_1 \text{ и, наконец, } \eta_0 = \frac{1}{2(\alpha_1')^{1/4}};$$

здесь $\alpha_1' = 1 - \alpha_1$. Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\alpha_1' = 1$ и $\eta_0 = 1/2$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\alpha_1' = 0$ и $\eta_0 = +\infty$.

Для моделирования выборочного значения ξ_0 компоненты ξ используем табличную формулу типа (2.20) (см. пример 2.1 и замечание 2.8): $\xi_0 = -(\ln \alpha_2)/(4\eta_0)$. Решение задачи Б1 закончено.

При конструировании плотности (14.26) использована версия технологии Б из замечания 14.3: для компоненты ξ была выбрана экспоненциальная плотность (2.18) с параметром 4λ вида $f_{\xi}(u; \lambda) = 4\lambda e^{-4\lambda u}$, $u, \lambda > 0$, а для компоненты η , отражающей рандомизацию параметра λ , взята плотность $f_{\eta}(v) = 1/(4v^5)$, $v \in (1/2, +\infty) \subset (0, +\infty)$. Описание примера Б1 закончено.

ПРИМЕР Б2 (1,5 балла). Рассмотрим еще одну экзаменационную задачу.

ЗАДАЧА Б2 [13]. Сформулируйте стандартный метод моделирования случайного вектора и продемонстрируйте его на примере двумерного вектора (ξ, η) , имеющего плотность распределения

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = 3u^2(u+1)v^u e^{-u^3}, \quad u > 0, \quad 0 < v < 1. \quad (14.27)$$

РЕШЕНИЕ. На этот раз интеграл по u функции $f_{(\xi, \eta)}(u, v)$ из соотношения (14.27) аналитически не берется, поэтому представление (14.20) не дает простых алгоритмов моделирования выборочного значения (ξ_0, η_0) случайного вектора (ξ, η) .

Рассмотрим представление (14.19). Имеем

$$f_{\xi}(u) = \int_0^1 3u^2(u+1)v^u e^{-u^3} dv = 3u^2 e^{-u^3} \times (v^{u+1}) \Big|_0^1 = 3u^2 e^{-u^3}$$

при $u > 0$ и

$$f_{\eta}(v|u) = \frac{f_{(\xi, \eta)}(u, v)}{f_{\xi}(u)} = (u+1)v^u, \quad 0 < v < 1.$$

Выведем формулу метода обратной функции распределения для компоненты ξ . Преобразуя соответствующее уравнение (14.1), последовательно получаем:

$$\int_0^{\xi_0} 3u^2 e^{-u^3} du = \alpha_1, \quad -e^{-u^3} \Big|_0^{\xi_0} = \alpha_1 \text{ и, наконец, } \xi_0 = \sqrt[3]{-\ln \alpha_1'};$$

здесь $\alpha_1' = 1 - \alpha_1$. Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\alpha_1' = 1$ и $\xi_0 = 0$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\alpha_1' = 0$ и $\xi_0 = +\infty$.

Для моделирования выборочного значения η_0 компоненты η , имеющей (при фиксированном $\xi = \xi_0$) степенное распределение (2.21), используем табличную формулу типа (2.22) (см. пример 2.2 и замечание 2.8): $\eta_0 = \alpha_2^{1/(\xi_0+1)}$. Решение задачи Б2 закончено.

При конструировании плотности (14.27) использована технология Б: для компоненты η была выбрана табличная плотность степенного распределения (2.21) $f_{\eta}(v; \lambda) = (\lambda+1)v^{\lambda}$, $0 < v < 1$, $\lambda > 0$, а для компоненты ξ , отражающей рандомизацию параметра λ , взята плотность $f_{\xi}(u) = 3u^2 e^{-u^3}$, $u \in (0, +\infty)$.

В свою очередь, последняя плотность получена с помощью технологии А из табличной плотности $f_{\theta}(w) = e^{-w}$ с использованием замены $w = u^3$. Описание примера Б2 закончено.

ПРИМЕР Б3 (1,5 балла). Приведем еще один пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА Б3 [13]. *Сформулируйте стандартный метод моделирования случайного вектора и продемонстрируйте его на примере двумерного вектора (ξ, η) , имеющего плотность распределения*

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = 4u^{v-1} \ln^3 v, \quad 0 < u < 1, \quad 1 < v < e. \quad (14.28)$$

РЕШЕНИЕ. Очевидно, что интеграл по v от функции (14.28) аналитически не берется, поэтому представление (14.19) не дает простых алгоритмов моделирования выборочного значения (ξ_0, η_0) случайного вектора (ξ, η) .

Рассмотрим представление (14.20). Имеем

$$f_{\eta}(v) = \int_0^1 4u^{v-1} \ln^3 v \, du = \frac{4 \ln^3 v}{v} \times (v u^{v-1}) \Big|_0^1 = \frac{4 \ln^3 v}{v}, \quad 1 < v < e,$$

$$f_{\xi}(u|v) = \frac{f_{(\xi, \eta)}(u, v)}{f_{\eta}(v)} = v u^{v-1}, \quad 0 < u < 1.$$

Выведем формулу метода обратной функции распределения для компоненты η . Преобразуя соответствующее уравнение (14.1), последовательно получаем:

$$\int_1^{\eta_0} \frac{4 \ln^3 v \, dv}{v} = \alpha_1, \quad \ln^4 v \Big|_1^{\eta_0} = \alpha_1, \quad \text{и, наконец, } \eta_0 = e^{\sqrt[4]{\alpha_1}}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\eta_0 = 1$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\eta_0 = e$.

Для моделирования выборочного значения ξ_0 компоненты ξ используем табличную формулу типа (2.22) (см. пример 2.2 и замечание 2.8): $\xi_0 = \alpha_2^{1/\eta_0}$. Решение задачи Б2 закончено.

При конструировании плотности (14.28) использована версия технологии Б из замечания 14.3: для компоненты ξ был выбран аналог табличной плотности степенного распределения (2.21) $f_{\xi}(u; \lambda) = \lambda u^{\lambda-1}$, $0 < u < 1$, $\lambda > 1$, а для компоненты η , отражающей рандомизацию параметра λ , взята плотность $f_{\eta}(v) = (4 \ln^3 v)/v$, $v \in (1, e) \subset (1, +\infty)$.

В свою очередь, последняя плотность получена с помощью технологии А из табличной плотности $f_{\theta}(w) = 4w^3$ с использованием замены $w = \ln v$. Описание примера Б3 закончено.

Теперь обсудим *выполнение пункта В семестрового домашнего задания (СДЗ)*. Можно заметить, что приводимые до этого примеры по этому пункту – примеры 2.3, Б1–Б3 имели невысокие оценки СДЗ. Причина в том, что частные плотности для компонент ξ и η представляли простые (часто – табличные) плотности. Даже небольшое «усложнение» этих частных плотностей с помощью технологии А (см. замечание 14.2) позволяет повысить оценку СДЗ.

ПРИМЕР Б4 (2 балла; [13]). Пусть требуется построить эффективный алгоритм моделирования выборочного значения (ξ_0, η_0) двумерного случайного вектора (ξ, η) с плотностью распределения

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = \frac{3v \sin v e^{-3uv}}{1 - e^{-v}}, \quad 0 < u < \frac{1}{3}, \quad 0 < v < \frac{\pi}{2}. \quad (14.29)$$

Очевидно, что интеграл по v от этой функции аналитически не возьмется, поэтому представление (14.19) не дает простых алгоритмов моделирования случайного вектора (ξ, η) .

Рассмотрим представление (14.20). Имеем

$$f_{\eta}(v) = \int_0^{1/3} \frac{3v \sin v e^{-3uv}}{1 - e^{-v}} du = \sin v \times \left(\frac{-e^{-3vu}}{1 - e^{-v}} \right) \Big|_0^{1/3} = \sin v$$

для $0 < v < \pi/2$ и

$$f_{\xi}(u|v) = \frac{f_{(\xi, \eta)}(u, v)}{f_{\eta}(v)} = \frac{3v e^{-3uv}}{1 - e^{-v}}, \quad 0 < u < \frac{1}{3}.$$

Выведем соответствующие формулы метода обратной функции распределения. Для выборочного значения η_0 последовательно получаем:

$$\int_0^{\eta_0} \sin v dv = \alpha_1, \quad -\cos v \Big|_0^{\eta_0} = \alpha_1 \quad \text{и, наконец,} \quad \eta_0 = \arccos \alpha_1';$$

здесь $\alpha_1' = 1 - \alpha_1$.

Для выборочного значения ξ_0 последовательно получаем:

$$\int_0^{\xi_0} \frac{3\eta_0 e^{-3\eta_0 u}}{1 - e^{-\eta_0}} du = \alpha_2, \quad 1 - e^{-3\eta_0 \xi_0} = \alpha_2(1 - e^{-\eta_0})$$

$$\text{и, наконец,} \quad \xi_0 = -\frac{\ln [1 - \alpha_2(1 - e^{-\eta_0})]}{3\eta_0}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\alpha'_1 = 1$ и $\eta_0 = \arccos 1 = 0$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\alpha'_1 = 0$ и $\eta_0 = \arccos 0 = \pi/2$.

При $\alpha_2 = 0$ получаем $\xi_0 = -(\ln [1 - 0 \times (1 - e^{-\eta_0})]) / (3\eta_0) = 0$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = -(\ln [1 - 1 \times (1 - e^{-\eta_0})]) / (3\eta_0) = \eta_0 / (3\eta_0) = 1/3$.

При конструировании плотности (14.29) использована версия технологии Б из замечания 14.3: для компоненты ξ была выбрана плотность усеченного экспоненциального распределения $f_\xi(u; \lambda) = 3\lambda e^{-3\lambda u} / (1 - e^{-\lambda})$, $0 < u < 1/3$, $\lambda > 0$, а для компоненты η , отражающей рандомизацию параметра λ , взята плотность $f_\eta(v) = \sin v$, $v \in (0, \pi/2) \subset (0, +\infty)$. Описание примера Б4 закончено.

Некоторую новую возможность «усложнения» примеров по моделированию двумерных векторов дает рассмотрение криволинейных (не прямоугольных) областей распределения вектора. У соответствующих примеров есть два недостатка:

– трудно сформулировать «универсальную» технологию (подобную технологии Б) для создания таких примеров;

– как правило, оба интеграла от совместной плотности $f_{(\xi, \eta)}(u, v)$ берутся аналитически и по v , и по u , и требуется исследование обоих представлений – (14.19) и (14.20) – на предмет возможности построения эффективного моделирующего алгоритма (см., в частности, [41]).

ПРИМЕР Б5 (2 балла; [41]). Пусть требуется построить эффективный алгоритм моделирования выборочного значения (ξ_0, η_0) двумерного случайного вектора (ξ, η) с плотностью распределения

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = \frac{2 \cos^2 u}{\cos^2 v}, \quad 0 < u < \pi/2, \quad 0 < v < u.$$

Представление (14.20) не дает эффективных моделирующих формул, в частности, не элементарной является плотность

$$\begin{aligned} f_\eta(v) &= \int_v^{\pi/2} \frac{2 \cos^2 u \, du}{\cos^2 v} = \frac{1}{\cos^2 v} \left(\frac{\pi}{2} - v + \int_v^{\pi/2} \cos 2u \, du \right) = \\ &= \frac{\pi - 2v - \sin 2v}{2 \cos^2 v}. \end{aligned}$$

Рассмотрим представление (14.19):

$$f_\xi(u) = 2 \int_0^u \frac{\cos^2 u \, dv}{\cos^2 v} = 2 \cos^2 u (\operatorname{tg} u - \operatorname{tg} 0) =$$

$$= 2 \sin u \cos u = \sin 2u, \quad 0 < u < \pi/2;$$

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

Выведем соответствующие формулы метода обратной функции распределения. Для выборочного значения ξ_0 последовательно получаем:

$$\int_0^{\xi_0} \sin 2u \, du = \alpha_1, \quad \text{или} \quad \frac{-\cos 2\xi_0 + \cos 0}{2} = \alpha_1, \quad \text{или} \quad \xi_0 = \frac{\arccos(1 - 2\alpha_1)}{2}.$$

Для выборочного значения η_0 имеем

$$\int_0^{\eta_0} \frac{dv}{\operatorname{tg} \xi_0 \cos^2 v} = \alpha_2, \quad \text{или} \quad \frac{\operatorname{tg} \eta_0 - \operatorname{tg} 0}{\operatorname{tg} \xi_0} = \alpha_2, \quad \text{или} \quad \eta_0 = \operatorname{arctg}(\alpha_2 \operatorname{tg} \xi_0).$$

Проверка 2.1 для $\alpha_1 = 0$ дает $\xi_0 = [\arccos(1 - 2 \times 0)]/2 = 0$, а для $\alpha_1 = 1$ имеем $\xi_0 = [\arccos(1 - 2 \times 1)]/2 = \pi/2$.

При $\alpha_2 = 0$ получаем $\eta_0 = \operatorname{arctg}(0 \times \operatorname{tg} \xi_0) = 0$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\eta_0 = \operatorname{arctg}(1 \times \operatorname{tg} \xi_0) = \xi_0$. Описание примера Б5 закончено.

14.4. Решение и конструирование задач по теме «Методы суперпозиции». Технология формирования смеси. Сначала рассмотрим возможности *выполнения пункта В.1 семестрового домашнего задания (СДЗ)*. Здесь речь идет о конструировании примера по эффективному применению *метода интегральной суперпозиции* (см. подраздел 3.1 данного пособия).

Требуется моделировать выборочное значение ξ_0 случайной величины $\xi \in (a, b)$, имеющей плотность распределения в виде интеграла, зависящего от параметра:

$$f_\xi(u) = \int_c^d f_\eta(v) f_\xi(u|v) \, dv; \quad u \in (a, b). \quad (14.30)$$

Здесь $f_\eta(v)$ и $f_\xi(u|v)$ (при фиксированном $v = \eta_0$) – моделируемые (элементарные) плотности, и соответствующие моделирующие формулы дают алгоритм: $\xi_0 = \psi_\xi(\alpha_2; \eta_0)$, где $\eta_0 = \psi_\eta(\alpha_1)$ и $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0, 1)$.

Из замечания 3.2 следует, что версия технологии Б из замечания 14.3 идеальным образом подходит для конструирования примеров эффективного применения метода интегральной суперпозиции. Здесь могут использоваться в том числе примеры, которые построены с помощью указанной версии технологии Б для темы «Моделирование двумерного вектора».

ПРИМЕР В1 (1,5 балла). Пусть требуется эффективный алгоритм метода интегральной суперпозиции для моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины, имеющей плотность распределения

$$f_{\xi}(u) = \int_{1/2}^{+\infty} \frac{e^{-4uv} dv}{v^4}, \quad u > 0. \quad (14.31)$$

Заметим, что при конструировании плотности (14.31) использована совместная плотность (14.26) вектора (ξ, η) , полученная в примере В1 с помощью версии технологии Б из замечания 14.3. Представление (14.19) для этого вектора не дает моделирующего алгоритма (т.к. интеграл (14.31) не берется аналитически), а вот представление (14.20) дает следующий моделирующий алгоритм из примера В1:

$$\xi_0 = -\frac{\ln \alpha_2}{4\eta_0}, \quad \text{где } \eta_0 = \frac{1}{2\sqrt[4]{\alpha_1}}.$$

Описание примера В1 закончено.

Упомянем также пример 3.1, в котором рассматривалось моделирование выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , распределенной согласно плотности

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

Версия технологии Б из замечания 14.3 применена здесь следующим образом. В качестве плотности компоненты ξ взята функция $f_{\xi}(u; \lambda) = (\lambda \cos \lambda u) / \sin \lambda$, $0 < u < 1$; $0 < \lambda < \pi/2$, которой соответствует моделирующая формула $\xi_0 = [\arcsin(\alpha_2 \sin \lambda)] / \lambda$.

Затем на множестве $(0, \pi/2)$ допустимых значений параметра λ рассмотрена плотность $f_{\eta}(v) = \sin 2v$, которой соответствует моделирующая формула $\eta_0 = [\arccos(1 - 2\alpha_1)] / 2$.

Далее после замены $\lambda = v$ сформирована совместная плотность

$$f_{(\xi, \eta)}(u, v) = f_{\eta}(v) \times f_{\xi}(u; v) = \sin 2v \times \frac{v \cos uv}{\sin v} = 2v \cos v \cos uv$$

(здесь $0 < u < 1$, $0 < v < \pi/2$), интеграл $f_{\xi}(u) = \int_0^{\pi/2} f_{(\xi, \eta)}(u, v) dv$ от которой аналитически не берется.

Моделирующий алгоритм для построенной плотности имеет вид:

$$\xi_0 = \frac{\arcsin(\alpha_2 \sin \eta_0)}{\eta_0}, \quad \text{где } \eta_0 = \frac{\arccos(1 - 2\alpha_1)}{2}$$

(подробности см. в примере 3.1).

Указанная здесь близость технологий конструирования задач по темам «Моделирование двумерного вектора» и «Метод интегральной суперпозиции» (здесь отличаются только постановки задач – см. замечание 3.1) является причиной того, что на экзамене данного курса задачи по теме «Метод интегральной суперпозиции» отсутствуют.

Зато присутствуют *экзаменационные задачи по теме «Метод дискретной суперпозиции»*.

Напомним (см. подраздел 11.1 данного пособия), что для метода дискретной суперпозиции в представлении (14.30) вспомогательная случайная величина η является дискретной целочисленной случайной величиной с распределением $\mathbf{P}\{\eta = i\} = p_i; i = 1, 2, \dots, M; M \leq \infty$.

При этом интеграл, зависящий от параметра, (14.30) превращается в сумму

$$f_{\xi}(u) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(u), \quad u \in (a, b) \quad (14.32)$$

(см. соотношение (11.2)), где $f_i(u)$ – моделируемые (в нашем случае – элементарные) плотности. Таким образом, (14.32) – это взвешенная сумма (смесь) элементарных плотностей.

Алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , распределенной согласно плотности (14.32), – см. алгоритм 11.1 – состоит в выборе случайного номера $\eta_0 = m$ (по набору вероятностей $\{p_i\}$) с последующим моделированием ξ_0 методом обратной функции распределения согласно плотности $f_m(u)$.

Достаточно содержательные примеры применения метода дискретной суперпозиции можно получить для малого числа M слагаемых в сумме (14.32) – в частности, для $M = 2 \vee 3$. Такие примеры дает *технология формирования смеси*.

ТЕХНОЛОГИЯ В [13]. Возьмем две [три] плотности элементарных распределений $f_1(u), f_2(u), f_3(u)$, определенные в интервале (a, b) и такие, что линейная комбинация с положительными коэффициентами

$$f_{\xi}(u) = p_1 f_1(u) + p_2 f_2(u) [+ p_3 f_3(u)], \quad u \in (a, b) \quad (14.33)$$

(здесь $p_1, p_2, p_3 > 0$ и $p_1 + p_2 [+ p_3] = 1$) не является плотностью элементарного распределения (т. е. уравнение вида (14.1) $\int_a^{\xi_0} f_{\xi}(u) du = \alpha_0, \alpha_0 \in U(0, 1)$ неразрешимо относительно ξ_0).

Такие плотности $f_1(u), f_2(u), f_3(u)$ можно получить с помощью разнородных замен $\varphi_i : (a, b) \rightarrow (c_i, d_i); i = 1, 2, 3$ в технологии А.

Для выборочных значений $\xi_0^{(i)}$, реализуемых согласно плотностям $f_i(u)$, выписываются моделирующие формулы $\xi_0^{(i)} = \psi_i(\alpha_0), i = 1, 2, 3$; $\alpha_0 \in U(0, 1)$. Для плотности (14.33) можно построить алгоритм дискретной суперпозиции: **если $\alpha_1 < p_1$, то значение η_0 вспомогательной целочисленной случайной величины η равно единице и выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ моделируется по формуле $\xi_0 = \psi_1(\alpha_2)$, для $\alpha_1 \geq p_1$ [для $p_1 \leq \alpha_1 < p_1 + p_2$] имеем $\eta_0 = 2$ и $\xi_0 = \psi_2(\alpha_2)$ [и, наконец, при $\alpha_1 \geq p_1 + p_2$ имеем $\eta_0 = 3$ и $\xi_0 = \psi_3(\alpha_2)$]; здесь $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0, 1)$ – стандартные случайные числа.**

Отметим, что для плотности (14.33) эффективным оказывается следующий **модифицированный метод суперпозиции** (см. подраздел 11.2 и алгоритм 11.3): **если $\alpha_0 < p_1$, то $\eta_0 = 1$ и $\xi_0 = \psi_1(\alpha_0/p_1)$, для $\alpha_0 \geq p_1$ [для $p_1 \leq \alpha_0 < p_1 + p_2$] имеем $\eta_0 = 2$ и $\xi_0 = \psi_2((\alpha_0 - p_1)/p_2)$ [и, наконец, при $\alpha_0 \geq p_1 + p_2$ имеем $\eta_0 = 3$ и $\xi_0 = \psi_3((\alpha_0 - p_1 - p_2)/p_3)$]; здесь $\alpha_0 \in U(0, 1)$.**

Иллюстрациями применения технологии В являются примеры 11.1, 11.2 из подразделов 11.1, 11.2 данного пособия.

Экзаменационные задачи по теме «Метод дискретной суперпозиции» сконструированы согласно технологии В. Можно отметить, что в представлении (14.33) одна–две плотности являются табличными (с точностью до обозначений параметров λ, a, b) – см. замечание 2.8; здесь можно использовать формулы (2.20), (2.22), (2.23), не представляя преобразования соответствующего уравнения (14.1) и результаты проверки 2.1.

В решении экзаменационных задач по теме должны быть отражены все этапы, отмеченные в замечании 11.2:

– обоснование того, что исходная плотность $f_\xi(u)$ не является элементарной и имеет смысл использовать метод дискретной суперпозиции;

– выделение вероятностей $\{p_i; i = 1, 2, 3\}$ (см. замечание 11.1);

– вывод моделирующих формул для плотностей $\{f_i(u); i = 1, 2, 3\}$ и формулировка метода дискретной суперпозиции и модифицированного метода суперпозиции для рассматриваемого случая.

