

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»

На правах рукописи



Булгакова Татьяна Евгеньевна

ОПТИМИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ОЦЕНОК И АЛГОРИТМОВ

Специальность 01.01.07 Вычислительная математика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

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

Новосибирск 2020

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
В.1. Актуальность работы и обзор литературы.....	6
В.2. Цель и задачи исследования.....	12
ГЛАВА 1. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ЯДЕРНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ: ОПТИМИЗАЦИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ.....	14
1.1. Сеточные, проекционные и ядерные (проекционно-сеточные) вычислительные алгоритмы приближения функций [52, 53, 55 – 66]*	14
1.1.1. Функциональные сеточные алгоритмы.....	14
1.1.2. Функциональный проекционный алгоритм.....	17
1.1.3. Функциональный проекционно-сеточный алгоритм и его оптимизация.....	18
1.1.4. Ядерные оценки и алгоритмы приближения функций	23
1.1.5. Алгоритмы приближения вероятностных плотностей и интегралов, зависящих от параметра.....	30
1.1.6. Использование квадратурных и кубатурных формул.....	33
1.1.7. Обзор применений функциональных ядерных вычислительных статистических алгоритмов.....	38
1.2. Тестирование и сравнительный анализ функциональных алгоритмов численного решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода [56, 57, 59 – 61, 63, 64, 67].....	45
1.2.1. Использование тестового уравнения.....	45
1.2.2. Использование условно-оптимальных параметров из работ [27, 28]..	47

* После названия каждого раздела указаны ссылки на работы Т. Е. Булгаковой, в которых опубликованы обзорные и новые результаты данного раздела.

1.2.3. Специальная методика выбора числа траекторий в сравнительных расчетах.....	48
1.2.4. О выборе ортонормированного базиса в функциональном проекционном алгоритме.....	51
1.2.5. Использование модификаций ядерных алгоритмов.....	56
1.2.6. Сравнение функциональных алгоритмов решения тестового уравнения.....	58
1.3. Условная оптимизация функционального ядерного вычислительного алгоритма приближения вероятностных плотностей [55, 57, 59, 60, 62, 64 – 67].....	60
1.3.1. Задача оперативной обработки больших данных.....	60
1.3.2. Компоненты погрешности и выбор аппроксимационного базиса.....	61
1.3.3. Верхние границы для детерминированных компонент \mathbb{L}_2 - и \mathbb{C} -погрешностей.....	63
1.3.4. Верхние границы для компонент смещения \mathbb{L}_2 - и \mathbb{C} -погрешностей.....	65
1.3.5. Верхняя граница для стохастической компоненты \mathbb{L}_2 -погрешности.....	70
1.3.6. Верхняя граница для стохастической компоненты \mathbb{C} -погрешности.....	72
1.3.7. Условно-оптимальные параметры для \mathbb{L}_2 - и \mathbb{C} -подходов.....	75
1.4. Тестирование и применение функционального ядерного вычислительного алгоритма приближения вероятностных плотностей [54, 55, 58, 65 – 67].....	79
1.4.1. О применении приближений плотностей при рандомизации математических моделей.....	79
1.4.2. О зависимости затрат и погрешности функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 от параметра M (тестовый пример).....	84
1.4.3. Условно-оптимальные параметры для тестового примера.....	87
1.5. Основные выводы главы 1.....	92

ГЛАВА 2. ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЕТОЧНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ.....	96
2.1. Условная оптимизация функциональных итерационных алгоритмов [50 – 53].....	96
2.1.1. Условная оптимизация функционального итерационного алгоритма с умножением на «большие» матрицы (\mathbb{C} -подход).....	96
2.1.2. Погрешность функционального итерационного алгоритма с рандомизацией «больших» матриц (\mathbb{L}_2 -подход).....	100
2.1.3. Гипотеза о минимуме количества выбираемых столбцов при рандомизации матрицы.....	103
2.1.4. Численная проверка гипотезы о минимуме количества выбираемых столбцов при рандомизации матрицы.....	108
2.2. Конструирование и оптимизация функционального двустороннего геометрического вычислительного статистического алгоритма [38 – 40, 44 – 49].....	111
2.2.1. Модификации геометрического алгоритма	111
2.2.2. Использование кусочно-постоянных мажоранты и миноранты: двумерный случай.....	117
2.2.3. Согласованный выбор параметров.....	121
2.2.4. Результаты численных экспериментов.....	123
2.3. Основные выводы главы 2.....	125
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	127
3.1. Научная новизна результатов диссертации.....	127
3.2. Положения и результаты, выносимые на защиту.....	128
3.3. Методология и методы диссертационного исследования.....	128
3.4. Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы.....	129
3.5. Достоверность и обоснованность результатов.....	130

3.6. Личное участие автора в получении результатов.....	130
3.7. Соответствие паспорту специальности.....	131
3.8. Представление результатов работы на семинарах и конференциях.....	131
3.9. Публикации.....	133
3.10. Благодарности.....	133

ПРИЛОЖЕНИЕ. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МНОГОУРОВНЕВЫХ СЕТОЧНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ [40 – 46]	134
П.1. Основы теории функциональных многоуровневых сеточных вычислительных статистических алгоритмов.....	134
П.2 Численное тестирование многоуровневого статистического алгоритма приближения интеграла, зависящего от параметра.....	143
П.3. Численное тестирование многоуровневого статистического алгоритма приближения решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода.....	148
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	154

ВВЕДЕНИЕ

В.1. Актуальность работы и обзор литературы

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 (см. в первую очередь [1–26]). 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.

Важным классом задач, при решении которых используются методы Монте-Карло, является приближение функционалов вида

$$I_h = (\varphi, h) = \int \varphi(x)h(x) dx, \quad x \in X \subset \mathbb{R}^d. \quad (\text{В. 1})$$

Здесь $h \in \mathbb{L}_\infty(X)$ – некоторая заданная функция, а $\varphi \in \mathbb{L}_1(X)$ является неизвестным решением интегрального уравнения Фредгольма второго рода

$$\varphi(x) = \int k(x', x)\varphi(x') dx' + f(x) \quad \text{или} \quad \varphi = K\varphi + f; \quad (\text{В. 2})$$

при этом функции $k(x', x)$ (ядро интегрального оператора $K: \mathbb{L}_1(X) \rightarrow \mathbb{L}_1(X)$) и $f \in \mathbb{L}_1(X)$ (свободный член уравнения) – заданы.

Хорошо известно (см., например, [22, 26]), что для приближения функционала (В.1) от решения уравнения (В.2) эффективным (экономичным) и информативным является *монте-карловская оценка по столкновениям*

$$I_h = \mathbf{E}\zeta; \quad \zeta = \sum_{m=0}^N Q^{(m)}h(\xi^{(m)}). \quad (\text{В. 3})$$

Здесь

$$\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N-1)}, \xi^{(N)} \quad - \quad (\text{В. 4})$$

прикладная цепь Маркова (или однородная цепь Маркова, обрывающаяся с вероятностью единица) с начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной функцией

$p(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = r(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \times [1 - p^{(a)}(\mathbf{x}')]]$ (здесь $r(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ – вероятностная переходная плотность, а $0 \leq p^{(a)}(\mathbf{x}') < 1$ обозначает вероятность обрыва траектории; соответственно, N – это случайный номер обрыва траектории). Случайные веса определяются рекуррентно

$$Q^{(0)} = \frac{f(\xi^{(0)})}{\pi(\xi^{(0)})}; \quad Q^{(m)} = Q^{(m-1)} \times \frac{k(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}{p(\xi^{(m-1)}, \xi^{(m)})}. \quad (\text{B.5})$$

Использование закона больших чисел дает следующий **статистический алгоритм метода Монте-Карло для приближения функционала (B.1)**.

АЛГОРИТМ B.1 (см., например, [22, 26]). *Моделируем n траекторий*

$$\xi_j^{(0)}, \xi_j^{(1)}, \dots, \xi_j^{(N_j-1)}, \xi_j^{(N_j)}; \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{B.6})$$

прикладной цепи Маркова (B.4) и одновременно формируем сумму для вычисления приближения

$$I_h = \mathbf{E}\zeta \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} h(\xi_j^{(m)}), \quad (\text{B.7})$$

где величины $\{Q_j^{(m)}\}$ подсчитываются по рекуррентным формулам вида (B.5):

$$Q_j^{(0)} = \frac{f(\xi_j^{(0)})}{\pi(\xi_j^{(0)})}; \quad Q_j^{(m)} = Q_j^{(m-1)} \frac{k(\xi_j^{(m-1)}, \xi_j^{(m)})}{p(\xi_j^{(m-1)}, \xi_j^{(m)})}; \quad j = 1, \dots, n; \quad m = 1, \dots, N_j. \quad (\text{B.8})$$

В последние годы (главным образом в новосибирской школе методов Монте-Карло) разрабатываются **теория и содержательные приложения функциональных вычислительных статистических алгоритмов** для аппроксимации неизвестного решения $\varphi(\mathbf{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (B.2) на ограниченном множестве $X \subset \mathbb{R}^d$ (см. в первую очередь [16–19, 22, 25–33]).

Учитывая, что решение $\varphi(\mathbf{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (B.2) можно записать в виде бесконечной суммы интегралов, зависящих от параметра \mathbf{x} (т. е. в виде ряда Неймана – см., например, [22, 26]), в качестве примеров приближаемой функции $\varphi(\mathbf{x})$ в теории функциональных статистических алгоритмов методически целесообразно рассмотреть **интегралы, зависящие от параметра**

$$\varphi(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}; \quad \mathbf{x} \in X \subset \mathbb{R}^{d_x}; \quad \mathbf{y} \in Y \subseteq \mathbb{R}^{d_y} \quad (\text{B.9})$$

(как это сделано в работах [27, 28, 34, 35], и в разделах 1.1, 2.2, 2.3 данной диссертационной работы).

Отметим также, что идеология построения функциональных статистических алгоритмов восходит к классическим работам Н. Н. Ченцова (см. в первую очередь [35, 36]), в которых речь идет о приближении *плотности распределения случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\eta} \in X \subseteq \mathbb{R}^d$*

$$\varphi(\mathbf{x}) = f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^d \quad (\text{B.10})$$

по заданной выборке $\{\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_n\}$ (этот случай тоже отражен в данной диссертации – см. разделы 1.1, 1.2, 1.3, 1.4).

При построении функциональных алгоритмов приближения функций $\varphi(\mathbf{x})$ из соотношений (B.2), (B.9), (B.10) используются *представления классической теории численной аппроксимации функций* (см., например, § 2 главы 2 книги [37]), имеющих общий вид

$$\varphi(\mathbf{x}) \approx L^{(M)}\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)} \chi^{(i)}(\mathbf{x}) \quad (\text{B.11})$$

для некоторого специально выбранного набора *базисных функций*

$$\boldsymbol{\Xi}^{(M)} = \{\chi^{(1)}(\mathbf{x}), \dots, \chi^{(M)}(\mathbf{x})\} \quad (\text{B.12})$$

(вид этих функций определяет тип аппроксимации (B.11)) и *коэффициентов*

$$\mathbf{W}^{(M)} = \{w^{(1)}, \dots, w^{(M)}\}, \quad (\text{B.13})$$

определяемых как функционалы вида (B.1) от приближаемой функции $\varphi(\mathbf{x})$.

В функциональных статистических алгоритмах *коэффициенты (B.13) вычисляются приближенно методом Монте-Карло* (используется, в частности, алгоритм B.1) с числом испытаний n_i , т. е. $w^{(i)} \approx \tilde{w}^{(i)}(n_i)$ (в данной диссертационной работе будет изучаться случай $n_1 = \dots = n_M \equiv n$) и рассматривается приближение

$$\varphi(\mathbf{x}) \approx L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M \tilde{w}^{(i)}(n) \chi^{(i)}(\mathbf{x}). \quad (\text{B.14})$$

Одним из основных достижений теории функциональных статистических алгоритмов вида (В.14) является *методология условной оптимизации* (см., например, [30]).

Общая схема оптимизации того или иного функционального статистического алгоритма выглядит следующим образом. Ставится задача согласованного выбора параметров M и n функционального алгоритма, обеспечивающего заданный уровень $L > 0$ погрешности $\delta^{(\mathbb{B})}(M, n)$ (для используемого нормированного функционального пространства $\mathbb{B}(X)$) приближения (В.14) при минимальных вычислительных затратах $S(M, n)$.

МЕТОД В.1 (см., например, [30]). *Строится верхняя граница $UP^{(\mathbb{B})}(M, n)$ погрешности $\delta^{(\mathbb{B})}(M, n)$, зависящая от параметров M и n :*

$$\delta^{(\mathbb{B})}(M, n) = \|\varphi - L^{(M, n)}\tilde{\varphi}\|_{\mathbb{B}(X)} \leq UP^{(\mathbb{B})}(M, n). \quad (\text{В.15})$$

Эта функция двух переменных приравнивается величине L . Из уравнения вида

$$UP^{(\mathbb{B})}(M, n) = L \quad (\text{В.16})$$

*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 $M_{\min}^{(\mathbb{B})}(L) = M_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$, $n_{opt}^{(\mathbb{B})}(L) = \psi^{(L)}[M_{opt}^{(\mathbb{B})}]$ объявляются **условно-оптимальными параметрами** соответствующего функционального алгоритма.*

«Условность» такого способа оптимизации связана с тем, что в левой части уравнения вида (В.16) используется не сама погрешность алгоритма $\delta^{(\mathbb{B})}(M, n)$, а ее верхняя граница $UP^{(\mathbb{B})}(M, n)$. К слову, оценка качества того или иного алгоритма по верхней границе погрешности используется в подавляющем числе теоретических рассуждений вычислительной математики (см., например, [37]), где, по сути, речь тоже идет об «условной оптимальности» исследуемых вычислительных схем.

При изучении погрешности $\delta^{(\mathbb{B})}(M, n)$ необходимо выбрать как соответствующее нормированное функциональное пространство $\mathbb{B}(X)$, так и вероятностный смысл выполнения неравенства вида (В.15) (ведь $\delta^{(\mathbb{B})}(M, n)$ является случайной величиной). Следуя канонам классического численного анализа (см., например, [37]), в качестве пространств $\mathbb{B}(X)$ будем рассматривать $\mathbb{L}_2(X)$ и $\mathbb{C}(X)$.

Для хорошо разработанного \mathbb{L}_2 -подхода (см., например, [30]) выбирается сходимость в среднем погрешности

$$\delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) = \|\varphi - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}\|_{\mathbb{L}_2(X)} = \left(\int_X [\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})]^2 dx \right)^{1/2}$$

к нулю при $M, n \rightarrow \infty$ и строятся оценки сверху $UP^{(\mathbb{L}_2)}(M, n)$ такие, что

$$[\mathbf{E}\delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n)]^2 \leq UP^{(\mathbb{L}_2)}(M, n). \quad (\text{В.17})$$

Для \mathbb{C} -подхода (см., например, [30]) величина

$$\delta^{(\mathbb{C})}(M, n) = \|\varphi - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}\|_{\mathbb{C}(X)} = \sup_{\mathbf{x} \in X} |\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})|$$

ограничивается сверху по вероятности:

$$\mathbf{P}[\delta^{(\mathbb{C})}(M, n) \leq UP^{(\mathbb{C})}(M, n)] > 1 - \varepsilon \quad (\text{В.18})$$

для некоторого достаточно малого $\varepsilon > 0$.

Отметим, что для \mathbb{L}_2 -подхода используется относительно «слабая» интегральная норма $\|\cdot\|_{\mathbb{L}_2(X)}$ пространства $\mathbb{L}_2(X)$ и «сильная» вероятностная сходимость погрешности к нулю (в среднем). В свою очередь в \mathbb{C} -подходе для «жесткой» нормы $\|\cdot\|_{\mathbb{C}(X)}$ используется относительно «слабая» сходимость (по вероятности).

Отметим наиболее важные события, связанные с изучением функциональных статистических алгоритмов, произошедшие за период наших исследований, результаты которых опубликованы в работах [38–67].

