*На правах рукописи*

БУЛГАКОВА Татьяна Евгеньевна

# ОПТИМИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ОЦЕНОК И АЛГОРИТМОВ

Специальность 01.01.07 – вычислительная математика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск – 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель: **Войтишек Антон Вацлавович**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты:

**Лемешко Борис Юрьевич**
доктор технических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский государственный технический университет», профессор кафедры теоретической и прикладной информатики

**Плотников Михаил Юрьевич**
кандидат физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики имени С. С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук РАН, старший научный сотрудник

Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»

Защита состоится «26 мая» 2021 г. в 16:30 на заседании диссертационного совета Д 003.061.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМиМГ СО РАН) по адресу: 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 6, конференц-зал ИВМиМГ; тел. +7(383)330-71-59.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИВМиМГ СО РАН https://icmmg.nsc.ru

Автореферат разослан « 24 марта» 2021 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета Д 003.061.01 на базе ИВМиМГ СОРАН,

д.ф.-м.н. Рогазинский Сергей Валентинович

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** С развитием вычислительной техники (в том числе в связи с расширением использования высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных систем) возрастает роль алгоритмов вычислительного статистического моделирования или методов Монте-Карло. Эти алгоритмы широко используются для решения задач математической и статистической физики, геофизики, физической и химической кинетики, теории турбулентности, теории массового обслуживания, математической биологии, финансовой математики и др.

В последние годы (главным образом в новосибирской школе методов Монте-Карло – см. в первую очередь работы Г. А. Михайлова, А. В. Войтишека, С. М. Пригарина, Е. В. Шкарупа и их соавторов и учеников) разрабатываются ***теория и содержательные приложения функциональных вычислительных статистических алгоритмов*** для аппроксимации неизвестного решения $\varphi(\boldsymbol{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода

$$\varphi(\boldsymbol{x}) = \int k(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x})\varphi(\boldsymbol{x}')\, d\boldsymbol{x}' + f(\boldsymbol{x}) \qquad (1)$$

на компактном множестве $X \subseteq \mathbb{R}^d$.

Учитывая, что решение $\varphi(\boldsymbol{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (1) можно записать в виде бесконечной суммы интегралов, зависящих от параметра $\boldsymbol{x}$ (т. е. в виде ряда Неймана), в качестве примеров приближаемой функции $\varphi(\boldsymbol{x})$ в теории функциональных вычислительных статистических алгоритмов методически целесообразно рассмотреть интегралы, зависящие от параметра

$$\varphi(\boldsymbol{x}) = \int_Y g(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, d\boldsymbol{y}\,; \;\; \boldsymbol{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^{d_x}; \;\; \boldsymbol{y} \in Y \subseteq \mathbb{R}^{d_y} \qquad (2)$$

(как это сделано в работах А. В. Войтишека и Е. В. Шкарупа).

Отметим также, что идеология построения функциональных статистических алгоритмов восходит к классическим работам Н. Н. Ченцова, в которых речь идет о приближении плотности распределения случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\eta} \in X \subseteq \mathbb{R}^d$

$$\varphi(\boldsymbol{x}) = f_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{x}); \;\; \boldsymbol{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^d \qquad (3)$$

по заданной выборке $\{\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_n\}$.

При построении функциональных алгоритмов приближения функций $\varphi(\boldsymbol{x})$ из соотношений (1)–(3) используются представления классической теории численной аппроксимации функций, имеющих общий вид $\varphi(\boldsymbol{x}) \approx L^{(M)}\varphi(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{M} w^{(i)}\chi^{(i)}(\boldsymbol{x})$ для некоторого специально выбранного набора базисных функций $\Xi^{(M)} = \{\chi^{(1)}(\boldsymbol{x}), \dots, \chi^{(M)}(\boldsymbol{x})\}$ и коэффициентов $\mathbf{W}^{(M)} = \{w^{(1)}, \dots, w^{(M)}\}$, определяемых как линейные функционалы от приближаемой функции $\varphi(\boldsymbol{x})$. В функциональных вычислительных статистических алгоритмах коэффициенты $\mathbf{W}^{(M)}$ вычисляются приближенно методом Монте-Карло с числом испытаний $n$, т. е. $w^{(i)} \approx \widetilde{w}^{(i)}(n)$ и рассматривается приближение

$$\varphi(\boldsymbol{x}) \approx L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{M} \widetilde{w}^{(i)}(n)\chi^{(i)}(\boldsymbol{x}). \qquad (4)$$

Одним из основных достижений теории функциональных вычислительных статистических алгоритмов вида (4) является методология условной оптимизации (см. в первую очередь работы Г. А. Михайлова, А. В. Войтишека, Е. В. Шкарупа).