ПРИМЕР В2 (1,5 балла). Рассмотрим характерный пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА В1 [13]. Сформулируйте метод дискретной суперпозиции и модифицированный метод суперпозиции и продемонстрируйте эти методы на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_\xi(u) = \frac{3 \cos \sqrt{u}}{8\sqrt{u}} + \frac{1}{\pi^2}, \quad 0 < u < \frac{\pi^2}{4}.$$

РЕШЕНИЕ. Данная плотность не является плотностью элементарного распределения, так как последовательные преобразования уравнения (14.1) вида

$$\int_0^{\xi_0} \left(\frac{3 \cos \sqrt{u}}{8\sqrt{u}} + \frac{1}{\pi^2} \right) du = \alpha_0, \quad \frac{3 \sin \sqrt{u}}{4} \Big|_0^{\xi_0} + \frac{u}{\pi^2} \Big|_0^{\xi_0} = \alpha_0, \quad (14.34)$$

приводят к соотношению $(3 \sin \sqrt{\xi_0})/4 + \xi_0/\pi^2 = \alpha_0$, которое неразрешимо относительно ξ_0 . С учетом замечания 11.1 по аналогии с выкладками (14.34) вычисляем

$$p_1 = \int_0^{\pi^2/4} \frac{3 \cos \sqrt{u}}{8\sqrt{u}} du = \frac{3 \sin \sqrt{u}}{4} \Big|_0^{\pi^2/4} = \frac{3}{4}, \quad p_2 = \int_0^{\pi^2/4} \frac{du}{\pi^2} = \frac{1}{4}$$

и получаем представление $f_\xi(u) = p_1 f_1(u) + p_2 f_2(u)$, где

$$f_1(u) = \frac{\cos \sqrt{u}}{2\sqrt{u}}, \quad f_2(u) \equiv \frac{4}{\pi^2}, \quad 0 < u < \frac{\pi^2}{4}.$$

С учетом выкладок (14.34) выведем моделирующую формулу для плотности $f_1(u)$. Преобразуя соответствующее уравнение (14.1), последовательно получаем:

$$\int_0^{\xi_0} \frac{\cos \sqrt{u}}{2\sqrt{u}} du = \alpha_2, \quad \sin \sqrt{\xi_0} = \alpha_2 \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = (\arcsin \alpha_2)^2.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_2 = 0$ дает $\xi_0 = (\arcsin 0)^2 = 0$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = (\arcsin 1)^2 = (\pi/2)^2 = \pi^2/4$.

Плотность $f_2(u)$ является табличной (это равномерное распределение в интервале $(0, \pi^2/4)$) – см. замечание 2.8 и соотношение (2.23); соответствующая моделирующая формула: $\xi_0 = \pi^2 \alpha_2/4$.

Алгоритм метода дискретной суперпозиции для реализации выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ имеет вид: *если* $\alpha_1 < 3/4$, *то* $\xi_0 = (\arcsin \alpha_2)^2$; *иначе* $\xi_0 = \pi^2 \alpha_2 / 4$.

Для $\eta_0 = m = 1$ получаем $\beta_0(\alpha_0) = (4/3)\alpha_0$, а при $m = 2$ имеем $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - 3/4)/(1/4) = 4\alpha_0 - 3$, отсюда получаем следующий модифицированный метод суперпозиции: *если* $\alpha_0 < 3/4$, *то* $\xi_0 = [\arcsin(4\alpha_0/3)]^2$; *иначе* $\xi_0 = \pi^2(4\alpha_0 - 3)/4$.

Решение задачи В1 закончено.

Заметим, что плотность $f_1(u)$ получена с помощью технологии А: сначала взята плотность $f_\theta(w) = \cos w$; $0 < w < \pi/2$ с моделирующей формулой $\theta_0 = \arcsin \alpha_0$, а затем использована замена $w = \sqrt{u}$. Описание примера В2 закончено.

ПРИМЕР В3 (1,5 балла). Рассмотрим еще одну экзаменационную задачу.

ЗАДАЧА В2 [13]. *Сформулируйте метод дискретной суперпозиции и модифицированный метод суперпозиции и продемонстрируйте эти методы на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения*

$$f_\xi(u) = e^{-2u} + e^{-3u} + e^{-6u}, \quad u > 0.$$

РЕШЕНИЕ. Эта плотность не является элементарной, так как уравнение (14.1) вида $\int_0^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0$ сводится к соотношению

$$\frac{e^{-2\xi_0}}{2} + \frac{e^{-3\xi_0}}{3} + \frac{e^{-6\xi_0}}{6} + \alpha_0 - 1 = 0,$$

которое неразрешимо относительно ξ_0 .

Учитывая, что

$$\int_0^{+\infty} e^{-\lambda u} du = -\frac{e^{-\lambda u}}{\lambda} \Big|_0^{+\infty} = \frac{1}{\lambda}$$

для любого $\lambda > 0$, согласно замечанию 11.1 получаем вероятности

$$p_1 = \int_0^{+\infty} e^{-2u} du = \frac{1}{2}, \quad p_2 = \frac{1}{3}, \quad p_3 = \frac{1}{6}$$

и представление вида (14.33)

$$f_\xi(u) = \frac{1}{2} \times (2e^{-2u}) + \frac{1}{3} \times (3e^{-3u}) + \frac{1}{6} \times (6e^{-6u}).$$

Плотности $f_1(u) = 2e^{-2u}$, $f_2(u) = 3e^{-3u}$, $f_3(u) = 6e^{-6u}$ являются табличными (экспоненциальными) (см. формулу (2.18) и замечание 2.8), и с учетом формулы (2.20) получаем следующий алгоритм метода суперпозиции:

- если $\alpha_1 < 1/2$, то выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ реализуется по формуле $\xi_0 = -(1/2) \ln \alpha_2$;
- если $1/2 \leq \alpha_1 < 1/2 + 1/3 = 5/6$, то $\xi_0 = -(1/3) \ln \alpha_2$;
- если $\alpha_1 \geq 5/6$, то $\xi_0 = -(1/6) \ln \alpha_2$.

Для $t = 1$ имеем $\beta_0(\alpha_0) = 2\alpha_0$, при $t = 2$ получаем $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - 1/2)/(1/3) = 3\alpha_0 - 3/2$, а при $t = 3$ имеем $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - 5/6)/(1/6) = 6\alpha_0 - 5$, отсюда получаем следующий модифицированный метод суперпозиции:

- если $\alpha_0 < 1/2$, то выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ реализуется по формуле $\xi_0 = -(1/2) \ln(2\alpha_0)$;
- если $1/2 \leq \alpha_0 < 5/6$, то $\xi_0 = -(1/3) \ln(3\alpha_0 - 3/2)$;
- если $\alpha_0 \geq 5/6$, то $\xi_0 = -(1/6) \ln(6\alpha_0 - 5)$.

Решение задачи В2 закончено.

В рассмотренной задаче плотность состояла из трех слагаемых, но все они были пропорциональны табличным (экспоненциальным) плотностям. Описание примера В3 закончено.

ПРИМЕР В4 (1,5 балла). Приведем заключительный пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА В3 [13]. *Сформулируйте метод дискретной суперпозиции и модифицированный метод суперпозиции и продемонстрируйте эти методы на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения*

$$f_\xi(u) = \frac{\sin u}{4} + \frac{e^u}{4(e^{\pi/2} - 1)} + \frac{1}{\pi}, \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}.$$

РЕШЕНИЕ. Данная плотность не является плотностью элементарного распределения, так как последовательные преобразования уравнения (14.1) вида

$$\int_0^{\xi_0} \left[\frac{\sin u}{4} + \frac{e^u}{4(e^{\pi/2} - 1)} + \frac{1}{\pi} \right] du = \alpha_0,$$

$$\left. \frac{-\cos u}{4} \right|_0^{\xi_0} + \left. \frac{e^u - 1}{4(e^{\pi/2} - 1)} \right|_0^{\xi_0} + \left. \frac{u}{\pi} \right|_0^{\xi_0} = \alpha_0 \quad (14.35)$$

приводят к соотношению

$$\frac{1 - \cos \xi_0}{4} + \frac{e^{\xi_0} - 1}{4(e^{\pi/2} - 1)} + \frac{\xi_0}{\pi} = \alpha_0,$$

которое неразрешимо относительно ξ_0 .

С учетом замечания 11.1 по аналогии с выкладками (14.35) вычисляем вероятности

$$p_1 = \int_0^{\pi/2} \frac{\sin u \, du}{4} = \frac{1}{4}, \quad p_2 = \int_0^{\pi/2} \frac{e^u \, du}{4(e^{\pi/2} - 1)} = \frac{1}{4}, \quad p_3 = \int_0^{\pi/2} \frac{du}{\pi} = \frac{1}{2},$$

и получаем представление $f_\xi(u) = p_1 f_1(u) + p_2 f_2(u) + p_3 f_3(u)$, где

$$f_1(u) = \sin u, \quad f_2(u) = \frac{e^u}{e^{\pi/2} - 1}, \quad f_3(u) \equiv \frac{2}{\pi}, \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}.$$

С учетом выкладок (14.35) выведем моделирующие формулы для плотностей $f_1(u)$ и $f_2(u)$. Преобразуя соответствующее уравнение (14.1), для первой плотности последовательно получаем:

$$\int_0^{\xi_0} \sin u \, du = \alpha_2, \quad 1 - \cos \xi_0 = \alpha_2 \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \arccos \alpha'_2,$$

где $\alpha'_2 = 1 - \alpha_2$.

Проверка 2.1 при $\alpha_2 = 0$ дает $\alpha'_2 = 1$ и $\xi_0 = \arccos 1 = 0$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\alpha'_2 = 0$ и $\xi_0 = \arccos 0 = \pi/2$.

Соответствующие преобразования для второй плотности имеют вид:

$$\int_0^{\xi_0} \frac{e^u \, du}{e^{\pi/2} - 1} = \alpha_2, \quad \frac{e^{\xi_0} - 1}{e^{\pi/2} - 1} = \alpha_2 \quad \text{и, наконец,} \quad \xi_0 = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1)\alpha_2].$$

Проверка 2.1 при $\alpha_2 = 0$ дает $\xi_0 = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1) \times 0] = \ln 1 = 0$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1) \times 1] = \ln e^{\pi/2} = \pi/2$.

Плотность $f_3(u)$ является табличной (это равномерное распределение в интервале $(0, \pi/2)$) – см. замечание 2.8 и соотношение (2.23); соответствующая моделирующая формула: $\xi_0 = \pi\alpha_2/2$.

Алгоритм метода дискретной суперпозиции для реализации выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ имеет вид: *если* $\alpha_1 < 1/4$, *то* $\xi_0 = \arccos \alpha_2$; *если* $1/4 \leq \alpha_1 < 1/2$, *то* $\xi_0 = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1)\alpha_2]$; *а если* $\alpha_1 \geq 1/2$, *то* $\xi_0 = \pi\alpha_2/2$.

Для $m = 1$ имеем $\beta_0(\alpha_0) = 4\alpha_0$, при $m = 2$ получаем $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - 1/4)/(1/4) = 4\alpha_0 - 1$, а при $m = 3$ имеем $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - 1/2)/(1/2) = 2\alpha_0 - 1$, отсюда получаем следующий модифицированный метод суперпозиции: *если $\alpha_0 < 1/4$, то $\xi_0 = \arccos 4\alpha_0$; если $1/4 \leq \alpha_0 < 1/2$, то $\xi_0 = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1)(4\alpha_0 - 1)]$; а если $\alpha_0 \geq 1/2$, то $\xi_0 = \pi(2\alpha_0 - 1)/2$.*

Решение задачи В3 и описание примера В4 закончены.

Теперь обсудим **выполнение пункта В.2 семестрового домашнего задания (СДЗ)**. Здесь рекомендуется использовать технологию В. Если выбираемые плотности имеют простой вид, есть опасность получить ситуацию, когда для сконструированной плотности применим метод обратной функции распределения, и потому использование метода суперпозиции не требуется.

ПРИМЕР В5 (0,5 балла). Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_\xi(u) = \frac{\sin u}{2} + \frac{\cos u}{2}, \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}. \quad (14.36)$$

Можно (выделяя вероятности согласно замечанию 11.1) представить эту плотность в виде (14.33) для $p_1 = p_2 = 1/2$; $f_1(u) = \sin u$; $f_2(u) = \cos u$, а также построить следующий модифицированный метод суперпозиции: *если $\alpha_0 < 1/2$, то $\xi_0 = \arccos(1 - 2\alpha_0)$, иначе $\xi_0 = \arcsin(2\alpha_0 - 1)$.*

Однако можно заметить, что плотность (14.36) представима в виде $f_\xi(u) = (1/\sqrt{2}) \cos(u - \pi/4)$, и потому является элементарной с моделирующей формулой $\xi_0 = \pi/4 + \arcsin(\sqrt{2}\alpha_0 - 1/\sqrt{2})$, и применение метода суперпозиции здесь не требуется. Описание примера В5 закончено.

Во избежание описанной в примере В5 ситуации при применении технологии В следует брать «сложные» (полученные в результате нескольких последовательных замен в технологии А – см. замечание 14.2) плотности $f_1(u), f_2(u), f_3(u)$. Это же позволит увеличить баллы СДЗ по сравнению с примерами 11.1–11.3, В2–В5.

ПРИМЕР В6 (2,5 балла; [13]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_\xi(u) = \frac{5u}{(1+u^2)^2} + \frac{\pi}{4\sqrt{2}u^2} \sin\left(\frac{\pi}{2u}\right), \quad 1 < u < 2. \quad (14.37)$$

Эта функция не является плотностью элементарного распределения, так как последовательные преобразования уравнения

$\int_1^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0$ вида

$$\begin{aligned} \frac{5}{2} \int_1^{\xi_0} \frac{d(u^2 + 1)}{(u^2 + 1)^2} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \int_1^{\xi_0} d \cos\left(\frac{\pi}{2u}\right) &= \alpha_0, \\ -\frac{5}{2(1+u^2)} \Big|_1^{\xi_0} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \cos\left(\frac{\pi}{2u}\right) \Big|_1^{\xi_0} &= \alpha_0 \end{aligned}$$

приводят к соотношению

$$\frac{5}{4} - \frac{5}{2(1+\xi_0^2)} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \cos\left(\frac{\pi}{2\xi_0}\right) = \alpha_0, \quad (14.38)$$

которое неразрешимо относительно ξ_0 .

По аналогии с выкладками, приводящими к равенству (14.38), несложно вычислить вероятности (см. замечание 11.1):

$$\begin{aligned} p_1 &= \int_1^2 \frac{5u du}{(1+u^2)^2} = \frac{5}{2} \left(-\frac{1}{1+2^2} + \frac{1}{1+1^2} \right) = \frac{3}{4}, \\ p_2 &= \int_1^2 \frac{\sqrt{2}\pi}{8u^2} \sin\left(\frac{\pi}{2u}\right) du = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\cos\frac{\pi}{4} - \cos\frac{\pi}{2} \right) = \frac{1}{4}. \end{aligned}$$

Таким образом, можно представить плотность (14.37) в виде смеси (14.33):

$$f_\xi(u) = \frac{3}{4} \times \frac{20u}{3(1+u^2)^2} + \frac{1}{4} \times \frac{\pi}{\sqrt{2}u^2} \sin\left(\frac{\pi}{2u}\right), \quad 1 < u < 2,$$

$$\text{т. е. } f_1(u) = \frac{20u}{3(1+u^2)^2}, \quad f_2(u) = \frac{\pi}{\sqrt{2}u^2} \sin\left(\frac{\pi}{2u}\right).$$

С учетом выкладок, приводящих к равенству (14.38), выведем моделирующие формулы для плотностей $f_1(u)$ и $f_2(u)$.

Преобразуя соответствующее уравнение (14.1) первой плотности, последовательно получаем:

$$\frac{20}{3} \int_1^{\xi_0} \frac{u du}{(1+u^2)^2} = \alpha_2, \quad \frac{5}{3} - \frac{10}{3(1+\xi_0^2)} = \alpha_2 \quad \text{и} \quad \xi_0 = \sqrt{\frac{10}{5-3\alpha_2}} - 1.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_2 = 0$ дает $\xi_0 = \sqrt{10/(5-3 \times 0)} - 1 = 1$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = \sqrt{10/(5-3 \times 1)} - 1 = 2$.

Преобразования уравнения (14.1) для плотности $f_2(u)$ дают

$$\int_1^{\xi_0} \frac{\pi}{\sqrt{2}u^2} \sin\left(\frac{\pi}{2u}\right) du = \alpha_2, \quad \sqrt{2} \cos\left(\frac{\pi}{2\xi_0}\right) = \alpha_2 \text{ и } \xi_0 = \frac{\pi}{2 \arccos(\alpha_2/\sqrt{2})}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_2 = 0$ дает $\xi_0 = \pi/[2 \arccos(0/\sqrt{2})] = 1$, а при $\alpha_2 = 1$ имеем $\xi_0 = \pi/[2 \arccos(1/\sqrt{2})] = 2$.

Алгоритм метода суперпозиции выглядит следующим образом: если $\alpha_1 < 3/4$, то выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ реализуется по формуле $\xi_0 = \sqrt{10/(5 - 3\alpha_2) - 1}$, иначе $\xi_0 = \pi/[2 \arccos(\alpha_2/\sqrt{2})]$.

Для $m = 1$ получаем $\beta_0(\alpha_0) = (4/3)\alpha_0$, а при $m = 2$ имеем $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - 3/4)/(1/4) = 4\alpha_0 - 3$, откуда получаем следующий модифицированный метод суперпозиции: если $\alpha_0 < 3/4$, то $\xi_0 = \sqrt{10/(5 - 4\alpha_0) - 1}$, иначе $\xi_0 = \pi/[2 \arccos([4\alpha_0 - 3]/\sqrt{2})]$.

Технология В реализована здесь следующим образом: по технологии А из плотности $10/(3w^2)$, $2 < w < 5$ с помощью замены $w = \varphi_1(u) = 1 + u^2$, $1 < u < 2$ создана плотность $f_1(u)$, а из плотности $\sqrt{2} \sin w$, $\pi/4 < w < \pi/2$ с помощью замены $w = \varphi_2(u) = \pi/(2u)$, $1 < u < 2$ получена плотность $f_2(u)$, а затем рассмотрена взвешенная сумма (14.33) с вероятностями $p_1 = 3/4$ и $p_2 = 1/4$. Описание примера В6 закончено.

«Усложнять» плотности вида (14.32), (14.33) при выполнении семестрового домашнего задания можно за счет наращивания числа слагаемых M в правой части (14.32) вплоть до использования функциональных рядов. Однако сконструировать достаточно содержательные примеры здесь сложнее, чем при применении технологии В.

ПРИМЕР В7 (1,5 балла; [41]). Пусть требуется моделировать выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f_\xi(u) = \sum_{i=1}^{\infty} ip[u(1-p)]^{i-1}, \quad 0 < u < 1, \quad 0 < p < 1. \quad (14.39)$$

Плотность (14.39) не является элементарной, так как уравнение (14.1) вида $\int_0^{\xi_0} f_\xi(u) du = \alpha_0$ сводится к соотношению $\sum_{i=1}^{\infty} p(1-p)^{i-1} \xi_0^i = \alpha_0$, которое неразрешимо относительно ξ_0 .

Плотность (14.39) представима в виде (14.32) для

$$a = 0, \quad b = 1; \quad p_i = p(1-p)^{i-1}; \quad f_i(u) = iu^{i-1}; \quad i = 1, 2, \dots$$

Заметим, что в данном примере вспомогательная целочисленная случайная величина η имеет *геометрическое распределение* (см. формулы (10.22) и подраздел 10.8 данного пособия).

Алгоритм метода суперпозиции имеет следующий вид: *моделируем номер m плотности $f_m(u)$ согласно стандартному алгоритму 10.4 или по специальной формуле (10.24):*

$$m = \left[\frac{\ln \alpha_1}{\ln(1-p)} \right] + 1,$$

а затем полагаем $\xi_0 = \sqrt[m]{\alpha_2}$ (это аналог табличной формулы (2.22)).

Отметим, что построение модифицированного метода суперпозиции здесь затруднено из-за более жестких требований к используемому генератору стандартных случайных чисел $\alpha_i \in U(0, 1)$ (эти числа должны быть равномерно распределенными в малых подмножествах интервала $(0, 1)$).

Отметим также, что плотность (14.39) является частным случаем полиномиальной плотности (11.44) из примера 11.8 (см. подраздел 11.7 данного пособия) для $M = \infty$ и $c_m = (m+1)p(1-p)^m > 0$, и поэтому здесь сработал метод дискретной суперпозиции типа алгоритма 11.16. Описание примера В7 закончено.

14.5. Технология «порчи» моделируемой плотности. Решение и конструирование задач по теме «Мажорантный метод исключения». Напомним, что при применении мажорантного метода исключения (см. подраздел 11.5 данного пособия) моделируется выборочное значение ξ_0 случайного вектора ξ , имеющего «немоделируемую» плотность

$$f_{\xi}(\mathbf{u}) = \frac{g(\mathbf{u})}{\bar{G}}, \quad \mathbf{u} \in U, \quad \bar{G} = \int_U g(\mathbf{u}) d\mathbf{u} \quad (14.40)$$

(см. также формулу (11.31)).

Здесь выбирается мажоранта $g^{(1)}(\mathbf{u})$ неотрицательной функции $g(\mathbf{u})$ из соотношения (14.40), причем плотность $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$, пропорциональная этой мажоранте, является «моделируемой» (в одномерном случае элементарной).

Напомним схему *алгоритма мажорантного метода исключения* (см. также алгоритм 11.10 и рис. 11.3 из подраздела 11.5 данного пособия).

АЛГОРИТМ Г1 (см., например, [9, 13]). 1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ случайного вектора (случайной величины) $\xi^{(1)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$: $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$, а также значение $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$; здесь $\bar{\alpha}_1, \alpha_2 \in U(0, 1)$ – стандартные случайные числа.

Согласно утверждению 11.5, точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в подграфике $G^{(1)}$ функции $g^{(1)}(\mathbf{u})$, т. е. $(\xi_0^{(1)}, \eta_0) \in U(G^{(1)})$.

2. Если

$$\eta_0 < g(\xi_0^{(1)}), \quad (14.41)$$

то пара $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ принадлежит подграфику G функции $g(\mathbf{u})$ из соотношения (14.40) и, согласно утверждению 2.3, равномерно распределена в этой области: $(\xi_0^{(1)}, \eta_0) \in U(G)$, и тогда, согласно утверждению 11.4, величину $\xi_0^{(1)}$ можно принять в качестве искомого выборочного значения, имеющего нужную плотность распределения (14.40): $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$.

В случае, когда неравенство (14.41) не выполнено, повторяем пункт 1 данного алгоритма и т. д.

Средние затраты \bar{s} алгоритма Г1 пропорциональны величине

$$s = \frac{1}{\mathbf{P}\{(\xi^{(1)}, \eta) \in G\}} = \frac{\bar{G}^{(1)}}{G} > 1 \quad (14.42)$$

(см. формулы (11.30), (11.36)). Близость этой величины к единице определяет эффективность (экономичность) алгоритма Г1.

При конструировании задач и примеров, связанных с применением алгоритма Г1, используется следующая **технология «порчи» моделируемой плотности**.

ТЕХНОЛОГИЯ Г [13]. Конструируем сначала «моделируемую» (в одномерном случае элементарную) плотность $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$, $\mathbf{u} \in U \subseteq \mathbb{R}^d$ вектора $\xi^{(1)}$ вместе с соответствующим эффективным (экономичным) алгоритмом (формулой) численной реализации: $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$ (этот алгоритм используется затем в первом пункте алгоритма Г1).

Для построения функции $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$ можно использовать весь арсенал конструирования моделируемых плотностей (технологии А, Б, В и др.).

Формируем также функцию $\tilde{g}^{(1)}(\mathbf{u})$ – это плотность $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$ без нормирующей константы (например, если $f_{\xi^{(1)}}(u) = 5e^{-5u}$, $u > 0$, то

$\tilde{g}^{(1)}(u) = e^{-5u}$, $u > 0$).