Новые вычислительные схемы и элементы теории условной оптимизации функциональных алгоритмов содержатся в диссертациях [27, 28, 68–89] и сопутствующих монографиях и статьях.

Из этого весьма обширного материала особо выделим работы [19, 20, 22–36, 75, 76, 79, 90–102], которые содержат методические и теоретические разработки, которые будут непосредственно использованы в данной работе.

В частности, в главе 1 данной диссертации используется новая (по сравнению с работами [19, 20, 22, 25, 27–30, 34]) классификация функциональных статистических алгоритмов для приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ уравнения (В.2) из работ [26, 98–100], в которой выделены сеточные, проекционные и проекционно-сеточные алгоритмы (тип метода определяется выбором базисных функций (В.12) и коэффициентов (В.13) – см. раздел 1.1 данной работы). В свою очередь, в работах [57, 64, 101, 102] (а также в подразделе 1.1.4 данной работы) отмечено, что «проекционная компонента» проекционно-сеточных алгоритмов (см. далее соотношение (1.1.13)) по сути эквивалентна известной ядерной оценке вероятностной плотности (см., например, [103]). Поэтому в [57, 64, 101, 102] предложено называть проекционно-сеточные методы *функциональными статистическими ядерными алгоритмами*.

В работах [98–102] (см. также замечание 1.9 данной работы) сформулирована гипотеза о том, что из-за ряда отрицательных свойств сеточных и проекционных методов *ядерные (проекционно-сеточные) вычислительные статистические алгоритмы перспективны в смысле их применения для численной аппроксимации решения уравнения (В.2) и приближения функций (В.9), (В.10)*. Всестороннему анализу этой гипотезы посвящена первая глава данной работы.

Кроме того, в данной работе проводится исследование таких новых конструкций, как *функциональные проекционные статистические алгоритмы* [31–35, 63], *функциональный двусторонний геометрический алгоритм* [47–49] и *функциональные итерационные алгоритмы, связанные с умножением на «большие» матрицы* [19, 23, 52, 76, 86], а также *функциональные многоуровневые сеточные вычислительные статистические алгоритмы* [41–43, 91, 92].

Для проекционных статистических алгоритмов приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (В.2) в данной работе проводится их сравнительный анализ с сеточными и ядерными алгоритмами (см. разделы

1.1, 1.3). Кроме того, обсуждаются нюансы использования проекционных алгоритмов для приближения вероятностных плотностей $f_{\eta}(\mathbf{x})$ из (В.10) (см. разделы 1.1, 1.3, 1.4). Для функционального двустороннего геометрического алгоритма приближения функции (В.9) построена теория условной оптимизации по методу В.1 и проведено численное тестирование (см. раздел 2.2). Для функциональных многоуровневых сеточных статистических алгоритмов приближения интеграла, зависящего от параметра (В.9), и решения уравнения (В.2) приводятся результаты показательных тестовых компьютерных экспериментов (см. Приложение).

В разделах 1.1, 2.1 данной диссертации рассмотрены проблемы условной оптимизации функционального итерационного алгоритма, связанного с последовательным умножением векторов на «большие» матрицы. Предлагается использовать рандомизацию матриц, основанную на случайном выборе относительно небольшого числа K столбцов. Важным здесь является также подробное изучение гипотезы из работ [19, 104–106] о наличии такой зависимости трудоемкости умножения на случайную матрицу от числа выбираемых столбцов K , которая дает минимум внутри интервала изменения параметра K (гипотеза не подтвердилась [52]).

В своих исследованиях мы учитывали и частично использовали результаты из работ [16, 17, 19, 20, 22–28, 31–33, 68–71, 73–83, 85–87, 89, 97–102, 107–116], в которых достаточно подробно описаны важнейшие приложения функциональных статистических алгоритмов для численного решения задач математической физики.

Последние замечания и приведенный обзор литературы подтверждают безусловную актуальность тематики данной диссертации, связанной с конструированием, исследованием и оптимизацией функциональных статистических алгоритмов.

В.2. Цель и задачи исследования

Целью данной работы являются 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.

ГЛАВА 1. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ЯДЕРНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ: ОПТИМИЗАЦИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ

1.1. Сеточные, проекционные и ядерные (проекционно-сеточные)

вычислительные алгоритмы приближения функций [52, 53, 55 – 66]

1.1.1. Функциональные сеточные алгоритмы

В этом разделе мы сначала представим упомянутую выше классификацию и сравнительный анализ функциональных вычислительных статистических алгоритмов вида (В.14) приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (В.2) из работ [26, 98–100], а затем перенесем идеологию их построения на случаи приближения функций (В.9), (В.10). Это позволит обоснованно сформулировать уточняющие замечания из наших работ [55, 57, 60–66].

Исторически сначала развитие получила теория *функциональных сеточных вычислительных статистических алгоритмов* (см. в первую очередь [16, 17, 19, 20, 22, 25, 27–30, 34]). Для этих алгоритмов приближения

$$\tilde{\mathbf{W}}^{(M)}(n) = \{\tilde{w}^{(1)}(n), \dots, \tilde{w}^{(M)}(n)\} \quad (1.1.1)$$

из формулы (В.14) строятся для коэффициентов (В.13) вида

$$w^{(i)} = w^{(i)}(\boldsymbol{\varphi}^{(M)}); \text{ чаще всего } w^{(i)} = \varphi(\mathbf{x}_i); \quad i = 1, \dots, M, \quad (1.1.2)$$

представляющих собой комбинации значений

$$\boldsymbol{\varphi}^{(M)} = \{\varphi(\mathbf{x}_1), \dots, \varphi(\mathbf{x}_M)\} \quad (1.1.3)$$

функции $\varphi(\mathbf{x})$ в узлах сетки

$$\mathbf{X}^{(M)} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}, \quad (1.1.4)$$

введенной в ограниченной области $X \subseteq \mathbb{R}^d$.

Далее мы рассмотрим два способа получения приближений

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) \approx \varphi(\mathbf{x}_i); \quad i = 1, \dots, M \quad (1.1.5)$$

значений (1.1.3) для последующего подсчета приближений коэффициентов (В.13) по формулам вида (1.1.2) с целью последующего применения окончательного приближения (В.14).

Упомянем прежде всего **локальный алгоритм** метода зависимых испытаний.

АЛГОРИТМ 1.1 (см., например, [98–100]). *Моделируем n траекторий (В.6) прикладной цепи Маркова (В.4) и одновременно вычисляем приближения (1.1.5) по формулам*

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} k(\xi_j^{(m)}, \mathbf{x}_i) + f(\mathbf{x}_i); \quad i = 1, \dots, M \quad (1.1.6)$$

(здесь веса $Q_j^{(m)}$ вычисляются по формулам (В.8)), а затем получаем приближения (1.1.1) коэффициентов (В.13) по формулам вида (1.1.2) и строим окончательную аппроксимацию функции $\varphi(\mathbf{x})$ вида (В.14):

$$\varphi(\mathbf{x}) \approx L^{(M,n)} \tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)} [\tilde{\varphi}^{(1)}(n), \dots, \tilde{\varphi}^{(M)}(n)] \chi^{(i)}(\mathbf{x}). \quad (1.1.7)$$

Локальный алгоритм метода зависимых испытаний (алгоритм 1.1) был впервые предложен в классической работе [35]. Этот метод основан на алгоритме В.1, а также на соотношениях (В.1)–(В.3), (В.7) и

$$\int k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = I_{h(\mathbf{x})}; \quad h^{(\mathbf{x})}(\mathbf{y}) = k(\mathbf{y}, \mathbf{x}).$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1.1. *Алгоритм 1.1, обладая рядом несомненных преимуществ (простота построения, экономичность, сохранение гладкости решения для приближения (1.1.7), независимость погрешности от числа M узлов сетки (1.1.4)), используется относительно редко, так как требует вычисления и даже повышенной гладкости ядра $k(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ и свободного члена $f(\mathbf{x})$ уравнения (В.2) по переменной \mathbf{x} (см., в частности, [27–30]).*

Более широкое применение находит **функциональный алгоритм метода сопряженных блужданий**.

АЛГОРИТМ 1.2 (см., например, [98–100]). *Для каждого узла \mathbf{x}_i ; $i = 1, \dots, M$ сетки (1.1.4) моделируем n траекторий*

$$\xi_j^{(i,0)} \equiv x_i, \xi_j^{(i,1)}, \dots, \xi_j^{(i,N_j^{(i)}-1)}, \xi_j^{(i,N_j^{(i)})}; \quad j = 1, \dots, n \quad (1.1.8)$$

прикладной цепи Маркова с переходной функцией $p^{(i)}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ и одновременно вычисляем значение

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^{N_j^{(i)}} Q_j^{(i,m)} f(\xi_j^{(i,m)}) + f(x_i),$$

где

$$Q_j^{(i,m)} \equiv 1, \quad Q_j^{(i,m)} = Q_j^{(i,m-1)} \times \frac{k(\xi_j^{(i,m)}, \xi_j^{(i,m-1)})}{p^{(i)}(\xi_j^{(i,m-1)}, \xi_j^{(i,m)})}. \quad (1.1.9)$$

Затем получаем приближения (1.1.1) коэффициентов (В.13) по формулам вида (1.1.2) и строим окончательную аппроксимацию (1.1.7).

Функциональный алгоритм метода сопряженных блужданий (алгоритм 1.2) основан на алгоритме В.1 и на соотношениях (В.1), (В.3), (В.7) и

$$\varphi(x_i) = \int \varphi(\mathbf{y}) \delta(\mathbf{y} - x_i) d\mathbf{y}; \quad \int \varphi(\mathbf{y}) h(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int \varphi^*(\mathbf{y}) f(\mathbf{y}) d\mathbf{y},$$

где $\delta(\mathbf{y})$ – это дельта-функция Дирака, а $\varphi^*(\mathbf{y})$ является решением сопряженного (относительно функционала (В.1)) интегрального уравнения Фредгольма второго рода вида

$$\varphi^*(\mathbf{y}) = \int k^*(\mathbf{z}, \mathbf{y}) \varphi^*(\mathbf{z}) d\mathbf{z} + h(\mathbf{y}); \quad k^*(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = k(\mathbf{y}, \mathbf{z}).$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1.2. *Весьма существенным недостатком алгоритма 1.2 является то обстоятельство, что для каждого x_i ; $i = 1, \dots, M$ приходится моделировать на ЭВМ индивидуальный набор траекторий (1.1.8).*

Отдельно отметим, что для сеточных алгоритмов 1.1 и 1.2 детально разработана теория условной оптимизации по методу В.1 для \mathbb{L}_2 -подхода (В.17) и \mathbb{C} -подхода (В.18) (см. прежде всего работы [16, 17, 20, 22, 25–30]). Особо отметим работы [21, 96], в которых в рамках \mathbb{L}_2 -подхода помимо соображений о выборе параметров

$M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$ и $n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$ разработан подход к оптимальному выбору начальной плотности $\pi(\mathbf{x})$ и переходной функции $p(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ моделируемой в сеточном функциональном статистическом алгоритме 1.1 прикладной цепи Маркова (В.4).

1.1.2. Функциональный проекционный алгоритм

В последнее время в качестве альтернативы использования алгоритмов 1.1, 1.2 и представленного далее проекционно-сеточного алгоритма 1.4 стали рассматриваться функциональные проекционные вычислительные статистические алгоритмы (см. прежде всего работы [31–33]).

Для этих алгоритмов базисные функции (В.12) из аппроксимаций (В.11) и (В.14) представляют собой отрезок ряда (длины M) ортонормированных функций, для которых

$$(\chi^{(i)}, \chi^{(j)}) = \int \chi^{(i)}(\mathbf{y})\chi^{(j)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \delta^{(ij)}; \quad i, j = 1, \dots, M, \quad (1.1.10)$$

где $\delta^{(ij)}$ – это символы Кронекера: $\delta^{(ii)} = 1$ и $\delta^{(ij)} = 0$ при $i \neq j$. Здесь коэффициенты (В.13) равны величинам

$$w^{(i)} = (\varphi, \chi^{(i)}) = \int \varphi(\mathbf{y})\chi^{(i)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (1.1.11)$$

т. е. являются линейными функционалами вида (В.1) от приближаемого решения $\varphi(\mathbf{x})$ уравнения (В.2).

На этой основе (с учетом алгоритма В.1 и соотношений (В.3), (В.7)) можно построить следующий **функциональный проекционный вычислительный статистический алгоритм**.

АЛГОРИТМ 1.3 (см., например, [98–100]). *Моделируем n траекторий (В.6) прикладной цепи Маркова (В.4) и одновременно вычисляем приближения (1.1.1) по формулам*

$$\tilde{w}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} \chi^{(i)}(\xi_j^{(m)}); \quad i = 1, \dots, M$$

(здесь веса $Q_j^{(m)}$ вычисляются по формулам (В.8)), а затем строим окончательную аппроксимацию функции $\varphi(\mathbf{x})$ вида (В.14).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.3. *Идея проекционного метода (алгоритма 1.3) сформулирована в классических работах [35, 36]. Правда, в этих работах речь идет об алгоритме приближения вероятностных плотностей (В.10) – см. далее алгоритм 1.7. Отметим также, что упомянутые в этом подразделе работы [31–33] также посвящены приближению функций (В.10). Возможности применения алгоритма 1.3 для приближения решений $\varphi(\mathbf{x})$ практически значимых интегральных уравнений (В.2) (см. далее раздел 1.2) не исследованы.*

ЗАМЕЧАНИЕ 1.4. *Качество расчетов по алгоритму 1.3 весьма чувствительно к выбору ортонормированного базиса (В.12), (1.1.10). В частности, можно наблюдать определенную численную неустойчивость алгоритма 1.3 при относительно «неудачном» выборе базиса (В.12), (1.1.10). Кроме того, для алгоритма 1.3 слабо разработана теория условной оптимизации по методу В.1.*

Замечание 1.4 проиллюстрировано в подразделе 1.2.4 данной работы (см. также нашу работу [63]).

1.1.3. Функциональный проекционно-сеточный алгоритм и его оптимизация

Отмеченные в замечаниях 1.1–1.4 недостатки отсутствуют у функционального проекционно-сеточного вычислительного статистического алгоритма (см., например, [98–100]).

Сеточная компонента этого алгоритма определяется тем, что базисные функции (В.12) определенным образом связаны с вводимой сеткой (1.1.4). При этом коэффициенты (В.13) представляют собой комбинации (1.1.2) значений (1.1.3). В этом случае приближения метода Монте-Карло (1.1.1) для коэффициентов (В.13) имеют вид

$$\tilde{w}^{(i)} = w^{(i)}[\tilde{\varphi}^{(1)}(n), \dots, \tilde{\varphi}^{(M)}(n)]; \quad \text{чаще всего } w^{(i)}[\tilde{\varphi}^{(1)}(n), \dots, \tilde{\varphi}^{(M)}(n)] = \tilde{\varphi}^{(i)}(n). \quad (1.1.12)$$

Проекционная компонента проекционно-сеточного алгоритма определяется особым способом нахождения значений $\{\tilde{\varphi}^{(i)}(n); i = 1, \dots, M\}$. Выбираются финитные, одинаковые по форме для всех $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$ функции $\{\kappa^{(x_1)}(\mathbf{y}), \dots, \kappa^{(x_M)}(\mathbf{y})\}$

(версии ядерной функции $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$ для различных значений параметра \mathbf{x} – см. следующий подраздел 1.1.4), так же, как и базисные функции (В.12), связанные с сеткой (1.1.4), и такие, что

$$I_{\kappa^{(x_i)}} = \int \varphi(\mathbf{y}) \kappa^{(x_i)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \approx \varphi(\mathbf{x}_i); \quad i = 1, \dots, M. \quad (1.1.13)$$

Учитывая, что соотношения (1.1.13) имеют вид (В.1) для $h(\mathbf{y}) = \kappa^{(x_i)}(\mathbf{y})$ и применяя алгоритм В.1, получаем **функциональный проекционно-сеточный вычислительный статистический алгоритм.**

АЛГОРИТМ 1.4 (см., например, [98–100]). *Моделируем n траекторий (В.6) прикладной цепи Маркова (В.4) и одновременно вычисляем значения*

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} \kappa^{(x_i)}(\xi_j^{(m)}); \quad i = 1, \dots, M$$

(здесь веса $Q_j^{(m)}$ вычисляются по формулам (В.8)), а затем получаем приближения (1.1.12) и строим окончательную аппроксимацию функции $\varphi(\mathbf{x})$ вида (1.1.7).