Общая схема оптимизации того или иного функционального вычислительного статистического алгоритма выглядит следующим образом. Ставится задача согласованного выбора параметров $M$ (число узлов вводимой сетки и-или число функций соответствующего аппроксимационного базиса $\boldsymbol{\Xi}^{(M)}$) и $n$ (число моделируемых или заданных траекторий или выборочных значений) функционального алгоритма, обеспечивающего заданный уровень $L > 0$ погрешности $\delta^{(\mathbb{B})}(M,n)$ (для используемого нормированного функционального пространства $\mathbb{B}(X)$) приближения (4) при минимальных вычислительных затратах $S(M,n)$.

МЕТОД 1. *Строится верхняя граница $UP^{(\mathbb{B})}(M,n)$ погрешности $\delta^{(\mathbb{B})}(M,n)$, зависящая от параметров $M$ и $n$:*

$$\delta^{(\mathbb{B})}(M,n) = \left\|\varphi - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}\right\|_{\mathbb{B}(X)} \le UP^{(\mathbb{B})}(M,n).$$

*Эта функция двух переменных приравнивается величине $L$. Из уравнения вида $UP^{(\mathbb{B})}(M,n) = L$ один из параметров (например, $n$) выражается через другой: $n = \psi^{(L)}(M)$. Это соотношение подставляется в выражение для затрат $S(M,n)$ (которое тоже зависит от параметров $M$ и $n$). В результате получается функция $\tilde{S}^{(\mathbb{B},L)}(M)$ одного переменного $M$, которая исследуется на минимум с помощью известных приемов математического или численного анализа. Найденные значения $M_{min}^{(\mathbb{B})}(L) = M_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$, $n_{opt}^{(\mathbb{B})}(L) = \psi^{(L)}\left[M_{opt}^{(\mathbb{B})}\right]$ объявляются условно-оптимальными параметрами соответствующего функционального алгоритма.*

**Цель диссертации:** конструирование, сравнительный анализ (на основе специальных методов тестирования), условная оптимизация и разработка новых приложений функциональных вычислительных статистических алгоритмов.

Были поставлены следующие **задачи**.

1. Провести сравнительный анализ сеточных, проекционных и ядерных (проекционно-сеточных) функциональных вычислительных статистических алгоритмов приближения решения интегрального уравнения Фредгольма

второго рода на основе специально разработанных методик тестирования, оптимизации и оценки возможности применения рассматриваемых численных схем для решения практически значимых задач. Особое внимание обратить на свойства функциональных ядерных вычислительных статистических алгоритмов.

2. Разработать конструкцию и специальную теорию условной оптимизации «быстрого» (экономичного) функционального вычислительного алгоритма приближения вероятностных плотностей.

3. Провести критический анализ функциональных вычислительных статистических алгоритмов приближения решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода, построенных с использованием кубатурных формул. Подробно исследовать функциональный итерационный статистический алгоритм, включающий многократные умножения вектора на матрицу большой размерности: построить соответствующую теорию условной оптимизации, изучить гипотезу о минимуме трудоемкости по числу выбираемых столбцов при рандомизации матрицы.

4. Разработать конструкцию и провести условную оптимизацию и численное тестирование функционального двустороннего геометрического алгоритма приближения интеграла, зависящего от параметра.

5. Провести численное тестирование функциональных многоуровневых сеточных статистических алгоритмов приближения интеграла, зависящего от параметра, и решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода.

**Научная новизна результатов диссертации.**

1. Впервые проведен подробный сравнительный анализ всего спектра функциональных вычислительных статистических алгоритмов приближения решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода (с учетом проекционных алгоритмов и методов, связанных с применением кубатурных формул) с точки зрения возможностей их применения для решения практически значимых задач математической физики и получения условно-оптимальных параметров. Проведено численное сравнение функциональных вычислительных статистических алгоритмов на основе многочисленных расчетов для приближения решения одномерного тестового уравнения [19, 20, 22–24, 26, 27, 30].

2. Предложен функциональный ядерный вычислительный (основанный на теории численного приближения функций) алгоритм приближения вероятностных плотностей и построена теория условной оптимизации этого алгоритма. Проведены расчеты по тестированию этого алгоритма и по его применению [17, 18, 20, 21, 23, 25, 27–29].

3. Впервые проведены условная оптимизация и численное исследование итерационного вычислительного статистического алгоритма, связанного с рандомизацией «больших» матриц на основе случайного выбора относительно

малого числа столбцов. Проведены многочисленные расчеты (в том числе с использованием вычислительных ресурсов Суперкомпьютерного центра ИВМиМГ), позволившие сформулировать соображения об оптимальном числе выбираемых столбцов [13–15].

