

На правах рукописи

**Антонов Антон Александрович**

**Расслоение и метод квази-Монте-Карло**

01.01.07 — вычислительная математика

Автореферат  
диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2016

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете.

Научный руководитель: **Ермаков Сергей Михайлович**  
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Войтишек Антон Вацлавович,**  
доктор физико-математических наук, профессор,  
Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской Академии наук,  
ведущий научный сотрудник лаборатории стохастических задач

**Кузнецов Андрей Николаевич,**  
кандидат физико-математических наук,  
Вологодский государственный университет,  
доцент кафедры прикладной математики

Ведущая организация: Санкт-Петербургский государственный политехнический университет Петра Великого

Защита состоится "30" марта 2016 г. в 15 час. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.232.49 на базе Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 199004, Санкт-Петербург, 10-я линия В.О., д. 33, ауд. 74.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке имени М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9 и на сайте [http://spbu.ru/disser2/disser/antonov\\_disser.pdf](http://spbu.ru/disser2/disser/antonov_disser.pdf).

Автореферат разослан "\_\_\_" \_\_\_\_ 2016 г..

Учёный секретарь  
диссертационного совета Д 212.232.49,  
доктор физико-математических наук

Ю. В. Чурин

# Общая характеристика работы

## Актуальность темы исследования

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

Наиболее полно разработана теория численного интегрирования по подмножествам одномерной вещественной оси  $\mathbb{R}$ . Случай интегрирования по многомерным областям является гораздо более сложным и менее изученным. Это связано в первую очередь с тем, что при увеличении размерности вычислительная трудоёмкость классических методов быстро возрастает. Кроме того, область интегрирования может иметь гораздо более сложную конфигурацию, поэтому значительная часть исследований посвящена только тем задачам, область интегрирования которых имеет достаточно простую форму (гиперкуб, шар или симплекс).

В теории многомерного численного интегрирования ключевым является следующий результат, полученный Бахваловым Н.С. Им установлено, что в размерности  $s$  на классе функций  $C_s^m(A)$ , имеющих ограниченные постоянной  $A$  частные производные до порядка  $m$  включительно, сходимость любого детерминированного метода не может быть лучше, чем  $\mathcal{O}(AN^{-m/s})$  (где  $N$  – количество вычислений подынтегральной функции). Это обстоятельство дало толчок изучению недетерминированных методов интегрирования, которые получили значительное распространение и выделились в отдельную группу методов под общим названием метод Монте-Карло.

Даже в простейшем случае метод Монте-Карло обладает рядом несомненных преимуществ: простота реализации, последовательный характер исполнения и удобная схема апостериорного контроля погрешности. Кроме того, существует обширный спектр приёмов уменьшения дисперсии, позволяющих эффективно ускорять сходимость метода.

Одним из наиболее известных и универсальных приёмов понижения дисперсии является введение зависимости в распределение узлов интегрирования. На этой идеи основана теория интерполяционно-квадратурных формул со случайными узлами, разработанная Ермаковым С.М. и Золотухиным В.Г.; Ермаковым С.М. и Грановским Б.Л. введено понятие допустимости таких процедур на

классах функций и исследованы критерии такой допустимости. Частным случаем использования квадратур со случайными узлами является широко известный приём расслоенной выборки (stratified sampling). Он заключается в разбиении области интегрирования на несколько подобластей, интегрирование по которым в простейшем случае ведётся раздельно.

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

Несмотря на окончательный результат Бахвалова Н.С. относительно широкого класса  $C_s^m(A)$ , многими исследователями предпринимались попытки получить оценки сходимости методов интегрирования на других, более узких классах функций. Так, в работах Коробова Н.М. рассматриваются классы  $H_s^\alpha$  и  $E_s^\alpha$  и строятся параллелепипедальные сетки, для которых скорость сходимости весьма близка к оптимальной. Похожих результатов достиг Соболь И.М. на классах  $S_p$  функций с быстро убывающими коэффициентами Фурье по системе Хаара. Им построена ЛП $_\tau$ -последовательность, обеспечивающая на этих классах почти наилучший порядок сходимости.

В ряде случаев при использовании Монте-Карло совокупность независимых реализаций случайной величины может быть заменена детерминированной (квазислучайной) структурой и привести к улучшенной сходимости. Так, в задаче численного интегрирования такая процедура может быть применена для любой интегрируемой по Риману подынтегральной функции, и при этом среднее по первым  $N$  узлам будет стремиться к истинному значению интеграла при  $N \rightarrow \infty$ . Такой приём в сочетании со структурами, имеющими определённую асимптотику дискрепанса, получил название метода квази-Монте-Карло.