Далее преобразуем функцию $\tilde{g}^{(1)}(\mathbf{u})$ таким образом, чтобы она превратилась в функцию $g(\mathbf{u})$, пропорциональную «немоделируемой» плотности $f_{\xi}(\mathbf{u})$ из соотношения (14.40) (по сути мы «портим» моделируемую плотность $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$).

Одним из простейших преобразований является умножение функции $\tilde{g}^{(1)}(\mathbf{u})$ на мало меняющуюся функцию $Y(\mathbf{u})$:

$$g(\mathbf{u}) = \tilde{g}^{(1)}(\mathbf{u}) Y(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u} \in U; \quad \text{где } 0 < A \leq Y(\mathbf{u}) \leq B \quad (14.43)$$

и $(B - A)$ – близкая к нулю положительная величина.

В качестве мажоранты функции (14.43) можно взять $g^{(1)}(\mathbf{u}) = B \tilde{g}^{(1)}(\mathbf{u})$. Плотность, пропорциональная этой функции, очевидно, равна $f_{\xi^{(1)}}(\mathbf{u})$.

Интегрируя неотрицательные функции $g^{(1)}(\mathbf{u})$ и $g(\mathbf{u})$ по области U с учетом соотношения $A \tilde{g}^{(1)}(\mathbf{u}) = A g^{(1)}(\mathbf{u}) / B \leq g(\mathbf{u})$, получаем $A \bar{G}^{(1)} / B \leq \bar{G}$, и тогда получается следующая оценка сверху для величины (14.42):

$$s = \frac{\bar{G}^{(1)}}{\bar{G}} \leq \frac{B}{A}, \quad (14.44)$$

т. е. при $A \lesssim B$ величина s из соотношений (14.42), (14.44) для алгоритма Г1 невелика (близка к единице).

ЗАМЕЧАНИЕ 14.5 [13]. Для предлагаемой технологии Г неравенство (14.41) имеет вид

$$\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)}) = \alpha_2 B \tilde{g}^{(1)}(\xi_0^{(1)}) < g(\xi_0^{(1)}) = \tilde{g}^{(1)}(\xi_0^{(1)}) Y(\xi_0^{(1)}),$$

и оно может быть упрощено, по крайней мере, до вида

$$\alpha_2 B < Y(\xi_0^{(1)}); \quad \alpha_2 \in U(0, 1). \quad (14.45)$$

Это упрощение весьма важно при практическом использовании алгоритма Г1, при программировании которого достаточно оставить строчку $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$; $\bar{\alpha}_1 \in U(0, 1)$ с меткой и проверку (14.41) вида (14.45); если это неравенство выполнено, то $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе идем на упомянутую метку – моделируем $\xi_0^{(1)}$ и т. д.

Поэтому особое внимание должно быть уделено (помимо оптимизации моделирующего алгоритма (формулы) $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$;

$\bar{\alpha}_1 \in U(0, 1)$ – см. замечание 2.7) *упрощению проверки (14.41)*, например, использование соотношения (14.45).

Заметим, что технология Г использована при составлении примера 11.6 (см. подраздел 11.5 данного пособия), в котором строился алгоритм мажорантного метода исключения для выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , плотность которой пропорциональна функции

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

(см. формулу (11.37)). Здесь $f_{\xi(1)}(u) = \tilde{g}^{(1)}(u) = e^{-u}$, $u > 0$ и $Y(u) = 1 + (1/2) \sin u$, причем $A = 1/2 \leq Y(u) \leq B = 3/2$.

Особенность примера 11.3 состоит в том, что для величины s получена не оценка сверху вида (14.44), а точное значение $s = 1, 2$.

Экзаменационные задачи по теме «Мажорантный метод исключения» сконструированы согласно технологии Г. Здесь ставится задача моделирования случайной величины, имеющей плотность распределения, пропорциональную функции вида $g(u) = Y(u) \times \tilde{g}^{(1)}(u)$ (произведение берется именно в этом порядке), где функция $\tilde{g}^{(1)}(u)$ пропорциональна простой (конкретнее – табличной, см. замечание 2.8) плотности $f_{\xi(1)}(u) = \tilde{g}^{(1)}(u)/\tilde{G}^{(1)}$ (и можно использовать формулы (2.20) и (2.22) без соответствующей проверки 2.1), а функция $Y(u)$ легко оценивается сверху и снизу положительными числами: $0 < A \leq Y(u) \leq B$.

В качестве мажоранты целесообразно взять $g^{(1)}(u) = B\tilde{g}^{(1)}(u)$. Величина s , пропорциональная трудоемкости соответствующего алгоритма Г1, оценивается сверху величиной $s \leq B/A$ (см. соотношение (14.44)).

ПРИМЕР Г1 (1,5 балла). Рассмотрим характерный пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА Г1 [13]. *Сформулируйте мажорантный метод исключения и продемонстрируйте его на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения $f_{\xi}(u)$, пропорциональную функции*

$$g(u) = \left(2 + \frac{\arcsin u}{5\pi}\right) u^3, \quad 0 < u < 1.$$

Оцените сверху трудоемкость метода.

РЕШЕНИЕ. Несложно убедиться в том, что плотность $f_{\xi}(u)$ не является элементарной (в первую очередь из-за того, что интеграл от функции $g(u)$ не берется аналитически).

Заметим, что $g(u) = Y(u) \times \tilde{g}^{(1)}(u)$, где $\tilde{g}^{(1)}(u) = u^3$ и $Y(u) = 2 + (\arcsin u)/(5\pi)$, причем, в силу монотонности функции $\arcsin u$ на интервале $(0, 1)$, выполнено неравенство $2 < Y(u) < 2,1$.

Тогда $g(u) < g^{(1)}(u) = 2,1 u^3$. Вычислим интеграл

$$\bar{G}^{(1)} = \int_0^1 g^{(1)}(u) du = \frac{2,1}{4}.$$

Плотность, пропорциональная мажоранте $g^{(1)}(u)$, является табличной (степенной): $f_{\xi^{(1)}}(u) = 4u^3$, $0 < u < 1$ (см. пример 2.2 и замечание 2.8); соответствующая моделирующая формула: $\xi_0^{(1)} = \sqrt[4]{\alpha_1}$; $\alpha_1 \in U(0, 1)$ (см. формулу (2.22)).

Алгоритм метода исключения включает следующие пункты.

1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ по формуле $\xi_0^{(1)} = \sqrt[4]{\alpha_1}$, а также величину $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)}) = 2,1\alpha_2(\xi_0^{(1)})^3$. Точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в «подграфике» мажоранты $g^{(1)}(u)$.

2. Проверяем неравенство $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ или

$$10,5\pi\alpha_2 < 10\pi + \arcsin \xi_0^{(1)}. \quad (14.46)$$

Если это неравенство выполнено, то точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ принадлежит «подграфику» функции $g(u)$ и является равномерно распределенной в этом множестве. Тогда в качестве выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ берем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$. Если же неравенство (14.46) не выполнено, то повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоёмкость построенного алгоритма пропорциональна величине s (это среднее число попыток розыгрыша пар $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ до выполнения неравенства (14.46)), которая оценивается сверху величиной $s < 2,1/2 = 1,05$. Близость числа s к единице свидетельствует об эффективности используемого алгоритма мажорантного метода исключения. Решение задачи Г1 и описание примера Г1 закончены.

ПРИМЕР Г2 (1,5 балла). Рассмотрим еще одну экзаменационную задачу.

ЗАДАЧА Г2 [13]. Сформулируйте мажорантный метод исключения и продемонстрируйте его на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения $f_\xi(u)$, пропорциональную функции

$$g(u) = \left(1 + \frac{\operatorname{arctg} u}{5\pi}\right) e^{-2u}, \quad u > 0.$$

Оцените сверху трудоемкость метода.

РЕШЕНИЕ. Несложно убедиться в том, что плотность $f_{\xi}(u)$ не является элементарной (в первую очередь из-за того, что интеграл от функции $g(u)$ не берется аналитически).

Заметим, что $g(u) = Y(u) \times \tilde{g}^{(1)}(u)$, где $\tilde{g}^{(1)}(u) = e^{-2u}$ и $Y(u) = 1 + (\operatorname{arctg} u)/(5\pi)$, причем, в силу монотонности функции $\operatorname{arctg} u$ на интервале $(0, +\infty)$, выполнено неравенство $1 < Y(u) < 1,1$. Тогда $g(u) < g^{(1)}(u) = 1,1 e^{-2u}$.

Несложно вычислить интеграл $\bar{G}^{(1)} = \int_0^{+\infty} g^{(1)}(u) du = 1,1/2$. Плотность, пропорциональная мажоранте $g^{(1)}(u)$, является табличной (экспоненциальной): $f_{\xi^{(1)}}(u) = 2e^{-2u}$, $u > 0$ (см. пример 2.1 и замечание 2.8); соответствующая моделирующая формула: $\xi_0^{(1)} = -(\ln \alpha_1)/2$; $\alpha_1 \in U(0, 1)$ (см. формулу (2.20)).

Алгоритм метода исключения включает следующие пункты.

1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ по формуле $\xi_0^{(1)} = -(\ln \alpha_1)/2$, а также величину $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)}) = 1,1 \alpha_2 e^{-2\xi_0^{(1)}}$. Точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в «подграфике» мажоранты $g^{(1)}(u)$.

2. Проверяем неравенство $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ или

$$5,5\pi \alpha_2 < 5\pi + \operatorname{arctg} \xi_0^{(1)}. \quad (14.47)$$

Если это неравенство выполнено, то точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ принадлежит «подграфику» функции $g(u)$ и является равномерно распределенной в этом множестве. Тогда в качестве выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ берем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$. Если же неравенство (14.47) не выполнено, то повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоемкость построенного алгоритма пропорциональна величине s (это среднее число попыток розыгрыша пар $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ до выполнения неравенства (14.47)), которая оценивается сверху величиной $s < 1,1$. Близость числа s к единице свидетельствует об эффективности используемого алгоритма мажорантного метода исключения. Решение задачи Г2 и описание примера Г2 закончены.

ПРИМЕР Г3 (1,5 балла). Рассмотрим последний пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА Г3 [13]. Сформулируйте мажорантный метод исключения и продемонстрируйте его на примере моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$f_\xi(u)$, пропорциональную функции

$$g(u) = \left(4 + \frac{\ln [1 + (e - 1)u]}{2} \right) \cos \left(\frac{\pi u}{2} \right), \quad 0 < u < 1.$$

Оцените сверху трудоемкость метода.

РЕШЕНИЕ. Несложно убедиться в том, что плотность $f_\xi(u)$ не является элементарной (в первую очередь из-за того, что интеграл от функции $g(u)$ не берется аналитически).

Заметим, что $g(u) = Y(u) \tilde{g}^{(1)}(u)$, где

$$\tilde{g}^{(1)}(u) = \cos(\pi u/2) \quad \text{и} \quad Y(u) = 4 + (1/2) \ln [1 + (e - 1)u],$$

причем, в силу монотонности функции $\ln [1 + (e - 1)u]$ на интервале $(0, 1)$, выполнено неравенство $4 < Y(u) < 4,5$. Тогда

$$g(u) < g^{(1)}(u) = 4,5 \cos(\pi u/2).$$

Вычислим интеграл $\bar{G}^{(1)} = \int_0^1 g^{(1)}(u) du = 4,5 \times 2/\pi$. Плотность, пропорциональная мажоранте $g^{(1)}(u)$ имеет вид: $f_{\xi^{(1)}}(u) = (\pi/2) \cos(\pi u/2)$, $0 < u < 1$. Формула метода обратной функции распределения для выборочного значения $\xi_0^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ получается из цепочки равенств

$$\int_0^{\xi_0^{(1)}} \frac{\pi}{2} \cos \left(\frac{\pi u}{2} \right) du = \alpha_1, \quad \sin \left(\frac{\pi u}{2} \right) \Big|_0^{\xi_0^{(1)}} = \alpha_1 \quad \text{и} \quad \xi_0^{(1)} = (2/\pi) \arcsin \alpha_1. \quad (14.48)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\xi_0 = (2/\pi) \arcsin 0 = 0$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\xi_0 = (2/\pi) \arcsin 1 = 1$.

Алгоритм метода исключения включает следующие пункты.

1. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(1)} = (2/\pi) \arcsin \alpha_1$, а также $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)}) = 4,5 \alpha_2 \cos(\pi \xi_0^{(1)}/2)$. Точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в «подграфике» мажоранты $g^{(1)}(u)$.

2. Проверяем неравенство $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ или

$$9\pi\alpha_2 < 8 + \ln [1 + (e - 1)\xi_0^{(1)}]. \quad (14.49)$$

Если это неравенство выполнено, то точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ принадлежит «подграфику» функции $g(u)$ и является равномерно распределенной в

этом множестве. Тогда в качестве выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ берем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$. Если же неравенство (14.49) не выполнено, то повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоёмкость построенного алгоритма пропорциональна величине s (это среднее число попыток розыгрыша пар $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ до выполнения неравенства (14.49)), которая оценивается сверху величиной $s < 4,5/4 = 1,125$. Близость числа s к единице свидетельствует об эффективности используемого алгоритма мажорантного метода исключения. Решение задачи ГЗ и описание примера ГЗ закончены.

Теперь обсудим **выполнение пункта Г.1 семестрового домашнего задания (СДЗ)**. Можно заметить, что приводимые до этого примеры применения мажорантного метода исключения – примеры 11.6, 11.8, Г1–Г3 – имели относительно низкие оценки СДЗ. Причина в том, что в применявшейся для создания этих примеров технологии Г простыми являлись как плотности $f_{\xi^{(1)}}(u)$, пропорциональные мажорантам (они чаще всего являлись табличными), так и функции $Y(u)$, определяющие вид мультипликативной «порчи».

Для «усложнения» плотности $f_{\xi^{(1)}}(u)$ следует применять технологию А (см. замечание 14.2).

«Усложнение» функции «порчи» $Y(u)$ связано с необходимостью нетривиального дополнительного исследования этой функции для поиска ее оценок сверху и снизу.

Приведем соответствующие примеры.

ПРИМЕР Г4 (2 балла; [13]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения $f_{\xi}(u)$, пропорциональную функции

$$g(u) = \frac{1}{u^2 \lg(u+10) + 10}, \quad 0 < u < 1.$$

Интеграл $\bar{G} = \int_0^1 (1/(u^2 \lg(u+10) + 10)) du$ не берется аналитически, поэтому функция $f_{\xi}(u)$ не является плотностью элементарного распределения.

Заметим, что $g(u) \leq g^{(1)}(u) = 1/(u^2 + 10)$, т. е. здесь

$$Y(u) = \frac{u^2 + 10}{u^2 \lg(u+10) + 10}, \quad \text{причем} \quad \frac{11}{\lg 11 + 10} < Y(u) < 1. \quad (14.50)$$

Последнее неравенство (14.50) следует из того, что разность между положительными знаменателем и числителем дроби, представляющей

функцию $Y(u)$, равная $(u^2 - 1) \lg(u + 10)$, растет с ростом u . Поэтому функция $Y(u)$ является убывающей и $Y(1) < Y(u) < Y(0)$.

Вычислим интеграл

$$\bar{G}^{(1)} = \int_0^1 \frac{du}{u^2 + 10} = \frac{1}{\sqrt{10}} \int_0^1 \frac{d(u/\sqrt{10})}{(u/\sqrt{10})^2 + 1} = \frac{\operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})}{\sqrt{10}}. \quad (14.51)$$

Таким образом,

$$f_{\xi^{(1)}}(u) = \frac{\sqrt{10}}{\operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})(u^2 + 10)}, \quad 0 < u < 1.$$

Формула метода обратной функции распределения для выборочного значения $\xi_0^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ получается (с учетом выкладок (14.51)) из цепочки равенств

$$\frac{\sqrt{10}}{\operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})} \int_0^{\xi_0^{(1)}} \frac{du}{u^2 + 10} = \alpha_1, \quad \operatorname{arctg}(\xi_0^{(1)}/\sqrt{10}) = \alpha_1 \operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})$$

и, наконец, $\xi_0^{(1)} = \sqrt{10} \operatorname{tg}[\alpha_1 \operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})]$.

Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\xi_0^{(1)} = \sqrt{10} \operatorname{tg}[0 \times \operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})] = 0$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\xi_0^{(1)} = \sqrt{10} \operatorname{tg}[1 \times \operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})] = 1$.

Тогда получаем алгоритм метода исключения, включающий следующие пункты.

1. Моделируем выборочные значения $\xi_0^{(1)} = \sqrt{10} \operatorname{tg}[\alpha_1 \operatorname{arctg}(1/\sqrt{10})]$ и $\eta_0 = \alpha_2 / [(\xi_0^{(1)})^2 + 10]$.

2. Проверяем неравенство $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ или

$$\alpha_2 [(\xi_0^{(1)})^2 \lg(\xi_0^{(1)} + 10) + 10] < (\xi_0^{(1)})^2 + 10.$$

Если это неравенство выполнено, то полагаем, что выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ равно $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Согласно соотношениям (14.44) и (14.50), трудоемкость построенного алгоритма пропорциональна величине s , которая оценивается сверху величиной $s < (\lg 11 + 10)/11 \approx 1,004$. Близость числа s к единице свидетельствует об эффективности используемого алгоритма мажорантного метода исключения. Описание примера Г4 закончено.

ПРИМЕР Г5 (2 балла; [41]). Пусть требуется построить алгоритм моделирования выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ , имеющей плотность распределения $f_\xi(u)$, пропорциональную функции

$$g(u) = \frac{u e^u}{(u+1)^2}, \quad 0 < u < 1.$$

Заметим, что

$$\bar{G} = \int_0^1 g(u) du = \frac{e^u}{u+1} \Big|_0^1 = \frac{e-2}{2},$$

и поэтому

$$f_\xi(u) = \frac{2u e^u}{(e-2)(u+1)^2}, \quad 0 < u < 1.$$

Плотность $f_\xi(u)$ не является элементарной, так как уравнение (14.1) вида

$$\int_0^{\xi_0} p_\xi(u) du = \alpha_0, \quad \text{или} \quad \frac{2}{e-2} \left(\frac{e^{\xi_0}}{\xi_0+1} - 1 \right) = \alpha_0$$

неразрешимо относительно ξ_0 .

Заметим, что

$$g(u) = Y(u) \times \tilde{g}^{(1)}(u), \quad \text{где} \quad Y(u) = \frac{u}{(u+1)^2}, \quad \tilde{g}^{(1)}(u) = e^u.$$

Из неравенства $(u-1)^2 \geq 0$ следует, что $4u \leq u^2 + 2u + 1$, и поэтому $Y(u) = u/(u+1)^2 \leq 1/4$.

Выбираем в качестве мажоранты $g(u) \leq g^{(1)}(u) = e^u/4$. При этом $\bar{G}^{(1)} = (e-1)/4$ и $f_{\xi^{(1)}}(u) = e^u/(e-1)$. Соответствующая моделирующая формула метода обратной функции распределения получается из соотношений

$$\int_0^{\xi_0^{(1)}} \frac{e^u du}{e-1} = \alpha_1, \quad \text{или} \quad e^{\xi_0^{(1)}} - 1 = \alpha_1(e-1), \quad \text{или} \quad \xi_0^{(1)} = \ln [1 + \alpha_1(e-1)].$$

Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\xi_0^{(1)} = \ln [1 + 0 \times (e-1)] = \ln 1 = 0$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\xi_0^{(1)} = \ln [1 + 1 \times (e-1)] = \ln e = 1$.

Тогда получаем алгоритм метода исключения, включающий следующие пункты.

1. Моделируем выборочные значения $\xi_0^{(1)} = \ln [1 + \alpha_1(e - 1)]$ и $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$.

2. Проверяем неравенство

$$\eta_0 < g(\xi_0^{(1)}), \text{ или } \alpha_2(\xi_0^{(1)} + 1)^2 < 4\xi_0^{(1)}.$$

Если это неравенство выполнено, то полагаем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоемкость построенного алгоритма пропорциональна величине s , равной

$$s = \frac{\bar{G}^{(1)}}{G} = \frac{e - 1}{2(e - 2)} \approx 1,125.$$

Близость числа s к единице свидетельствует об эффективности используемого алгоритма мажорантного метода исключения. Описание примера Г5 закончено.

Теперь рассмотрим **выполнение пункта Г.2 семестрового домашнего задания (СДЗ)**. Заметим, что алгоритм Г1 и технология Г применимы и для многомерного (в частности двумерного) случая.

ПРИМЕР Г6 (1,5 балла; [13]). Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования выборочного значения $\xi_0 = (\nu_0, \mu_0)$ двумерного случайного вектора $\xi = (\nu, \mu)$, имеющего плотность распределения $f_{\xi}(u, v)$, пропорциональную функции

$$g(u, v) = e^u e^v (\sin u + \sin v), \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}, \quad 0 < v < \frac{\pi}{2}. \quad (14.52)$$

Используя «симметрию» функции (14.52) относительно u, v и реализуя интегрирование по частям (см. также выкладки из примера 11.6), получаем

$$\begin{aligned} \bar{G} &= \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} g(u, v) du dv = 2 \left(\int_0^{\pi/2} e^u du \right) \times \left(\int_0^{\pi/2} e^v \sin v dv \right) = \\ &= e^u \Big|_0^{\pi/2} \times [e^v (\sin v - \cos v)] \Big|_0^{\pi/2} = (e^{\pi/2} - 1)(e^{\pi/2} + 1). \end{aligned}$$

Аналогичные выкладки (см. также рассуждения из примера 11.6) показывают, что ни одно из представлений вида (14.19) и (14.20) для плотности

$$f_{\xi}(u, v) = \frac{e^u e^v (\sin u + \sin v)}{(e^{\pi} - 1)}, \quad 0 < u < \frac{\pi}{2}, \quad 0 < v < \frac{\pi}{2}$$

не дает эффективных алгоритмов моделирования значений ν_0 и μ_0 .

По аналогии с примером 11.6 в качестве мажоранты функции (14.52) берем

$$g(u, v) \leq g^{(1)}(u, v) = 2e^u e^v, \quad \text{при этом } \bar{G}^{(1)} = 2(e^{\pi/2} - 1)^2$$

и

$$f_{\xi^{(1)}}(u, v) = \frac{e^u}{e^{\pi/2} - 1} \times \frac{e^v}{e^{\pi/2} - 1}, \quad 0 < u < \pi/2, \quad 0 < v < \pi/2,$$

т. е. соответствующий вектор $\xi^{(1)} = (\nu^{(1)}, \mu^{(1)})$ имеет независимые одинаково распределенные компоненты с усеченными экспоненциальными распределениями (11.43) (при $\lambda = 1$) и моделирующими формулами вида $\xi_0 = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1)\tilde{\alpha}_0]$; $\tilde{\alpha}_0 \in U(0, 1)$ – см. пример 11.7.

Тогда получаем алгоритм мажорантного метода исключения, включающий следующие пункты.

1. Численно моделируем выборочные значения

$$\nu_0^{(1)} = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1)\alpha_1], \quad \mu_0^{(1)} = \ln [1 + (e^{\pi/2} - 1)\alpha_2],$$

а также $\eta_0 = \alpha_3 g^{(1)}(\nu_0^{(1)}, \mu_0^{(1)})$.