Наиболее подробно алгоритм 1.4 изучен (см. в первую очередь [27–30, 90, 93, 94]) для случая, когда в качестве базисных функций (В.12) используются «абсолютно устойчивые» финитные функции **мульти-линейной аппроксимации** (или аппроксимации Стренга – Фикса с производящей функцией $\beta^{(1)}(u)$, являющейся B -сплайном первого порядка – см. [117], а также раздел 1.3.2 данной диссертации) на регулярной сетке $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$ с шагом h по каждой координате:

$$\chi^{(i,1)}(\mathbf{x}) = \beta^{(1)}\left(\frac{x^{(1)}}{h} - j_i^{(1)}\right) \times \dots \times \beta^{(1)}\left(\frac{x^{(d)}}{h} - j_i^{(d)}\right); \quad \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}); \quad (1.1.14)$$

$$\beta^{(1)}(u) = \begin{cases} u + 1 & \text{при } -1 \leq u \leq 0; \\ -u + 1 & \text{при } 0 \leq u \leq 1; \\ 0 & \text{иначе;} \end{cases}$$

$$\mathbf{x}_i = (j_i^{(1)}h, \dots, j_i^{(d)}h); \quad (1.1.15)$$

здесь $j_i^{(k)}$; $k = 1, \dots, d$; $i = 1, \dots, M$ – целые числа, а множество $X \subset \mathbb{R}^d$, на котором происходит приближение функции $\varphi(\mathbf{x})$, представляет собой прямоугольный параллелепипед.

При этом функция $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$ из соотношений (1.1.13) выбирается в виде

$$\kappa^{(x)}(\mathbf{y}) = \begin{cases} \frac{1}{h^d} & \text{при } \mathbf{y} \in \Delta^{(x)}; \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1.1.16)$$

где $\Delta^{(x)} = \{\mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d)}): x^{(s)} - \frac{h}{2} \leq y^{(s)} \leq x^{(s)} + \frac{h}{2}; s = 1, \dots, d; \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)})\}$.

Приближения (1.1.12) аппроксимационных коэффициентов (В.13) имеют простейший вид

$$w^{(i)}[\tilde{\varphi}^{(1)}(n), \dots, \tilde{\varphi}^{(M)}(n)] = \tilde{\varphi}^{(i)}(n). \quad (1.1.17)$$

Алгоритм 1.4, в котором используются функции (1.1.14), (1.1.16) и приближения аппроксимационных коэффициентов (1.1.17), назван в [27–30, 90, 93, 94] **многомерным аналогом метода полигона частот**.

Упомянутые здесь исследования многомерного аналога метода полигона частот связаны прежде всего с условной оптимизацией по методу В.1 [27–30, 34, 75, 79, 90, 93–95]. Помимо аппроксимаций $L^{(M)}\varphi(\mathbf{x})$, $L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})$ функции $\varphi(\mathbf{x})$ по точным и неточным значениям в узлах сетки (1.1.4) (см. формулы (В.11), (В.14), (1.1.7)) здесь вводится функция

$$L^{(M)}\bar{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)}[\mathbf{E}\zeta^{(x_1)}, \dots, \mathbf{E}\zeta^{(x_M)}]\chi^{(i)}(\mathbf{x}), \quad (1.1.18)$$

где $\zeta^{(x_i)} = \sum_{m=0}^N Q^{(m)}\kappa^{(x_i)}(\xi^{(m)})$; $i = 1, \dots, M$ для прикладной цепи Маркова (В.4) и случайных весов (В.5).

Для \mathbb{L}_2 -подхода (В.17) и \mathbb{C} -подхода (В.18) можно разделить погрешность на три компоненты: детерминированную $\delta_{det}^{(\mathbb{B})}(M)$, стохастическую $\delta_{stoch}^{(\mathbb{B})}(M, n)$ и компоненту смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$.

В частности, для \mathbb{C} -подхода, согласно неравенству треугольника,

$$\delta^{(\mathbb{C})}(M, n) \leq \delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) + \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) + \delta_{bias}^{(\mathbb{C})}(M), \quad (1.1.19)$$

где

$$\begin{aligned} \delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) &= \|\varphi - L^{(M)}\varphi\|_{\mathbb{C}(X)}, & \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) &= \|L^{(M)}\bar{\varphi} - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}\|_{\mathbb{C}(X)}, \\ \delta_{bias}^{(\mathbb{C})}(M) &= \|L^{(M)}\varphi - L^{(M)}\bar{\varphi}\|_{\mathbb{C}(X)}. \end{aligned}$$

Для \mathbb{L}_2 -подхода, применяя неравенство Коши – Буняковского и теорему Фубини, получаем

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}\delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n)]^2 &\leq \mathbf{E}\left(\int_X [\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})]^2 d\mathbf{x}\right) \times \mathbf{E}1 = \\ &= \int_X \mathbf{E}[\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})]^2 d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Далее заметим, что

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})]^2 &= \mathbf{E}([\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M)}\varphi(\mathbf{x})] + [L^{(M)}\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M)}\bar{\varphi}(\mathbf{x})] + \\ &+ [L^{(M)}\bar{\varphi}(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})])^2 = ([\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M)}\varphi(\mathbf{x})] + [L^{(M)}\varphi(\mathbf{x}) - L^{(M)}\bar{\varphi}(\mathbf{x})])^2 + \\ &+ \mathbf{E}[L^{(M)}\bar{\varphi}(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x})]^2; \end{aligned}$$

здесь учтено, что $\mathbf{E}L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = L^{(M)}\bar{\varphi}(\mathbf{x})$. Используя очевидное неравенство $(a + b)^2 \leq 2a^2 + 2b^2$, получаем

$$[\mathbf{E}\delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n)]^2 \leq 2[\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M)]^2 + \delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) + 2[\delta_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M)]^2, \quad (1.1.20)$$

где

$$\begin{aligned} \delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M) &= \|\varphi - L^{(M)}\varphi\|_{\mathbb{L}_2(X)}, \quad \delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) = \int_X \mathbf{D}L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \\ \delta_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M) &= \|L^{(M)}\varphi - L^{(M)}\bar{\varphi}\|_{\mathbb{L}_2(X)}. \end{aligned}$$

Построение согласованных верхних границ компонент погрешностей $\delta_{det}^{(\mathbb{B})}(M)$, $\delta_{stoch}^{(\mathbb{B})}(M, n)$, $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$ для $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X) \vee \mathbb{L}_2(X)$ существенно зависит от выбора базиса (В.12). Функции $\Xi^{(M)}$ должны одновременно обладать хорошими аппроксимационными свойствами (обеспечивающими при правильном выборе коэффициентов (В.13) стремление к нулю компоненты $\delta_{det}^{(\mathbb{B})}(M) \rightarrow 0$ при $M \rightarrow \infty$) и устойчивостью (это важно при оценке компоненты $\delta_{stoch}^{(\mathbb{B})}(M, n)$). Кроме того, следует учитывать наличие компоненты $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$, оценка которой существенно зависит от выбора функции $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$.

Как показано в работах [27–30, 90, 93, 94], сформулированным требованиям наилучшим образом соответствуют функции (1.1.14), (1.1.16) и коэффициенты (1.1.17), определяющие многомерный аналог метода полигона частот. Соответствующие рассуждения метода В.1 дают следующие формулы оптимальных параметров:

$$M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = H_1^{(\mathbb{L}_2)} \left(\frac{d+4}{d} \right)^{\frac{d}{4}} L^{-\frac{d}{2}}, \quad n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = H_2^{(\mathbb{L}_2)} \left(\frac{d+4}{d} \right)^{\frac{d}{4}} (d+4) L^{-2-\frac{d}{2}};$$

$$M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) = H_1^{(\mathbb{C})} \left[\frac{(2a+1)d+4}{(2a+1)d} \right]^{\frac{d}{2}} L^{-\frac{d}{2}}; \quad (1.1.21)$$

$$n_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) = H_2^{(\mathbb{C})} \frac{[(2a+1)d+4]^{2+\frac{d}{2}}}{[(2a+1)d]^{\frac{d}{2}}} \left[2 \ln M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) - \ln \ln M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) + H_3^{(\mathbb{C})} \right] L^{-2-\frac{d}{2}}$$

для некоторых положительных констант $H_1^{(\mathbb{L}_2)}$, $H_2^{(\mathbb{L}_2)}$, $H_1^{(\mathbb{C})}$, $H_2^{(\mathbb{C})}$, $H_3^{(\mathbb{C})}$ и a ; выбор или приближение этих констант представляет собой отдельную – часто непростую – задачу (см, в частности, раздел 1.3 данной диссертации).

Аналоги формул (1.1.21) будут получены далее в разделе 1.3 данной диссертации для специального алгоритма 1.5 приближения вероятностных плотностей (см. далее подраздел 1.1.4).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.5. Применение версий алгоритма 1.4, отличных от многомерного аналога метода полигона частот, ведет к определенным рассогласованиям при выборе параметров n и M .

Например, использование более гладких (по сравнению с (1.1.14)) базисных функций (например, базиса Стренга – Фикса [117] с производящей функцией $\beta^{(3)}(u)$, являющейся кубическим B -сплайном – как в работе [75]) приводит к тому, что порядок по шагу h сетки (1.1.15) для детерминированной компоненты погрешности $\delta_{det}^{(\mathbb{B})}(M)$ превосходит порядок по h компоненты смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$ для $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X) \vee \mathbb{L}_2(X)$ (подробности см. в статье [94] и в подразделах 1.3.3, 1.3.4 данной работы); кроме того, нецелесообразным становится применение простейших коэффициентов (1.1.17).

Что касается использования ядерной функции $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$, отличной от кусочно-постоянной версии (1.1.16), то, судя по проведенным нами тестовым расчетам (см., в частности, подраздел 1.2.5 данной работы), это, с одной стороны, не дает существенных улучшений результатов расчетов, а с другой стороны, усложняет построение верхних границ для компонент смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$ для $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X) \vee \mathbb{L}_2(X)$ (см., в частности, подраздел 1.3.4 данной работы).

1.1.4. Ядерные оценки и алгоритмы приближения функций

Сформулируем следующие важные замечания из наших работ [55, 57, 60–66].

В классической работе [103] рассматривается непараметрическая оценка функции $\varphi(\mathbf{x})$ вида (B.10), т. е. вероятностной плотности распределения $\varphi(\mathbf{x}) = f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in X \subset \mathbb{R}^d$ случайного вектора $\boldsymbol{\eta}$ по выборочным значениям $\{\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_n\}$ из этого распределения вида

$$f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) \approx Z_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \kappa^{(x)}(\boldsymbol{\eta}_j), \quad (1.1.22)$$

где $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$ – некоторая финитная параметрическая, одинаковая по форме для всех значений параметра \mathbf{x} **ядерная функция**. Приближение (1.1.22) называется **ядерной оценкой плотности $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x})$** .

При исследовании свойств приближения (1.1.22) существенно используется то обстоятельство, что, согласно закону больших чисел, для достаточно больших n выполнено

$$Z_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \kappa^{(x)}(\boldsymbol{\eta}_j) \approx \mathbf{E} \kappa^{(x)}(\boldsymbol{\eta}) = \int_X \kappa^{(x)}(\mathbf{y}) f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (1.1.23)$$

Определенным конструктивным недостатком теории ядерных оценок плотности и ее приложений (см., в частности, работу [103]) является отсутствие обсуждения алгоритма практического (в первую очередь, вычислительного, компьютерного) приближения функции $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x})$ в целом, основанного на теории сеточной ап-

проксимации функций (см., например, [37]). Мы предлагаем рассмотреть **функциональный ядерный вычислительный алгоритм приближения вероятностной плотности** $f_\eta(\mathbf{x})$, который выглядит следующим образом.

Предположим, что область $X \subset \mathbb{R}^d$ распределения случайного вектора является ограниченной, и в этой области построена сетка (1.1.4) и рассматривается сеточное приближение функции $f_\eta(\mathbf{x})$ вида (B.11)

$$f_\eta(\mathbf{x}) \approx L^{(M)} f_\eta(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)} [f_\eta(\mathbf{x}_1), \dots, f_\eta(\mathbf{x}_M)] \chi^{(i)}(\mathbf{x}) \quad (1.1.24)$$

с соответствующим аппроксимационным базисом (B.12) и набором коэффициентов (B.13), являющихся комбинациями значений приближаемой функции $f_\eta(\mathbf{x})$ в узлах сетки (1.1.4); чаще всего

$$w^{(i)} [f_\eta(\mathbf{x}_1), \dots, f_\eta(\mathbf{x}_M)] = f_\eta(\mathbf{x}_i). \quad (1.1.25)$$

АЛГОРИТМ 1.5 [55, 57, 60–66]. *Вычисляем значения $\tilde{f}_\eta^{(x_i)}(n) = Z_n(\mathbf{x}_i)$; $i = 1, \dots, M$ по формулам вида (1.1.22) и приближаем функцию $f_\eta(\mathbf{x})$ по формуле*

$$f_\eta(\mathbf{x}) \approx L^{(M,n)} \tilde{f}_\eta(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)} [\tilde{f}_\eta^{(x_1)}(n), \dots, \tilde{f}_\eta^{(x_M)}(n)] \chi^{(i)}(\mathbf{x}). \quad (1.1.26)$$

Алгоритм 1.5 основан на соотношениях

$$\int_X \kappa^{(x_i)}(\mathbf{y}) f_\eta(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \approx f_\eta(\mathbf{x}_i), \quad i = 1, \dots, M, \quad (1.1.27)$$

которые, в свою очередь, следуют из соотношений (1.1.22) и (1.1.23).

Сравнение алгоритмов 1.4 и 1.5 приводит к следующему важному выводу.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.6. *Основанный на подходах численной сеточной аппроксимации функций функциональный ядерный вычислительный алгоритм 1.5 приближения вероятностной плотности $f_\eta(\mathbf{x})$ конструктивно совпадает с функциональным проекционно-сеточным вычислительным статистическим алгоритмом 1.4 приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ уравнения Фредгольма второго рода (B.2).*

Отличие алгоритмов 1.4 и 1.5 состоит только в разности форм монте-карловских оценок для приближенного вычисления функционалов вида (1.1.13) и (1.1.27)

(что, в свою очередь, связано с определенным различием приближаемых функций $f_\eta(\mathbf{x})$ и $\varphi(\mathbf{x})$).

В связи с основным выводом замечания 1.6 можно сформулировать следующее соображение.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.7. *Для развития теории конструирования и условной оптимизации функционального проекционно-сеточного алгоритма 1.4 можно использовать соображения из теории ядерных оценок вероятностных плотностей из работы [103].*

В частности, для алгоритма 1.4 вполне целесообразно применять новое название **функциональный ядерный вычислительный статистический алгоритм для приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ уравнения (В.2)**, как это сделано, например, в работах [55, 57, 60–66, 101, 102].