4. Построены новые конструктивные модификации геометрического вычислительного статистического метода. Предложен новый функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм для приближения интеграла, зависящего от параметра, и построена теория условной оптимизации этого алгоритма. Проведено тестирование построенного алгоритма. [1–3, 7–12].

5. Впервые проведено подробное численное исследование многоуровневых сеточных вычислительных статистических алгоритмов приближения интеграла, зависящего от параметра, и решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода [1–7].

**Основные положения, выносимые на защиту.**

1. Сравнительный анализ функциональных вычислительных статистических алгоритмов приближения решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода.

2. Функциональный «быстрый» (дающий заданный уровень погрешности за меньшее время компьютерных вычислений) вычислительный ядерный алгоритм приближения вероятностных плотностей.

3. Условная оптимизация итерационного вычислительного статистического алгоритма, связанного с последовательным умножением векторов на «большую» матрицу. Рекомендации по выбору столбцов в статистическом алгоритме умножения матриц.

4. Новый оптимизированный и протестированный функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм для приближения интеграла, зависящего от параметра.

5. Численное исследование функциональных многоуровневых сеточных вычислительных статистических алгоритмов метода зависимых испытаний.

**Методология и методы диссертационного исследования.** Для проведения исследований в работе применялись элементы вычислительной математики (в частности, конструкции численной аппроксимации функций, теории весовых оценок метода Монте-Карло, теории условной оптимизации функциональных вычислительных статистических алгоритмов, теории численного моделирования случайных процессов и полей и др.), математической физики, теории вероятностей, математической статистики, функционального анализа, а также алгоритмы вычислительного статистического моделирования (методы Монте-Карло).

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Одновременно теоретическая и практическая значимость полученных в работе результатов состоит прежде всего в том, что при проведении обстоятельного сравнительного анализа функциональных вычислительных статистических алгоритмов (в том числе, с точки зрения возможностей условной оптимизации этих алгоритмов) одним из главных критериев качества того или иного алгоритма являлась возможность его использования для решения практически значимых задач. Определенную теоретическую и методическую значимость имеют результаты работы, связанные с выбором числа столбцов в итерационном вычислительном статистическом алгоритме с рандомизацией матрицы, а также с исследованиями функциональных геометрических и многоуровневых вычислительных статистических алгоритмов. Особую практическую ценность в задачах обработки больших данных может иметь предложенный в работе конструктивный «быстрый» ядерный вычислительный алгоритм приближения вероятностных плотностей. Определенную методическую ценность имеют разработанные в диссертации подходы к тестированию функциональных вычислительных статистических алгоритмов.

**Достоверность и обоснованность результатов.** Достоверность и обоснованность аналитических результатов (выводов формул и соотношений, доказательств утверждений и теорем), полученных в диссертации, подтверждается корректным использованием конструкций, постановок задач, результатов и методологии теории методов Монте-Карло, теории условной оптимизации, теории численного приближения функций и вероятностных плотностей, теории вероятностей и математической статистики, функционального анализа и др. Достоверность и обоснованность результатов численных экспериментов подтверждается правильным применением классических и новых методик тестирования и анализа полученных данных.

**Апробация результатов исследования.** Результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующий научных конференциях и семинарах:

– семинар «Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике»; Институт вычислительной математики и математической геофизики (ИВМиМГ) СО РАН, руководитель: член-корреспондент РАН Г. А. Михайлов – неоднократно;

– IV, X Workshops on Simulation and Statistics: Санкт-Петербург, 18–22 июня 2001 года [4]; Зальцбург, Австрия, 2–6 сентября 2019 года [23];

– V International Workshop «Applied Methods of Statistical Analysis. Statistical Computation and Simulation»; НГТУ, Новосибирск, 18–20 сентября 2019 года [25];

– X Международная конференция «Optimization and Applications»; Петровац, Черногория; 30 сентября – 4 октября 2019 года [29];

– III International Conference on Mathematics and Statistics; American University of Shariah, ОАЭ, 6–9 февраля 2020 года [30];

– V, VII, VIII международные семинары-совещания «Кубатурные формулы и их приложения»: Красноярск, 13–18 сентября 1999 года [1]; Красноярск, 18–23 августа 2003 года [8, 9]; Улан-Удэ, 15–22 августа 2005 года [10, 11];

– X Международная Петрозаводская конференция «Вероятностные методы в дискретной математике»; Петрозаводск, 22–26 мая 2019 года [17];