2. Проверяем неравенство $\eta_0 < g(\nu_0^{(1)}, \mu_0^{(1)})$ или

$$2\alpha_3 < \sin \nu_0^{(1)} + \sin \mu_0^{(1)}.$$

Если это неравенство выполнено, то полагаем, что выборочные значения ν_0, μ_0 случайных величин ν и μ равны $\nu_0 = \nu_0^{(1)}, \mu_0 = \mu_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоёмкость построенного алгоритма пропорциональна величине s , равной

$$s = \frac{\bar{G}^{(1)}}{G} = \frac{2(e^{\pi/2} - 1)}{e^{\pi/2} + 1} \approx 1,3.$$

Близость числа s к единице свидетельствует об эффективности используемого алгоритма мажорантного метода исключения. Описание примера Г6 закончено.

Невысокая оценка СДЗ за пример Г6 обусловлена следующими причинами:

- этот пример является аналогом примера 11.6;
- компоненты вектора $\xi^{(1)} = (\nu^{(1)}, \mu^{(1)})$ независимы (к слову, в пункте Г.2 этот недостаток считается намного менее значительным, чем в пункте Б);

– плотности распределения компонент $\nu^{(1)}$ и $\mu^{(1)}$ вектора $\xi^{(1)}$ «простоваты» – они являются одинаковыми усеченными экспоненциальными распределениями – см. пример 11.7;

– простой вид имеет функция «порчи» $Y(u, v) = \sin u + \sin v$, позволяющая легко получить оценку сверху $Y(u, v) \leq 2$.

Определенным достоинством этого примера Г6 (как и примера 11.6) является то, что трудоемкость s вычисляется точно.

В следующем примере перечисленные недостатки ликвидированы, и потому оценка СДЗ – выше.

ПРИМЕР Г7 (2,5 балла). Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования выборочного значения $\xi_0 = (\nu_0, \mu_0)$ двумерного случайного вектора $\xi = (\nu, \mu)$, имеющего плотность распределения $f_{\xi}(u, v)$, пропорциональную функции

$$g(u, v) = u^2 v^3 \cos v^3 e^{-vu^3} \sqrt{1 + \frac{11}{25} \cos^2(u + v)}, \quad u > 0, \quad 0 < v < \sqrt[3]{\frac{\pi}{2}}. \quad (14.53)$$

Плотность $f_{\xi}(u, v)$ не является моделируемой (в частности, из-за того, что интеграл от функции (14.53) не берется аналитически ни по u , ни по v).

Функция $g(u, v)$ представима в виде (14.43):

$$g(u, v) = \tilde{g}^{(1)}(u, v) \times Y(u, v),$$

$$\text{где } \tilde{g}^{(1)}(u, v) = u^2 v^3 \cos v^3 e^{-vu^3}, \quad Y(u, v) = \sqrt{1 + \frac{11}{25} \cos^2(u + v)}.$$

Так как $0 \leq \cos^2(u + v) \leq 1$, то $A = 1 \leq Y(u) \leq \sqrt{1 + \frac{11}{25}} = 6/5 = B$ (к слову, функция «порчи» здесь, как и в примере Г6, не слишком «сложная»).

Поэтому

$$g(u, v) \leq g^{(1)}(u, v) = B \tilde{g}^{(1)}(u, v) = \frac{6}{5} u^2 v^3 \cos v^3 e^{-vu^3}; \quad u > 0, \quad 0 < v < \sqrt[3]{\frac{\pi}{2}}.$$

Построенная мажоранта $g^{(1)}(u, v)$ не интегрируется аналитически по v , поэтому представление вида (14.19) для рассматриваемой далее плотности $f_{\xi^{(1)}}(u, v)$ не дает эффективного алгоритма моделирования выборочных значений $\xi_0^{(1)} = (\nu_0^{(1)}, \mu_0^{(1)})$ соответствующего вектора $\xi^{(1)} = (\nu^{(1)}, \mu^{(1)})$.

Интегрируя функцию $g^{(1)}(u, v)$ по u от 0 до $+\infty$, получаем

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} g^{(1)}(u, v) du &= \frac{2}{5} v^2 \cos v^3 \int_0^{+\infty} 3vu^2 e^{-vu^3} du = \\ &= \frac{2}{5} v^2 \cos v^3 \times (-e^{-vu^3}) \Big|_0^{+\infty} = \frac{2}{5} v^2 \cos v^3. \end{aligned} \quad (14.54)$$

Интегрируя полученную функцию по v от 0 до $\sqrt[3]{\pi/2}$, получаем

$$\bar{G}^{(1)} = \frac{2}{5} \int_0^{\sqrt[3]{\pi/2}} v^2 \cos v^3 dv = \frac{2}{15} \sin v^3 \Big|_0^{\sqrt[3]{\pi/2}} = \frac{2}{15}. \quad (14.55)$$

Таким образом,

$$f_{\xi^{(1)}}(u, v) = \frac{g^{(1)}(u, v)}{\bar{G}^{(1)}} = 9u^2 v^3 \cos v^3 e^{-vu^3}; \quad u > 0, \quad 0 < v < \sqrt[3]{\frac{\pi}{2}}.$$

Компоненты $\nu^{(1)}$ и $\mu^{(1)}$ вектора $\xi^{(1)}$ *зависимы*, причем, как указано выше, представление вида (14.19) для плотности $f_{\xi^{(1)}}(u, v)$ не дает эффективных алгоритмов моделирования значений $\nu_0^{(1)}$ и $\mu_0^{(1)}$ (интеграл по v от функции $f_{\xi^{(1)}}(u, v)$ не берется аналитически).

Для представления вида (14.20) по аналогии с выкладками (14.54) получаем

$$f_{\mu^{(1)}}(v) = \int_0^{+\infty} f_{\xi^{(1)}}(u, v) du = 9 \int_0^{+\infty} u^2 v^3 \cos v^3 e^{-vu^3} du = 3v^2 \cos v^3$$

(здесь $v \in (0, \sqrt[3]{\pi/2})$), а также

$$f_{\nu^{(1)}}(u|v) = \frac{f_{\xi^{(1)}}(u, v)}{f_{\mu^{(1)}}(v)} = 3vu^2 e^{-vu^3}, \quad u > 0.$$

По аналогии с выкладками (14.55) выведем формулу метода обратной функции распределения для значения $\mu_0^{(1)}$:

$$3 \int_0^{\mu_0^{(1)}} v^2 \cos v^3 dv = \alpha_1, \quad \text{или} \quad \sin v^3 \Big|_0^{\mu_0^{(1)}} = \alpha_1, \quad \text{или} \quad \mu_0^{(1)} = \sqrt[3]{\arcsin \alpha_1}.$$

Проверка 2.1 при $\alpha_1 = 0$ дает $\mu_0^{(1)} = \sqrt[3]{\arcsin 0} = 0$, а при $\alpha_1 = 1$ имеем $\mu_0^{(1)} = \sqrt[3]{\arcsin 1} = \sqrt[3]{\pi/2}$.

Теперь выведем формулу метода обратной функции распределения для значения $\nu_0^{(1)}$:

$$3 \int_0^{\nu_0^{(1)}} \mu_0^{(1)} u^2 e^{-\mu_0^{(1)} u^3} du = \alpha'_2, \quad \text{или} \quad \left(-e^{-\mu_0^{(1)} u^3} \right) \Big|_0^{\nu_0^{(1)}} = \alpha'_2,$$

$$\text{или} \quad \nu_0^{(1)} = \sqrt[3]{-\frac{\ln \alpha_2}{\mu_0^{(1)}}}, \quad \text{где} \quad \alpha_2 = 1 - \alpha'_2.$$

Проверка 2.1 при $\alpha'_2 = 0$ дает $\alpha_2 = 1$ и $\nu_0^{(1)} = \sqrt[3]{(-\ln 1)/\mu_0^{(1)}} = 0$, а при $\alpha'_2 = 1$ имеем $\alpha_2 = 0$ и $\mu_0^{(1)} = \sqrt[3]{(-\ln 0)/\mu_0^{(1)}} = +\infty$.

Получаем алгоритм мажорантного метода исключения, включающий следующие пункты.

1. Численно моделируем выборочные значения $\mu_0^{(1)} = \sqrt[3]{\arcsin \alpha_1}$, $\nu_0^{(1)} = \sqrt[3]{-\frac{\ln \alpha_2}{\mu_0^{(1)}}}$, а также $\eta_0 = \alpha_3 g^{(1)}(\nu_0^{(1)}, \mu_0^{(1)})$.

2. Проверяем неравенство $\eta_0 < g(\nu_0^{(1)}, \mu_0^{(1)})$ или

$$6\alpha_3 < \sqrt{25 + 11 \cos^2(\nu_0^{(1)} + \mu_0^{(1)})}.$$

Если это неравенство выполнено, то полагаем, что выборочные значения ν_0 , μ_0 случайных величин ν и μ равны $\nu_0 = \nu_0^{(1)}$, $\mu_0 = \mu_0^{(1)}$, иначе повторяем пункт 1 и т. д.

Трудоемкость построенного алгоритма пропорциональна величине s , которая оценивается сверху величиной $s \leq B/A = 6/5 = 1,2$.

Близость числа s к единице свидетельствует об эффективности используемого алгоритма мажорантного метода исключения. Описание примера Г7 закончено.

14.6. Решение и конструирование задач по теме «Выборка по важности». Применение технологии «порчи» моделируемой плотности. Напомним (см. подраздел 1.6 данного пособия), что стандартный алгоритм метода Монте-Карло для вычисления интеграла $I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ состоит в представлении его в виде математического ожидания

$$I = \int_X \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})} f_{\xi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta, \quad \zeta = q(\xi) = \frac{g(\xi)}{f_{\xi}(\xi)}, \quad \mathbf{x}, \xi \in \mathbb{R}^d$$

(здесь вектор ξ имеет плотность распределения $f_{\xi}(\mathbf{x})$) и приближении I на основе закона больших чисел: $I \approx (1/n) \sum_{i=1}^n \zeta_i$; здесь $\zeta_i = q(\xi_i)$ – получаемые на ЭВМ выборочные значения случайной величины ζ .

При фиксированном уровне погрешности затраты этого алгоритма пропорциональны величине *трудоемкости* $S = t \times \mathbf{D}\zeta$, где t – среднее время ЭВМ для реализации одного выборочного значения ζ_i (это время, в свою очередь, зависит от затрат на реализацию выборочного значения ξ_i случайного вектора ξ согласно плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$).

При выборе плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ следует минимизировать величину S , т. е. требуется, чтобы

- выборочные значения ξ_i реализовывались на ЭВМ достаточно быстро,
- дисперсия $\mathbf{D}\zeta$ случайной величины ζ была мала.

Значительная часть модификаций стандартного алгоритма метода Монте-Карло связана с уменьшением дисперсии $\mathbf{D}\zeta$ (см. разделы 3–5 данного пособия).

Дисперсия, в частности, будет тем меньше, чем ближе плотность $f_{\xi}(\mathbf{x})$ к функции вида $|g(\mathbf{x})|/\tilde{I}$ (здесь $\tilde{I} = \int |g(\mathbf{x})| d\mathbf{x}$; при $g(\mathbf{x}) \geq 0$ величина \tilde{I} совпадает с I); на этом основан *метод выборки по важности* (см. раздел 4 данного пособия).

Технология создания примеров интегралов, для вычисления которых целесообразно применять метод выборки по важности, во многом схожа с технологией Γ (т. е. с *технологией «порчи» моделируемой плотности*) из предыдущего подраздела 14.5 данного пособия.

ТЕХНОЛОГИЯ Д. *Конструируем эффективно моделируемую плотность распределения $f_{\xi}(\mathbf{x}, \mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^d)$ вектора ξ (как правило, компоненты этого вектора берутся независимыми или попарно зависимыми – см. подраздел 14.3) и выбираем функцию $q(\mathbf{x})$, заключенную между близкими положительными константами: $0 < m_1 \lesssim q(\mathbf{x}) \lesssim m_2$ (т. е. разность $(m_2 - m_1)$ невелика). Ставится задача вычисления интеграла*

$$I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad g(\mathbf{x}) = f_{\xi}(\mathbf{x}) \times q(\mathbf{x}).$$

Здесь надо позаботиться о том, чтобы получаемый интеграл не брался аналитически (т. е., как и в технологии Γ , умножение на функцию $q(\mathbf{x})$ должно «портить» моделируемую плотность $f_{\xi}(\mathbf{x})$). В этом случае в стандартном алгоритме метода Монте-Карло берем

$\zeta = q(\boldsymbol{\xi})$. Согласно утверждению 4.3, дисперсия $\mathbf{D}\zeta$ ограничена сверху величиной $(m_2 - m_1)^2/4$.

Заметим, что технология Д применена при составлении примера 4.1 (см. подраздел 4.2 данного пособия), где строился алгоритм вычисления четырехкратного интеграла, при этом

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = \left[\frac{\pi}{2} \cos\left(\frac{\pi x^{(1)}}{2}\right) \right] \times \left[2e^{-2x^{(2)}} \right] \times \left[4(x^{(3)})^3 \right] \times 1$$

(здесь $\mathbf{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)})$ и $0 < x^{(1)} < 1$; $x^{(2)} > 0$; $0 < x^{(3)} < 1$; $0 < x^{(4)} < 1$), а также

$$q(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \times \operatorname{arctg} \left[(x^{(1)})^2 x^{(2)} + (x^{(3)})^3 (x^{(4)})^4 \right].$$

В данном подразделе, как и в примере 4.1, рассмотрены алгоритмы вычисления четырехкратных интегралов (т. е. $d = 4$). Согласно теории кубатурных формул (см., например, [16]), именно начиная с этой размерности методы Монте-Карло начинают превосходить по эффективности детерминированные (сеточные) алгоритмы численного интегрирования, т. е. здесь предпринята попытка показать «реальные» задачи.

Разберем сначала *экзаменационные задачи по теме «Выборка по важности»*. Эти задачи сконструированы согласно технологии Д.

Ставится задача вычисления интеграла $I = \int_X g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$, $\mathbf{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)})$, причем подынтегральная функция $g(\mathbf{x})$ имеет вид $g(\mathbf{x}) = \tilde{f}(\mathbf{x}) \times \tilde{q}(\mathbf{x})$, где функция $\tilde{f}(\mathbf{x})$ пропорциональна простой эффективно моделируемой плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = H\tilde{f}(\mathbf{x})$ случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$ с независимыми компонентами, распределенными, как правило, согласно табличным плотностям (см. замечание 2.8).

Для моделирования выборочных значений $\xi_i^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$; $i = 1, \dots, n$ можно использовать соответствующие табличные формулы (2.20), (2.22), (2.23), при этом проверка 2.1 не требуется.

Функция $\tilde{q}(\mathbf{x})$ легко оценивается сверху и снизу положительными числами $0 < A \leq \tilde{q}(\mathbf{x}) \leq B$. В стандартном алгоритме метода Монте-Карло имеем $\zeta = q(\boldsymbol{\xi}) = \tilde{q}(\boldsymbol{\xi})/H$, при этом $m_1 \leq q(\mathbf{x}) \leq m_2$, где $m_1 = A/H$, $m_2 = B/H$. Дисперсия $\mathbf{D}\zeta$ оценивается сверху величиной $(m_2 - m_1)^2/4$. Малость этой величины обосновывает эффективность соответствующего алгоритма выборки по важности.

Сразу отметим, что *пример 4.1 из подраздела 4.2 является примером экзаменационной задачи по теме «Выборка по важности».*

ПРИМЕР Д1 (1,5 балла). Рассмотрим еще одну экзаменационную задачу.

ЗАДАЧА Д1 [13]. *Сформулируйте метод выборки по важности и продемонстрируйте его на примере вычисления интеграла*

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^{+\infty} \left[x^{(2)} (x^{(3)})^2 e^{-4x^{(4)}} \times \right. \\ \left. \times \sqrt{2 + \cos [6x^{(1)} (x^{(2)})^3 (x^{(3)})^7 (x^{(4)})^9]} \right] dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)} dx^{(4)}.$$

Оцените сверху дисперсию соответствующего весового оценителя (монте-карловской оценки).

Здесь и далее верхний и нижний индекс при первом символе интеграла обозначают интервал изменения переменной $x^{(1)}$, индексы при втором символе интеграла – интервал изменения $x^{(2)}$ и т. д.

РЕШЕНИЕ. В качестве плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ выбираем

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) = f_{\xi}(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = 1 \times [2x^{(2)}] \times [3(x^{(3)})^2] \times [4e^{-4x^{(4)}}],$$

где $0 < x^{(j)} < 1$, $j = 1, 2, 3$ и $x^{(4)} > 0$, а функция $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})/f_{\xi}(\mathbf{x})$ имеет вид

$$q(\mathbf{x}) = q(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = \frac{1}{24} \times \sqrt{2 + \cos [6x^{(1)} (x^{(2)})^3 (x^{(3)})^7 (x^{(4)})^9]}.$$

Учитывая, что $-1 \leq \cos u \leq 1$, получаем неравенство $m_1 \leq q(\mathbf{x}) \leq m_2$, где $m_1 = 1/24$ и $m_2 = \sqrt{3}/24$.

Имеем $I = \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E}q(\xi)$, где $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$, причем компоненты $\xi^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$ независимы.

Компонента $\xi^{(1)}$ имеет табличное (равномерное) распределение в интервале $(0, 1)$ (см. замечание 2.8), и для реализации соответствующих выборочных значений $\xi_i^{(1)}$ следует использовать формулу (2.23).

Компоненты $\xi^{(2)}, \xi^{(3)}$ имеют табличные (степенные) распределения (2.21), и для реализации соответствующих выборочных значений $\xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)}$ следует использовать формулу (2.22).

Компонента $\xi^{(4)}$ также имеет табличное (на сей раз экспоненциальное) распределение (2.18) с параметром $\lambda = 4$, и для реализации соответствующих выборочных значений $\xi_i^{(4)}$ следует использовать формулу (2.20).

Получаем следующий алгоритм выборки по важности.

Численно моделируем выборочные значения компонент четырехмерного случайного вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$ по формулам:

$$\xi_i^{(1)} = \alpha_{1,i}, \quad \xi_i^{(2)} = \sqrt{\alpha_{2,i}}, \quad \xi_i^{(3)} = \sqrt[3]{\alpha_{3,i}}, \quad \xi_i^{(4)} = (-\ln \alpha_{4,i})/4,$$

где $i = 1, \dots, n$, а $\alpha_{j,i} \in U(0, 1)$; $j = 1, 2, 3, 4$ – стандартные случайные числа, и приближенно вычисляем интеграл

$$I \approx \frac{1}{24n} \sum_{i=1}^n \sqrt{2 + \cos \left[6\xi_i^{(1)} (\xi_i^{(2)})^3 (\xi_i^{(3)})^7 (\xi_i^{(4)})^9 \right]}.$$

Справедливо неравенство $D\zeta \leq (m_2 - m_1)^2/4 \approx 2,33 \cdot 10^{-4}$. Это достаточно малая величина и, следовательно, предложенный алгоритм выборки по важности эффективен. Решение задачи Д1 и описание примера Д1 закончены.

ПРИМЕР Д2 (1,5 балла). Приведем заключительный пример экзаменационной задачи.

ЗАДАЧА Д2 [13]. *Сформулируйте метод выборки по важности и продемонстрируйте его на примере вычисления интеграла*

$$I = \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^1 \int_0^{\pi/2} \left[e^{-10x^{(1)} - \pi x^{(2)}} \times \cos x^{(4)} \times \right. \\ \left. \times \arcsin \left[\frac{1}{1 + x^{(1)}(x^{(2)})^2(x^{(3)})^3(x^{(4)})^4} \right] \right] dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)} dx^{(4)}.$$

Оцените сверху дисперсию соответствующего весового оценителя (монте-карловской оценки).

РЕШЕНИЕ. В качестве плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ выбираем

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) = f_{\xi}(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = [10e^{-10x^{(1)}}] \times [\pi e^{-\pi x^{(2)}}] \times 1 \times [\cos x^{(4)}],$$

где $x^{(1)} > 0$, $x^{(2)} > 0$, $0 < x^{(3)} < 1$, $0 < x^{(4)} < \pi/2$, а функция $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})/f_{\xi}(\mathbf{x})$ имеет вид

$$q(\mathbf{x}) = q(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = \frac{1}{10\pi} \times \arcsin \left[\frac{1}{1 + x^{(1)}(x^{(2)})^2(x^{(3)})^3(x^{(4)})^4} \right].$$

Так как $0 < \arcsin u < \pi/2$ при $0 < u < 1$, то выполнено неравенство $m_1 \leq q(\mathbf{x}) \leq m_2$, где $m_1 = 0$ и $m_2 = 1/20$.

Имеем $I = \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi})$, где $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$, причем компоненты $\xi^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$ независимы.

Компоненты $\xi^{(1)}, \xi^{(2)}$ имеют табличные (экспоненциальные) распределения с параметрами $\lambda = 4$ и $\lambda = \pi$ соответственно (см. замечание 2.8), и для реализации выборочных значений $\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}$ следует использовать формулы вида (2.20).

Компонента $\xi^{(3)}$ также имеет табличное (равномерное) распределение в интервале $(0, 1)$, и для реализации соответствующих выборочных значений $\xi_i^{(3)}$ следует использовать формулу (2.23).

Для компоненты $\xi^{(4)}$ несложно вывести формулу метода обратной функции распределения: $\int_0^{\xi_i^{(4)}} \cos x^{(4)} dx^{(4)} = \alpha_{4,i}$, или $\sin \xi_i^{(4)} = \alpha_{4,i}$, или $\xi_i^{(4)} = \arcsin \alpha_{4,i}$.

Проверка 2.1 при $\alpha_{4,i} = 0$ дает $\xi_i^{(4)} = \arcsin 0 = 0$, а при $\alpha_{4,i} = 1$ имеем $\xi_i^{(4)} = \arcsin 1 = \pi/2$.

Получаем следующий алгоритм выборки по важности.

Численно моделируем выборочные значения компонент четырехмерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$ по формулам:

$$\xi_i^{(1)} = (-\ln \alpha_{1,i})/10, \quad \xi_i^{(2)} = (-\ln \alpha_{2,i})/\pi, \quad \xi_i^{(3)} = \alpha_{3,i}, \quad \xi_i^{(4)} = \arcsin \alpha_{4,i},$$

где $i = 1, \dots, n$, а $\alpha_{j,i} \in U(0, 1)$; $j = 1, 2, 3, 4$ – стандартные случайные числа, и приближенно вычисляем

$$I \approx \frac{1}{10\pi n} \sum_{i=1}^n \arcsin \left[\frac{1}{1 + \xi_i^{(1)} (\xi_i^{(2)})^2 (\xi_i^{(3)})^3 (\xi_i^{(4)})^4} \right].$$

Справедливо неравенство $\mathbf{D}\zeta \leq (m_2 - m_1)^2/4 \approx 6,25 \cdot 10^{-4}$. Это достаточно малая величина и, следовательно, предложенный алгоритм выборки по важности эффективен. Решение задачи Д2 и описание примера Д2 закончены.

Теперь рассмотрим **выполнение пункта Д семестрового домашнего задания (СДЗ)**.