ЗАМЕЧАНИЕ 1.8. *Для функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 приближения вероятностной плотности $f_\eta(\mathbf{x})$ можно использовать соображения теории условной оптимизации функционального ядерного (проекционно-сеточного) вычислительного статистического алгоритма 1.4.*

В связи с замечаниями 1.7 и 1.8 уместно упомянуть следующие рассуждения об оптимизации приближения (1.1.22) из работы [103]. В этой работе предлагается рассматривать ядерную функцию $\kappa^{(\mathbf{x})}(\mathbf{y})$ в виде

$$\kappa^{(\mathbf{x})}(\mathbf{y}) = \prod_{s=1}^d \frac{1}{h^{(s)}(n)} \hat{\kappa}^{(s)}\left(\frac{x^{(s)} - y^{(s)}}{h^{(s)}(n)}\right); \quad \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}), \quad \mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d)}), \quad (1.1.28)$$

где положительные (вообще говоря, зависящие от величины выборки n) числа $h^{(s)}(n)$; $s = 1, \dots, d$ определяют носитель («коэффициенты размытости») ядерной функции $\kappa^{(\mathbf{x})}(\mathbf{y})$, а ограниченные четные ($\hat{\kappa}^{(s)}(y) = \hat{\kappa}^{(s)}(-y)$) функции $\hat{\kappa}^{(s)}(y)$ имеют единичный второй момент и конечные m -е моменты:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y^2 \hat{\kappa}^{(s)}(y) dy = 1; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} y^m \hat{\kappa}^{(s)}(y) dy < \infty, \quad m > 2. \quad (1.1.29)$$

Содержательные результаты по оптимизации приближения (1.1.22) с ядерной функцией (1.1.28) получаются лишь для случая

$$h^{(1)}(n) = \dots = h^{(d)}(n) \equiv \hat{h}(n), \quad \hat{\kappa}^{(1)}(y) = \dots = \hat{\kappa}^{(d)}(y) \equiv \hat{\kappa}(y)$$

(см., в частности, [103]); случай различных $h^{(s)}(n), \hat{\kappa}^{(s)}(y); s = 1, \dots, d$ практически не изучен.

В работе [103] в рамках асимптотического (при $n \rightarrow \infty$) подхода с помощью разложения функции $f_\eta[x^{(1)} + \hat{h}(n)y^{(1)}, \dots, x^{(d)} + \hat{h}(n)y^{(d)}]$ по всем переменным $\mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d)})$ в точке $\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$ в ряд Тейлора и минимизации относительной глобальной среднеквадратической ошибки

$$[\hat{\delta}^{(\mathbb{L}_2)}(n)]^2 = \frac{\mathbf{E} \int_X [f_\eta(\mathbf{x}) - Z_n(\mathbf{x})]^2 d\mathbf{x}}{Q}; \quad Q = \int_X f_\eta^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (1.1.30)$$

получено асимптотическое приближение

$$[\hat{\delta}^{(\mathbb{L}_2)}(n)]^2 \sim \frac{n^{-1} \times \hat{h}^{-d(n)} \times I^d + \left(\frac{1}{4}\right) \times \hat{h}^4(n) \times J}{Q}; \quad (1.1.31)$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\kappa}^2(y) dy, \quad J = \int_X \dots \int_X \sum_{l=1}^d \left[\frac{\partial^2 f_\eta(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})}{\partial (x^{(l)})^2} \right]^2 dx^{(1)} \dots dx^{(d)}. \quad (1.1.32)$$

Минимизация полученного приближения (1.1.31) величины (1.1.30) и выбор функции $\hat{\kappa}(y)$ из соображений минимизации величины I из (1.1.32) с соблюдением условий (1.1.29) дают оптимальное значение «коэффициента размытости» и оптимальную форму функции $\hat{\kappa}(y)$:

$$\hat{h}_{opt}(n) = \left(\frac{d \times I^d}{n \times J} \right)^{1/(d+4)}; \quad \hat{\kappa}_{opt}(y) = \begin{cases} \frac{3}{4\sqrt{5}} - \frac{3y^2}{20\sqrt{5}} & \text{при } |y| \leq \sqrt{5}, \\ 0 & \text{при } |y| > \sqrt{5}. \end{cases} \quad (1.1.33)$$

По поводу проведенной в [103] оптимизации приближения (1.1.22) плотности $f_\xi(\mathbf{x})$ можно сделать следующие критические замечания.

Во-первых, оптимизируется «непрерывное» приближение, а более конструктивной, как отмечалось выше, является сеточная численная аппроксимация функции $f_\xi(\mathbf{x})$, представленная в алгоритме 1.5.

Во-вторых, выражение (1.1.33) для $\hat{h}_{opt}(n)$ содержит неопределенную константу J из (1.1.32), приближение которой представляет собой отдельную (и весьма непростую) задачу.

В-третьих, представленная здесь оптимизация приближения (1.1.22) связана с минимизацией асимптотического приближения верхней границы погрешности, а более объективным является следующий критерий оптимизации.

КРИТЕРИЙ 1.1. *То приближение функции $\varphi(\mathbf{x})$ эффективнее (оптимальнее), которое дает заданный уровень погрешности за меньшее время (с меньшими компьютерными затратами).*

Вопрос о том, насколько использование параметров (1.1.33) в ядерных алгоритмах 1.4, 1.5 (в сочетании с выбором шага h сетки (1.1.15)) соответствует критерию 1.1, требует отдельного подробного исследования. Предварительные тестовые численные эксперименты, представленные далее в подразделе 1.2.5, показывают, что использование параметров (1.1.33) не дает ощутимых преимуществ по сравнению со случаем, когда

$$\hat{h}(n) = h \quad \text{и} \quad \hat{\kappa}(y) = \begin{cases} 1 & \text{при } |y| \leq 1/2; \\ 0 & \text{при } |y| > 1/2 \end{cases} \quad (1.1.34)$$

(т. е. «коэффициент размытости» совпадает с шагом сетки (1.1.15) и функция $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$ имеет вид (1.1.16)), что соответствует многомерному аналогу метода полигона частот.

Критерию 1.1 в большей степени соответствует метод В.1, позволяющий получить формулы для условно-оптимальных параметров алгоритма 1.5 вида (1.1.21). Подробный вывод этих формул приведен в разделе 1.3 данной диссертации.

Важным также является следующее замечание.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.9. *В работах [98–102] сформулирована гипотеза о том, что ядерные алгоритмы 1.4, 1.5 перспективны в смысле их применения для решения практически значимых задач.*

Всестороннему анализу замечания 1.9 посвящена первая глава данной работы.

Отметим, что в работах [16, 17, 19, 20, 24, 31–33, 35, 36, 97, 101, 102, 115, 116] сеточные и ядерные алгоритмы 1.1, 1.2, 1.4, 1.5 исследуются и применяются без обсуждения деталей выбора аппроксимационного базиса (В.12) для приближений (В.11), (В.14), (1.1.7), (1.1.24), (1.1.26).

Выделим также раздел 1.4.4 книги [19] и статью [107], где изучается целесообразность применения в методе полигона частот монте-карловских оценок по поглощениям и по пробегу вместо оценки по столкновениям (В.3) функционалов вида (В.1) для $h(\mathbf{y}) = \kappa^{(x_i)}(\mathbf{y})$. Общий вывод по результатам этих исследований следующий: использование оценки по столкновениям в методе полигона частот (и в других функциональных алгоритмах) является более предпочтительным.

Следует также отметить работу [97], в которой в рамках \mathbb{L}_2 -подхода помимо соображений о выборе параметров $M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$ и $n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$ разработан подход к оптимальному выбору начальной плотности $\pi(\mathbf{x})$ и переходной функции $p(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ моделируемой в функциональном ядерном вычислительном статистическом алгоритме 1.4 прикладной цепи Маркова (В.4).

Аналог ядерных алгоритмов 1.4, 1.5 можно сформулировать и для интеграла, зависящего от параметра $\varphi(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}; \mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^{d_x}; \mathbf{y} \in Y \subseteq \mathbb{R}^{d_y}$ (см. формулу (В.9)).

АЛГОРИТМ 1.6. *Моделируем n пар выборочных значений $(\vartheta_1, \theta_1), \dots, (\vartheta_n, \theta_n)$ случайных векторов $\vartheta \in X \subseteq \mathbb{R}^{d_x}$ и $\theta \in Y \subseteq \mathbb{R}^{d_y}$ согласно совместной плотности распределения $f_{(\vartheta, \theta)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ и одновременно вычисляем значения*

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{\kappa^{(x_i)}(\vartheta_j) g(\vartheta_j, \theta_j)}{f_{(\vartheta, \theta)}(\vartheta_j, \theta_j)}; \quad i = 1, \dots, M,$$

а затем получаем приближения (1.1.12) и строим окончательную аппроксимацию (1.1.7) для функции $\varphi(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$.

Для проблематики изучения алгоритма 1.6 (а также приведенных далее алгоритмов 1.8–1.10, 2.3, 2.4) важным является следующее замечание.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.10. Рассмотрение функции (В.9) (интеграла, зависящего от параметра) и вычислительных статистических алгоритмов ее приближения носит вспомогательный, методический характер (по отношению к задаче приближения решений уравнений вида (В.2)) и не связано с содержательными практическими приложениями (см. прежде всего работы [27, 28, 30, 34, 35, 42, 47–49, 92]).

Здесь дело в том, что решение $\varphi(\mathbf{x})$ уравнения (В.2) может быть представлено в виде ряда Неймана

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} K^m f(\mathbf{x}), \quad (1.1.35)$$

где $K^0 f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$, $K^1 f(\mathbf{x}) = Kf(\mathbf{x}) = \int k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'$ и

$$K^m f(\mathbf{x}) = \int \dots \int [f(\mathbf{y}^{(0)}) k(\mathbf{y}^{(0)}, \mathbf{y}^{(1)}) k(\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(2)}) \times \dots \times \\ \times k(\mathbf{y}^{(m-2)}, \mathbf{y}^{(m-1)}) k(\mathbf{y}^{(m-1)}, \mathbf{x})] d\mathbf{y}^{(0)} d\mathbf{y}^{(1)} d\mathbf{y}^{(2)} \dots d\mathbf{y}^{(m-2)} d\mathbf{y}^{(m-1)},$$

т. е. представляет собой сумму интегралов бесконечно возрастающей кратности, зависящих от параметра (см., например, учебник [26]).

При этом функционал (В.1) представляет собой сумму интегралов бесконечно возрастающей кратности

$$I_h = \sum_{m=0}^{\infty} (K^m f, h), \\ (K^m f, h) = \int \dots \int [f(\mathbf{y}^{(0)}) k(\mathbf{y}^{(0)}, \mathbf{y}^{(1)}) k(\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(2)}) \times \dots \times \\ \times k(\mathbf{y}^{(m-2)}, \mathbf{y}^{(m-1)}) k(\mathbf{y}^{(m-1)}, \mathbf{y}^{(m)}) h(\mathbf{y}^{(m)})] d\mathbf{y}^{(0)} d\mathbf{y}^{(1)} \dots d\mathbf{y}^{(m-1)} d\mathbf{y}^{(m)}.$$

Поэтому при построении и изучении монте-карловской оценки (В.3) функционала (В.1) активно используются результаты теории классического весового алгоритма метода Монте-Карло для приближения интеграла

$$I = \int g(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \mathbf{E} \frac{g(\boldsymbol{\theta})}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})} \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{g(\boldsymbol{\theta}_j)}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}_j)}; \quad (1.1.36)$$

здесь $\boldsymbol{\theta}_1, \dots, \boldsymbol{\theta}_n$ – выборочные значения случайного вектора $\boldsymbol{\theta}$, распределенного согласно выбранной плотности $f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})$ (см., например, учебники [22, 26]).

Аналогично, алгоритм 1.6 может быть использован для изучения и тестирования алгоритма 1.4. Однако, в связи с замечаниями 1.9 и 1.10, алгоритм 1.6 в данной работе не изучается и не используется.

1.1.5. Алгоритмы приближения вероятностных плотностей и интегралов, зависящих от параметра

В связи с рассуждениями подраздела 1.1.4 возникает вопрос о наличии аналогов сеточных и проекционных алгоритмов 1.1–1.3 для функций (В.9), (В.10).

Начнем с функции (В.10), т. е. с задачи приближения вероятностной плотности $\varphi(\mathbf{x}) = f_{\eta}(\mathbf{x})$ по заданным выборочным значениям $\{\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_n\}$. Нам не известны аналоги сеточных алгоритмов 1.1 и 1.2 для этой задачи. А вот аналог проекционного алгоритма 1.3 известен довольно давно (см. в первую очередь работы [35, 36]).

Если взять в приближении (1.1.24) ортонормированный аппроксимационный базис (В.12), удовлетворяющий условиям (1.1.10), то, с учетом соотношения (1.1.11), получим

$$w^{(i)} = (\varphi, \chi^{(i)}) = \int \varphi(\mathbf{y}) \chi^{(i)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int f_{\eta}(\mathbf{y}) \chi^{(i)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \mathbf{E} \chi^{(i)}(\boldsymbol{\eta}),$$

и тогда, с учетом приближения (1.1.36), получаем следующий **проекционный вычислительный алгоритм приближения вероятностной плотности $f_{\eta}(\mathbf{x})$** .

АЛГОРИТМ 1.7 [35, 36]. *Вычисляем приближения (1.1.1) по формулам*

$$w^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \chi^{(i)}(\boldsymbol{\eta}_j); \quad i = 1, \dots, M,$$

а затем строим окончательную аппроксимацию функции $\varphi(\mathbf{x}) = f_{\eta}(\mathbf{x})$ вида (1.1.26):

$$f_{\eta}(\mathbf{x}) \approx L^{(M,n)} \tilde{f}_{\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)}(n) \chi^{(i)}(\mathbf{x}).$$

Еще раз отметим, что в последнее время алгоритм 1.7 активно используется для решения практически значимых задач (см. в первую очередь работы [31–33]).

Теперь обратимся к аналогам алгоритмов 1.1–1.3 для функции (В.9) (интеграла, зависящего от параметра).

Первый способ применения приближений вида (1.1.36), связанный с введением «универсальной» (одинаковой для всех узлов сетки (1.1.4), и вообще для всех $\mathbf{x} \in X$) плотности распределения $f_{\theta}(\mathbf{y})$, дает **сеточный статистический алгоритм метода зависимых испытаний** (аналог алгоритма 1.1) в классической постановке.

АЛГОРИТМ 1.8 [35]. Моделируем n выборочных значений $\theta_1, \dots, \theta_n$ случайного вектора θ , распределенного согласно выбранной плотности $f_{\theta}(\mathbf{y})$ и одновременно вычисляем приближения (1.1.5) по формулам

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{g(\mathbf{x}_i, \theta_j)}{f_{\theta}(\theta_j)}; \quad i = 1, \dots, M,$$

а затем получаем приближения (1.1.1) коэффициентов (В.13) по формулам вида (1.1.12) и строим окончательную аппроксимацию (1.1.7) для функции $\varphi(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$.

Второй способ применения приближений вида (1.1.36), связанный с введением отдельных плотностей распределения $f_{\theta^{(i)}}(\mathbf{y})$ для каждого узла \mathbf{x}_i сетки (1.1.4), дает следующий аналог алгоритма 1.2 – **сеточный алгоритм с независимыми оценками в узлах для приближения интеграла, зависящего от параметра**.

АЛГОРИТМ 1.9 [27, 28, 34]. Для каждого узла \mathbf{x}_i сетки (1.1.4) моделируем n выборочных значений $\theta_1^{(i)}, \dots, \theta_n^{(i)}$ случайного вектора $\theta^{(i)}$, распределенного согласно плотности $f_{\theta^{(i)}}(\mathbf{y})$ и вычисляем приближения (1.1.5) по формулам

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{g(\mathbf{x}_i, \theta_j^{(i)})}{f_{\theta^{(i)}}(\theta_j^{(i)})}; \quad i = 1, \dots, M.$$

Затем получаем приближения (1.1.1) коэффициентов (В.13) по формулам вида (1.1.12) и строим окончательную аппроксимацию (1.1.7) для функции $\varphi(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$.

Алгоритмы 1.8, 1.9 использованы в работах [27, 28, 34] для разработки методик условной оптимизации функциональных сеточных вычислительных статистических алгоритмов по методу В.1 и для проведения упрощенных (по сравнению с задачей приближения решения интегрального уравнения (В.2)) тестовых экспериментов (см. замечание 1.10). В данной работе алгоритм 1.8 рассматривается как частный («одноуровневый») случай многоуровневого статистического алгоритма из работ [42, 92] (см. далее алгоритм П.1 из раздела П.2). Кроме того, в разделе 2.2 для случая, когда вычисление значений подынтегральной функции $g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ является трудоемким, сконструирован и подробно изучен специальный аналог алгоритма 1.8 – функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм (алгоритм 2.4). Сеточный алгоритм 1.9 в данной работе не изучается и не используется.