В рамках теории квази-Монте-Карло последовательность называется low-discrepancy, если асимптотика её дискрепанса есть  $\mathcal{O}\left(\frac{\ln^s N}{N}\right)$ . В этом случае известное неравенство Коксмы-Хлавки обеспечивает скорость сходимости метода порядка  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1-\varepsilon}}\right)$  для сколь угодно малого положительного  $\varepsilon$ . ЛП $_\tau$ -последовательность Соболя И.М., являясь low-discrepancy последовательностью, обладает ещё и тем преимуществом, что для неё известен эффективный последовательный алгоритм Антонова И.А. и Салеева В.М.

Одним из принципиальных недостатков метода квази-Монте-Карло является невозможность апостериорного контроля остатка. Это обстоятельство порождает необходимость проводить некоторое количество повторений процедуры

с различными независимыми рандомизациями. Вопрос о достаточном количестве таких повторений не разрешён окончательно.

Вероятностные методы получили дальнейшее распространение в ряде других задач, для которых детерминированные алгоритмы оказывались слишком трудоёмкими. Так, для внутренней задачи Дирихле для оператора Лапласа,  $\Delta u = 0$  в области  $G$  с краевым условием  $u|_{\partial G} = g$ , использование формул Грина и теоремы о среднем позволяет связать решение в точке с марковским процессом, обрывающимся на границе области. Этот результат позволяет свести задачу к сферическому процессу (процессу блуждания по сферам), траектории которого моделируются некоторое количество раз. Применение расслоения в этом алгоритме сопряжено с алгоритмическими и вычислительными трудностями, а надёжной адаптации квази-Монте-Карло в настоящий момент не существует.

### **Степень разработанности темы**

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

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

Основы теории интерполяционно-квадратурных формул со случайными узлами изложены в книге Ермакова С.М. Ключевыми в этой области являются работы Ермакова С.М. и Золотухина В.Г., Хэндскомба Д. Понятие допустимости таких квадратур введено и исследовано Ермаковым С.М. и Грановским Б.Л. Квадратурные формулы со случайными узлами представляют собой гибкий инструмент для решения сложных задач интегрирования методом Монте-Карло, в связи с чем обнаружение новых и обобщение имеющихся результатов представляет несомненную ценность.

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

## **Цель и задачи диссертационной работы**

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

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

## **Научная новизна**

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

- 1) Впервые формально установлена тесная связь между методами квази-Монте-Карло и расслоения для Монте-Карло. Теория квадратурных формул со случайными узлами дополнена новыми теоретическими утверждениями.
- 2) В отличие от существующих методов квази-Монте-Карло, которые не предоставляют конструктивной оценки погрешности либо оценивают неизвестную дисперсию, в работе впервые разработан новый метод оценивания

схем рандомизированного квази-Монте-Карло, дисперсия которого известна теоретически.

- 3) Предлагаемый метод рандомизации квазислучайных последовательностей и основанная на нём адаптация метода „блуждания по сферам“ предлагаются впервые.
- 4) Все иллюстрирующие численные примеры, представленные в докторской работе, разработаны автором.

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Значимость докторской работы определяется тремя главными факторами.

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

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

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

## **Методология и методы исследования**

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

## **Положения, выносимые на защиту**

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

## **Степень достоверности и апробация результатов**

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

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях:

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

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

## **Публикации по теме диссертации**

Основные результаты по теме диссертации изложены в 5 печатных изданиях, 3 [1-3] из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК. В [1] соискателем сформулированы и доказаны теоремы 1 и 2 о виде и дисперсии формулы, точной для обобщённой системы Хаара, а также представлены результаты численных экспериментов. В [3] соискателю принадлежит лемма 2.5, а также теоремы 2.6, 3.1 и 3.2. В обеих совместных работах соавтору – научному руководителю – принадлежит общая постановка задачи и план исследований.

## **Структура работы**

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

## **Содержание работы**

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируются цели работы.

**Первая глава** посвящена построению класса квадратурных формул со случайными узлами, точных для обобщённых функций Хаара.