Заметим, что невысокие оценки СДЗ за примеры 4.1, Д1, Д2 обусловлены следующими причинами:

– компоненты четырехмерного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$ независимы;

– плотности распределения компонент $\xi^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$ «простоваты» – они являются в подавляющем числе случаев табличными (см. замечание 2.8);

– достаточно простой вид имеет функция «порчи» $\tilde{q}(\mathbf{x})$, позволяющая легко получить оценки сверху и снизу $0 < A \leq \tilde{q}(\mathbf{x}) \leq B$.

Для «усложнения» плотностей распределения компонент $\xi^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$ следует применять технологию А (см. замечание 14.2). Кроме того, с помощью технология Б можно сделать эти компоненты *попарно зависимыми*.

«Усложнение» функции «порчи» $\tilde{q}(\mathbf{x})$ связано с необходимостью нетривиального дополнительного исследования этой функции для поиска ее оценок сверху и снизу.

Приведем соответствующие примеры.

ПРИМЕР ДЗ (2,5 балла). Пусть требуется построить алгоритм метода Монте-Карло для приближенного вычисления четырехкратного интеграла

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(x^{(1)})^3 x^{(2)}}{[(x^{(1)})^4 + 1]^2} \times e^{-[2(x^{(2)})^2 + (x^{(3)})^2 + (x^{(4)})^2]/2} \times \\ \times \sqrt{1 + \frac{7 \sin^4 [x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)}]}{9}} dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)} dx^{(4)}.$$

В качестве плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ выбираем

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) = f_{\xi}(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = \frac{8(x^{(1)})^3}{[(x^{(1)})^4 + 1]^2} \times \\ \times \left[\frac{2e x^{(2)} e^{-(x^{(2)})^2}}{e - 1} \right] \times \frac{e^{-(x^{(3)})^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \times \frac{e^{-(x^{(4)})^2/2}}{\sqrt{2\pi}},$$

$$0 < x^{(1)} < 1, \quad 0 < x^{(2)} < 1, \quad -\infty < x^{(3)} < +\infty, \quad -\infty < x^{(4)} < +\infty.$$

Тогда

$$q(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})} = \frac{\pi(e - 1)}{8e} \times \sqrt{1 + (7/9) \sin^4 [x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)}]}.$$

Учитывая то, что $0 \leq \sin^4 [x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)}] \leq 1$, получаем, что значения функции $q(\mathbf{x})$ заключены между $m_1 = \pi(e - 1)/(8e) \approx 0,248$ и

$m_2 = \pi(e-1)/(6e) \approx 0,331$ (к слову, функция «порчи» здесь достаточно проста – в смысле сложности получения оценок снизу и сверху).

Имеем $I = \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi})$, где $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$, причем компоненты $\xi^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$ независимы.

Формула метода обратной функции распределения для выборочных значений $\xi_i^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ получается из цепочки равенств

$$\int_0^{\xi_i^{(1)}} \frac{8(x^{(1)})^3 dx^{(1)}}{[(x^{(1)})^4 + 1]^2} = \alpha_{1,i}, \quad -\frac{2}{(x^{(1)})^4 + 1} \Big|_0^{\xi_i^{(1)}} = \alpha_{1,i}, \quad 2 - \frac{2}{(\xi_i^{(1)})^4 + 1} = \alpha_{1,i}$$

и, наконец,

$$\xi_i^{(1)} = \sqrt[4]{\frac{\alpha_{1,i}}{2 - \alpha_{1,i}}}. \quad (14.56)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_{1,i} = 0$ дает $\xi_i^{(1)} = \sqrt[4]{0/(2-0)} = 0$, а при $\alpha_{1,i} = 1$ имеем $\xi_i^{(1)} = \sqrt[4]{1/(2-1)} = 1$.

Формула метода обратной функции распределения для выборочных значений $\xi_i^{(2)}$ случайной величины $\xi^{(2)}$ получается из цепочки равенств

$$\int_0^{\xi_i^{(2)}} \frac{2e x^{(2)} e^{-(x^{(2)})^2} dx^{(2)}}{e-1} = \alpha_{2,i}, \quad \frac{e}{e-1} - \frac{e^{1-(\xi_i^{(2)})^2}}{e-1} = \alpha_{2,i}$$

и, наконец,

$$\xi_i^{(2)} = \sqrt{-\ln(1 - \alpha_{2,i} + \alpha_{2,i}/e)}. \quad (14.57)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_{2,i} = 0$ дает $\xi_i^{(2)} = \sqrt{-\ln(1-0+0/e)} = 0$, а при $\alpha_{2,i} = 1$ имеем $\xi_i^{(2)} = \sqrt{-\ln(1-1+1/e)} = 1$.

Компоненты $\xi^{(3)}, \xi^{(4)}$ имеют стандартное нормальное распределение (13.2), и пары выборочных значений $(\xi_i^{(3)}, \xi_i^{(4)})$ можно получать по формулам (13.4):

$$\xi_i^{(3)} = \sqrt{-2 \ln \alpha_{3,i}} \sin 2\pi\alpha_{4,i}, \quad \xi_i^{(4)} = \sqrt{-2 \ln \alpha_{3,i}} \cos 2\pi\alpha_{4,i}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (14.58)$$

Получаем следующий алгоритм выборки по важности.

Используя формулы (14.56)–(14.58), моделируем значения $\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)}, \xi_i^{(4)}$ и приближенно вычисляем

$$I \approx \frac{\pi(e-1)}{8e \times n} \sum_{i=1}^n \sqrt{1 + \frac{7 \sin^4 [\xi_i^{(1)} \xi_i^{(2)} \xi_i^{(3)} \xi_i^{(4)}]}{9}}.$$

Справедливо неравенство $\mathbf{D}\zeta \leq (m_2 - m_1)^2/4 \approx 1,71 \cdot 10^{-3}$. Это достаточно малая величина и, следовательно, предложенный алгоритм выборки по важности эффективен. Описание примера ДЗ закончено.

Относительное «усложнение» в примере ДЗ (по сравнению с экзаменационными задачами из примеров 4.1, Д1 и Д2) связано с применением нетабличных формул (14.56), (15.57) и парной формулы Бокса – Мюллера (13.4) – см. соотношения (14.58).

В следующем примере использована попарная зависимость компонент вектора ξ (с моделирующими формулами, не являющимися табличными) и несколько «усложнена» функция «порчи».

ПРИМЕР Д4 (3 балла; [13]). Пусть требуется построить алгоритм метода Монте-Карло для приближенного вычисления четырехкратного интеграла

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{(x^{(1)})^2 [1 - (x^{(1)})^2]^{1/2} \cos(x^{(1)}x^{(2)}) (x^{(3)})^2}{\sin x^{(1)} \ln(1 + x^{(3)}) \sqrt{9 + 16(x^{(3)})^2} (1 + x^{(3)}x^{(4)})} \times \\ \times \frac{16 + (x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)} + 2)^4}{(x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)} + 2)^2} dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)} dx^{(4)}.$$

В качестве плотности $f_{\xi}(\mathbf{x})$ выбираем

$$f_{\xi}(\mathbf{x}) = \left[(3x^{(1)} [1 - (x^{(1)})^2]^{1/2}) \times \frac{x^{(1)} \cos(x^{(1)}x^{(2)})}{\sin x^{(1)}} \right] \times \\ \times \left[\frac{2x^{(3)}}{\sqrt{(x^{(3)})^2 + (3/4)^2}} \times \frac{x^{(3)}}{(1 + x^{(3)}x^{(4)}) \ln(1 + x^{(3)})} \right], \quad 0 < x^{(j)} < 1;$$

$j = 1, 2, 3, 4$.

Тогда

$$q(\mathbf{x}) = \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\xi}(\mathbf{x})} = q(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}) = \frac{16 + (x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)} + 2)^4}{6(x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)} + 2)^2} = \\ = \frac{1}{24} \left(w^2 + \frac{1}{w^2} \right), \quad \text{где } w = \frac{x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}x^{(4)} + 2}{2}.$$

Заметим, что $w \in (1; 5)$. Кроме того, функция $t(w) = w^2 + 1/w^2$ возрастает на этом промежутке $w \in (1; 5)$. Действительно,

$$t'(w) = 2w - 2/w^3 = \frac{2(w-1)(w+1)(w^2+1)}{w^3} > 0.$$

Поэтому $m_1 = (1/24) \times 2 = 1/12$ и $m_2 = (1/24) \times (9/4 + 4/9) = 97/864$.

Имеем $I = \mathbf{E}\zeta = \mathbf{E}q(\boldsymbol{\xi})$, где $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(4)})$, причем компоненты $\xi^{(1)}, \xi^{(2)}$ и $\xi^{(3)}, \xi^{(4)}$ попарно независимы.

Формула метода обратной функции распределения для выборочных значений $\xi_i^{(1)}$ случайной величины $\xi^{(1)}$ получается из цепочки равенств

$$\int_0^{\xi_i^{(1)}} 3x^{(1)} [1 - (x^{(1)})^2]^{1/2} dx^{(1)} = \alpha'_{1,i}, \quad 1 - [1 - (\xi_i^{(1)})^2]^{3/2} = \alpha'_{1,i}$$

и, наконец,

$$\xi_i^{(1)} = \sqrt{1 - (\alpha_{1,i})^{2/3}}, \quad \alpha_{1,i} = 1 - \alpha'_{1,i}. \quad (14.59)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_{1,i} = 1$ дает $\alpha'_{1,i} = 0$ и $\xi_i^{(1)} = \sqrt{1 - 1^{2/3}} = 0$, а при $\alpha_{1,i} = 0$ имеем $\alpha'_{1,i} = 1$ и $\xi_i^{(1)} = \sqrt{1 - 0^{2/3}} = 1$.

Формула метода обратной функции распределения для выборочных значений $\xi_i^{(2)}$ случайной величины $\xi^{(2)}$ получается из цепочки равенств

$$\int_0^{\xi_i^{(2)}} \frac{\xi_i^{(1)} \cos(\xi_i^{(1)} x^{(2)}) dx^{(2)}}{\sin \xi_i^{(1)}} = \alpha_{2,i}, \quad \frac{\sin(\xi_i^{(1)} \xi_i^{(2)})}{\sin \xi_i^{(1)}} = \alpha_{2,i}$$

и, наконец,

$$\xi_i^{(2)} = \frac{\arcsin(\alpha_{2,i} \sin \xi_i^{(1)})}{\xi_i^{(1)}}. \quad (14.60)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_{2,i} = 0$ дает $\xi_i^{(2)} = (1/\xi_i^{(1)}) \arcsin(0 \times \sin \xi_i^{(1)}) = 0$, а при $\alpha_{2,i} = 1$ имеем $\xi_i^{(2)} = (1/\xi_i^{(1)}) \arcsin(1 \times \sin \xi_i^{(1)}) = \xi_i^{(1)}/\xi_i^{(1)} = 1$.

Формула метода обратной функции распределения для выборочных значений $\xi_i^{(3)}$ случайной величины $\xi^{(3)}$ получается из цепочки равенств

$$\int_0^{\xi_i^{(3)}} \frac{2x^{(3)} dx^{(3)}}{\sqrt{(x^{(3)})^2 + (3/4)^2}} = \alpha_{3,i}, \quad 2 \left[\sqrt{(\xi_i^{(3)})^2 + (3/4)^2} - 3/4 \right] = \alpha_{3,i}$$

и, наконец,

$$\xi_i^{(3)} = \frac{\sqrt{\alpha_{3,i}(3 + \alpha_{3,i})}}{2}. \quad (14.61)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_{3,i} = 0$ дает $\xi_i^{(3)} = (1/2)\sqrt{0(3+0)} = 0$, а при $\alpha_{3,i} = 1$ имеем $\xi_i^{(2)} = (1/2)\sqrt{1(3+1)} = 1$.

Формула метода обратной функции распределения для выборочных значений $\xi_i^{(4)}$ случайной величины $\xi^{(4)}$ получается из цепочки равенств

$$\int_0^{\xi_i^{(4)}} \frac{\xi_i^{(3)} dx^{(4)}}{(1 + \xi_i^{(3)} x^{(4)}) \ln(1 + \xi_i^{(3)})} = \alpha_{4,i}, \quad \frac{\ln(1 + \xi_i^{(3)} \xi_i^{(4)})}{\ln(1 + \xi_i^{(3)})} = \alpha_{4,i}$$

и, наконец,

$$\xi_{4,i} = \frac{\exp[\alpha_{4,i} \times \ln(1 + \xi_i^{(3)})] - 1}{\xi_i^{(3)}}. \quad (14.62)$$

Проверка 2.1 при $\alpha_{4,i} = 0$ дает

$$\xi_i^{(4)} = \frac{\exp[0 \times \ln(1 + \xi_i^{(3)})] - 1}{\xi_i^{(3)}} = 0,$$

а при $\alpha_{4,i} = 1$ имеем

$$\xi_i^{(4)} = \frac{\exp[1 \times \ln(1 + \xi_i^{(3)})] - 1}{\xi_i^{(3)}} = \frac{1 + \xi_i^{(3)} - 1}{\xi_i^{(3)}} = 1.$$

Получаем следующий алгоритм выборки по важности.

Используя формулы (14.59)–(14.62), моделируем значения $\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)}, \xi_i^{(4)}$ и приближенно вычисляем

$$I \approx \frac{1}{24n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\theta_i} + \theta_i \right), \quad \text{где } \theta_i = \frac{(\xi_i^{(1)} \xi_i^{(2)} \xi_i^{(3)} \xi_i^{(4)} + 2)^2}{4}.$$

Справедливо неравенство $\mathbf{D}\zeta \leq (m_2 - m_1)^2/4 \approx 2,10 \cdot 10^{-4}$. Это достаточно малая величина и, следовательно, предложенный алгоритм выборки по важности эффективен. Описание примера Д4 закончено.

Приложение 1. Экзаменационные билеты

Каждый *билет содержит задачу* по одной из тем

- А) «Метод обратной функции распределения»,
- Б) «Моделирование двумерного вектора»,
- В) «Метод дискретной суперпозиции»,
- Г) «Мажорантный метод исключения»,
- Д) «Выборка по важности»

(соответствующие примеры подробно разобраны в разделе 14 данного пособия), а также *один теоретический вопрос* из следующего списка.

В списке после формулировки вопроса **жирным шрифтом** (в квадратных скобках) указаны основные разделы данного пособия, которые следует использовать при подготовке к ответу на экзамене. Кроме того, обычным шрифтом указаны разделы, где можно найти дополнительную информацию и примеры, касающиеся данного вопроса.

ЧАСТЬ 1. ОБЩАЯ СХЕМА МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО. ВЫЧИСЛЕНИЕ МНОГОКРАТНОГО ИНТЕГРАЛА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

1.1(1). Общая схема метода Монте-Карло. Примеры применения общей схемы [**1.4, 1.6**].

1.2(2). Обобщенная формула математического ожидания. Вычисление интеграла методом Монте-Карло. Сравнение с другими методами [**1.5, 1.6, 1.8**].

1.3(3). Погрешность и трудоемкость метода Монте-Карло. Оценка трудоемкости с помощью предварительных расчетов [**1.7, 1.8, 1.9, 1.10**].

1.4(4). Оптимизация и простейшая параллелизация метода Монте-Карло [**1.9, 1.10, 1.11**].

1.5(5). Преимущества и недостатки метода Монте-Карло [1.6, 1.7, 1.8, 1.9, 1.11, **1.12**, 2, 3.2, 4].

1.6(6). Общая схема рандомизации численной математической модели [**3.2**, 6.4, 6.5, 14.3].

1.7(7). Метод условного математического ожидания [**3.3**].

1.8(8). Метод расщепления и его оптимизация [**3.4**].

1.9(9). Теорема о минимальной дисперсии для оценщика интеграла. Выборка по важности [**4.1, 4.2**, 14.6].

- 1.10(10). Априорная оценка сверху для дисперсии [4.2, 14.6].
- 1.11(11). Включение особенности в плотность [4.3, 6.5, 8.2, 8.3].
- 1.12(12). Метод выделения главной части [5.1].
- 1.13(13) Метод интегрирования по части области [5.2].
- 1.14(14). Выборка по группам [5.3].

ЧАСТЬ 2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЛИНЕЙНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ
 ОТ РЕШЕНИЯ ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ
 ФРЕДГОЛЬМА ВТОРОГО РОДА. ПРИЛОЖЕНИЯ: ПЕРЕНОС
 ЧАСТИЦ И ИЗЛУЧЕНИЯ И ДР.

- 2.1(15). Простейшая модель переноса частиц. Вероятностные распределения в модели переноса частиц [6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6].
- 2.2(16). Вывод марковского уравнения Фредгольма второго рода для суммарной плотности столкновений. Ряд Неймана [6.1, 7.1].
- 2.3(17). Теоремы Леви и Лебега и их применения в теории методов Монте-Карло [7.2, 7.4, 8.5].
- 2.4(18). Линейный функционал от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода как сумма интегралов бесконечно возрастающей кратности. Оценитель для отдельного слагаемого [7.2, 7.3].
- 2.5(19). Классическая цепь Маркова, прикладная однородная цепь Маркова и их моделирование [2.8, 6.1, 7.4].
- 2.6(20). Основной оценитель и оценитель по поглощениям для линейного функционала [6.6, 7.4, 7.5].
- 2.7(21) Несмещенность основного оценителя и оценителя по поглощениям [7.4, 7.5].
- 2.8(22). Прямое моделирование. Конечность математического ожидания номера состояния обрыва прикладной однородной цепи Маркова [8.3, 8.4].
- 2.9(23). Дисперсия основного оценителя и оценителя по поглощениям. Оптимальные плотности [8.5].
- 2.10(24). Двойственное представление функционала. Локальный оценитель метода сопряженных блужданий и его применения [8.1, 8.2].
- 2.11(25). Функциональный локальный оценитель и его применения [8.2].
- 2.12(26). Проекционные и сеточные функциональные алгоритмы метода Монте-Карло и их оптимизация [8.6, 8.7].

ЧАСТЬ 3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН, ВЕКТОРОВ И ФУНКЦИЙ

3.1(27). Свойства стандартной случайной величины. Двоичное представление стандартной случайной величины. Генераторы стандартных случайных чисел [2.3, 9.2, 9.3].

3.2(28). Метод вычетов. Равномерность и корреляция соседних членов последовательности метода вычетов [9.3, 9.4].

3.3(29). Свойство периодичности, тестирование и использование метода вычетов для моделирования стандартных случайных чисел [9.1, 9.5, 9.6].

3.4(30). Стандартный алгоритм моделирования дискретных случайных величин и его средние затраты: случаи большого и малого числа значений [6.5, 10.1, 10.2, 10.3, 10.4].

3.5(31). Специальный метод моделирования равномерного дискретного распределения. Квантильный метод [10.5, 10.6].

3.6(32). Метод Уолкера [10.7].

3.7(33). Метод обратной функции распределения. Элементарные плотности распределения [2.5, 2.6, 6.5, 11.3, 11.6, 11.7, 14.2].

3.8(34). Условная плотность распределения. Моделирование случайного вектора [2.1, 2.2, 2.3, 2.7, 14.3].

3.9(35). Выбор и конструирование вероятностных плотностей распределения в алгоритмах метода Монте-Карло [2.8, 14.1, 14.2, 14.3, 14.4, 14.5].

3.10(36). Методы интегральной и дискретной суперпозиции. Модифицированный метод дискретной суперпозиции [3.1, 11.1, 11.2, 11.3, 11.4, 11.7, 14.4].

3.11(37). Мажорантный метод исключения. Двусторонний метод исключения [11.5, 11.6, 11.7, 14.5].

3.12(38). Моделирование гамма- и бета-распределений [12.1, 12.2, 12.3, 12.4].

3.13(39). Моделирование стандартного гауссовского распределения. Моделирование изотропного вектора. Моделирование гауссовского случайного вектора [6.3, 6.4, 13.1, 13.2, 13.3].

3.14(40). Численные модели однородных гауссовских случайных полей [13.4, 13.5].

Приложение 2. Контрольные вопросы

Весь курс и экзаменационные вопросы можно разбить на три части (см. приложение 1). Если экзаменуемый успешно решил задачу и ответил на теоретический вопрос из соответствующей части, то следует задать ему *контрольные вопросы по двум другим основным частям курса*. Примеры таких вопросов приводятся ниже.

После формулировки вопроса **жирным шрифтом** (в квадратных скобках) указан раздел (разделы) данного пособия, в котором содержится ответ на этот вопрос.

Контрольные вопросы по части 1 «Общая схема метода Монте-Карло. Вычисление многократного интеграла методом Монте-Карло»

Опишите общую схему метода Монте-Карло. [1.4]

Как вычислить математическое ожидание случайной величины методом Монте-Карло? [1.4]

Что такое оценитель (монте-карловская оценка)? [1.4]

Какая теорема теории вероятностей обосновывает общую схему метода Монте-Карло? [1.4]

Как записать интеграл в виде математического ожидания? [1.6]

Как выглядит весовой оценитель (монте-карловская оценка) интеграла? [1.6]

Каковы два основных приложения основной схемы метода Монте-Карло, описанные в данном курсе? [1.6]

Какой вид имеет аналитическое выражение для погрешности метода Монте-Карло? [1.7]

Какая теорема теории вероятностей является основой получения аналитического выражения для погрешности метода Монте-Карло? [1.7]

Почему при реализации методов Монте-Карло стараются (при прочих равных условиях) уменьшить дисперсию соответствующего оценителя? [1.7, 1.9]

Каков порядок погрешности метода Монте-Карло (по числу испытаний)? [1.8]

Как оцениваются затраты метода Монте-Карло? [1.9]

Что такое трудоемкость метода Монте-Карло? [1.9]

Как вычисляются дисперсия оценки и среднее время реализации одного выборочного значения? [1.10]

Опишите простейшую схему параллелизации вычислений по методу Монте-Карло. [1.11]

Каковы основные преимущества метода Монте-Карло? [1.12]

Каковы основные недостатки метода Монте-Карло? [1.12]

Опишите общую схему рандомизации. [3.2]

Напишите формулу для дисперсии весового оценителя интеграла. [3.3, 4.1]

Какова основная идея метода условного математического ожидания? [3.3]

Что такое формула полной дисперсии? [3.3]

Какова основная идея метода расщепления? [3.4]

Какой выбор плотности дает наименьшую дисперсию весового оценителя метода Монте-Карло для задачи вычисления интеграла? [4.1]

Что такое метод выборки по важности? [4.2]

Напишите априорную оценку дисперсии весового оценителя метода Монте-Карло для задачи вычисления интеграла. [4.2]

Как учитываются особенности подынтегральной функции (в том числе описываемые дельта-функциями) при построении оценителей метода Монте-Карло? [4.3]

Какова основная идея метода выделения главной части? [5.1]

Какова основная идея метода интегрирования по части области? [5.2]

Какова основная идея выборки по группам? [5.3]

Какие методы уменьшения дисперсии для задачи вычисления интеграла вы знаете? [3.3, 4.2, 5.1, 5.2, 5.3, 5.4]

Контрольные вопросы по части 2 «Вычисление линейных функционалов от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода. Приложения: перенос частиц и излучения и др.»