Для функции (В.9) несложно построить также аналог проекционного алгоритма 1.3. Если взять в приближении (В.11) ортонормированный аппроксимационный базис (В.12), удовлетворяющий условиям (1.1.10), то, с учетом соотношений (1.1.11), (1.1.36) получим следующий **проекционный статистический алгоритм приближения интеграла, зависящего от параметра**.

АЛГОРИТМ 1.10. Моделируем n пар выборочных значений $(\boldsymbol{\vartheta}_1, \boldsymbol{\theta}_1), \dots, (\boldsymbol{\vartheta}_n, \boldsymbol{\theta}_n)$ случайных векторов $\boldsymbol{\vartheta} \in X \subseteq \mathbb{R}^{d_x}$ и $\boldsymbol{\theta} \in Y \subseteq \mathbb{R}^{d_y}$ согласно совместной плотности распределения $f_{(\boldsymbol{\vartheta}, \boldsymbol{\theta})}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ и вычисляем приближения (1.1.1) по формулам

$$w^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{\chi^{(i)}(\boldsymbol{\vartheta}_j) g(\boldsymbol{\vartheta}_j, \boldsymbol{\theta}_j)}{f_{(\boldsymbol{\vartheta}, \boldsymbol{\theta})}(\boldsymbol{\vartheta}_j, \boldsymbol{\theta}_j)}; \quad i = 1, \dots, M,$$

а затем строим окончательную аппроксимацию (В.14) для функции $\varphi(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$.

Учитывая замечание 1.10, алгоритм 1.10 может быть использован для методически упрощенного (по сравнению с задачей приближения решения интегрального

уравнения (В.2)) изучения функциональных статистических проекционных алгоритмов. В данной работе алгоритм 1.10 не изучается и не используется.

1.1.6. Использование квадратурных и кубатурных формул

Вернемся к рассмотрению задачи приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода уравнения (В.2). Рассмотрим сеточные алгоритмы, в которых вычисляются величины $\tilde{\varphi}_i \approx \varphi(\mathbf{x}_i); i = 1, \dots, M$ в узлах сетки (1.1.4) с использованием *квадратурных и (или) кубатурных формул* (см., например, [37]) для последующего подсчета коэффициентов (1.1.1) по формулам (1.1.12). Особо обратим внимание на возможности рандомизации этих алгоритмов.

Сразу отметим, что как сами эти алгоритмы, так и их рандомизированные версии значительно уступают рассмотренным в подразделах 1.1.1–1.1.3 функциональным алгоритмам как по свойствам сходимости, так и по возможностям их применения для решения практически значимых интегральных уравнений (см. далее подраздел 1.1.7).

Первая идея связана с использованием соотношения (1.1.35) в фиксированных точках $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$. Задав некоторое $S < +\infty$, можно пытаться вычислять значения

$$\tilde{\varphi}_i = \sum_{m=0}^S K^m f(\mathbf{x}_i) \approx \varphi(\mathbf{x}_i); \quad i = 1, \dots, M. \quad (1.1.37)$$

Численная аппроксимация интегралов

$$K^m f(\mathbf{x}_i) = \int \dots \int f(\mathbf{y}^{(0)}) k(\mathbf{y}^{(0)}, \mathbf{y}^{(1)}) \times \dots \times k(\mathbf{y}^{(m-1)}, \mathbf{x}_i) d\mathbf{y}^{(0)} d\mathbf{y}^{(1)} \dots d\mathbf{y}^{(m-1)}$$

с использованием детерминированных или дискретно-стохастических кубатурных формул видится нецелесообразной и осуществимой только для малых S (при этом приближения (1.1.37) имеют значительные погрешности), хотя такие попытки предпринимались; см., в частности, работы [79, 118, 119].

Вторая идея по использованию кубатурных формул для вычисления величин $\tilde{\varphi}^{(M)} = (\tilde{\varphi}_1, \dots, \tilde{\varphi}_M)$ рассмотрена в наших работах [52, 53] (см. также [120]) и связана с приближением первого члена $\int_{\mathbf{x}} k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'$ в правой части интегрального уравнения (В.2).

Представим эту идею для одномерного варианта уравнения (В.2), в котором $x, x' \in X = [a, b]$.

Для простейшего функционального сеточного алгоритма вида (В.14) с коэффициентами (1.1.12) будем искать приближения $\tilde{\varphi}_i \approx \varphi(x_i)$ значений функции $\varphi(x)$ в узлах одномерной равномерной сетки (1.1.15) вида

$$x_i = a + (i - 1)h; \quad h = \frac{b - a}{M - 1}; \quad i = 1, \dots, M. \quad (1.1.38)$$

Заменим интегралы $\int k(x', x_i)\varphi(x') dx'$ на интегральные суммы, построенные на той же сетке (1.1.38), и рассмотрим уравнения

$$\tilde{\varphi}_i = h \sum_{j=1}^M k(x_j, x_i) \tilde{\varphi}_j + f(x_i); \quad i = 1, \dots, M. \quad (1.1.39)$$

Таким образом, задача нахождения значений (1.1.12) сводится к решению линейной системы

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b}, \quad (1.1.40)$$

где

$$\mathbf{y} = (\tilde{\varphi}_1, \dots, \tilde{\varphi}_M)^{(T)}; \quad \mathbf{A} = \{a_{ij} = hk(x_j, x_i); i, j = 1, \dots, M\}; \quad \mathbf{b} = (f(x_1), \dots, f(x_M))^{(T)}, \quad (1.1.41)$$

а «(T)» – знак транспонирования.

Матрица \mathbf{A} системы (1.1.40), (1.1.41) имеет, как правило, большую размерность $M \gg 1$, и точные методы решения линейных систем (трудоемкие и неустойчивые) неэффективны или неприменимы, и здесь используются соответствующие итерационные алгоритмы, которые строятся следующим образом (см., например, [37, 121, 122]).

По аналогии с соотношением (1.1.35), в предположении, что норма матрицы \mathbf{A} меньше единицы, решение \mathbf{y} линейной системы (1.1.39)–(1.1.41) можно представить в виде ряда Неймана $\mathbf{y} = \sum_{s=0}^{\infty} \mathbf{A}^s \mathbf{b}$, соответствующего итерационному процессу

$$\mathbf{y}^{(s+1)} = \mathbf{A}\mathbf{y}^{(s)} + \mathbf{b}; \quad \mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{b}; \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (1.1.42)$$

На практике процесс (1.1.42) «обрывают», т. е. выбирают число итераций S и берут приближение решения

$$\mathbf{y} \approx \mathbf{y}^{(S)} = \sum_{s=0}^S \mathbf{A}^s \mathbf{b}; \quad \mathbf{y}^{(S)} = (\tilde{\varphi}_1^{(S)}, \dots, \tilde{\varphi}_M^{(S)}). \quad (1.1.43)$$

Получаем следующий **функциональный итерационный вычислительный статистический алгоритм с умножением на «большие» матрицы**.

АЛГОРИТМ 1.11 [52, 53, 120]. Решаем систему (1.1.39)–(1.1.41) итерационным методом (1.1.42), (1.1.43) и вычисляем коэффициенты (1.1.1) по формулам типа (1.1.12): $\tilde{w}_i = w_i(\mathbf{y}^{(S)})$ или $\tilde{w}_i = \tilde{\varphi}_i^{(S)}$, а затем используем приближение (В.14).

Проблемы условной оптимизация алгоритма 1.11 по методу В.1 обсуждаются далее в подразделе 2.1.1.

Отметим следующие две возможности **рандомизации** описанного в данном подразделе подхода.

Первая из них предложена в работе В. М. Иванова, О. Ю. Кульчицкого [123] и подробно изучена в диссертации [76]. По аналогии с уравнениями (1.1.39) рассмотрим соотношения

$$\hat{\varphi}(\theta_i) = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1, j \neq i}^{n-1} \frac{k(\theta_j, \theta_i) \hat{\varphi}(\theta_j)}{p_\theta(\theta_j)} + f(\theta_i); \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.1.44)$$

Здесь $\theta_1, \dots, \theta_n$ – выборочные значения случайной величины ξ , распределенной в области $X = [a, b]$ согласно плотности $p_\theta(x')$.

Соотношения (1.1.44) означают, что интеграл $\int k(x', x) \varphi(x') dx'$ в правой части уравнения (В.2) при каждом фиксированном $x = \theta_i$ приближенно вычислен методом Монте-Карло (1.1.36):

$$\int k(x', \theta_i) \varphi(x') dx' = \mathbf{E} \frac{k(\theta, \theta_i) \varphi(\theta)}{p_\theta(\theta)} \approx \frac{1}{n-1} \sum_{j=1, j \neq i}^{n-1} \frac{k(\theta_j, \theta_i) \varphi(\theta_j)}{p_\theta(\theta_j)}. \quad (1.1.45)$$

Заметим, что стохастическая сетка $\theta_1, \dots, \theta_n$ из системы (1.1.44) не является (в отличие, например, от сетки (1.1.38)) регулярной и применение приближения (В.14) с коэффициентами вида (1.1.12) является затруднительным, и потому в [76, 123] рассматривается следующий способ окончательного приближения функции $\varphi(x)$ в заданной точке x :

$$\varphi(x) \approx \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n \frac{k(\theta_s, x) \hat{\varphi}(\theta_s)}{p_\theta(\theta_s)} + f(x); \quad (1.1.46)$$

здесь $(\hat{\varphi}(\theta_1), \dots, \hat{\varphi}(\theta_N))$ – решение системы уравнений (1.1.44). Соотношение (1.1.46) означает, что для вычисления интеграла $\int k(x', x) \varphi(x') dx'$ в правой части уравнения (В.2) снова использован метод Монте-Карло вида (1.1.36) или (1.1.45).

Описанные конструкции позволяют построить следующий **функциональный вычислительный статистический алгоритм В. М. Иванова – О. Ю. Кульчицкого**.

АЛГОРИТМ 1.12 [76, 123]. Реализуя выборку $\theta_1, \dots, \theta_N$ согласно плотности $p_\theta(x)$, решаем систему (1.1.44) и полагаем

$$\tilde{\varphi}^{(M)} = (\tilde{\varphi}_1, \dots, \tilde{\varphi}_M); \quad \tilde{\varphi}_i = \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n \frac{k(\theta_s, x_i) \hat{\varphi}(\theta_s)}{p_\theta(\theta_s)} + f(x_i); \quad i = 1, \dots, M.$$

Вычисляем коэффициенты (1.1.1) по формулам (1.1.12), а затем используем приближение (В.14).

Учитывая, что метод Монте-Карло $\mathbf{E}\zeta \approx Z_n = \frac{\zeta_1 + \dots + \zeta_n}{n}$ имеет (по вероятности) характерный вид погрешности $\delta_n = |Z_n - \mathbf{E}\zeta| \approx H \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}}$ для $H = 0.80 \dots$ [26], т. е. сходится достаточно медленно, функциональный алгоритм 1.12 не является эффективным (экономичным). Более того, имеются проблемы как с обоснованием (доказательством сходимости) этого алгоритма (см., в частности, [76, 123]), так и с его реализацией (учитывая то, что число n выборочных значений $\theta_1, \dots, \theta_n$ является размерностью системы уравнений (1.1.44)).

В этом смысле более привлекательным видится более «примитивный» функциональный алгоритм 1.11, для которого, к слову, также можно предложить следующий конструктивный способ рандомизации (см., например, [52, 53, 120]).

Рассмотрим независимые одинаково распределенные случайные матрицы $\mathbf{G}^{(0)}, \mathbf{G}^{(1)}, \dots, \mathbf{G}^{(S-1)}$, математическое ожидание которых равно \mathbf{A} . Определим случайные векторы $\xi^{(s)}$, полагая

$$\xi^{(s+1)} = \mathbf{G}^{(s)} \xi^{(s)} + \mathbf{b}, \quad s = 0, 1, \dots, S-1; \quad \xi^{(0)} = \mathbf{b}. \quad (1.1.47)$$

Последнее соотношение представляет собой рандомизацию итерационного процесса (1.1.42), (1.1.43).

Так как матрично-векторные случайные величины $\mathbf{G}^{(s)}$ и $\xi^{(s)}$ независимы по построению, то $\mathbf{E}\xi^{(s)} = \mathbf{y}^{(s)}$. Описанные конструкции позволяют построить следующий *функциональный итерационный вычислительный статистический алгоритм с рандомизацией «больших» матриц.*

АЛГОРИТМ 1.13 [52, 53, 120]. Численно получаем n реализаций $\mathbf{G}_j^{(0)}, \mathbf{G}_j^{(1)}, \dots, \mathbf{G}_j^{(s-1)}$; $j = 1, \dots, n$ независимых одинаково распределенных (как \mathbf{G} , такая, что $\mathbf{E}\mathbf{G} = \mathbf{A}$) случайных матриц $\mathbf{G}^{(0)}, \mathbf{G}^{(1)}, \dots, \mathbf{G}^{(s-1)}$ и вычисляем соответствующие векторы $\xi_j^{(s)}$ по итерационным формулам (1.1.47), а затем приближенно вычисляем вектор $\mathbf{y}^{(s)}$ из (1.1.43) методом Монте-Карло согласно формуле

$$\mathbf{y}^{(s)} = \mathbf{E}\xi^{(s)} \approx \tilde{\mathbf{y}}^{(s)}(n) = \frac{\xi_1^{(s)} + \dots + \xi_n^{(s)}}{n}. \quad (1.1.48)$$

Далее вычисляем коэффициенты (1.1.1) по формулам типа (1.1.12): $\tilde{w}_i = w_i(\tilde{\mathbf{y}}^{(s)}(n))$, а затем используем окончательную аппроксимацию (B.14).

В свою очередь, одним из наиболее экономичных способов построения матрицы $\mathbf{G} = \{g_{mm'}; m, m' = 1, \dots, M\}$ такой, что $\mathbf{E}\mathbf{G} = \mathbf{A}$, является следующий (см., например, [19, 52, 53, 86, 104–106, 120]).

Случайным образом выбираем относительно небольшое число K номеров $J^{(K)} = \{J_1, \dots, J_K\}$ столбцов матрицы \mathbf{A} (конкретнее, $J^{(K)}$ – случайный вектор, состоящий из K равновероятных отличных друг от друга натуральных чисел $J_k; k = 1, \dots, K$, меньших или равных M). Для всех $m, m' = 1, \dots, M$ полагаем

$$g_{mm'} = \begin{cases} \frac{M a_{mm'}}{K} & \text{при } m' \in J^{(K)}; \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases} \quad (1.1.49)$$

Математическое ожидание такой матрицы \mathbf{G} равно \mathbf{A} . Действительно,

$$\mathbf{E}g_{mm'} = \frac{M a_{mm'}}{K} \times \mathbf{P}\{m' \in J^{(K)}\} = a_{mm'}.$$

Аналогичную рандомизацию можно применить при построении начального (для итерационного процесса (1.1.47)) вектора $\xi^{(0)} = \mathbf{b}$.

Рандомизация (1.1.47)–(1.1.49) функционального алгоритма 1.11 позволяет для случая $M \gg 1$ избавиться от умножения «больших» матриц и уменьшить трудоемкость алгоритма приближения функции $\varphi(x)$. Особо отметим, что в наших работах [52, 53] (и в разделе 2.1 данной работы) рассмотрен вопрос о согласованном выборе параметров M, S и K функционального статистического алгоритма 1.13, основанном на минимизации вычислительных затрат (т. е. применяется оптимизационный метод В.1). Возможность такого выбора определяет значительное преимущество алгоритма 1.13 перед статистическим алгоритмом 1.12.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.11. Применимость рассмотренных в этом подразделе алгоритмов 1.11–1.13 для решения практически значимых задач существенно ограничена в связи с тем обстоятельством, что в формулах вида (1.1.39), (1.1.41), (1.1.44)–(1.1.46) требуется вычислять ядро $k(x', x)$ уравнения (В.4) в заданных точках $x', x \in X$ (см. следующий под раздел 1.1.7).

1.1.7. Обзор применений функциональных ядерных вычислительных алгоритмов

На основе обзоров, представленных в работах [56, 59, 98–100], можно сформулировать следующий важный вывод.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.12. Ядра $k(x', x)$ интегральных уравнений (В.2), возникающих в важнейших приложениях, в подавляющем числе случаев имеют интегрируемые особенности (такие как разрывы второго рода и/или дельта-функции Дирака), и их прямое вычисление невозможно.