Дается краткая характеристика методов Монте-Карло (далее МС) и квази-Монте-Карло (далее QMC) в рамках традиционной задачи численного интегрирования по единичному  $s$ -мерному гиперкубу  $U_s = [0,1]^s$  от интегрируемой функции  $f \in L^2(U_s)$  по мере Лебега. Приведены основные результаты: факты несмешённости оценки интеграла и величина дисперсии в методе МС, неравенство Коксмы-Хлавки в методе QMC. Очерчены основные проблемы для практического применения методов: большая дисперсия для МС и неконструктивность неравенства Коксмы-Хлавки. Приводятся широко распространённые способы решения этих проблем: приём расслоенной выборки для МС и рандомизированный вариант QMC.

Легко наблюдать, что расслоение для метода МС имеет под собой ту же идею о наиболее равномерном заполнении всех областей гиперкуба  $U_s$ , что и метод QMC, который оперирует понятием дискрепанса. Естественной выглядит задача выведения такого класса формул, который обладал бы свойством точности для функций Хаара, которые были использованы Соболем И.М. для построения ЛП<sub>7</sub> последовательностей. Подобный результат для одномерного случая уже был получен Ермаковым С.М.

Для обобщения вышеупомянутого результата для произвольной размерности производится построение *системы обобщённых функций Хаара*  $\{\chi_i\}_{i=1}^n$  для некоторого произвольного разбиения гиперкуба на  $n = 2^\nu, \nu \in \mathbb{N}_0$ , непересекающихся частей  $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$  равного объёма. Эта система ортонормирована, и поэтому к ней применимы теоремы из теории квадратур со случайными узлами. Результатом применения после некоторых упрощений является следующая теорема.

**Теорема 1.** *Квадратурная формула, точная для первых  $n$  обобщённых функций Хаара, имеет вид*

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

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

$$\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \begin{cases} \frac{n^n}{n!}, & (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \in ULat; \\ 0, & (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \notin ULat, \end{cases} \quad (2)$$

где  $ULat$  – множество, полученное объединением всевозможных множеств  $Lat(i_1, \dots, i_n)$ , которые для произвольной перестановки  $(i_1, \dots, i_n)$  определя-

иотся следующим образом:

$$(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \in Lat(i_1, \dots, i_n) \Leftrightarrow \forall j \in \{1, \dots, n\} \ x_j \in \mathfrak{X}_{i_j}. \quad (3)$$

Теория квадратур со случайными узлами не даёт ответа на вопрос о дисперсии такой формулы, поскольку поскольку точное выражение для дисперсии известно только для регулярных систем. Однако непосредственный подсчёт дисперсии формулы (1) с плотностью узлов (2) приводит к следующему результату.

**Теорема 2.** Дисперсия формулы (1) равна

$$\text{Var}(S_n) = \frac{1}{n} \int_{U_s} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{n} \left( \int_{U_s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^2 - \frac{1}{n} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2, \quad (4)$$

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

Эта дисперсия меньше дисперсии МС на величину  $\frac{1}{n} \sum_{i < j} (\alpha_i - \alpha_j)^2$ , которая всегда неотрицательна.

Далее, из этих двух теорем можно сделать несколько важных выводов. Во-первых, уже на данном этапе может быть сформулирована идея вычислительной схемы на основе оценок коэффициентов  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ . Во-вторых, в свете нового класса формул, точного для обобщённых функций Хаара, возникает возможность использования рандомизированных точек Соболя вместо расслоенной выборки МС, и при этом будут выполнены как условие расслоения (2), так и несмешённость оценки (1) для исходного интеграла  $I$ .

Истинная дисперсия квадратурной формулы  $S_n$  отличается от теоретической оценки сверху (полученной Ермаковым С.М. и Золотухиным В.Г.) множителем  $\frac{1}{n}$  перед суммой квадратов коэффициентов Фурье-Хаара. Таким образом, для рассматриваемой нерегулярной системы получено улучшение порядка сходимости. При этом заведомо известно, что ни для какой регулярной системы подобного улучшения не может быть. Из этого возникает вопрос: существуют ли другие нерегулярные системы, обладающие тем же свойством, что и система Хаара? Если да, то возможно ли улучшение порядка, отличное от  $\frac{1}{n}$ ?

Для ответа на поставленные вопросы вводится *класс систем со скользящим носителем*, каждая из которых состоит из  $n \in \mathbb{N}$  ортогональных функций  $\{w_i\}_{i=1}^n$ , для которых выполнено  $\text{supp}(w_i) = \mathfrak{X}_i$  для  $i = 1, \dots, n$  и при этом вся система линейно независима с константой на всем гиперкубе  $U_s$ . Для всего такого класса справедливо следующее утверждение.