Что такое однородная цепь Маркова? Как моделируется конечный отрезок траектории этой цепи на компьютере? [2.8]

Что такое прикладная цепь Маркова? Как моделируются траектории этой цепи на компьютере? [2.8, 6.1]

Математическая модель какого физического процесса исторически явилась толчком для развития теории алгоритмов численного статистического моделирования? [6.1]

Опишите простейшую математическую модель процесса переноса частиц. [6.2]

Какой вероятностный процесс образуют состояния столкновений в модели переноса частиц? [6.2]

Какие вероятностные распределения приходится моделировать при реализации прямого моделирования процесса переноса излучения? [6.3, 6.5]

Какому уравнению удовлетворяет суммарная плотность состояний прикладной цепи Маркова? [6.1, 7.1]

В каком случае ряд Неймана является единственным решением интегрального уравнения Фредгольма второго рода? [6.1, 7.1]

Как проверить, что ряд Неймана является решением интегрального уравнения Фредгольма второго рода? [7.1]

Что такое марковское интегральное уравнение Фредгольма второго рода? [7.1]

Приведите пример интегрального уравнения Фредгольма второго рода, которое не является марковским. [7.2]

Сформулируйте теорему Леви. [7.2]

Сформулируйте теорему Лебега. [7.2]

Почему линейный функционал от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода можно трактовать как сумму интегралов бесконечно возрастающей кратности? [7.2]

Как связана идея построения основного оценителя линейного функционала от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода с методом выборки по важности? [7.3]

Опишите все обозначения в выражении для основного оценителя $\zeta = \sum_{m=0}^N Q^{(m)} h(\xi^{(m)})$. [7.3, 7.4]

Чему равно математическое ожидание основного оценителя $\zeta = \sum_{m=0}^N Q^{(m)} h(\xi^{(m)})$? [7.4]

Опишите алгоритм метода Монте-Карло для приближения линейного функционала от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода. [7.4]

Что такое оценитель по поглощениям? Приведите пример применения оценителя по поглощениям. [7.5, 6.6]

Что такое сопряженное интегральное уравнение? [8.1]

Что такое двойственное представление линейного функционала от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода? [8.1]

Что такое метод сопряженных блужданий? [8.1]

Что такое локальный оценитель? Какие локальные оценители вы знаете? [8.2]

Что такое прямое моделирование? [8.3]

Какова идея доказательства того, что среднее число состояний прикладной цепи Маркова конечно? [8.4]

Решения каких интегральных уравнений используются в выражении для дисперсии основного оценителя $\zeta = \sum_{m=0}^N Q^{(m)} h(\xi^{(m)})$? [8.5]

Для чего используются функциональные оценители метода Монте-Карло? [8.6]

Контрольные вопросы по части 3 «Численное моделирование случайных величин, векторов и функций»

Что такое стандартная случайная величина α ? [2.4]

Что такое стандартное случайное число α_0 ? [2.4]

Как выглядит плотность распределения стандартной случайной величины α ? [2.4]

Чему равны математическое ожидание и дисперсия стандартной случайной величины α ? [2.4]

Чему равна вероятность того, что стандартное случайное число α_0 попадет в интервал $(c, d) \subseteq (0, 1)$? [2.4]

Как выглядит двоичное представление стандартной случайной величины α ? [9.2]

Как моделируются стандартные случайные числа на ЭВМ? [9.3]

Каковы принципы построения физического датчика стандартных случайных чисел? [9.3]

Что такое мультипликативный метод вычетов? [9.3]

Какие свойства преобразования мультипликативного метода вычетов вы знаете? [9.4]

Почему в мультипликативном методе вычетов используется множитель $Q = 5^{2p+1}$ для достаточно больших p ? [9.4, 9.5]

Каким образом происходит тестирование генераторов стандартных случайных чисел? [9.6]

Каковы особенности использования мультипликативного метода вычетов в параллельных вычислениях? [9.6]

Опишите стандартный алгоритм моделирования дискретной случайной величины. [10.2]

Каковы средние затраты стандартного алгоритма моделирования дискретной случайной величины? [10.2]

Как можно модифицировать стандартный алгоритм моделирования дискретной случайной величины в случае, когда эта величина принимает малое число значений? [10.3]

Каковы особенности применения стандартного алгоритма моделирования дискретной случайной величины в случае, когда эта величина принимает большое число значений? [10.4]

Опишите специальный алгоритм моделирования равномерного дискретного распределения. [10.5]

Что такое квантильный метод? [10.6]

Что такое метод Уолкера? [10.7]

Напишите основное интегральное соотношение для метода обратной функции распределения. [2.5]

Что такое элементарная плотность распределения? [2.6]

Приведите примеры элементарных плотностей распределения. [2.6]

Выведите моделирующую формулу для случайной величины, имеющей экспоненциальное распределение. [2.6]

Выведите моделирующую формулу для случайной величины, имеющей степенное распределение. [2.6]

Выведите моделирующую формулу для случайной величины, имеющей равномерное распределение на конечном интервале (a, b) , $-\infty < a < b < +\infty$. [2.6]

Напишите два возможных представления совместной плотности двумерного случайного вектора. [2.1]

Опишите стандартный алгоритм моделирования двумерного случайного вектора. [2.2]

Как выглядит плотность распределения случайной величины (случайного вектора), для численного моделирования которой эффективно применим метод интегральной суперпозиции? [3.1]

Как выглядит плотность распределения случайной величины (случайного вектора), для численного моделирования которой эффективно применим метод дискретной суперпозиции? [11.1]

Опишите метод дискретной суперпозиции. [11.1]

Почему для плотности, представляющей собой сумму неотрицательных функций, нормирующие коэффициенты, превращающие слагаемые в плотности, имеют смысл вероятностей? [11.1]

В каком случае и для чего применяется модифицированный метод дискретной суперпозиции? [11.2]

Что такое составная плотность? Как моделируется случайная величина с такой плотностью? [11.3]

Что такое «моделируемый» функциональный базис? [11.4]

Как распределена первая компонента точки, равномерно распределенной в подграфике неотрицательной интегрируемой непрерывной

функции? [11.5]

Как смоделировать точку, равномерно распределенную в подграфике неотрицательной интегрируемой непрерывной функции? [11.5]

Опишите мажорантный метод исключения. [11.5]

Что такое двусторонний метод исключения и в каких случаях он применяется? [11.6]

Как моделируются случайные величины с усеченными распределениями? [11.6]

В каких случаях применимы алгоритмы метода обратной функции распределения, метода суперпозиции и мажорантного метода исключения для моделирования случайной величины с полиномиальной плотностью распределения? [11.7]

Напишите формулу моделирования случайной величины, имеющей распределение Эрланга (гамма-распределение с целым параметром ν). [12.2]

Напишите формулы моделирования случайной величины, имеющей бета-распределение с целыми параметрами ν и μ . [12.2]

Какие методы наиболее эффективны для моделирования случайных величин, имеющих гамма- и бета-распределения с нецелыми параметрами? [12.4]

Напишите формулы Бокса – Мюллера для моделирования стандартного нормального распределения. [13.1]

На каком свойстве многомерного изотропного случайного вектора основано обоснование формул Бокса – Мюллера для моделирования стандартного нормального распределения? [13.1]

Как используются формулы Бокса – Мюллера для моделирования точки, равномерно распределенной в многомерном шаре? [13.2]

Какова основная идея построения алгоритмов моделирования гауссовского случайного вектора с заданной корреляционной структурой? [13.3]

Что такое конечномерное распределение случайной функции? [13.4]

Что такое однородное случайное поле? [13.4]

Какова основная идея построения численных спектральных моделей однородных гауссовских случайных полей? [13.5]

Что такое рандомизированная численная спектральная модель однородного гауссовского случайного поля? [13.5]

Приложение 3. План семинарских занятий

В подразделе 14.1 отмечена целесообразность проведения семинаров в рамках данного курса. Содержанием этих семинаров могли бы стать обсуждения технологий и примеров из раздела 14. Примерный план семинаров приводится в данном приложении. После формулировки каждого пункта этого плана **жирным шрифтом** (в квадратных скобках) указан раздел (разделы) пособия, в котором содержатся материалы, соответствующие данному пункту.

СЕМИНАР 1

- 1.1. Организация семинара: литература, студенческие доклады, семестровое домашнее задание, досрочный экзамен и др. **[14.1]**.
- 1.2. Основные идеи теории методов Монте-Карло **[1]**.

СЕМИНАР 2

- 2.1. Моделирование случайных векторов (общий алгоритм) **[2.2, 2.3]**.
- 2.2. Метод обратной функции распределения **[2.5]**.
- 2.3. Элементарные плотности, примеры. Проверка моделирующих формул **[2.6, 14.2]**.

СЕМИНАР 3

- 3.1. Семестровое домашнее задание **[14.1]**.
- 3.2. Технология последовательных (вложенных) замен для конструирования задач по теме «Метод обратной функции распределения» **[14.2]**.
- 3.3. Решение экзаменационных задач по теме «Метод обратной функции распределения», примеры **[14.2]**.
- 3.4. Моделирование двумерного случайного вектора **[2.2]**.
- 3.5. Технология распределенного (взвешенного) параметра для конструирования задач по теме «Моделирование двумерного вектора» **[14.3]**.
- 3.6. Решение экзаменационных задач по теме «Моделирование двумерного вектора», примеры **[14.3]**.

СЕМИНАР 4

- 4.1. Методы интегральной и дискретной суперпозиции, примеры [3.1, 11.1].
- 4.2. Технология формирования смеси для конструирования задач по теме «Метод дискретной суперпозиции» [14.4].
- 4.3. Решение экзаменационных задач по теме «Метод дискретной суперпозиции», примеры [14.4].
- 4.4. Мажорантный метод исключения (теоретические основы) [11.5].

СЕМИНАР 5

- 5.1. Технология «порчи» моделируемой плотности для конструирования задач по теме «Мажорантный метод исключения» [14.5].
- 5.2. Решение экзаменационных задач по теме «Мажорантный метод исключения», примеры [14.5].
- 5.3. Выборка по важности, априорная оценка сверху для дисперсии [4.1, 4.2].
- 5.4. Использование технологии «порчи» моделируемой плотности для конструирования задач по теме «Выборка по важности» [14.6].
- 5.5. Решение экзаменационных задач по теме «Выборка по важности», примеры [14.6].

СЕМИНАР 6

Решение экзаменационных задач, примеры (повторение) [14].

СЕМИНАР 7

- 7.1. Разбор семестрового домашнего задания [14].
- 7.2. Обзор экзаменационных и контрольных вопросов [приложения 1, 2].

СЕМИНАР 8

Занятие в компьютерном классе: построение гистограмм моделируемых вероятностных плотностей.

Список литературы

1. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method // *Journal of American Statistical Association*. 1949. V. 44. № 249. P. 335–341.
2. Бусленко Н. П., Голенко Д. И., Соболев И. М., Срагович В. Г., Шрейдер Ю. А. *Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло)*. М.: Физматгиз, 1962.
3. Hammersley J. M., Handscomb D. C. *Monte Carlo Methods*. New York: John Wiley and Sons, 1964.
4. Spanier J., Gelbard E. *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Addison–Wesley, Reading, 1969.
5. Соболев И. М. *Численные методы Монте-Карло*. М.: Наука, 1973.
6. Ермаков С. М. *Метод Монте-Карло и смежные вопросы*. М.: Наука, 1974.
7. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. *Статистическое моделирование*. М.: Наука, 1982.
8. Михайлов Г. А. *Оптимизация весовых методов Монте-Карло*. М.: Наука, 1988.
9. Михайлов Г. А., Войтишек А. В. *Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло*. М.: Академия, 2006.
10. Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А., Дарбинян Р. А., Каргин Б. А., Елепов Б. С. *Метод Монте-Карло в атмосферной оптике*. Новосибирск: Наука, 1976.
11. Kalos M. H., Whitlock P. A. *Monte Carlo Methods*. New York: John Wiley & Sons, 1986.
12. Сабельфельд К. К. *Методы Монте-Карло в краевых задачах*. М.: Наука, 1989.
13. Войтишек А. В. *Основы метода Монте-Карло*. Новосибирск: НГУ, 2010.
14. Боровков А. А. *Теория вероятностей*. М.: Наука, 1976.
15. Боровков А. А. *Математическая статистика: оценка параметров, проверка гипотез*. М.: Наука, 1984.
16. Бахвалов Н. С. *Численные методы*. М.: Наука, 1973.
17. Войтишек А. В. *Дискретно-стохастические модификации стандартного метода Монте-Карло*. Новосибирск: НГУ, 2009.
18. Марчук Г. И., Агошков В. И. *Введение в проекционно-сеточные методы*. М.: Наука, 1981.
19. Канторович Л. В., Акилов Г. П. *Функциональный анализ*. М.: Наука, 1984.

20. Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А. и др. *Метод Монте–Карло в атмосферной оптике*. Новосибирск: Наука, 1976.
21. Фихтенгольц Г. М. *Курс дифференциального и интегрального исчисления: в 3 т.* М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.
22. Гранштейн И. С., Рыжик И. М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963.
23. Михайлов Г. А. Замечания о практически эффективных алгоритмах численного статистического моделирования // *Сибирский журнал вычислительной математики*. 2014. Т. 17. № 2. С. 177–190.
24. Войтишек А. В. *Дополнительные сведения о численном моделировании случайных элементов*. Новосибирск: НГУ, 2007.
25. Владимиров В. С. *Уравнения математической физики*. М.: Наука, 1981.
26. Войтишек А. В. *Функциональные оценки метода Монте-Карло*. Новосибирск: НГУ, 2007.
27. Фролов А. С., Ченцов Н. Н. Использование зависимых испытаний в методе Монте-Карло для получения гладких кривых // *Труды Всесоюзного совещания по теории вероятностей и математической статистике*. Вильнюс, 1962. С. 425–437.
28. Shkarupa E. V., Voytishok A. V. Convergence of discrete-stochastic numerical procedures with independent or weakly dependent estimators at grid nodes // *Journal of Statistical Planning and Inference*. 2000. V. 85. P. 199–211.
29. Войтишек А. В. *Рандомизированные итерационные численные модели и алгоритмы*. LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2017.
30. Виноградов И. М. *Основы теории чисел*. М.-Л.: Гос. изд. технико-теоретической литературы, 1952.
31. Михайлов Г. А. *Весовые алгоритмы статистического моделирования*. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2003.
32. Weyl H. Uber die Gleichverteilung von Zahlen mod Eins // *Math. Annalen*. 1916. V. 77. № 3. P. 313–352.
33. Михайлов Г. А., Медведев И. Н. *Оптимизация весовых алгоритмов статистического моделирования*. Новосибирск: Омега–Принт, 2011.
34. Walker A. J. An efficient method for generating discrete random variables with general distributions // *ASM Trans. Math. Software*. 1977. № 3. P. 253–256.
35. Дэйвид Г. *Порядковые статистики*. М.: Наука, 1979.

36. Войтишек А. В., Мясников А. П., Санеев Л. Э. Использование алгоритмов численного моделирования порядковых статистик // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2008. Т. 48. № 12. С. 2237–2246.
37. Ширяев А. Н. *Вероятность*. М.: Наука, 1980.
38. Гихман И. И., Скороход А. В. *Теория случайных процессов*. М: Наука, 1971.
39. Королюк В. С., Портенко Н. И., Скороход А. В., Турбин А. Ф. *Справочник по теории вероятностей и математической статистике*. М.: Наука, 1985.
40. Пригарин С. М. *Методы численного моделирования случайных процессов и полей*. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2005.
41. Войтишек А. В. *Основы метода Монте-Карло. Семестровое домашнее задание*. Новосибирск: НГУ, 2002.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
1. РАЗВИТИЕ И ОСНОВНЫЕ ОБЛАСТИ ПРИЛОЖЕНИЯ ЧИСЛЕННОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ. ОБЩАЯ СХЕМА МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО	5
1.1. Разработка теории и приложений алгоритмов метода Монте-Карло	5
1.2. Новосибирская школа методов Монте-Карло	6
1.3. О преподавании теории и приложений методов Монте-Карло в НГУ	7
1.4. Общая схема метода Монте-Карло. Понятие оценщика (монте-карловской оценки)	7
1.5. Использование обобщенной формулы математического ожидания	9
1.6. Приближенное вычисление интеграла методом Монте-Карло	11
1.7. Построение доверительного интервала с помощью центральной предельной теоремы	12
1.8. Низкая скорость сходимости и «универсальность» метода Монте-Карло	14
1.9. Затраты и трудоемкость метода Монте-Карло	16
1.10. Оценивание трудоемкости с помощью предварительных расчетов	17
1.11. Простейшая параллелизация вычислений по методу Монте- Карло	19
1.12. Преимущества и недостатки метода Монте-Карло	19
2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ВЕКТОРОВ, МЕТОД ОБРАТНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ: ОБОСНОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ, ОСНОВНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ	20
2.1. Теорема о разложении совместной плотности распределения двумерного случайного вектора	20
2.2. Алгоритм численного моделирования двумерного случайного вектора	24
2.3. Стандартный алгоритм моделирования случайного вектора ..	25
2.4. Использование стандартных случайных чисел α_i	26

2.5. Метод обратной функции распределения	29
2.6. Элементарные плотности	31
2.7. Пример моделирования двумерного вектора	36
2.8. О выборе плотностей распределения при численном решении прикладных задач. Моделирование траекторий цепей Маркова	37
3. МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНОЙ СУПЕРПОЗИЦИИ. РАНДОМИЗАЦИЯ. МЕТОД УСЛОВНОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОЖИДАНИЯ. МЕТОД РАСЩЕПЛЕНИЯ	41
3.1. Метод интегральной суперпозиции	41
3.2. Введение случайных параметров	45
3.3. Метод условного математического ожидания для вычисления интеграла как один из методов уменьшения дисперсии веса оценителя	46
3.4. Метод расщепления и его оптимизация	50
4. ПРИНЦИП ВЫБОРКИ ПО ВАЖНОСТИ	57
4.1. Теорема о минимальной дисперсии	57
4.2. Выборка по важности. Априорная оценка сверху для дисперсии	58
4.3. Включение особенности в плотность	63
5. МЕТОДЫ УМЕНЬШЕНИЯ ДИСПЕРСИИ ВЕСОВОГО ОЦЕНИВАТЕЛЯ ИНТЕГРАЛА	66
5.1. Метод выделения главной части	66
5.2. Интегрирование по части области	68
5.3. Выборка по группам	73
5.4. Краткий обзор методов уменьшения трудоемкости стандартного весового алгоритма метода Монте-Карло для вычисления интеграла	79
6. ПРИМЕНЕНИЕ ПРИКЛАДНЫХ ЦЕПЕЙ МАРКОВА. ИСТОРИЧЕСКИ ВАЖНЫЙ ПРИМЕР: МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ЧАСТИЦ (ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОЙ РЕАЛИЗАЦИИ) ..	80
6.1. «Естественность» использования траекторий обрывающихся цепей Маркова в качестве рандомизированных итерационных численных моделей	80

6.2. Простейшая численная модель переноса частиц.....	82
6.3. Моделирование точки «рождения» и начального направления движения фотона. Случайный изотропный вектор.....	85
6.4. Моделирование точки, равномерно распределенной в многомерном шаре.....	86
6.5. Моделирование длины свободного пробега и точек столкновения фотона.....	94
6.6. Простейшая схема прямого численного моделирования.....	101
7. МАРКОВСКОЕ ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ. ЛИНЕЙНЫЕ ФУНКЦИОНАЛЫ ОТ РЕШЕНИЯ ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ФРЕДГОЛЬМА ВТОРОГО РОДА. ОСНОВНОЙ ВЕСОВОЙ ОЦЕНИВАТЕЛЬ. ОЦЕНИВАТЕЛЬ ПО ПОГЛОЩЕНИЯМ.....	
7.1. Интегральное уравнение для суммарной плотности столкновений.....	103
7.2. Произвольное интегральное уравнение Фредгольма второго рода. Линейный функционал от его решения как сумма интегралов бесконечно возрастающей кратности.....	104
7.3. Использование метода выборки по важности. Случайные веса.....	108
7.4. Введение прикладных цепей Маркова. Основной оценитель (монте-карловская оценка по столкновениям) ..	109
7.5. Оценитель по поглощениям.....	113
8. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА С ОСНОВНЫМ ОЦЕНИВАТЕЛЕМ. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ.....	
8.1. Сопряженное интегральное уравнение. Двойственное представление функционала. Метод сопряженных блужданий.....	115
8.2. Локальные оценители.....	116
8.3. Использование прямого моделирования. Включение особенностей свободного члена и ядра интегрального уравнения в начальную плотность и переходную функцию используемой прикладной цепи Маркова.....	118
8.4. Оптимизация алгоритмов 7.1, 7.2. Конечность среднего числа состояний прикладной цепи Маркова.....	120

8.5. Теоремы о дисперсии основного оценивателя и оценивателя по поглощениям. Оптимальные плотности	121
8.6. Функциональные оцениватели	126
8.7. Условная оптимизация функциональных алгоритмов	130
8.8. Другие задачи теории и приложений алгоритмов численного статистического моделирования	134
9. ГЕНЕРАТОРЫ СТАНДАРТНЫХ СЛУЧАЙНЫХ ЧИСЕЛ	135
9.1. Мера управляемости численных итерационных процессов ...	135
9.2. Двоичное представление случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$	137
9.3. Два типа генераторов стандартных случайных чисел.....	139
9.4. Два полезных свойства преобразования метода вычетов	141
9.5. Периодичность и мера управляемости метода вычетов.....	143
9.6. Тестирование генераторов стандартных случайных чисел. Применение мультипликативного метода вычетов в параллельных вычислениях	146
9.7. Использование квазислучайных чисел.....	149
9.8. Два важных замечания	151
10. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСКРЕТНЫХ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН	152
10.1. Основные классы алгоритмов моделирования случайных величин и векторов. Способы представления распределения дискретной случайной величины	152
10.2. Стандартный алгоритм моделирования дискретной случайной величины для случая $M < \infty$ и его трудоемкость	154
10.3. Случай малого числа значений. Теорема о минимальной дисперсии целочисленной случайной величины	157
10.4. Случай большого числа значений	159
10.5. Специальный алгоритм моделирования равномерного дискретного распределения.....	160
10.6. Квантильный алгоритм. Бинарный поиск	161
10.7. Метод перераспределения вероятностей (алгоритм Уолкера).....	163
10.8. Анализ использования специальных алгоритмов (на примере моделирования геометрического распределения).....	165

11. АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ АЛГОРИТМЫ ШИРОКОГО ПРИМЕНЕНИЯ: МЕТОД ДИСКРЕТНОЙ СУПЕРПОЗИЦИИ И МАЖОРАНТНЫЙ МЕТОД ИСКЛЮЧЕНИЯ	168
11.1. Метод дискретной суперпозиции	168
11.2. Модифицированный метод суперпозиции	171
11.3. Моделирование случайных величин с составными плотностями	174
11.4. Плотности распределения, пропорциональные приближениям неотрицательных функций. «Моделируемые» функциональные базисы	180
11.5. Общая схема метода исключения. Мажорантный метод исключения и его обоснование	182
11.6. Замечания о построении мажорант. Двусторонний метод исключения. Моделирование усеченных распределений	189
11.7. Сравнительный анализ моделирующих алгоритмов для случайной величины с полиномиальной плотностью распределения	193
12. МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕТА– И ГАММА– РАСПРЕДЕЛЕНИЙ	196
12.1. Бета- и гамма-распределения и их частные случаи	196
12.2. Моделирование бета- и гамма-распределений для целых параметров	199
12.3. Случай нецелых параметров: «точные» формулы и методы суперпозиции	202
12.4. Случай нецелых параметров: методы исключения	207
13. МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАУССОВСКИХ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН, ВЕКТОРОВ, ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ	211
13.1. Использование изотропного вектора случайной длины	211
13.2. Решение проблемы 6.1. Альтернативные алгоритмы моделирования d -мерного изотропного случайного вектора и стандартной гауссовской (нормальной) случайной величины	214
13.3. Моделирование гауссовского случайного вектора с заданной корреляционной структурой	217
13.4. Общие сведения из теории случайных функций	220
13.5. Основные идеи построения численных моделей однородных гауссовских случайных полей	224

14. ТЕХНОЛОГИИ КОНСТРУИРОВАНИЯ МОДЕЛИРУЕМЫХ ВЕРОЯТНОСТНЫХ ПЛОТНОСТЕЙ. ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ И ДОМАШНИЕ ЗАДАНИЯ	229
14.1. Формирование «банка» моделируемых плотностей. Экзаменационные задачи. Семестровое домашнее задание ..	229
14.2. Технология последовательных (вложенных) замен. Решение и конструирование задач по теме «Метод обратной функции распределения»	231
14.3. Технология распределенного (взвешенного) параметра. Решение и конструирование задач по теме «Моделирование двумерного вектора»	241
14.4. Решение и конструирование задач по теме «Методы суперпозиции». Технология формирования смеси	249
14.5. Технология «порчи» моделируемой плотности. Решение и конструирование задач по теме «Мажорантный метод исключения»	260
14.6. Решение и конструирование задач по теме «Выборка по важности». Применение технологии «порчи» моделируемой плотности	274
ПРИЛОЖЕНИЕ 1. ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ БИЛЕТЫ	285
ПРИЛОЖЕНИЕ 2. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ	288
ПРИЛОЖЕНИЕ 3. ПЛАН СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ	294
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	296

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- B*-сплайн 131
- первого порядка 131
- bf*-генератор 149
- C*-подход к оценке погрешности рандомизированного функционального алгоритма 131
- lf*-генератор 149
- Абсолютно непрерывная спектральная мера** 224
- непрерывное распределение 9
- условное распределение 21
- Алгоритм бинарного поиска (метода деления отрезка пополам)** 162
- Г. А. Михайлова для моделирования гамма-распределения с параметром, меньшим единицы 176–177, **207–208**
- двустороннего метода исключения 190
- для бета-распределения, основанный на моделировании порядковых статистик 200
- Йонка для моделирования гамма-распределения с параметром, меньшим единицы 206
- квантильный для моделирования дискретных случайных величин 162
- для случая малого числа значений случайной величины 163
- мажорантного метода исключения **186–187**, 260–261
- для моделирования гамма-распределения с параметром, меньшим единицы (алгоритм Г. А. Михайлова) 176–177, **207–208**
- для моделирования случайной величины с полиномиальной плотностью распределения 195
- усеченного распределения 70, **191**
- метода выборки по группам (расслоенной выборки) 73–74
- деления отрезка пополам (бинарного поиска) 162
- дискретной суперпозиции 62, 65, **169**, 251
- для моделирования бета-распределения с нецелыми параметрами 204
- для моделирования случайной величины, плотность которой пропорциональна приближению неотрицательной функции 181
- модифицированный 172–173
- для моделирования случайной величины с полиномиальной плотностью распределения 194
- зависимых испытаний 128
- интегральной суперпозиции **42**, 168, 249
- исключения для моделирования случайной величины с полиномиальной плотностью распределения 195
- точек, равномерно распределенной в многомерном шаре 216
- усеченного распределения **70**, 191
- экспоненциального распределения 193
- (общая схема) 183
- мажорантного (максимального) сечения 96
- максимального (мажорантного) сечения 96
- Монте-Карло для приближения интеграла **11**, 57, 274
- для приближения линейного функционала от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода 113, 114
- (общая схема) 8
- Неймана 189
- расслоенной выборки (выборки по группам) 73–74
- сопряженных блужданий 116
- функциональный 128–129
- (метод) рандомизированный проекционно-сеточный функциональный 129
- проекционный функциональный 127
- моделирования гауссовского случайного вектора с заданной корреляционной матрицей 218–219
- двумерного вектора **24**, 25, 241
- случайного вектора (стандартный) 26
- с независимыми компонентами 37–38
- события **40**, 157–158
- случайной точки, равномерно распределенной в многомерном шаре 215
- стандартного нормального (гауссовского) распределения (общая схема) 213
- траектории однородной цепи Маркова 39
- прикладной цепи Маркова 40–41
- цепи Маркова 39
- модифицированного метода суперпозиции 172–173
- для моделирования случайной величины с кусочно-линейной плотностью распределения 179
- с кусочно-постоянной плотностью распределения 178
- приближенного вычисления интеграла **11**, 57, 274
- линейного функционала (основной оцениватель) 113
- (оцениватель по поглощениям) 114
- прямого моделирования 84
- с оценкой по поглощению для задачи переноса частиц 101–102
- стандартного моделирования геометрического распределения (рекуррентный пересчет вероятностей) 166
- дискретной случайной величины 155
- непрерывной случайной величины (метод обратной функции распределения) 30
- случайного вектора 26
- целочисленной случайной величины 155
- Уолкера для моделирования дискретных случайных величин 163–164
- (формула) для бета-распределения с целыми параметрами, основанная на моделировании гамма-распределения 200
- с целым параметром, основанная на моделировании степенного распределения 202
- для гамма-распределения с целым параметром (распределения Эрланга), основанная на свойстве безграничной делимости 200
- метода обратной функции распределения 30
- моделирования геометрического распределения 166
- минимального распределения 233
- равномерного дискретного распределения 160
- распределения на конечном интервале 35
- распределения Вейбулла 234
- Парето 233
- Хензи – Гринстейна **100**, 233
- стандартного нормального (гауссовского) распределения, основанный на применении центральной предельной теоремы 217
- степенного распределения 35
- усеченного распределения Парето 233
- экспоненциального распределения 193
- экспоненциального (показательного) распределения 34
- экстремального (минимального) распределения 233
- С. А. Роженок для моделирования случайной величины с двумя значениями 157
- (формулы) моделирования случайной точки, равномерно распределенной в круге 92
- в многомерном шаре 86–94, **215**
- в трехмерном шаре **71**, **93**, 215–216
- в шаровом слое 71–72
- стандартного нормального (гауссовского) распределения 31–32, **214**
- Алгоритмы мажорантного метода исключения для моделирования гамма- и бета-распределений с нецелыми параметрами 207–210
- метода Монте-Карло векторные 134
- (методы) моделирования случайных величин и векторов 152
- альтернативные широкого применения 32, 41–43, 135, **152**, 163–165, 168–169, 186–187, 251, 260–261

- специальные 32, 86–94, 95–96, 99, 157, **152**, 157, 160, 166, 198, 200, 202, 213–216
- стандартные 26, 30, **152**
- радомизированные сеточные функциональные 128–129
- функциональные 126–127
- функциональные 126
- моделирования бернуллиевской случайной величины 157
- геометрического распределения 166–167
- случайных процессов и полей 134, **217**, 224–229
- реализации стандартных случайных чисел 134, **139–141**
- решения стохастических дифференциальных уравнений 134
- с ветвлением траекторий 134
- случайного вектора с марковским свойством 39–41
- изотропного вектора 215–216
- случайной величины с двумя значениями 157
- с полиномиальной плотностью распределения 193–196
- численного статистического моделирования (методы Монте-Карло) 5
- Альтернативные алгоритмы (методы) широкого применения 32, 41–43, 135, **152**, 163–165, 168–169, 186–187, 251, 260–261
- Анализ использования специальных алгоритмов моделирования дискретных случайных величин (на примере моделирования геометрического распределения) 165–167
- Аппроксимационная сетка 126
- Аппроксимационный базис **62**, 126, 180
- Бернштейна 182
- Лагранжа 182
- моделируемый 62–63, **181–182**
- Стренга – Фикса 63, 130, **131**, 182
- тригонометрический 182
- Аппроксимация Бернштейна 182
- Лагранжа 182
- мультилинейная 131
- Стренга – Фикса 63, 130, **131**, 182
- устойчивая 181
- функции **62**, 127, 180
- моделируемая 62–63, **181–182**
- Априорная оценка сверху для дисперсии оценителя интеграла 59–60
- Базис Бернштейна 182
- Лагранжа 182
- Стренга – Фикса 63, 130, **131**, 182
- функциональный **62**, 126, 180
- моделируемый 62–63, **181–182**
- тригонометрический 182
- Безграничная делимость 201
- гамма-распределения 201
- нормального (гауссовского) распределения 217
- Безгранично делимое распределение 201
- Бернуллиевская случайная величина **157**, 166
- Бета-распределение 135, **196**
- Бета-функция **91**, 196
- Бинарный поиск (метод деления отрезка пополам) 162
- Вариационный ряд 199
- Введение случайных параметров (радомизация) 45–46
- Вектор математических ожиданий 218
- случайный 8
- Векторное случайное поле 220
- Векторные алгоритмы метода Монте-Карло 134
- Векторный случайный процесс 220
- Вероятность «выживания» **40**, 81
- для задачи переноса частиц 98
- доверительная (коэффициент доверия) 147
- обрыва **40**, 81
- для задачи переноса частиц 98
- Весы случайные 109, **110**
- Весовая монте-карловская оценка (оценитель) интеграла **11**, 57, 274
- по поглощениям 113
- для прямого моделирования 102
- по столкновениям (основной оценитель) 110–113
- Весовой основной оценитель (оценка по столкновениям) 110–113
- оценитель (монте-карловская оценка) интеграла **11**, 57, 274
- по поглощениям для прямого моделирования 102
- Взвешенная сумма (смесь) эффективно моделируемых плотностей **168**, 181, 251
- Включение особенности в плотность **63–65**, 118–120
- Волновой тест 148
- Вопросы контрольные 288–293
- экзаменационные 285–287
- Выборка по важности **58**, 275
- группам 73–74
- типическая 76–77
- Выборочная функция (траектория, реализация) случайной функции 220–221
- Выборочное вероятностное пространство 221
- Выборочные значения оценителя метода Монте-Карло 7
- Выделение вероятностей при применении метода дискретной суперпозиции 170–171
- главной части 66
- Вычисление (приближение) интеграла **11**, 14–16, 57, 274
- линейных функционалов от решений интегральных уравнений Фредгольма второго рода 12, **104–114**
- Вычисляемое моделируемое преобразование декартовых координат 89
- Вычислительные затраты метода Монте-Карло 16
- Гамма-распределение 136, **196–197**
- Гамма-функция **90–91**, 147, 197
- Гауссовский случайный процесс 223
- Гауссовское (нормальное) распределение 13, 31, 197, **211**
- случайное поле **223**, 227
- Генератор псевдослучайных чисел 26–27, **140**
- как детерминированная дискретная последовательность 140–141
- Геометрическое распределение **166**, 183
- Гильбертово пространство $L_2(X)$ 104
- Гиперсферические координаты 89
- Гистограмма 130, 181
- Датчик случайных чисел 26
- физический 139–140
- Двоичное представление стандартного случайного числа 137–139
- Двойственное представление функционала 115
- Двумерный случайный вектор 20
- Двусторонний метод исключения 190
- Дельта-плотность 64
- Дельта-функция Дирака **64**, 94, 119–120, 153
- Дискретная случайная величина 40, 43, 65, **152–153**
- Дискретно-стохастические методы 134
- численного интегрирования **16**, 62, 67, 77, 79, 151, 180–181
- Дискретные случайные процессы и поля 220
- Дисперсия как множитель в выражении для трудоемкости метода Монте-Карло 16–17
- основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) 121
- минимальная 124
- нулевая 125
- оценителя интеграла 57
- минимальная 57

- нулевая 58
- по поглощениям 124
- минимальная 124
- нулевая 125
- стандартной случайной величины **27**, 137
- Длина периода метода вычетов для чисел с конечной мантиссой 144–146
- свободного пробега 95
- Доверительная вероятность (коэффициент доверия) 147
- граница с заданным уровнем значимости 147
- Доверительный интервал для погрешности метода Монте-Карло 14
- Допредельная интегральная сумма спектрального представления как численная модель однородного случайного поля 226
- Задача Дирихле для уравнения Гельмгольца 105**
- приближенного вычисления интеграла 11
- Закон больших чисел 8
- Затраты метода Монте-Карло 16
- (трудоемкость) мажорантного метода исключения 187
- метода исключения 183
- стандартного алгоритма моделирования дискретной случайной величины 156
- для случая большого числа значений 159–160
- малого числа значений 157
- Изотропное рассеяние фотона 99**
- Изотропный случайный вектор 85
- Индикатриса рассеяния 98
- Хенъи – Гринштейна 99
- Интегральное уравнение сопряженное 115
- Фредгольма второго рода 12, **103–105**
- марковского 82, **103–104**
- Интегральный оператор 81
- сжимающий **81**, 103, 106
- Интегрирование по части области 68
- Итерационный процесс 135
- управляемый 135
- Квадратурные формулы Ньютона – Котеса 14–15**
- Квантильный алгоритм для моделирования дискретных случайных величин 161–162
- для случая малого числа значений случайной величины 163
- Квазислучайные числа 149–150
- Класс стохастически эквивалентных случайных функций 222
- Комплексозначное случайное поле 222–223, **224**
- Конечномерное распределение 222
- Контрольные вопросы 288–293
- Координаты гиперсферические 89
- полярные 91
- сферические 92
- Корректный и естественный критерий оптимальности алгоритмов 11
- Корреляционная (автокорреляционная, ковариационная, автоковариационная) функция 222–223
- матрица 218
- теория стационарных (в широком смысле) случайных функций 224–226
- Корреляционные критерии 148
- Коэффициент доверия (доверительная вероятность) 147
- Критерии корреляционные 148
- Критерий ω^2 Н. В. Смирнова 148
- Вейля 148
- оптимальности алгоритмов метода Монте-Карло 11, **17**
- хи-квадрат 147–148
- Кубатурные формулы 15
- Н. С. Вахвалова 77
- Кусочно-линейная плотность распределения 178–179
- Кусочно-постоянная плотность распределения 177
- Линейный функционал от решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода 12, **82**, **104**
- Локальные оценщики 116–118
- Локальный оценщик метода сопряженных блужданий 117
- функциональный 116
- Мажорантные методы исключения для моделирования бета-распределения 208–210
- Мажорантный метод исключения 32, 135, **186–187**, 260–261
- для гамма-распределения (Алгоритм Г. А. Михайлова) 176–177, **207–208**
- для моделирования случайной величины с полиномиальной плотностью распределения 195
- Максимальная длина периода метода вычетов для чисел с конечной мантиссой 145
- Марковское интегральное уравнение Фредгольма второго рода 82, **103–104**
- свойство **38**, 80
- Мартингал 220
- «Математический анализ в среднеквадратическом» 224
- Математическое ожидание дискретной случайной величины 155–156
- случайной величины с геометрическим распределением **166**, 183
- стандартной случайной величины **27**, 137
- Матрица корреляционная 218
- нижняя треугольная 218
- Мера спектральная 224
- управляемости **136**, 145–146
- метода вычетов 136–137, **144–146**
- Метод браковки 167
- для геометрического распределения 167
- деления отрезка пополам (бинарный поиск) 162
- дискретной суперпозиции (рандомизации) 32, 43, **65**, 135, 152, 153, **168–169**, 251
- модифицированный **171–173**, 252
- выборки по важности для интеграла **58–59**, 79
- для интегрального уравнения Фредгольма второго рода 119–120
- выборки по группам (расслоенной выборки) **73–74**, 79
- выделения главной части **66**, 79
- вычетов (мультипликативный) 27, 136, **140–141**
- для чисел с конечной мантиссой 143–146
- геометрический 79
- гистограмм 130
- зависимых испытаний 138
- интегральной суперпозиции (рандомизации) 32, **41–43**, 152, 168
- для гамма распределения с параметром, меньшим единицы (алгоритм Йонка) 205–207
- интегрирования по части области **68**, 79
- исключения 32, 135, 152, **182–183**, 186–187, 189, 260–261
- двусторонний 190–191
- для моделирования усеченного распределения **70**, **191**
- экспоненциального распределения 192–193
- мажорантный 32, 135, 152, **186–187**, 260–261
- (общая схема) 182–183
- мажорантного (максимального) сечения 96–97
- максимального (мажорантного) сечения 96–97
- многократного расщепления 56
- многомерной симметризации 79
- Монте-Карло (общая схема) 7–8
- Неймана (метод исключения с постоянной мажорантой) 189
- обратной функции распределения для дискретных случайных величин 153
- для непрерывных случайных величин 29–31
- перераспределения вероятностей (алгоритм Уолкера) для моделирования дискретных случайных величин 163–165

- полигона частот (многомерный аналог) **130**, **133**
- равномерной выборки **79**
- раслоенной выборки (выборки по группам) **73–74**, **79**
- расщепления **50–51**, **79**
- (простейший вариант) **52**
- сопряженных блужданий **115–116**
- функциональный **128–129**
- специальный **32**, **152**
- с поправочным множителем **79**
- суперпозиции **32**, **41–43**, **65**, **135**, **152**, **153**, **168–169**, **251**
- модифицированный **171–173**, **252**
- условного математического ожидания **46–47**, **79**
- центральных прямоугольников **14–15**
- Методы (алгоритмы) моделирования случайных величин и векторов **152**
- альтернативные широкого применения **32**, **41–43**, **135**, **152**, **163–165**, **168–169**, **186–187**, **251**, **260–261**
- специальные **32**, **86–94**, **95–96**, **99**, **157**, **152**, **157**, **160**, **166**, **198**, **200**, **202**, **213–216**
- стандартные **26**, **30**, **152**
- рандомизированные сеточные функциональные **128–129**
- функциональные **126**
- функциональные **126**
- браковки **167**
- Монте-Карло (алгоритмы численного статистического моделирования) **5**
- Неймана (методы исключения) **189**
- уменьшения дисперсии оценителя метода Монте-Карло **46–47**, **57–59**, **66**, **68**, **73–74**, **79**, **124–126**
- среднего времени моделирования выборочного значения оценителя метода Монте-Карло **79**, **120–121**
- трудоемкости (затрат) стандартного алгоритма моделирования дискретной случайной величины для случая большого числа значений **156**, **159–160**
- метода Монте-Карло **46–47**, **50–51**, **57–59**, **66**, **68**, **73–74**, **79**, **120–121**, **124–126**
- Метрика пространства $C(X)$ **222**
- Минимальное распределение **233**
- Многомерное нормальное распределение **217–218**
- Многомерный аналог метода полигона частот **130**, **133**
- Множество цилиндрическое **221**
- Моделирование бернуллиевской случайной величины **157**
- бета-распределения **196–210**
- выборочных значений оценителя метода Монте-Карло **9**, **20–41**
- случайной величины **7**
- гамма-распределения **196–208**
- гауссовского (нормального) распределения **13–14**, **31–32**, **211–217**
- случайного вектора с заданной корреляционной структурой **218–219**
- геометрического распределения **166–167**
- двумерного случайного вектора **24–25**
- дискретных случайных величин **152–167**
- длины свободного пробега **95–97**
- минимального распределения **233**
- начального направления движения фотона **85–94**
- непрерывной случайной величины (стандартный алгоритм метода обратной функции распределения) **30**
- нормального (гауссовского) распределения **13–14**, **31–32**, **211–217**
- обобщенного экспоненциального распределения **95–96**
- показательного (экспоненциального) распределения **34**
- процессов и полей **217**, **224–229**
- прямое **84**, **118–119**, **121**
- (простейшая схема) **101–102**
- равномерного дискретного распределения **35**
- распределения на конечном интервале **35**
- распределения Вейбулла **234**
- Парето **233**
- Хензи – Гринштейна **100**, **233**
- случайного вектора **25–26**
- с марковским свойством **38–41**
- с независимыми компонентами **37–38**
- изотропного вектора **85–94**, **214–216**
- события **40**, **98**, **157–158**
- случайной величины, плотность которой пропорциональна приближению неотрицательной функции **181**
- с кусочно-линейной плотностью распределения **178–179**
- с кусочно-постоянной плотностью распределения **177–178**
- с полиномиальной плотностью распределения **32**, **193–196**
- точки, равномерно распределенной в круге **91–92**
- в многомерном шаре **85–94**, **214–216**
- в трехмерном шаре **71**, **92–93**
- в шаровом слое **71–72**
- случайных величин и векторов **152**
- с составными плотностями **174–176**
- стандартного нормального распределения **13–14**, **31–32**, **211–217**
- степенного распределения **35**
- точек столкновения фотона **94–100**
- точки «рождения» фотона **85–94**
- траектории однородной цепи Маркова **39**
- прикладной цепи Маркова **40–41**
- цепи Маркова **39** – усеченного распределения **70**, **191**
- Парето **233**
- целочисленной случайной величины **155**
- численное статистическое **5**
- экспоненциального (показательного) распределения **34**
- экстремального (минимального) распределения **233**
- Моделируемая аппроксимация (приближение) функции **62–63**, **181–182**
- Моделируемое приближение (аппроксимация) функции **62–63**, **181–182**
- Моделируемый аппроксимационный базис **62–63**, **181–182**
- Модели случайных процессов и полей **134**, **217**, **224–229**
- Модель переноса частиц **82–84**
- простейшая **84**
- однородного гауссовского случайного поля (спектральная) **226–227**
- рандомизированная **228**
- Модификации стандартного алгоритма моделирования дискретной случайной величины для случая большого числа значений **160–163**
- Модификация алгоритма Волкера **165**
- стандартного алгоритма моделирования дискретной случайной величины для случая малого числа значений **157**
- Модифицированный метод суперпозиции **171–173**
- для моделирования случайной величины, плотность которой пропорциональна приближению неотрицательной функции **181**
- с кусочно-линейной плотностью распределения **178–179**
- с кусочно-постоянной плотностью распределения **177–178**
- с полиномиальной плотностью распределения **194**
- Монте-карловская оценка (оценитель) **8**
- интеграла **11**, **57**, **274**
- по поглощениям **102**, **113**
- для прямого моделирования **102**
- по столкновениям **110–113**
- Мультилинейная аппроксимация **131**