Для иллюстрации этого замечания приведем принципиальные примеры уравнений вида (В.2) из классического учебника [22] и других источников; при этом, следуя замечанию 1.9, будем обращать особое внимание на возможности применения ядерных алгоритмов 1.4, 1.5 для численного решения соответствующих прикладных задач.

Рассмотрим прикладную цепь Маркова (В.4) и соответствующее ей марковское интегральное уравнение (В.2) с функциями $f(\mathbf{x}) = \pi(\mathbf{x})$, $k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = p(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = r(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \times [1 - p^{(a)}(\mathbf{x}')]]$ для задачи переноса излучения, связанной с моделированием прямолинейного движения частиц (квантов) излучения в трехмерном пространстве, которые испытывают столкновения с частицами вещества с последующим поглощением или рассеянием.

Состояниями цепи Маркова являются точки столкновений, которые описываются координатой \mathbf{u} расположения соответствующей частицы вещества и единичным вектором \mathbf{v} направления прилета частицы излучения в точку \mathbf{u} . Обозначим через \mathbf{x} пару (\mathbf{u}, \mathbf{v}) . Переходной функцией (и ядром соответствующего марковского уравнения (В.2)) является

$$k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \frac{[1 - p^{(a)}(\mathbf{x}')] \times g(\mathbf{v}|\mathbf{x}') \times \sigma(\mathbf{u}) \exp[-\tau(\mathbf{u}', \mathbf{u}|\mathbf{v})] \times \delta^{(3)}\left(\mathbf{v} - \frac{\mathbf{u} - \mathbf{u}'}{|\mathbf{u} - \mathbf{u}'|}\right)}{|\mathbf{u} - \mathbf{u}'|^2}. \quad (1.1.50)$$

Здесь $[1 - p^{(a)}(\mathbf{x}')] -$ вероятность выживания (не поглощения) фотона в предыдущей точке \mathbf{x}' ; $g(\mathbf{v}|\mathbf{x}')$ – индикатриса рассеяния (или условная плотность нового направления \mathbf{v} при фиксированном предыдущем состоянии \mathbf{x}'); $\sigma(\mathbf{u}) \exp[-\tau(\mathbf{u}', \mathbf{u}|\mathbf{v})]$ – плотность распределения длины свободного пробега частицы (т. е. длины прямолинейного пути без столкновений), при этом $\tau(\mathbf{u}', \mathbf{u}|\mathbf{v}) = \int_0^{|\mathbf{u}-\mathbf{u}'|} \sigma(\mathbf{u}' + s\mathbf{v}) ds$, а $\sigma(\mathbf{u})$ – функция полного сечения взаимодействия. Обозначение $\delta^{(k)}(\mathbf{y})$ введено здесь для k -мерной дельта-функции:

$$\int g(\mathbf{y}) \delta^{(k)}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) d\mathbf{y} = g(\mathbf{y}_0); \quad \mathbf{y}, \mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^k.$$

Множитель $|\mathbf{u} - \mathbf{u}'|^{-2}$ из (1.1.50) является нормирующим при переходе из системы координат $(\mathbf{u} - \mathbf{u}', \mathbf{v})$ в декартову систему координат; при этом переходе в выражении для $k(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ возникает также дельта-функция $\delta^{(3)}\left(\mathbf{v} - \frac{\mathbf{u}-\mathbf{u}'}{|\mathbf{u}-\mathbf{u}'|}\right)$, отражающая факт прямолинейного движения частицы между точками \mathbf{u}' и \mathbf{u} вдоль направления \mathbf{v} . Наличие этих особенностей приводит к тому, что применение сеточных алгоритмов 1.1, 1.11–1.13 (см. формулы (1.1.6), (1.1.39), (1.1.41), (1.1.44)–

(1.1.46) и замечания 1.1, 1.11) видится (для данной математической модели) проблематичным.

При тестировании различных конструкций теории методов Монте-Карло, связанных с решением интегрального уравнения (В.2), часто рассматривают следующую существенно упрощенную версию ядра (1.1.50), соответствующую т. н. **анизотропному рассеянию**, когда частица не меняет направления движения после столкновения и вещество, в котором движется частица, однородно (т. е. $\sigma(\mathbf{u}) \equiv A = \text{const}$).

ПРИМЕР 1.1 (см. раздел 4.10 учебника [22]). Рассмотрим одномерное интегральное уравнение (В.2) с ядром и свободным членом

$$k(x', x) = qAe^{-A(x-x')}\Delta(x' \leq x), \quad f(x) = e^{-Ax}, \quad (1.1.51)$$

$$x > 0, \quad A > 0, \quad 0 < q < 1; \quad \Delta(C) = \begin{cases} 1, & \text{если условие } C \text{ выполнено,} \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Уравнение (В.2), (1.1.51) имеет точное решение

$$\varphi(x) = e^{-Ap x}, \quad x > 0; \quad p = 1 - q; \quad (1.1.52)$$

это обстоятельство существенно используется при проведении тестовых расчетов – см., в частности, раздел 1.3 данной диссертации.

Построение вычислительных статистических алгоритмов решения уравнения (В.2), (1.1.51) основано на моделировании n **траекторий одномерного процесса переноса частиц** согласно следующему алгоритму.

АЛГОРИТМ 1.14 (см., например, [22]). Для j -ой траектории ($j = 1, \dots, n$) частица стартует в точке $\xi_j^{(-1)} = 0$ и движется вдоль оси x в положительном направлении случайными пробегами $\xi_j^{(m-1)} \rightarrow \xi_j^{(m)}$; $m = 0, 1, \dots, N_j$, длина которых распределена согласно плотности

$$\tilde{p}(s) = A \exp(-As), \quad s > 0, \quad (1.1.53)$$

при этом

$$\xi_j^{(m)} = \xi_j^{(m-1)} - \frac{\ln \alpha_j^{(m)}}{A}, \quad (1.1.54)$$

где $\alpha_j^{(m)} \in U(0,1)$ – стандартные случайные числа, т. е. выборочные значения случайной величины $\alpha \in U(0,1)$, равномерно распределенной в интервале $(0,1)$. В конце пробега в точке $\xi_j^{(m)}$ происходит розыгрыш «поглощения частицы» (обрыва траектории) с вероятностью $p = 1 - q$: если $\tilde{\alpha}_j^{(m)} < p$, то происходит обрыв траектории (и текущее t полагается равным N_j); иначе моделируется новый пробег (1.1.54) и т. д.

Для моделируемой в алгоритме 1.14 прикладной цепи Маркова начальная плотность имеет вид $\pi(x) = Af(x)$, а переходная функция $p(x', x)$ совпадает с ядром $k(x', x)$, что соответствует упомянутому выше прямому моделированию. При этом все случайные веса (В.8) тождественно равны константе $1/A$. Описание примера 1.1 закончено.

Отметим, что для приближения решения рассматриваемого здесь интегрального уравнения переноса излучения (В.2), (1.1.50) весьма перспективным является использование ядерного (проекционно-сеточного) алгоритма 1.4 (это соответствует замечанию 1.9). В работе [107] алгоритм 1.4 использован для задачи переноса излучения (В.2), (1.1.50) в том варианте, когда вместо монте-карловских оценок по столкновениям (В.3) для функционалов вида (В.1) используется оценка по пробегу (см., например, раздел 6.6 учебника [22]). Для этого случая в [107] получены аналоги формул (1.1.21). Что касается численных экспериментов, то они сначала проведены для тестового уравнения из примера 1.1 и для специально полученных конкретных значений условно-оптимальных параметров. Затем эти же значения параметров использованы в [107] при реализации соответствующего аналога алгоритма 1.4 для приближения функции интенсивности прохождения излучения через плоский стохастически неоднородный слой вещества (при этом модель среды и алгоритм моделирования траекторий частиц взяты из работы [125]).

Упомянем также важные работы, в которых компьютерное моделирование прикладных цепей Маркова с переходными функциями вида (1.1.50) позволяет получить выборки для применения алгоритмов приближения нужных вероятностных

плотностей. Так, в работах [115, 116] аналог ядерного алгоритма 1.5 (без конкретизации используемого аппроксимационного базиса (В.12)) с моделированием траекторий частиц согласно переходным функциям вида (1.1.50) позволил получить выборки для приближения диффузионных характеристик частиц в электронных лавинах и углового распределения солнечного излучения, отраженного от облачного слоя, соответственно. В работах [31, 33] аналогичные выборки получены для применения проекционного алгоритма 1.7 со специальным подбором ортонормированного базиса (В.12), (1.1.10) для приближения плотности углового распределения излучения, прошедшего через слой вещества. Различные аспекты изучения вычислительных статистических алгоритмов, связанных с уравнением (В.2) с ядром (1.1.50) (включая функциональные алгоритмы), имеются в книгах и диссертациях [1–10, 12–14, 16, 17, 19, 20, 22–28, 78, 81, 82, 85, 87] и др.

В кинетической теории (см., например, [22, 32, 77, 80, 83, 89]) уравнение вида (В.2) получают при математическом моделировании однородной релаксации простого однокомпонентного газа, рассматривая т. н. алгоритм прямого статистического моделирования. Ядро такого уравнения имеет вид

$$k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \chi^{(0,t)}(t') \nu(\mathbf{V}') \exp[-\nu(\mathbf{V}')(t - t')] \times \\ \times \sum_{i,j=1,\dots,K; i \neq j} p(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) q[(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) \rightarrow (\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)] \prod_{m=1; m \neq i, j}^K \delta^{(3)}(\mathbf{v}_m - \mathbf{v}'_m); \quad (1.1.55)$$

соответствующие обозначения см. в разделе 6.14.2 книги [22].

Наличие особенностей (в частности, дельта-функций) в выражении (1.1.55) приводит, как и при рассмотрении уравнения переноса, к выводу о том, что имеет место ситуация, описанная в замечании 1.12, приводящая к тому, что сеточные алгоритмы 1.1, 1.2, 1.11–1.13 здесь неприменимы. Соображения прямого моделирования (связанные с использованием переходных функций, близких по конструкции к функции (1.1.55), для используемых прикладных цепей Маркова) приводят к идее применения ядерного (проекционно-сеточного) алгоритма 1.4. Такой подход для

задачи вида (В.2), (1.1.55) реализован в работах [111, 113, 114]; в этих работах приведены соображения об оценке погрешности для \mathbb{C} -подхода (т.е. получены соотношения вида (В.18)).

Особо выделим работу [32], в которой для кинетической задачи (В.2), (1.1.55) использован проекционный алгоритм 1.7 для приближения одномерной плотности распределения частиц по скоростям. В рассмотренном в [32] тестовом примере приближаемая плотность близка по форме к гауссовской, и поэтому хорошие результаты приближения обеспечил базис Эрмита (см., например, раздел 7.3.7 книги [126]). Различные аспекты изучения вычислительных статистических алгоритмов, связанных с уравнением (В.2) с ядром (1.1.61) (включая функциональные алгоритмы), имеются в диссертациях [77, 80, 83, 89].

В теории краевых задач математической физики (см., например, [127]) в ряде случаев имеется возможность перехода от дифференциальных постановок к интегральным уравнениям (В.2) с использованием аппарата функций Грина. Однако соответствующие ядра $k(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ снова имеют особенности (разрывы второго рода, дельта-функции; см., например, [15]), что не позволяет применять сеточные алгоритмы 1.1, 1.11–1.13 для численного решения соответствующих интегральных уравнений (В.2). Более того, более подробный анализ приводит к выводу о том, что и проекционный алгоритм 1.3, и ядерный (проекционно-сеточный) алгоритм 1.4 не могут быть реализованы из-за трудностей подсчета выборочных значений (В.8) случайных весов (В.5). Относительно эффективным оказывается здесь только алгоритм метода сопряженных блужданий – алгоритм 1.2, в котором траектории (1.1.8) представляют собой реализации процесса «блуждания по сферам». Различные аспекты изучения вычислительных статистических алгоритмов, связанных с решением краевых задач математической физики (включая как рассмотренные здесь функциональные статистические алгоритмы, так и альтернативные им – такие, например, как алгоритмы «блуждания по решетке») имеются в работах [11–17,

19, 20, 22–25, 68–71, 73, 108–110, 112]. Что касается ядерного (проекционно-сеточного) алгоритма 1.4, то целесообразность его использования для решения краевых задач требует дополнительного исследования.

В ходе работы над данным подразделом диссертации мы поставили перед собой задачу поиска новых (по сравнению, в частности, с учебником [22]) уравнений (В.2), имеющих определенное прикладное значение и включающих в себя «вычисляемые» (без особенностей) ядра $k(x', x)$, что позволяет использовать широкий спектр рассмотренных в этом разделе функциональных вычислительных статистических алгоритмов. Результаты этого поиска оказались весьма скромными. Пока найден только один пример: при решении одной обратной задачи для гиперболических уравнений [128, 129] возникает необходимость численного приближения решения одномерного уравнения Фредгольма второго рода (В.2) с ядром и свободным членом

$$k(x', x) = \frac{Y_0'(x - x')\Delta^{(-x, x)}(x')}{-2Y_0(+0)}, \quad f(x) \equiv \frac{1}{-2Y_0(+0)} \quad (1.1.56)$$

для некоторой функции $Y_0(x)$; здесь $\Delta^{(-x, x)}(y) \equiv 1$ при $y \in (-x, x)$ и $\Delta^{(-x, x)}(y) \equiv 0$ при $y \notin (-x, x)$. В работе [128] показано, что из-за наличия функции $\Delta^{(-x, x)}(x')$ в ядре (1.1.56) приходится применять функциональный алгоритм метода сопряженных блужданий (алгоритма 1.2). Что касается ядерного (проекционно-сеточного) алгоритма 1.4, то целесообразность его использования для задачи (В.2), (1.1.56) требует дополнительного исследования.

В заключение данного подраздела, следуя замечанию 1.9, особо выделим работу [130] (см. также диссертации [27, 28]), в которой ядерный (проекционно-сеточный) алгоритм 1.4 эффективно используется на шагах итерационного процесса

$$\phi^{(s)}(x) = \int \hat{k}[x', x, \phi^{(s-1)}(x')] \phi(x') dx' + \hat{f}(x); \quad s = 1, \dots, S \quad (1.1.57)$$

для приближения решения нелинейного уравнения вида

$$\phi(x) = \int \hat{k}[x', x, \phi(x')] \phi(x') dx' + \hat{f}(x).$$

В этой работе главное внимание уделено рассуждениям о возможных решениях задачи условной оптимизации (в рамках \mathbb{C} -подхода к построению верхней оценки погрешности типа (В.18) для итерационного метода (1.1.57)). Здесь ситуация усложнена тем обстоятельством, что в методе В.1 помимо параметров M (число узлов сетки (1.1.4)) и n (число траекторий (В.6)) выбирается еще и параметр S (число итераций (1.1.57)).

В работе [130] также проведены расчеты с выбором конкретных значений условно-оптимальных параметров для следующего нелинейного аналога одномерного тестового уравнения (В.2), (1.1.51) из примера 1.1:

$$\phi(x) = q \int_0^x \phi(x') \phi(x) \exp \left[- \int_{x'}^x \phi(y) dy \right] dx' + \exp \left[- \int_0^x \phi(y) dy \right] \quad (1.1.58)$$

с точным решением

$$\phi(x) = \exp \left[-(1-q) \int_0^x \phi(y) dy \right] = \frac{1}{(1-q)x + 1};$$

см., например, раздел 1.10.3 книги [19]. Далее в работе [130] полученные условно-оптимальные значения типа (1.1.21) для модельной задачи (1.1.58) были использованы для численного решения задачи о теплопередаче между параллельными пластинами.