**Теорема 3.** Квадратурная формула, точная для системы  $\{w_i\}_{i=1}^n$  со скользящим носителем, не имеет уменьшения дисперсии, то есть известная оценка сверху превращается в строгое равенство.

Эта теорема отсекает большой класс потенциальных систем. Отсюда следует такой вывод: либо система обобщённых функций Хаара (и системы, связанные к ней линейной заменой) является уникальными в этом отношении, либо другие системы, дающие гарантированное уменьшение дисперсии, существуют, но имеют какую-то более сложную структуру.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что ключевую роль в применении теории квадратурных формул со случайными узлами играют множества линейной зависимости функций внутри той или иной выбранной ортонормированной системы. Оказывается, что можно сформулировать эту зависимость конструктивным образом, и полученная теорема будет новым дополнением к существующей теории.

**Теорема 4.** Пусть  $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$  – ортонормированная система на  $\mathfrak{X}$ . Пусть  $\Theta$  и  $\Theta_{-1}$  являются максимально широкими подмножествами  $\mathfrak{X}$ , где  $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$  и  $\{\varphi_i\}_{i=2}^n$  линейно зависимы, соответственно. Очевидно, что  $\Theta_{-1} \subseteq \Theta \subseteq \mathfrak{X}$ .

Верхняя граница для дисперсии квадратурной формулы со случайными узлами, точной для  $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$  зависит от мер множеств  $\Theta$  и  $\Theta_{-1}$  следующим образом:

- 1) если  $\mu(\Theta) = 0$ , то система регулярна, и неравенство обращается в строгое равенство;
- 2) если  $0 < \mu(\Theta) < \mu(\mathfrak{X})$ , то система нерегулярна, и
  - (a) если  $\mu(\Theta_{-1}) = \mu(\Theta)$ , то неравенство обращается в строгое равенство;
  - (b) если  $\mu(\Theta_{-1}) < \mu(\Theta)$ , то истинная дисперсия, вообще говоря, меньше, чем верхняя граница.

В качестве нетривиального иллюстрирующего примера рассмотрена достаточно простая система из двух функций на отрезке  $[0, 1]$ . Она удовлетворяет условию уменьшения дисперсии в соответствии с теоремой 4, и прямой подсчёт дисперсии действительно приводит к таковому.

**Вторая глава** посвящена практическим аспектам использования полученного класса формул.

Определённую сложность представляет выбор схемы оценивания дисперсии формулы  $S_n$ . В связи с этим ставится задача построить эквивалентное выражение дисперсии через коэффициенты Фурье-Хаара. Непосредственный переход к коэффициентам Фурье-Хаара затруднителен, поэтому рассматривается

вспомогательная система обобщённых индикаторов  $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$ . Эта система также ортонормирована и сводится к системе Хаара линейной заменой. Существование такой замены и свойства матрицы перехода  $H$  сформулированы и доказаны рядом вспомогательных лемм. Окончательным результатом является следующая теорема.

**Теорема 5.** *Формула (1) является точной как для системы обобщённых функций Хаара, так и для системы обобщённых индикаторов. Её дисперсия может быть выражена тремя эквивалентными способами:*

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

где  $\varkappa_i$  и  $e_i$  – коэффициенты Фурье функции  $f$  по системам  $\{\chi_i\}_{i=1}^n$  и  $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$ , соответственно:  $\varkappa_i = \langle f, \chi_i \rangle$ ,  $e_i = \langle f, \varepsilon_i \rangle$ .

Далее по аналогии с известным приёмом рандомизации квазислучайных последовательностей (рандомизированный квази-Монте-Карло, RQMC) представлена обобщённая схема, опирающаяся на формулу (1) с  $n$  узлами и  $m$  повторами. В такой схеме дисперсия становится, вообще говоря, функцией двух переменных,  $m$  и  $n$ , и может быть представлена в следующем виде.