- Мультипликативный метод вычетов 27, 136, **140–141**
- для чисел с конечной мантиссой 143–146
- Начальная плотность цепи Маркова **38–39**, 81, 109
- для задачи переноса частиц 97–98
- Недостатки метода Монте-Карло 20
- Неизотропное рассеяние фотона 98–100
- Непрерывная случайная величина 30–31
- Новосибирская школа методов Монте-Карло **6–7**, 134
- Нормальное (гауссовское) распределение 13–14, 31–32, 197, **211**
- многомерное 217–218
- Норма функционального пространства $C(X)$ 222
- $L_1(X)$ 81
- $L_\infty(X)$ 104
- Обобщенная формула математического ожидания 9
- функция (дельта-функция Дирака) **64**, 94, 119–120, 153
- Обобщенное экспоненциальное распределение 95
- Обоснование алгоритма моделирования двумерного вектора 24
- априорной оценки сверху для дисперсии оценителя интеграла 59–60
- двоячного представления стандартной случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$ 137–139
- двойственного представления функционала 115
- конечности дисперсии основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) в случае использования прямого моделирования 126
- среднего числа состояний прикладной цепи Маркова 120–121
- мажорантного метода исключения 183–187
- метода мажорантного (максимального) сечения 96
- максимального (мажорантного) сечения 96
- обратной функции распределения 30
- расщепления 51
- модифицированного метода суперпозиции 172–173
- несмещенности основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) 110–112
- оценителя по поглощениям 114
- рандомизированной модели однородного гауссовского случайного поля 228 – технологии последовательных (вложенных) замен для возрастающей функции замены 232
- для убывающей функции замены 232
- того, что остаток от деления числа 5^{2p+1} на 8 равен 5 145
- предельные состояния итерационного процесса образуют циклическую группу 136
- ряд Неймана является решением интегрального уравнения Фредгольма второго рода 104
- уменьшения дисперсии оценителя интеграла при использовании метода интегрирования по части области 69
- формул условного и безусловного распределений в представлении совместной плотности двумерного случайного вектора 22–23
- формулы дисперсии основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) 121–123
- для коэффициента корреляции между соседними членами рандомизированного метода вычетов 142–143
- для функции распределения длины свободного пробега 95
- математического ожидания случайной величины с геометрическим распределением 166
- минимальной дисперсии оценителя интеграла 57–58
- моделирования геометрического распределения 167
- косинуса угла рассеяния, распределенного согласно индикатрисе Хензи – Гринштейна 100
- минимального распределения 233
- моделирования дискретного равномерного распределения 160–161
- показательного (экспоненциального) распределения 33–34
- степенного распределения 34–35
- экспоненциального (показательного) распределения 33–34
- экстремального (минимального) распределения 233
- полной дисперсии 47
- С. А. Роженко для моделирования случайной величины с двумя значениями 157
- Обрыв траектории прикладной цепи Маркова **40**, 81, 98
- Общая схема метода Монте-Карло 8
- Однородная цепь Маркова 39
- Однородное случайное поле 223
- комплекснозначное 224
- Оператор интегральный 81
- сжимающий **81**, 103, 106
- Оптимальный параметр для простейшего варианта метода расщепления 53
- Оптимизация алгоритмов приближенного вычисления линейных функционалов 120–126
- метода выборки по группам (расслоенной выборки) 74–77
- Монте-Карло 9, 11, **16–17**
- расслоенной выборки (выборки по группам) 74–77
- простейшего варианта метода расщепления 51–53
- рандомизированных функциональных алгоритмов (методов) условно-оптимальная 130–131
- Отклонение группы точек 150
- Оценивание с помощью предварительных расчетов дисперсии оценителя 18
- параметров метода расщепления 53–54
- среднего времени моделирования выборочного значения оценителя 17–18
- трудоемкости метода Монте-Карло 17–18
- Оценители локальные 116–118
- Оценитель локальный метода сопряженных блужданий 117
- функциональный 116
- (монте-карловская оценка) 8
- интеграла **11**, 57, 274
- по поглощениям 102, **113**
- для прямого моделирования 102
- по столкновениям 110–113
- основной (монте-карловская оценка по столкновениям) 110–113
- Параллелизация вычислений по методу Монте-Карло **19**, 148–149
- простейшая **19**, 148–149
- Параметры условно-оптимальные 130–131
- для метода зависимых испытаний 132
- для многомерного аналога метода полигона частот 133–134
- Переприсваивание **41**, 96, 154–155
- Перераспределение вероятностей 163–165
- Переходная плотность цепи Маркова **39**, 81, 108
- функция прикладной цепи Маркова **40**, 81, 109
- для задачи переноса частиц 101
- Периодичность метода вычетов для чисел с конечной мантиссой 143–146
- Период метода вычетов для чисел с конечной мантиссой 143–146
- План семинарских занятий 294–295
- Плотность бета-распределения 196
- гамма-распределения 196
- с целым параметром (распределения Эрланга) 198
- гауссовского (нормального) многомерного распределения 217–218
- распределения 13, **211**
- минимального распределения 233

- начальная цепи Маркова **38–39**, 81, 109
- нормального (гауссовского) распределения **13**, **211**
- обобщенного экспоненциального распределения **95**
- переходная цепи Маркова **39**, 81, 108
- показательного (экспоненциального) распределения **33**
- равномерного многомерного распределения **28**
- распределения в d -мерном шаре **85**
- – в круге **86**
- – в трехмерном шаре **86**
- – на конечном интервале (одномерного) **27**, **35**
- распределения **8–9**
- Вейбулла **234**
- длины свободного пробега **95**
- кусочно-линейная **178–179**
- кусочно-постоянная **177**
- Парето **233**
- первого («нулевого») столкновения фотона **97–98**
- полиномиальная **32**, **193**
- порядковой статистики из произвольного распределения **199**
- – из равномерного распределения **199**
- пропорциональная приближению неотрицательной функции **180**
- составная **97**, **174**
- состояний суммарная **82**
- состояния прикладной цепи Маркова **81–82**
- стандартной случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$ **27–28**
- табличная **33**, **34**, **35**
- условная **21**
- элементарная **31**
- Эрланга **198**
- совместного распределения **21**, **23**
- спектральная **224**
- стандартного нормального (гауссовского) распределения **13**, **211**
- степенного распределения **34**
- усеченного распределения **68**, **191**, **192**
- – Парето **233**
- экспоненциального распределения **192–193**
- хи-квадрат распределения с d степенями свободы **147**, **198**, **212**
- экспоненциального (показательного) распределения **33**
- экстремального (минимального) распределения **233**
- Погрешность метода Монте-Карло **9**, **12–14**, **19–20**
- метода центральных прямоугольников **14–15**
- формулы Симпсона **15**
- «Подграфик» неотрицательной функции **183**, **185**
- Показательное (экспоненциальное) распределение **33**
- Полигон частот **130**, **133**, **181**
- Полиномиальная плотность распределения **32**, **193**
- Полное сечение взаимодействия частицы со средой **95**, **98**
- Полярные координаты **91**
- Порядковая статистика **199**
- Порядок сходимости метода Монте-Карло **14**, **19–20**
- метода центральных прямоугольников **14–15**
- формулы Симпсона **15**
- Последовательность И. М. Соболя **150**
- мультипликативного метода вычетов **140**
- Холтона **15**
- Построение кусочно-постоянных мажорант **181**, **191**
- мажорант **181**, **189–191**
- в виде сеточных приближений «сверху» **181**, **191**
- для полиномиальной плотности распределения **194–196**
- «Правило трех сигма» **13–14**
- Представление плотности совместного распределения двумерного вектора **21**, **23**, **241**
- Представления плотности совместного распределения многомерного вектора **25–26**
- Преимущества метода Монте-Карло **19–20**
- Преподавание теории и приложений методов Монте-Карло в НГУ **7**
- Приближение «сложных» плотностей **180**
- функции **62**, **127**, **180**
- моделируемое **62–63**, **181–182**
- Прикладная цепь Маркова **40**, **80–81**, **109–110**
- Приложения метода Монте-Карло **5–6**
- экспоненциального (показательного) распределения **33**, **96–97**
- Применение бета-распределения для моделирования случайных параметров, распределенных на конечном интервале **196**
- гамма-распределения для моделирования случайных параметров, распределенных на полуоси **196**
- гауссовского (нормального) распределения для моделирования случайных параметров, распределенных на всей числовой прямой **197**
- квазислучайных чисел **151**
- метода выборки по важности при построении основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) **108–109**
- обратной функции распределения для моделирования бета- и гамма-распределений **197–198**
- модифицированного метода суперпозиции для моделирования случайной величины с кусочно-линейной плотностью **178–179**
- – – – – с кусочно-постоянной плотностью **177–178**
- принципа рандомизации при решении прикладной задачи **97–98**, **101**
- прямого моделирования **82–102**, **118–121**, **126**
- теорем Леви и Лебега для обоснования несмещенности основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) **110–112**
- – – – – оценителя по поглощениям **114**
- – – – – формулы дисперсии основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) **121–123**
- – – – – для представления линейного функционала в виде суммы интегралов бесконечно возрастающей кратности **106–108**
- теоремы о свертке со степенным распределением для моделирования бета-распределения с целым параметром **201–202**
- о замене случайных переменных для построения вычисляемых моделируемых преобразований декартовых координат **87–94**
- технологии «порчи» моделируемых плотностей (технологии Г) для конструирования содержательных примеров использования мажорантного метода исключения **188**, **260–274**
- – – – – (технологии Д) для конструирования содержательных примеров использования метода выборки по важности **60–62**, **275–284**
- – – – – последовательных (вложенных) замен (технологии А) для конструирования элементарных плотностей **33**, **99**, **231–240**
- – – – – распределенного (взвешенного) параметра (технологии В) для конструирования моделируемых распределений двумерных случайных векторов **36–37**, **241–249**
- – – – – содержательных примеров применения метода интегральной суперпозиции **43–44**, **249–251**
- – – – – формирования смеси (технологии В) для конструирования содержательных примеров применения метода дискретной суперпозиции **169–170**, **173–174**, **251–260**
- Пример немарковского интегрального уравнения Фредгольма второго рода с негладким ядром **105–106**
- получения выражений для условно-оптимальных параметров рандомизированного функционального алгоритма **131–133**
- прикладной задачи (простейшая модель переноса частиц) **82–102**

- применения алгоритма моделирования гауссовского случайного вектора с заданной корреляционной матрицей 219–220
- мажорантного метода исключения для моделирования усеченного распределения 192–193
- метода выборки по группам 77–78
- выделения главной части 67
- интегрирования по части области 70–73
- расслонной выборки 77–78
- расщепления 54–56
- условного математического ожидания 48–50
- Примеры альтернативных алгоритмов широкого применения 41–43, 163–165, 168–169, 186–187, 251, 260–261
- включения особенности в плотность 63, 98, 101
- вычисляемых моделируемых преобразований декартовых координат 91–92, 92–93
- моделирования двумерных случайных векторов 36–37, 43–44, 48–50, 241–251
- случайных величин, имеющих составные плотности 176–177, 177–178, 178–180
- моделируемых аппроксимационных базисов 182
- немоделируемых аппроксимационных базисов 182
- немоделируемых двумерных распределений 270, 272
- неэлементарных плотностей 13, 32, 43, 87, 90, 94, 96, 169, 173, 188, 196–199, 201–202, 206, 211, 250, 252–259, 261–269, 280
- оценителей метода Монте-Карло 11, 57, 102, 110–113, 116–118, 274
- применения алгоритма моделирования случайной точки, равномерно распределенной в трехмерном шаре 70–73, 85–94, 99
- мажорантного метода исключения 188–189, 192–193, 195–196, 207–210, 262–274
- метода выборки по важности 60–62, 275–284
- дискретной суперпозиции 65, 169–170, 176–179, 180–181, 194–195, 203–205, 209, 251–260
- интегральной суперпозиции 43–44, 205–207, 250
- обратной функции распределения 32–37, 44, 49, 61–62, 63, 87, 91–92, 93, 99–100, 169–170, 173–174, 175–176, 188, 192–194, 197–198, 202, 209, 214, 232–240, 244–251, 263–274, 276–284
- методов моделирования дискретной случайной величины 40–41, 65, 98, 165–167, 169–170, 173–174, 176–179, 181, 194–195, 204, 209, 251–260
- модифицированного метода суперпозиции 173–174, 176–179, 194–195, 209, 251–260
- проекционно-сеточных функциональных алгоритмов 130
- сеточных функциональных алгоритмов 128–129
- элементарных плотностей 27, 33–37, 44, 49, 61–62, 63, 87, 90, 91, 93, 99, 169, 173, 176–179, 188, 192, 194, 197–198, 202, 206, 209, 232–220, 244–251, 252–259, 263–274, 276–284
- Проблема вывода формулы метода обратной функции распределения (проблема 2.2) 31
- определения класса приближаемых величин (проблема 1.1) 9
- оптимизации алгоритма моделирования многомерного вектора (проблема 2.3) 36
- выбора оценителя (проблема 1.2) 9
- оценки скорости сходимости метода Монте-Карло (проблема 1.3) 9
- построения алгоритма моделирования случайной величины с плотностью, пропорциональной приближению неотрицательной функции (проблема 11.1) 180
- точки, равномерно распределенной в многомерном шаре (проблема 6.1) 86
- численного моделирования выборочных значений одномерной случайной величины (проблема 2.1) 26
- оценителя (проблема 1.4) 9
- Проверка моделирующих формул 35, 233–234
- Простейшая параллелизация вычислений по методу Монте-Карло 19
- численная модель переноса частиц 82–84
- Пространство $L_1(X)$ 81–82, 103–104
- $L_\infty(X)$ 104
- гильбертово $L_2(X)$ 104
- непрерывных функций $C(X)$ 131, 222
- Прямое моделирование 84, 118–119, 121
- Псевдослучайное число 26–27, 134, 140
- Равномерное дискретное распределение 160
- многомерное распределение 28
- распределение в d -мерном шаре 85
- в круге 86
- в трехмерном шаре 86
- на конечном интервале (одномерное) 27, 35, 137
- Равномерно распределенная последовательность точек 149–150
- точка в d -мерном шаре 85
- в круге 86
- в трехмерном шаре 86
- Радиус спектральный 106
- Разложение плотности совместного распределения двумерного вектора 21, 23, 241
- Холесского 219
- Рандомизация 40, 45–46
- бета-распределения с параметрами, меньшими единицы 205
- Рандомизированная модель однородного гауссовского случайного поля 228
- Рандомизированные сеточные функциональные алгоритмы (методы) 128–129
- функциональные алгоритмы (методы) 126
- численные методы решения кинетических уравнений 134
- решения краевых задач математической физики 134
- Рандомизированный проекционно-сеточный функциональный алгоритм (метод) 129
- проекционный функциональный алгоритм (метод) 127
- Распределение абсолютно непрерывное 9
- условное 21
- безгранично делимое 201
- Вейбулла 234
- гауссовское (нормальное) 13, 31, 197, 211
- многомерное 217–218
- геометрическое 166, 183
- дискретной случайной величины 152–153
- конечномерное 222
- минимальное 233
- многомерное нормальное 217–218
- равномерное 27–29
- нормальное (гауссовское) 13, 31, 197, 211
- многомерное 217–218
- обобщенное экспоненциальное 95
- Парето 233
- усеченное 233
- показательное (экспоненциальное) 33
- равномерное в d -мерном шаре 85
- в круге 86
- в трехмерном шаре 86
- многомерное 27–29
- на конечном интервале (одномерное) 27, 35, 137
- случайной функции 221
- совместное 21–22
- с полиномиальной плотностью распределения 32, 193
- стандартное нормальное (гауссовское) 13, 31, 197, 211
- стандартной случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$ 27–29, 137
- степенное 34
- усеченное 68, 191, 192
- экспоненциальное 192–193
- условное 20–21
- хи-квадрат с d степенями свободы 147, 198, 212
- экспоненциальное (показательное) 33
- экстремальное (минимальное) 233

- Эрланга 198
- Рассеяние фотона 98–100
 - – изотропное 99
 - – неизотропное 99–100
- Реализация (траектория, выборочная функция) случайной функции 220–221
- Ряд вариационный 199
- Неймана 82, 103, **106**

- Свободный член интегрального уравнения 103–104, **105**
- Свойства бета-функции 90, 198
 - гамма-функции 90, 198–199
 - дисперсии 18, **52**, 60, 69, 74
 - математического ожидания 18, **51–52**, 60, 69
 - плотности распределения 9–10
 - преобразования метода вычетов 141–143
 - стандартной случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$ **27–29**, 137
- Свойство d -равномерности 146–148
 - аддитивности математического ожидания 51
 - марковское **38**, 80
- Семестровое домашнее задание 33, **230**, 237–240, 246–251, 257–260, 267–274, 279–284
- Сетка аппроксимационная 126
- Сечение поглощения 98
 - полное **95**, 98
 - рассеяния 98
- Сжимающий интегральный оператор **81**, 103, 106
- Скорость сходимости метода Монте-Карло **14**, 19–20
 - – метода центральных прямоугольников 14–15
 - – формулы Симпсона 15
- Случайная величина бернуллиевская **157**, 166
 - – дискретная 40, 43, 65, **152–153**
 - – непрерывная 30–31
 - – стандартная $\alpha \in U(0, 1)$ **27–29**, 137
 - – нормальная (гауссовская) **13**, 31, 197, 211
 - – целочисленная 40, 43, **155**, 166, 168
 - – последовательность 220
 - – функция 220
- Случайное поле 220
 - – гауссовское 223
 - – комплекснозначное 223, **224**
 - – однородное 223
- Случайные веса 109, **110**
- Случайный вектор 8
 - – двумерный 20
 - – изотропный 85
 - – с марковским свойством **38**, 80
 - – процесс гауссовский 223 – – с дискретным временем 220
 - – с непрерывным временем 220
 - – стационарный в узком смысле 223
 - – в широком смысле 223
- Смесь (звешенная сумма) эффективно моделируемых плотностей **168**, 181, 251
- Смешанные дискретно-стохастические численные методы 134
- Совместная плотность распределения 21–22
- Совместное распределение случайных величин 21–22
- Сопряженное интегральное уравнение 115
- Составная плотность распределения 97, **174**
- Спектральная мера 224
 - – абсолютно непрерывная 224
 - – модель однородного гауссовского случайного поля 226–227
 - – плотность 224
- Спектральное представление случайной функции 224–225
 - – разложение корреляционной функции 224
- Спектральные тесты 148
- Спектральный радиус интегрального оператора 106
- Специальные численные модели (алгоритмы моделирования) случайных процессов и полей 134, **217**, 224–229
 - – методы моделирования случайных величин 32, 86–94, 95–96, 99, 157, **152**, 157, 160, 166, 198, 200, 202, 213–216
 - – специальный алгоритм (формула) моделирования геометрического распределения 166
 - – – равномерного дискретного распределения 160
 - – стандартная случайная величина $\alpha \in U(0, 1)$ **27–29**, 137
 - – стандартный алгоритм моделирования дискретной случайной величины 155
 - – – непрерывной случайной величины 30
 - – – случайного вектора 26
 - – – целочисленной случайной величины 155
 - – стандартное число случайное **26–27**, 134, 139–140
 - – псевдослучайное **26–27**, 134, 140–141
 - – статистика порядковая 199
 - – статистическая оценка 8
 - – дисперсии 18
 - – смещенная 18
 - – состоятельная 18
 - – статистическое моделирование 5
 - – стационарный (в узком смысле) случайный процесс 223
 - – (в широком смысле) случайный процесс 223
 - – степенное распределение 34
 - – сумма интегралов бесконечно возрастающей кратности 12, **107–108**
 - – суммарная плотность столкновений **82**, 103
 - – – как решение марковского интегрального уравнения Фредгольма второго рода 82, **103–104**
 - – сферические координаты 92
 - – сходимость по распределению 13–14
- Табличные плотности 33, 34, **35**
- Табулирование непрерывного распределения 178
- Теорема Вохнера – Хинчина 224
 - – Лебега 106–107
 - – Леви 106
 - – об априорной оценке дисперсии 59–60
 - – об изотропности случайного вектора, составленного из независимых стандартных нормальных компонент 214–215
 - – об оптимальном порядке нумерации значений и вероятностей дискретной случайной величины 156–157
 - – об уменьшении дисперсии при применении метода интегрирования по части области 69
 - – об эквивалентности метода обратной функции и модифицированного метода суперпозиции для моделирования случайной величины с составной плотностью 176
 - – об элементарности случайной величины с усеченной плотностью распределения 192
 - – – составной плотности 175–176
 - – о безграничной делимости гамма-распределения 200–201
 - – о гауссовских компонентах изотропного вектора случайной длины 211–213
 - – о двоичном представлении стандартной случайной величины 137–139
 - – о дисперсии основного оценителя 121–123
 - – – оценителя по поглощениям 124
 - – о замене случайных переменных 87–89
 - – о конечности математического ожидания случайного числа переходов в траектории прикладной цепи Маркова 120–121
 - – о коэффициенте корреляции между соседними членами последовательности метода вычетов для двоичной мантиссы длины m 145
 - – о минимальной дисперсии основного оценителя (монте-карловской оценки по столкновениям) 124
 - – – оценителя интеграла 57–58
 - – – – по поглощениям 124
 - – – – целочисленной случайной величины с заданным математическим ожиданием 53, **158–159**

- $L_\infty(X)$ 104
- гильбертово $L_2(X)$ 104
- непрерывных функций $C(X)$ 131, **222**
- Функциональный базис **62**, 126, 180
- Бернштейна 182
- Лагранжа 182
- моделируемый 62–63, **181–182**
- Стренга – Фикса 63, 130, **131**, 182
- тригонометрический 182
- локальный оценщик 116
- рандомизированный алгоритм (метод) сопряженных блужданий 128–129
- проекционный алгоритм (метод) 127
- проекционно-сеточный алгоритм (метод) 129
- Функциональные рандомизированные алгоритмы (методы) 127
- сеточные алгоритмы (методы) 128–129
- Функциональный ряд Неймана 82, 103, **106**
- Функция дисперсии 223
- корреляционная (автокорреляционная, ковариационная, автоковариационная) 222–223
- математического ожидания 222
- обобщенная **64**, 94, 119–120, 153
- обобщенного экспоненциального распределения 95
- переходная прикладной цепи Маркова **40**, 81, 109
- -- -- для задачи переноса частиц 101
- распределения непрерывной случайной величины 29–30
- стандартной случайной величины $\alpha \in U(0, 1)$ **27–28**, 137
- хи-квадрат с d степенями свободы 212
- управления 135
- ценности 125
- Хи-квадрат** распределение с d степенями свободы 147, **198**, 212
- Целочисленная** случайная величина 40, 43, **155**, 166, 168
- Центральная предельная теорема для одинаково распределенных случайных величин **13**, 217, 223
- Цепь Маркова **38–39**, 80, 108–109, 220
- однородная **38–39**, 80, 108–109
- прикладная **40–41**, 80–81, 109–110, 113–114, 116–117, 128–129
- Цилиндрическое множество 221
- Числа** квазислучайные 149–150
- псевдослучайные 26–27, 134, **140–141**
- стандартные случайные **26–27**, 134, 139–140
- Численная модель переноса частиц 82–84
- -- -- простейшая 84
- спектральная модель однородного гауссовского случайного поля 226–227
- -- -- рандомизированная 228
- Численное статистическое моделирование 5
- Численные итерационные процессы 135
- модели случайных процессов и полей 134, **217**, 224–229
- Число сочетаний 199
- Экзаменационные** задачи 60–62, 229, 234–237, 243–246, 251–257, 263–267, 275–279
- вопросы 285–287
- Экспоненциальное (показательное) распределение 33
- Экстремальное (минимальное) распределение 233
- Элементарная плотность 31
- Ядро** интегрального оператора 12, **81**, 103–104, 104–105
- уравнения Фредгольма второго рода 12, 81–82, 103–104, **104–105**