– XVIII, XIX Международные конференции имени А. Ф. Терпугова «Информационные технологии и математической моделирование»; Саратов, 26–30 июня 2019 года [18, 19]; Томск, 2–5 декабря 2020 года;

– Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» («Марчуковские чтения»); ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 1–5 июля 2019 года [20, 27]; Новосибирск, 19–23 октября 2020 года;

– Международная конференция в честь 90-летия С. К. Годунова «Математика в приложениях»; ИМ СО РАН, Новосибирск, 4–10 августа 2019 года [21, 22];

– Международная конференция «Аналитические и численные методы решения задач гидродинамики, математической физики и биологии», посвященная 100-летию К. И. Бабенко; Пущино Московской области, 26–29 августа 2019 года [24];

– XV Международная Азиатская школа-семинар «Проблемы оптимизации сложных систем»; Новосибирск, 26–30 августа 2019 года [29];

– конференции молодых ученых ИВМиМГ СО РАН: апрель 2001 года [5]; апрель 2002 года [6]; апрель 2006 года [12]; апрель 2010 года [16];

– XLI, XLV, XLVI Международные студенческие конференции «Студент и научно-технический прогресс» (Новосибирский гос. университет): апрель 2003 года [7]; апрель 2007 года [13]; апрель 2008 года [14].

**Публикации.** По результатам диссертации Т. Е. Булгаковой опубликовано 30 работ [1–30]; из них 8 работ в изданиях (журналы, сборники статей конференций), индексированных в Web of Science или Scopus [2, 3, 9, 11, 15, 25, 26, 29]; 13 статей в материалах конференций [1, 4–6, 8, 10, 16–19, 27, 28] и 9 тезисов докладов на конференциях [7, 13, 14, 20–24, 30].

**Личное участие автора в получении результатов.** Постановки задач исследования были сформулированы научным руководителем, доктором физико-математических наук, профессором А. В. Войтишеком. Математические выкладки, доказательства утверждений, численные эксперименты и анализ их результатов выполнены Т. Е. Булгаковой лично. В совместных публикациях с научным руководителем А. В. Войтишек участвовал в определении направлений исследований и обсуждении полученных аналитических и численных результатов. В совместных публикациях с Е. Г. Каблуковой и Н. С. Моцартовой вклад соавторов – равный. Претензии соавторов, связанные с некорректным использованием совместных результатов, отсутствуют.

**Объем и структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, двух глав, заключения, приложения и списка литературы. Общий объем диссертации 170 страниц, включая 16 таблиц и 11 рисунков. В тексте сформулировано 4 теоремы (из них 3 – оригинальные, впервые доказанные) и 10 утверждений (из них 4 – оригинальные). Список использованной литературы содержит 154 наименований.

**Благодарности.** Автор диссертации благодарит своего научного руководителя проф. Войтишека А. В. за постоянное внимание к работе, постановку задач и регулярные обсуждения результатов исследования. Благодарим также члена-корреспондента РАН Михайлова Г. А., к.ф.-м.н. Трачеву Н. В., к.ф.-м.н. Шкарупа Е. В., к.ф.-м.н. Каблукову Е. Г. за полезные консультации и предоставленные материалы. Особо отметим творческую и доброжелательную атмосферу, созданную в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН сотрудниками отдела статистического моделирования в физике, способствующую проведению содержательных научных исследований.

## Содержание работы

**Во введении** приведен подробный обзор литературы по тематике диссертации и сформулированы цели и задачи исследования.

В **первом разделе главы 1** представлены различные функциональные вычислительные статистические алгоритмы. Для приближения решения $\varphi(\boldsymbol{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (1) определены: локальный алгоритм метода зависимых испытаний, функциональный алгоритм метода сопряженных блужданий, функциональный проекционный вычислительный статистический алгоритм, функциональный ядерный (проекционно-сеточный) вычислительный статистический алгоритм (см. далее алгоритм 1). Для последнего алгоритма (точнее для его наиболее естественной и эффективной версии – многомерного аналога метода полигона частот) особо выделены возможности получения значений условно-оптимальных параметров по методу 1.

Для решения методической задачи приближения интеграла, зависящего от параметра (2), представлены: алгоритм метода зависимых испытаний, алгоритм с независимыми оценками в узлах, а также малоиспользуемые ядерный и проекционный алгоритмы.

Для численного решения весьма актуальной задачи оперативного численного приближения вероятностных плотностей (3) по заданным выборочным значениям сформулирован проекционный алгоритм, а также предложен функциональный ядерный вычислительный (основанный на классических подходах теории аппроксимации функций) алгоритм (см. далее алгоритм 2).

Кроме того, для задачи приближения решения $\varphi(\boldsymbol{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (1) описаны малоэффективные детерминированные и статистические алгоритмы, основанные на применении кубатурных формул.