**Теорема 6.** *Обобщённая схема с  $m$  повторами и  $n$  узлами в каждом повторе,  $S_{(m,n)}$ , имеет дисперсию*

$$\text{Var}(S_{(m,n)}) = \frac{1}{mn} \left( \|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n \varkappa_i^2 \right). \quad (5)$$

Скорость убывания такой дисперсии по переменной  $m$  такая же, как и в методе МС, что вполне естественно для рандомизированной схемы. А скорость убывания по переменной  $n$  зависит от того, насколько хорошо функция  $f$  приближается системой Хаара. Однако не вызывает сомнений тот факт, что порядок убывания должен быть выше, чем по переменной  $m$ . Это рассуждение говорит о том, что с теоретической точки зрения при выборе между количеством подразбиений  $n$  и количеством повторов  $m$  имеет смысл наращивать именно первый параметр.

Однако когда речь идёт об оценивании среднего в соответствии с центральной предельной теоремой, параметр количества повторов не может быть слишком мал. Кроме того, точное выражение для дисперсии RQMC неизвестно,

так что даже достаточно большого количества вполне может оказаться недостаточно. Одним из ключевых преимуществ предлагаемого подхода является известная величина дисперсии (теорема 6). Это обстоятельство позволяет оценить дисперсию непосредственно, то есть построить некоторую теоретическую оценку, доказать её (асимптотическую) несмешённость, а затем предложить алгоритм её подсчёта.

Ранее для схемы без повторов было рассмотрено несколько эквивалентных выражений для дисперсии (теорема 5), поэтому потенциальных оценок может быть построено несколько. В частности, в одной из статей автора и Ермакова С.М. была предложена оценка на основе

$$\hat{A} = \sum_{i < j} (\hat{\alpha}_i - \hat{\alpha}_j)^2, \quad (6)$$

где  $\hat{\alpha}_k$  – оценка  $\alpha_k$ , то есть интеграла от функции  $f$  по подразбиению  $\mathfrak{X}_k$ . Такая оценка была использована в численных экспериментах, но её математическое ожидание ранее исследовано не было. Этот пробел восполняется в диссертационной работе: доказана асимптотическая несмешённость оценки  $\hat{A}$ .

Впрочем, смещение оценки  $\hat{A}$  для конечных  $m$  и  $n$  может быть значительным, в связи с чем предлагается новая оценка на основе  $\hat{\hat{A}}$ , где вместо  $\hat{\alpha}_k$  используются  $\hat{\hat{\alpha}}_k = \sqrt{\frac{m}{m-1}}\hat{\alpha}_k$ . Показано, что смещение такой оценки убывает быстрее, благодаря чему оценка дисперсии будет более точной. На конец, рассмотрена ещё одна возможная оценка вида

$$\frac{1}{(mn)^2} \sum_i f(x_i)^2 - \frac{1}{m} \sum_i \hat{\hat{\alpha}}_i^2, \quad (7)$$

которая обладает минимальным смещением из всех рассматриваемых. Эта оценка будет использоваться в качестве основной в ходе вычислительных экспериментов.

Вычислительная процедура на основе обобщённой схемы (теорема 6) зависит также и от формы разбиения на подмножества  $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ . Основной мотивацией для выбора формы разбиения служит понятие элементарных подмножеств, взятое из определения  $(t,m,s)$ -сетей и  $(t,s)$ -последовательностей (оригинальное определение принадлежит Нидеррейтеру Х.). Показано, что существует такой алгоритм разбиения  $s$ -мерного гиперкуба, для которого произвольная  $(t,s)$ -последовательность (в том числе последовательность Соболя) автоматически удовлетворяет условию расслоения по подмножествам  $\mathfrak{X}_1, \dots, \mathfrak{X}_n$ , причём даже после рандомизации.

Вычислительные примеры, приведённые в диссертационной работе, покрывают широкий спектр тестовых подынтегральных функций, взятых из работ Генца А., Морокоффа У., Кафлиша Р., Шюрера Р. Используются последовательности Соболя, рандомизированные по алгоритму Оуэна А.

**Третья глава** посвящена рассмотрению ряда прикладных задач, решаемых при помощи методов МС. Дисперсия получаемых при этом оценок может быть значительно уменьшена при помощи применения специальных приёмов, одним из которых является расслоение.

В настоящее время методы QMC широко используются в задачах, сводимых к вычислению многомерных интегралов. Их использование при моделировании распределений и случайных процессов и цепей Маркова, в задачах оптимизации и решения дифференциальных уравнений может приводить к грубым ошибкам, что отмечалось многими авторами. Тем не менее, в работе демонстрируется, что замена расслоенной выборки на квазислучайные последовательности при соблюдении ряда условий всё же возможна.