1.2. Тестирование и сравнительный анализ функциональных алгоритмов численного решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода [56, 57, 59 – 61, 63, 64, 67]

1.2.1. Использование тестового уравнения

Продолжим рассмотрение задачи приближения решения $\phi(x)$ уравнения (В.2) на ограниченном множестве $X \subset \mathbb{R}^d$. Приведенный подразделе 1.1.7 обзор прикладных задач в целом подтверждает как основное замечание 1.9 данной главы и работ [98–102] (о целесообразности использования ядерного алгоритма 1.4 для чис-

ленного решения прикладных задач), так и частные замечания 1.1–1.5, 1.7 (о преимуществах и недостатках сеточных, проекционных и проекционно-сеточных алгоритмов).

Нам удалось осуществить более детальный анализ упомянутых здесь замечаний 1.1–1.5, 1.7, 1.9 на основе многочисленных компьютерных экспериментов, связанных с приближением решения $\varphi(x)$ представленного выше в примере 1.1 широко известного одномерного тестового уравнения

$$\varphi(x) = q \int_0^x A e^{-A(x-x')} \varphi(x') dx' + e^{-Ax}; \quad x \geq 0; \quad A > 0, 0 < q < 1 \quad (1.2.1)$$

с ядром и свободным членом (1.1.51) и точным решением

$$\varphi(x) = e^{-Ap x}, \quad x > 0; \quad p = 1 - q; \quad (1.2.2)$$

(см. также формулу (1.1.52)).

Для случая $A = 1$ уравнение (1.2.1) подробно описано в разделе 4.10 учебника [22]. Уравнения (1.2.1) с параметрами $A > 1$ (конкретнее, $A = 5$ и $A = 50$) использовались в теоретических рассуждениях и расчетах в диссертационных работах [27, 28] и сопутствующих статьях. Очевидно, что для достаточно больших A функция $\varphi(x)$ имеет достаточно большое абсолютное значение производной в окрестности точки $x = 0$. Это обстоятельство использовалось в [27, 28] при изучении зависимости эффективности того или иного функционального алгоритма от величины градиента решения.

Точное решение (1.2.2) приближалось на отрезке $[a, b]; 0 \leq a < b < +\infty$. Для алгоритмов 1.1, 1.2, 1.4 на этом отрезке вводилась равномерная сетка

$$x_i = a + (i - 1)h; \quad h = \frac{(b - a)}{M - 1}; \quad i = 1, \dots, M. \quad (1.2.3)$$

При реализации алгоритмов 1.1, 1.3 и 1.4 осуществлялось моделирование траекторий (В.6) прикладной цепи Маркова (В.4) согласно представленному выше (см. пример 1.1) алгоритму 1.14.

Что касается алгоритма 1.2, то моделирование траекторий (1.1.8), соответствующих прямому моделированию, происходило следующим образом. При реализации оценок метода сопряженных блужданий $\tilde{\varphi}^{(i)}(n)$ частицы стартовали в точках x_i из (1.2.3) и двигались в отрицательном направлении случайными пробегами с длиной, распределенной согласно плотности (1.1.53); траектория заканчивалась поглощением (с вероятностью $p = 1 - q$ в каждой точке столкновения) или вылетом в точке $x = 0$.

Опишем основные результаты проведенных расчетов.

1.2.2. Использование условно-оптимальных параметров из работ [27, 28]

Первым делом отметим, что нам удалось подтвердить выводы работ [27, 28], касающиеся сравнения локального алгоритма метода зависимых испытаний (алгоритм 1.1), метода сопряженных блужданий (алгоритм 1.2) и ядерного алгоритма 1.4 для $a = 0$, $b = 1$ и для упомянутых выше случаев $A = 5$ и $A = 50$.

Особо отметим, что в работах [27, 28] для алгоритмов 1.1, 1.2, 1.4 при выбранных параметрах a, b, A удалось получить значения $M_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ и $n_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ условно-оптимальных параметров M (число узлов сетки (1.2.3)) и n (количество моделируемых траекторий используемой прикладной цепи Маркова) для \mathbb{C} - и \mathbb{L}_2 -подходов к оценке погрешности функциональных алгоритмов (В.17), (В.18) (см., в частности, формулы (1.1.21)) и для мульти-линейного восполнения (1.1.14) при фиксированном уровне погрешности $L = 0,003$ (\mathbb{L}_2 -подход) и $L = 0,03$ (\mathbb{C} -подход). Эффективность того или иного алгоритма определялась малостью времени счета.

АЛГОРИТМ	$M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L)$	$n_{opt}^{(\mathbb{C})}(L)$	время (сек.)
Локальный алгоритм (алгоритм 1.1)	12	367	0,0001
метод сопряженных блужданий (алг-м 1.2)	12	3552	0,018
ядерный алгоритм (алгоритм 1.4)	14	61725	0,054

Таблица 1.1. Сравнение алгоритмов 1.1, 1.2, 1.4 для $a = 0$; $b = 1$; $p = 0,5$; $A = 5$, $L = 0,03$

и $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X)$.

Наши расчеты подтвердили оптимальность выбранных параметров (отличие параметров M и n от оптимальных приводило либо к превышению уровня погрешности L либо к заметному увеличению времени счета), а также то обстоятельство, что ядерный алгоритм 1.4 уступает по эффективности не только локальному алгоритму метода зависимых испытаний (алгоритму 1.1), но и алгоритму метода сопряженных блужданий (алгоритму 1.2). В качестве примера здесь приводятся результаты расчетов для $a = 0, b = 1, p = 0,5, A = 5$ и $\mathbb{W}(X) = \mathbb{C}(X)$ – см. таблицу 1.1.

Особо отметим, что в описанных в этом подразделе сравнительных расчетах (как и в численных экспериментах из работ [27, 28]) не рассматривался проекционный алгоритм 1.3. Это связано, в том числе, с указанным в замечании 1.4 отсутствием практических рекомендаций по выбору условно-оптимальных параметров $M_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ и $n_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ для этого алгоритма.

1.2.3. Специальная методика выбора числа траекторий в сравнительных расчетах

Учитывая следующие обстоятельства:

- *варьирование параметра A не дает особого различия в соотношениях эффективностей функциональных статистических алгоритмов 1.1–1.4;*
- *для больших A (например, для $A = 50$) решение $\varphi(x)$ уравнения (1.2.1) практически равно нулю уже для относительно небольших x ;*
- *для малых A (например, для $A = 1$) возникают численные артефакты вблизи точки $x = 0$, т. к. соответствующая траектория (В.6) прикладной цепи Маркова (В.4) достаточно быстро «уходит» от нуля (средняя длина пробега при реализации перехода (1.1.53) моделируемой частицы равна $1/A$);*
- *проекционный алгоритм 1.3 не исследовался для уравнения (1.2.1) в работах [27, 28], зато хорошо изучен нами в работе [63] для параметров*

$$a = 2, b = 6, p = 0,5 \text{ и } A = 1; \tag{1.2.4}$$

см. также подраздел 1.2.4 данной работы;

– для проекционного алгоритма 1.3 не получены значения условно-оптимальных параметров $M_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ и $n_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$, даже для простого одномерного уравнения (1.2.1);

– для более наглядного представления вычислительных эффектов следует брать не слишком большие (и не обязательно оптимальные) значения параметров n и M ,

основные сравнения алгоритмов 1.1–1.4 были сделаны нами для параметров (1.2.4). Число узлов сетки (1.2.3) для алгоритмов 1.1, 1.2, 1.4 выбиралось равным $M = 9$, а число ортонормированных базисных функций (В.12), удовлетворяющих условию (1.1.10), для проекционного алгоритма 1.3 равнялось $M = 5$ или $M = 10$.

С учетом сформулированных выше обстоятельств возникла определенная проблема объективного сравнения алгоритмов 1.1–1.4. Здесь был реализован следующий подход.

Выбирался уровень допустимой погрешности (конкретнее, $L = 0,003$). Было замечено, что в связи с малым изменением точного решения (1.2.2) при выбранных параметрах (1.2.4) детерминированные компоненты погрешностей $\delta_{det}^{(\mathbb{B})}(M)$ и компоненты смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$ (для алгоритма 1.4) для $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X)$ (см. соотношение (1.1.19)) для всех алгоритмов 1.1–1.4 значительно меньше заданного уровня погрешности L (т. е. основной вклад в погрешность дают стохастические компоненты $\delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n)$).

Исключение здесь составил проекционный алгоритм 1.3 с эрмитовым базисом (см. далее формулы (1.2.11) и весь подраздел 1.2.4). Оказалось, что даже выбор $M = 10$ базисных функций не обеспечивает неравенства

$$\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) < L = 0,003. \quad (1.2.5)$$

Напротив, для базиса Лагерра (см. далее формулы (1.2.12)) число базисных функций $M = 10$ избыточно для выполнения неравенства (1.2.5) (вполне достаточно взять $M = 5$) – см. далее подразделы 1.2.4, 1.2.6.

Что касается выбора числа n траекторий (В.6) (или (1.1.8)), то он происходил из следующих соображений. При численном приближении математических ожиданий $\mathbf{E}\zeta$ методом Монте-Карло $\mathbf{E}\zeta \approx Z_n = \frac{\zeta_1 + \dots + \zeta_n}{n}$ (здесь ζ_1, \dots, ζ_n – реализуемые на ЭВМ выборочные значения) погрешность вычислений $\delta(n)$ определяется формулой

$$\delta(n) = |Z_n - \mathbf{E}\zeta| \approx \Delta(n; H; \mathbf{D}\zeta) = H \frac{\sqrt{\mathbf{D}\zeta}}{\sqrt{n}}, \quad (1.2.6)$$

где $\mathbf{D}\zeta$ – дисперсия случайной величины ζ , а $H = \text{const}$ (см., например, раздел 3.13 учебника [22]). Проведенные аккуратные тестовые вычисления дали значение $H \approx 0,80 \dots$ – точно устанавливаются только две первые десятичные цифры мантиссы. Кроме того, известно «правило трех сигма», утверждающее, что для достаточно большого n с высокой вероятностью (порядка 0,997) выполнено неравенство $\delta(n) \leq \Delta(n; 3; \mathbf{D}\zeta)$.

Мы использовали эти соображения при изучении стохастических компонент $\delta_{stoch}^{(C)}(M, n)$ рассматриваемых функциональных вычислительных статистических алгоритмов 1.1–1.4. Для каждого алгоритма проводились предварительные вычисления. С достаточно большой точностью (такую точность давало для всех алгоритмов $n = 10^8$) вычислялась максимальная дисперсия $[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}$ (максимум получался для $x \approx a = 2$). Например, для ядерного алгоритма 1.4 с параметрами (1.2.4) было получено $[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max} = 0,778521$.

Далее вычислялись два значения

$$N_1 = 0,64 \times \frac{[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}}{L^2} \quad \text{и} \quad N_2 = 9 \times \frac{[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}}{L^2}; \quad (1.2.7)$$

здесь $L = 0,003$ (например, для ядерного алгоритма 1.4 с параметрами (1.2.4) $N_1 = 55\,000$ и $N_2 = 780\,000$). В полученном отрезке $[N_1, N_2]$ с определенным шагом перебирались значения n и, с учетом точного решения (1.2.2), контролировалось выполнение неравенства

$$\delta^{(C)}(M, n) \approx \delta_{stoch}^{(C)}(M, n) < L = 0,003. \quad (1.2.8)$$

Далее выбиралось такое минимальное N_0 , для которого неравенство (1.2.8) выполнено для всех $n \in [N_0, N_2]$. Значение $n = N_0$ считалось числом траекторий, обеспечивающим заданный уровень погрешности $L = 0,003$ исследуемого функционального статистического алгоритма. Это значение бралось для фиксации времени работы алгоритма. Пример определения величины $n = N_0$ для ядерного алгоритма 1.4 с параметрами (1.2.4) проиллюстрирован на рис. 1.1.



Рис. 1.1. Пример определения величины $n = N_0$ для ядерного алгоритма 1.4 (здесь $N_0 = 276\,000$).

1.2.4. О выборе ортонормированного базиса в функциональном проекционном алгоритме

Наши расчеты позволили проиллюстрировать замечание 1.4, в котором речь идет, в частности, о существенной зависимости расчетов с использованием проекционных алгоритмов 1.3 и 1.7 от выбираемого ортонормированного базиса (В.12), удовлетворяющего условиям (1.1.10).

В нашей работе [63] (см. также [124]) речь шла об устойчивости выбираемого ортонормированного базиса (В.12), (1.1.10). Показателем устойчивости является *константа Лебега*

$$K^{(\Xi^{(M)})} = \sup_{x \in X} \sum_{i=1}^M |\chi^{(i)}(x)| \quad (1.2.9)$$

(см., например, раздел 3.1 книги [131]), которая используется при построении оценок сверху для стохастических компонент погрешности для \mathbb{C} -подхода (В.18). Так, записав аналог неравенства (1.1.19) для проекционных алгоритмов 1.3 и 1.7 (здесь компонент смещения не будет), получаем и оцениваем сверху стохастическую компоненту погрешности

$$\begin{aligned} \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) &= \|L^{(M)}\varphi - L^{(M,n)}\tilde{\varphi}\|_{\mathbb{C}(X)} = \sup_{x \in X} \left| \sum_{i=1}^M w^{(i)}\chi^{(i)}(x) - \sum_{i=1}^M \tilde{w}^{(i)}(n)\chi^{(i)}(x) \right| \leq \\ &\leq K^{(\Xi^{(M)})} \max_{i=1, \dots, M} |w^{(i)} - \tilde{w}^{(i)}(n)|. \end{aligned} \quad (1.2.10)$$

Для известных ортонормированных базисов (В.12), удовлетворяющих условиям (1.1.10), константа существенно возрастает с ростом M , что может существенно сказаться на свойствах приближений (В.14) из алгоритмов 1.3 и 1.7.

В нашей работе [63] (см. также [124]) по аналогии с работой [32] в качестве базиса (В.12) мы рассмотрели, как оказалось, «неудачный» для приближения функции (1.2.2) начальный отрезок длины M ортонормированной системы *функций Эрмита* (см., например, раздел 7.3.7 книги [126]):

$$\chi^{(i)}(x) = A^{(i-1)} H^{(i-1)}(x) e^{-\frac{x^2}{2}}; \quad i = 1, \dots, M, \quad (1.2.11)$$

где $H^{(m)}(x)$ – многочлен Эрмита, определяемый соотношением

$$H^{(m)}(x) = (-1)^m e^{x^2} \frac{d^m}{dx^m} e^{-x^2},$$

а $A^{(m)} = 1/\sqrt{2^m m! \sqrt{\pi}}$ – соответствующие нормирующие константы. Для проведения расчетов полезной оказывается рекуррентная формула

$$H^{(m+1)}(x) = 2x H^{(m)}(x) - 2m H^{(m-1)}(x), \quad m \geq 1; \quad H^{(0)}(x) \equiv 1, \quad H^{(1)}(x) = 2x.$$

Из работы [32] и приведенных здесь рассуждений об устойчивости проекционных алгоритмов 1.3 и 1.7 следует, что достаточно использовать относительно небольшое число функций (1.2.11). Конкретнее, в расчетах использовались $M \leq 10$; при этом известен конкретный вид многочленов Эрмита:

$$\begin{aligned}
H^{(0)}(x) &\equiv 1, & H^{(1)}(x) &= 2x, & H^{(2)}(x) &= 4x^2 - 2, & H^{(3)}(x) &= 8x^3 - 12x, \\
H^{(4)}(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, & H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x, \\
H^{(6)}(x) &= 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120, & H^{(7)}(x) &= 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x, \\
H^{(8)}(x) &= 256x^8 - 3584x^6 + 13440x^4 - 13440x^2 + 1680, \\
H^{(9)}(x) &= 512x^9 - 9216x^7 + 48384x^5 - 80640x^3 + 30240x, \\
H^{(10)}(x) &= 1024x^{10} - 23040x^8 + 161280x^6 - 403200x^4 + 302400x^2 - 30240.
\end{aligned}$$

Применение алгоритма 1.3 с базисом (1.2.11) для приближения точного решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) дало неудовлетворительные результаты. Обнаружилось, в частности, что приближение $L^{(M,n)}\tilde{\varphi}(x)$ из (В.14) не воспроизводит гладкости приближаемой функции $\varphi(x)$ даже при достаточно больших M – см. рис. 1.2.