Для представленных алгоритмов описаны их преимущества и недостатки. Из этого перечня особо выделено замечание о том, что описанные ниже ядерные алгоритмы 1 и 2 наиболее перспективны в смысле их применения для решения практически значимых задач (в том числе, по причине возможности выбора условно-оптимальных параметров по методу 1).

Сеточные компоненты этих алгоритмов определяются тем, что базисные функции $\boldsymbol{\Xi}^{(M)}$ определенным образом связаны с вводимой сеткой $\mathbf{X}^{(M)} = \{\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_M\}$. При этом коэффициенты $\mathbf{W}^{(M)}$ представляют собой комбинации значений приближаемой функции $\varphi(\boldsymbol{x})$ в узлах сетки $\mathbf{X}^{(M)}$. В этом случае приближения метода Монте-Карло для коэффициентов $\mathbf{W}^{(M)}$ из соотношения (4) имеют вид

$\widetilde{w}^{(i)} = w^{(i)}\big[\tilde{\varphi}^{(1)}(n), \dots, \tilde{\varphi}^{(M)}(n)\big]$; чаще всего $w^{(i)}\big[\tilde{\varphi}^{(1)}(n), \dots, \tilde{\varphi}^{(M)}(n)\big] = \tilde{\varphi}^{(i)}(n)$. (5)

Проекционные компоненты ядерных алгоритмов определяются особым способом нахождения значений $\big\{\tilde{\varphi}^{(i)}(n);\ i = 1, \dots, M\big\}$. Выбираются финитные, одинаковые по форме для всех $\{\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_M\}$ функции $\big\{\kappa^{(\boldsymbol{x}_1)}(\boldsymbol{y}), \dots, \kappa^{(\boldsymbol{x}_M)}(\boldsymbol{y})\big\}$ (версии ядерной функции $\kappa^{(\boldsymbol{x})}(\boldsymbol{y})$ для различных значений параметра $\boldsymbol{x}$), так же, как и базисные функции $\boldsymbol{\Xi}^{(M)}$, связанные с сеткой $\mathbf{X}^{(M)}$, и такие, что $\int \varphi(\boldsymbol{y})\kappa^{(\boldsymbol{x}_i)}(\boldsymbol{y})\,d\boldsymbol{y} \approx \varphi(\boldsymbol{x}_i); \int_X \kappa^{(\boldsymbol{x}_i)}(\boldsymbol{y}) f_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{y})\,d\boldsymbol{y} \approx f_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{x}_i);\quad i = 1, \dots, M.$

АЛГОРИТМ 1. *Моделируем* $n$ *траекторий* $\boldsymbol{\xi}_j^{(0)}, \boldsymbol{\xi}_j^{(1)}, \dots, \boldsymbol{\xi}_j^{(N_j)}$ *прикладной (обрывающейся с вероятностью единица) цепи Маркова с начальной плотностью* $\pi(\boldsymbol{x})$ *и переходной функцией* $p(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x})$ *и одновременно вычисляем значения*

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)}\kappa^{(\boldsymbol{x}_i)}\big(\boldsymbol{\xi}_j^{(m)}\big);\quad i = 1, \dots, M;$$

*здесь случайные веса* $Q_j^{(m)}$ *вычисляются по формулам*

$$Q_j^{(0)} = \frac{f\big(\boldsymbol{\xi}_j^{(0)}\big)}{\pi\Big(\boldsymbol{\xi}_j^{(0)}\Big)};\quad Q_j^{(m)} = Q_j^{(m-1)}\frac{k\big(\boldsymbol{\xi}_j^{(m-1)}, \boldsymbol{\xi}_j^{(m)}\big)}{p\Big(\boldsymbol{\xi}_j^{(m-1)}, \boldsymbol{\xi}_j^{(m)}\Big)};\ j = 1, \dots, n;\ m = 1, \dots, N_j,$$

*а затем получаем приближения* (5) *и строим окончательную аппроксимацию вида* (4) *для решения* $\varphi(\boldsymbol{x})$ *уравнения* (1).

АЛГОРИТМ 2. *Вычисляем значения* $\tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}^{(x_i)}(n) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j)$; $i = 1, \dots, M$ *(здесь* $\boldsymbol{\eta}_j, \dots, \boldsymbol{\eta}_n$ *– заданная выборка) и приближаем функцию* $\varphi(\boldsymbol{x}) = f_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{x})$ *из* (3) *по формулам вида* (4), (5) для $\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}^{(x_i)}(n)$.

Оценке перспектив применения алгоритмов 1 и 2 посвящен дальнейший материал первой главы диссертации.