Так, для квазислучайных последовательностей предлагается новый способ рандомизации, основанный на частичной замене битов из двоичного разложения числа  $x \in [0,1]$ . Так, для параметра  $k$  и разложения

$$x = 0.\varepsilon_1\varepsilon_2\dots\varepsilon_k\varepsilon_{k+1}\varepsilon_{k+2}\dots\varepsilon_d \quad (8)$$

рассматривается замена вида

$$\tilde{x} = 0.\varepsilon_1\varepsilon_2\dots\varepsilon_k\tilde{\varepsilon}_{k+1}\tilde{\varepsilon}_{k+2}\dots\tilde{\varepsilon}_d, \quad (9)$$

где все биты  $\tilde{\varepsilon}_j$  для любого  $j$  случайны (0 или 1 с равной вероятностью) и попарно независимы. При помощи такой замены, во-первых, не слишком сильно нарушается исходная структура  $(t,s)$ -последовательности (и чем больше  $k$ , тем больше она сохраняется), а во-вторых, появляется возможность проводить независимые повторы рандомизации и оценивать дисперсию, как это делается в рандомизированном QMC.

Показано, что такая схема может быть эффективно реализована для формата чисел двойной точности, определяемых стандартом IEEE 754, при этом свойства алгоритма определяются исходной квазислучайной структурой.

Генератор последовательностей Соболя с предложенной рандомизацией использовался в задачах численного интегрирования, описанной выше, и для решения внутренней задачи Дирихле для оператора Лапласа, которая задаётся для области  $\Omega$  уравнением  $\Delta u = 0$  с краевыми условиями  $u|_{\partial\Omega} = g(\mathbf{x})$ .

Для задач численного интегрирования проведено сравнение предложенного метода с МС и рандомизированным QMC. Показано, как предложенная па-

раметризация метода может быть использована для гибкого изменения работы алгоритма. Так, для малых  $k$  поведение профилей дисперсии близко к МС, для больших – к QMC. Для метода „блуждания по сферам“ выполнен анализ поведения смещения, дисперсии и вспомогательных показателей для рассматриваемых методов. Приведены количественные оценки множителя уменьшения дисперсии, причём для избавления от эффекта случайности использовались результаты множественных запусков. Показано, что предлагаемый гибридный метод, обладая тем же смещением, демонстрирует значительное уменьшение дисперсии для достаточно сложных конфигураций и различных размерностей.

В **заключении** подведены основные научные итоги докторской работы и перечислены ключевые результаты для нового способа оценки погрешности дисперсии метода квази-Монте-Карло и нового алгоритма рандомизации квазислучайных последовательностей. Сформулированы перспективы дальнейшей разработки представленной в работе тематики, а также приведены рекомендации по применению результатов работы в приложениях и научных исследованиях.

## **Публикации автора по теме докторской работы**

1. Антонов А.А., Ермаков С.М. Эмпирическая оценка погрешности интегрирования методом квази Монте-Карло // Вестник Санкт-Петербургского Университета. Сер. 1. – 2014. – Т. 1(59), № 1. – С. 3–11.
2. Антонов А.А. Qint: алгоритм численного интегрирования методом квази Монте-Карло с апостериорной оценкой погрешности // Вестник Санкт-Петербургского Университета. Сер. 1. – 2015. – Т. 2(60), № 1. – С. 3–13.
3. Antonov A.A., Ermakov S.M. Random cubatures and quasi-Monte Carlo methods // Monte Carlo Methods and Applications. – 2015. – Vol. 21, no. 3. – Pp. 179–187.
4. Антонов А.А. Элементы квази Монте-Карло в теории квадратурных формул с одним свободным узлом // Математические модели. Теория и приложения. – 2010. – Т. 11. – С. 104–121.
5. Антонов А.А. Точки Холтона и критерий Вейля // Математические модели. Теория и приложения. – 2012. – Т. 13. – С. 48–60.

*Отпечатано в авторской редакции с готового оригинал-макета*

Подписано в печать 25.01.16.

Формат 60x84/16. Бумага офсетная. Печать цифровая. Заказ №762.  
Уч.-изд. л. 1. Печ. л. 1. Тираж 100 экз.

**ТИПОГРАФИЯ ООО «ГАЛАНИКА»**

г. Санкт-Петербург, ул. Правды, д. 15.

Тел.: (812) 670-56-88, galanika@list.ru, www.galanika.com