В частности, в подразделе 1.1.7 приведен достаточно основательный обзор практически значимых интегральных уравнений Фредгольма второго рода (1). Описаны задачи переноса излучения, кинетические задачи, краевые задачи математической физики. Отмечено, что ядра $k(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x})$ практически значимых уравнений (1) содержат особенности, не допускающие вычисление $k(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x})$ в случайных точках (за редким исключением). Отмечено, что ядерные функциональные алгоритмы 1 и 2 наименее чувствительны к указанным ограничениям, описаны известные успешные применения ядерных алгоритмов для решения практически значимых задач.

В **разделе 1.2** представлены результаты многочисленных тестовых экспериментов на примере известного одномерного интегрального уравнения, позволившие провести подробный сравнительный анализ функциональных алгоритмов. Здесь, в частности, получено согласие с выводами из диссертаций Е. В. Шкарупа и А. В. Войтишека и сопутствующих статей. Подтверждены численная неустойчивость и крайняя зависимость проекционного алгоритма от выбираемого базиса; кроме того, при проведении расчетов отмечено и учтено, что этот алгоритм не допускает на сегодняшний день применения метода 1 для получения условно-оптимальных параметров.

Особо выделим разработанную в подразделе 1.2.3 методику, которая позволяет при разумном выборе параметра $M$ (числа узлов и (или) базисных функций) выбирать число траекторий $n$ используемой прикладной цепи Маркова, гарантирующее получение заданного уровня погрешности $L$. Эта методика позволила как «забраковать» версии ядерного алгоритма 1, отличные от многомерного аналога метода полигона частот, так и провести объективное сравнение исследуемых функциональных алгоритмов. К сожалению, в этом сравнении ядерный алгоритм 1 оказался едва ли не худшим, однако из обзора, представленного в разделе 1.1, следует, что такое соотношение верно только для упрощенной тестовой одномерной задачи.

Одним из основных преимуществ предложенного в данной работе функционального ядерного вычислительного алгоритма 2 приближения вероятностных плотностей $f_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{x})$ является возможность его условной оптимизации по методу 1. В **разделе 1.3** обоснована целесообразность разработки этой теории только для многомерного аналога полигона частот. Соответствующая оптимизация проведена для $\mathbb{L}_2$- и $\mathbb{C}$-подходов для построения верхних границ погрешности: доказаны нужные и важные утверждения 1.1–1.6 и теоремы 1.1–1.4, получены выражения для условно-оптимальных параметров

$$M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = \left[A_1^{(\mathbb{L}_2)}\right]^{d/4} \left(\frac{d+4}{d}\right)^{d/4} L^{-d/2}, n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = \frac{A_2^{(\mathbb{L}_2)} \left[A_1^{(\mathbb{L}_2)}\right]^{d/4} (d+4)^{d/4+1}}{4d^{d/4}} L^{-2-d/2};$$

$$M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) = \left(\frac{A_1^{(\mathbb{C})}[(2a+1)d+4]}{(2a+1)d}\right)^{\frac{d}{2}} L^{-\frac{d}{2}}, n_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) = \frac{\left[A_1^{(\mathbb{C})}\right]^{d/2}\left[A_2^{(\mathbb{C})}\right]^2}{16d^{d/2}} \times$$

$$\times [(2a+1)d+4]^{2+d/2} \times \left[2\ln M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) - \ln\ln M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) + 2A_3^{(\mathbb{C})}\right] L^{-2-\frac{d}{2}}$$

для заданного уровня погрешности $L$ и для соответствующих констант $A_1^{(\mathbb{L}_2)}, A_2^{(\mathbb{L}_2)}, A_1^{(\mathbb{C})}, A_2^{(\mathbb{C})}, A_3^{(\mathbb{C})}$ и $a$. Отмечено, что приближение (подбор) этих констант составляет отдельную (часто – не простую) проблему.

В первом подразделе **раздела 1.4** приведены соображения о возможности применения многомерного аналога полигона частот при рандомизации математических моделей. В подразделах 1.4.2, 1.4.3 описаны результаты тестовых расчетов, показывающих особенности применения оптимизированного полигона частот на примере приближения тестовой элементарной плотности (конкретнее, плотности усеченного экспоненциального распределения).

В **главе 2** представлены специальные функциональные вычислительные статистические алгоритмы приближения интеграла, зависящего от параметра, и решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода: функциональные итерационные алгоритмы с умножением на «большие» матрицы (**раздел 2.1**) и функциональный двусторонний геометрический вычислительный численный алгоритм (**раздел 2.2).**

Оптимизация по методу 1 для этих алгоритмов по разным причинам затруднена, и поэтому применен подход, подразумевающий разбиение допустимого значения погрешности на соразмерные компоненты, что позволяет осуществить конструктивный выбор параметров вычислений.

В **разделе 2.1** на основании серии компьютерных экспериментов (включающей вычисления на многопроцессорных системах Сибирского суперкомпьютерного центра при ИВМиМГ СО РАН) показано, что перспективная гипотеза о существовании «внутреннего» минимума по числу выбираемых столбцов трудоемкости рандомизированного алгоритма умножения на «большие» матрицы, не выполнена.

В **разделе 2.2** для случая, когда в интеграле, зависящем от параметра, подынтегральная функция является трудно вычислимой, сконструирован функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм, включающий введение просто вычислимых мажоранты и миноранты подынтегральной функции. Проведена оптимизация выбора параметров введенной конструкции для случая, когда мажоранта и миноранта являются кусочно-постоянными функциями. Приведены результаты численных экспериментов, подтверждающих оптимальность предложенного выбора параметров.

В **приложении** приведены результаты серии вычислительных экспериментов, которые продемонстрировали то, что функциональные многоуровневые вычислительные статистические алгоритмы приближения интеграла, зависящего от параметра, и решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода, оптимальные на специальном классе статистических алгоритмов в рамках теории сложности вычислительных алгоритмов (основанной на простейшей стоимостной модели), оказываются не самыми экономичными для достижения заданного уровня погрешности (они проигрывают, в частности, классическим «одноуровневым» алгоритмам метода зависимых испытаний). Следует особо выделить то обстоятельство, что при проведении упомянутых многочисленных экспериментов использовались, в том числе, элементы разработанной нами стохастической тестовой системы функций.

В **заключении** диссертации приведены материалы из разделов «Научная новизна результатов диссертации», «Основные положения, выносимые на защиту», «Методология и методы диссертационного исследования», «Теоретическая и практическая значимость работы», «Достоверность и обоснованность результатов», «Апробация результатов исследования», «Публикации», «Личное участие автора в получении результатов» и «Благодарности» данного автореферата.

## Список опубликованных работ

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

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

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

4. Voytishek A. V., **Mezentseva (Bulgakova) T. E.** Practical use of multilevel algorithms // Proceedings of the Fourth Petersburg Workshop on Simulation. – Санкт-Петербург: СПбГУ: 2001. – P. 500–505.

5. **Булгакова Т. Е.** Исследование многоуровневого метода зависимых испытаний // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2001. – С. 177–185.
6. **Булгакова Т. Е.** Исследование многоуровневого метода решения интегрального уравнения второго рода // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2002. – С. 25–32.
7. Каблукова Е. Г.**, Булгакова Т. Е.** О некоторых применениях численной стохастической системы функций // Материалы XLI Международной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». Математика. – Новосибирск: НГУ, 2003. – С. 118–119.
8. **Булгакова Т. Е.,** Войтишек А. В., Каблукова Е. Г. Использование стохастической системы функций при исследовании алгоритмов численного интегрирования // Материалы VII Международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». – Красноярск: КГТУ, 2003. – С. 26–32.
9. Войтишек А. В., Каблукова Е. Г., **Булгакова Т. Е.** Использование спектральных моделей случайных полей при исследовании алгоритмов численного интегрирования // Вычислительные технологии. – 2004. – Т. 9, специальный выпуск «Избранные доклады VII международного семинара-совещания ‘Кубатурные формулы и их приложения’, Красноярск, август 2003 г.». – С. 50–61.
10. **Булгакова Т. Е.** Оптимизация двустороннего геометрического метода Монте-Карло // Материалы VIII международного семинара-совещания «Кубатурные формулы и их приложения». Улан-Удэ: ВСГТУ, 2005. С. 18–22.
11. **Булгакова Т. Е.** Оптимизация функционального двустороннего геометрического метода Монте-Карло // Вычислительные технологии. – 2006. – Т. 11, специальный выпуск «Избранные доклады VIII международного семинара-совещания ‘Кубатурные формулы и их приложения’ (Улан-Удэ, август 2005 г.)». – С. 12–17.
12. **Булгакова Т. Е.** Оптимизация функционального двустороннего геометрического метода Монте-Карло // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2006. – С. 28–35.
13. Моцартова Н. С., **Булгакова Т. Е.** Оптимизация рандомизированного метода решения системы линейных уравнений // Материалы XLV Международной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». Математика. – Новосибирск: НГУ, 2007. – С. 204–205.
14. Моцартова Н. С., **Булгакова Т. Е.** Применение алгоритма рандомизации «больших» матриц для решения задачи Дирихле // Материалы XLVI Международной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». Математика. – Новосибирск: НГУ, 2008. – С. 238–239.

15. **Булгакова Т. Е.,** Войтишек А. В. Условная оптимизация рандомизированного итерационного метода // Журнал вычислительной математики и математической физики. –2009. – Т. 49, № 7. – С. 1148–1157.

16. **Булгакова Т. Е.** Условная оптимизация одного итерационного алгоритма, связанного с рандомизацией «больших» матриц // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2010. – С. 11–21.

17. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Об использовании бета- и гамма-распределений в численных рандомизированных моделях // Расширенные тезисы X Международной Петрозаводской конференции «Вероятностные методы в дискретной математике» (22–26 мая 2019 года, Петрозаводск, Россия). – Петрозаводск: КарНЦ, 2019. – С. 66–68.

18. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Об использовании «ядерных» оценок плотностей при рандомизации математических численных моделей // Материалы XVIII Международной конференции имени А. Ф. Терпугова «Информационные технологии и математической моделирование» (Саратов, 26–30 июня 2019 года). – Часть 2. – Томск: Изд-во НТЛ, 2019. – С. 322–328.

19. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Применение рандомизированных функциональных алгоритмов для решения одной задачи с «вычислимым» ядром интегрального уравнения // Материалы XVIII Международной конференции имени А.Ф. Терпугова «Информационные технологии и математической моделирование» (Саратов, 26–30 июня 2019 года). – Часть 2. – Томск: Изд-во НТЛ, 2019. С. 329–334.

20. Войтишек А. В., **Булгакова Т. Е.** Сравнительный анализ функционального «ядерного» алгоритма и метода полигона частот // Тезисы Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 1–5 июля 2019 года). – Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2019. – С. 43–44.

21. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. О выборе вероятностных распределений при рандомизации прикладных стохастических численных моделей // Тезисы докладов Международной конференции в честь 90-летия С. К. Годунова «Математика в приложениях» (ИМ СО РАН, Новосибирск, 4–10 августа 2019 года). – Новосибирск: Изд-во Института математики, 2019. – С. 108.

22. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Практически значимые приложения функциональных алгоритмов метода Монте-Карло // Тезисы докладов Международной конференции в честь 90-летия С. К. Годунова «Математика в приложениях» (ИМ СО РАН, Новосибирск, 4–10 августа 2019 года). – Новосибирск: Изд-во Института математики, 2019. – С. 109.

23. Voytishek A. V., **Bulgakova T. E.** Numerical functional kernel Monte Carlo algorithm // Booklet of the X International Workshop on Simulation and Statistics (September 2–6, 2019; Salzburg, Austria). – P. 87.

24. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Рандомизированные численные алгоритмы приближения решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода // Proceedings of the International Conference «Analytical and numerical methods for solving of hydrodynamics, mathematical physics and biology problems», dedicated to the 100th anniversary of K. I. Babenko (Pushino, Russia, 26–29 August, 2019). – Moscow: Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, 2019. – С. 48–49.

25. Voytishek A. V., **Bulgakova T. E.** On conditional optimization of «kernel» estimators of densities // Proceedings of the Fifth International Workshop «Applied Methods of Statistical Analysis. Statistical Computation and Simulation» (Novosibirsk, Russia, 18-20 September, 2019). – Novosibirsk: NSTU publisher, 2019. – P. 152–159.

26. **Bulgakova T. E.**, Voytishek A. V. On numerical stability of randomized projection functional algorithms // Communications in Statistics – Simulation and Computation. – 2019. Latest articles. https://doi.org/10.1080/03610918.2019.1677914

27. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Сравнительный анализ функционального «ядерного» алгоритма и метода полигона частот // Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 1–5 июля 2019 года). – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2019. – С. 65–71.

28. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Критерии оптимизации «ядерного» алгоритма приближения вероятностной плотности // Труды XV Международной Азиатской школы-семинара «Проблемы оптимизации сложных систем» (26–30 августа 2019 года, Российская федерация, Новосибирск). – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2019. – С. 15–23.

29. Voytishek A. V., **Bulgakova T. E.** Optimization of kernel estimators of probability densities // Jacimovic M., Khachay M., Malkova V., Posypkin M. (eds). Optimization and Applications. OPTIMA 2019. Communications in Computer and Information Science. – 2020: Springer, Cham. Vol. 1145. – P. 254–266.

30. **Bulgakova T. E.**, Tracheva N. V., Voytishek A. V. Usage of the randomized kernel functional numerical algorithm // Book of abstracts of the Third International Conference on Mathematics and Statistics (February 6–9, 2020). – Sharjah, UAE: American University of Sharjah, 2020. – P. 111.