Алгоритм 1.3 с базисом (1.2.11) был и вовсе исключен из сравнительных вычислений, описанных далее в подразделе 1.2.6, по методологии из подраздела 1.2.3, т. к. не удавалось достичь выполнения неравенств (1.2.5), (1.2.8) для приемлемых значений параметров M, n .

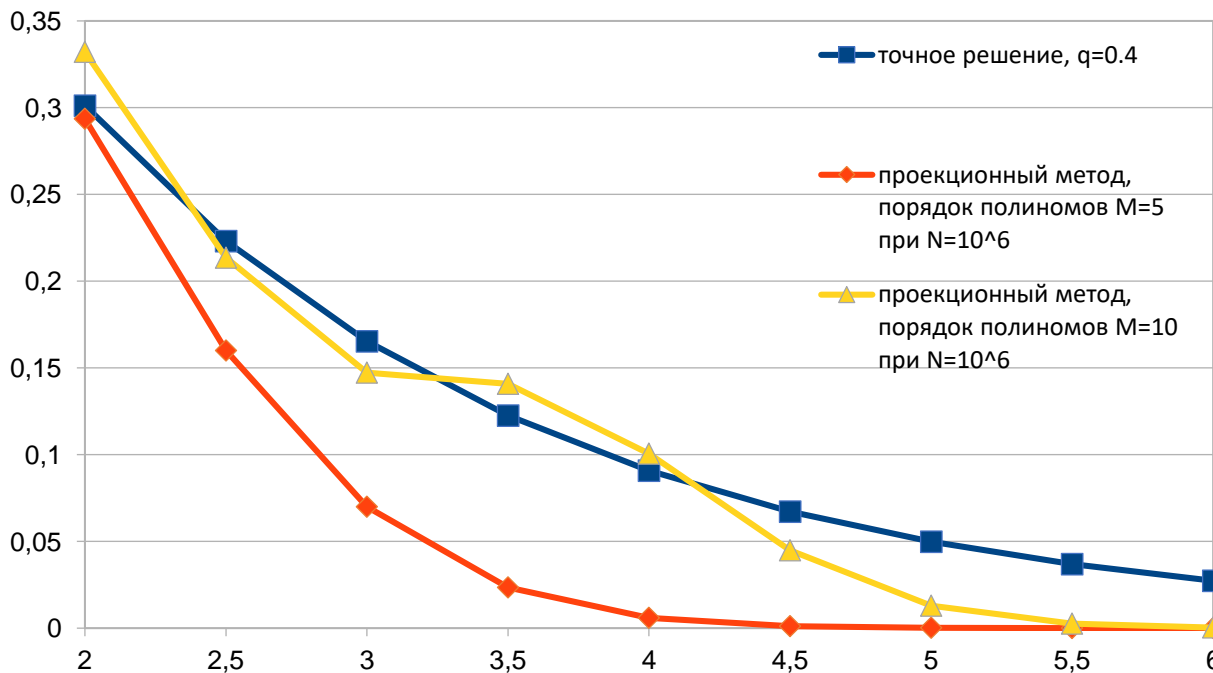


Рис. 1.2 [63]. Результаты применения алгоритма 1.3 с базисом Эрмита (1.2.11) для приближения решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) для $q = 0,4$.

Положение резко меняется, когда вместо функций Эрмита (1.2.11) используется начальный отрезок длины M ортонормированной системы **функций Лагерра** (см., например, раздел 7.3.7 книги [126]):

$$\chi^{(i)}(x) = L^{(i-1)}(x) e^{-\frac{x}{2}}; \quad i = 1, \dots, M, \quad (1.2.12)$$

где $L^{(m)}(x)$ – многочлен Лагерра, определяемый соотношением

$$L^{(m)}(x) = \frac{e^x}{m!} \times \frac{d^m}{dx^m} (x^m \cdot e^{-x}).$$

Для проведения расчетов полезной оказывается рекуррентная формула

$$L^{(m+1)}(x) = \frac{1}{m+1} [(2m+1-x)L^{(m)}(x) - mL^{(m-1)}(x)], \quad m \geq 1; \quad L^{(0)}(x) \equiv 1, \quad L^{(1)}(x) = 1-x.$$

В расчетах использовалось небольшое количество (конкретно – $M = 10$) функций (1.2.12), которые можно представить в явном виде

$$L^{(0)}(x) \equiv 1, \quad L^{(1)}(x) = -x + 1, \quad L^{(2)}(x) = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2),$$

$$L^{(3)}(x) = \frac{1}{6}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6), \quad L^{(4)}(x) = \frac{1}{24}(x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24),$$

$$L^{(5)}(x) = \frac{1}{120}(-x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120),$$

$$L^{(6)}(x) = \frac{1}{720}(x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720),$$

$$L^{(7)}(x) = \frac{1}{5040}(-x^7 + 49x^6 - 882x^5 + 7350x^4 - 29400x^3 + 52920x^2 - 35280x + 5040),$$

$$L^{(8)}(x) = \frac{1}{40320}(x^8 - 64x^7 + 1568x^6 - 18816x^5 + 117600x^4 - \\ - 376320x^3 + 564480x^2 - 322560x + 40320)$$

$$L^{(9)}(x) = \frac{1}{362880}(-x^9 + 81x^8 - 2592x^7 + 42336x^6 - 381024x^5 + \\ + 1905120x^4 - 5080320x^3 + 6531840x^2 - 3265920x + 362880),$$

$$L^{(10)}(x) = \frac{1}{3628800}(x^{10} - 100x^9 + 4050x^8 - 86400x^7 + 1058400x^6 - \\ - 7620480x^5 + 31752000x^4 - 72576000x^3 + 81648000x^2 - 36288000x + 3628800).$$

Аналог ситуации, приведенной на рисунке 1.2, для случая применения алгоритма 1.3 с базисом (1.2.12) показан на рисунке 1.3. Удача выбора функций Лагерра (1.2.12) (по сравнению с функциями Эрмита (1.2.11)) состоит здесь в том, что уже первая функция $\chi^{(1)}(x)$ из (1.2.12) достаточно неплохо приближает экспоненту (1.2.2) (чего никак нельзя сказать о начальных функциях из (1.2.11)).

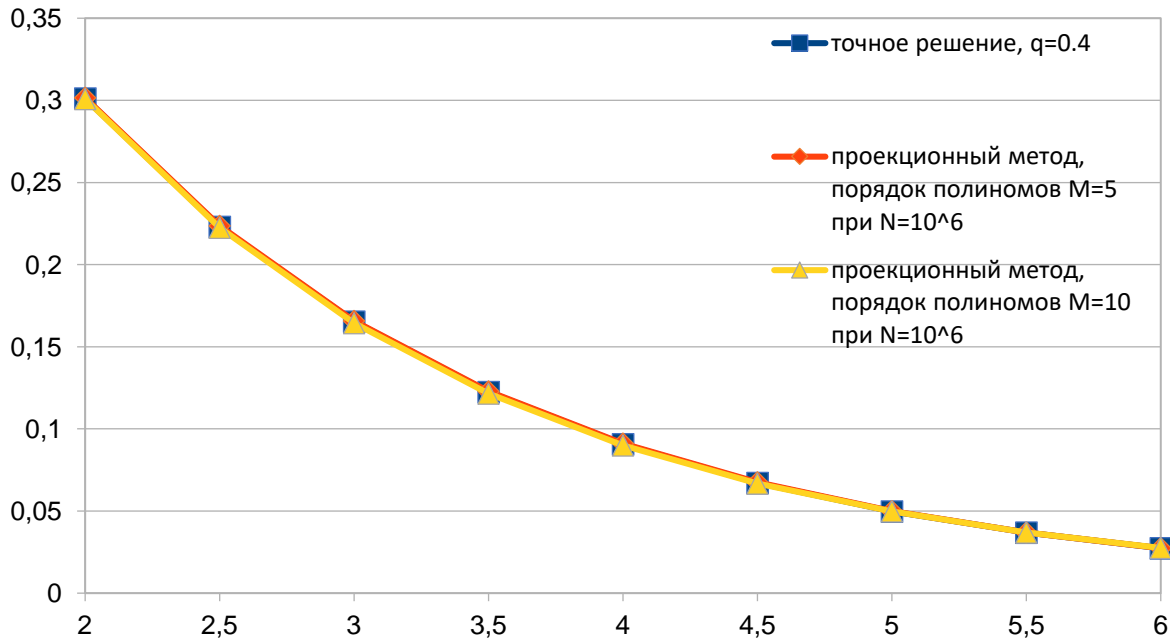


Рис. 1.3. Результаты применения алгоритма 1.3 с базисом Лагерра (1.2.12) для приближения решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) для $q = 0,4$.

С помощью многочисленных тестовых экспериментов по приближению точного решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) была обнаружена более существенная (по сравнению с сеточными алгоритмами 1.1, 1.2 и ядерным алгоритмом 1.4) зависимость эффективности проекционного алгоритма 1.3 от вероятности выживания q . Дело здесь в том, что вид ядра (1.1.56) уравнения (1.2.1) и ограниченность отрезка $[a, b]$ (у нас в расчетах $[a, b] = [2, 6]$) для алгоритмов 1.1, 1.2, 1.4 моделирование траекторий по алгоритму 1.14 (и его аналогу для метода сопряженных блужданий) позволяет прерывать траектории не только по факту поглощения частицы (с вероятностью $p = 1 - q$), но и по выходу траектории за точку $x = b$ (для метода сопряженных блужданий – за точку $x = 0$). Для проекционного алгоритма 1.3 подсчет

приближений коэффициентов $\tilde{w}^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^{N_j} Q_j^{(m)} \chi^{(i)}(\xi_j^{(m)})$ требует моделирования траекторий (В.6) по алгоритму 1.14 вплоть до поглощения частицы, и для q , близких к единице, эти траектории становятся «длинными», а алгоритм 1.3 – менее эффективным. Иллюстрацией этого обстоятельства служит таблица 1.2.

В этой таблице

$$\Delta_1 = \Delta(n; 0,80; [\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}), \quad \Delta_2 = \Delta(n; 3; [\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}); \quad (1.2.13)$$

см. формулу (1.2.6).

q	n	M	максимальная погрешность	$[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}$	Δ_1	Δ_2	время, сек
0,1	10^4	5	0,00387866	0,23288	0,00386061	0,0144773	0,008
		10	0,0050515	0,234321	0,00387254	0,014522	0,016
	10^6	5	0,00075747	0,234699	0,00038757	0,00145337	0,696
		10	0,00028279	0,234267	0,00038721	0,00145203	1,593
0,4	10^4	5	0,00142261	0,413834	0,00514639	0,019299	0,011
		10	0,00554354	0,407086	0,00510426	0,019141	0,024
	10^6	5	0,00053043	0,412495	0,00051381	0,00192677	0,908
		10	0,00097884	0,41106	0,00051291	0,00192342	2,176
0,7	10^4	5	0,00246162	0,878905	0,00749999	0,028125	0,018
		10	0,00340568	0,871413	0,00746796	0,0280049	0,046
	10^6	5	0,00075667	0,878253	0,00074972	0,00281146	1,551
		10	0,00105157	0,876606	0,00074902	0,00280882	3,903

Таблица 1.2. Результаты применения алгоритма 1.3 с базисом Лагерра (1.2.12) для приближения решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) для различных значений вероятности выживания q .

1.2.5. Использование модификаций ядерных алгоритмов

Вернемся теперь к основному замечанию 1.9 данной главы о перспективности использования ядерных алгоритмов 1.4, 1.5.

Установленная нами аналогия алгоритмов 1.4 и 1.5 (см. замечание 1.6) позволила нам предположить, что для развития теории проекционно-сеточного алгоритма 1.4 могут пригодиться соображения теории оптимизации ядерных оценок вероятностных плотностей (см. замечание 1.7).

С помощью тестовых расчетов для одномерного уравнения (1.2.1) мы попытались понять, насколько целесообразным может быть замена в ядерном алгоритме 1.4 кусочно-постоянных функций

$$\kappa^{(x_i)}(y) = \begin{cases} \frac{1}{h}, & \text{если } x_i - \frac{h}{2} \leq y \leq x_i + \frac{h}{2}, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1.2.14)$$

соответствующих методу полигона частот на сетке (1.2.3) (здесь используется одномерный вариант функции (1.1.28) и соотношения (1.1.34)) на одномерный вариант функций Епанечникова (1.1.33)

$$\kappa^{(x_i)}(y) = \begin{cases} \frac{3}{4\sqrt{5}h} \left[1 - \frac{(x_i - y)^2}{5h^2} \right], & \text{если } x_i - \sqrt{5}h \leq y \leq x_i + \sqrt{5}h, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1.2.15)$$

получающихся при специальной \mathbb{L}_2 -оптимизации ядерных оценок плотностей, описанной в подразделе 1.1.4 (см. также классическую работу [103]). В формуле (1.2.15) использована только оптимальная форма функции Епанечникова (1.1.33), а «коэффициент размытости» $\hat{h}(n)$ отличен от оптимального (он, как и в соотношении (1.1.34), равен шагу сетки (1.2.3): $\hat{h}(n) = h$).

Один из результатов многочисленных экспериментов приведен в таблицах 1.3, 1.4 (величины Δ_1 и Δ_2 определяются соотношениями (1.2.6), (1.2.13)). Этот результат показывает, что использование функций (1.2.15) вместо (1.2.14) не повышает эффективности ядерного алгоритма 1.4.

В подтверждение рассуждений из подраздела 1.1.3 отметим, что даже для рассматриваемого здесь простого тестового уравнения (1.2.1) выбор «коэффициента размытости» $\hat{h}(n)$, отличного от h , и использование версий ядерных функций, отличных от (1.2.14) (например, функций (1.2.15)) существенно усложняет реализацию алгоритма 1.4 и не приводит к повышению его эффективности (см., например, таблицы 1.3, 1.4). Кроме того, усложняется построение верхних границ для компонент смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$ из соотношений (1.1.19), (1.1.20) для $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X) \vee \mathbb{L}_2(X)$ (подробности см. в подразделе 1.3.4 данной работы).

n	максимальная погрешность	$[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}$	Δ_1	Δ_2	время, сек.
40000	0,00853873	1,87798	0,00548157	0,0205559	0,037
61725	0,0114503	1,84977	0,00437944	0,0164229	0,054
80000	0,00476063	1,85918	0,00385661	0,0144623	0,072

Таблица 1.3. Результаты применения алгоритма 1.4 с ядерными функциями (1.2.14)

для приближения решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) при $A = 5; q = 0,5$.

n	максимальная погрешность	$[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}$	Δ_1	Δ_2	время, сек.
40000	0,0107805	0,326387	0,00228521	0,00856954	0,061
61725	0,0125196	0,325551	0,00183725	0,0068897	0,071
80000	0,0124977	0,323986	0,00160993	0,00603725	0,092

Таблица 1.4. Результаты применения алгоритма 1.4 с ядерными функциями (1.2.15)

для приближения решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) при $A = 5; q = 0,5$.

1.2.6. Сравнение функциональных алгоритмов решения тестового уравнения

Мы описали здесь лишь малую часть результатов многочисленных экспериментов по применению вариаций локального алгоритма метода зависимых испытаний (см. алгоритм 1.1), метода сопряженных блужданий (см. алгоритм 1.2), проекционного метода (см. алгоритм 1.3) и ядерного (проекционно-сеточного) метода (см. алгоритм 1.4) для приближения решения (1.2.2) одномерного тестового интегрального уравнения (1.2.1) для различных параметров n, M, A, q, a, b , ортонормированных базисов (В.12) (для алгоритма 1.3), ядерных функций $\kappa^{(x)}(y)$ (для алгоритма 1.4).

В связи с основным замечанием 1.9 первой главы данной диссертации особый интерес представлял вопрос о том, насколько эффективен для этой задачи ядерный (проекционно-сеточный) алгоритм 1.4 по сравнению с остальными перечисленными алгоритмами. Сравнение алгоритмов 1.1–1.4 осуществлялась по специальной методике, подробно описанной нами в подразделе 1.2.3.

Один из характерных результатов сравнения применения алгоритмов 1.1–1.4 для приближения решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) с параметрами (1.2.4) приведен

в таблице 1.5 (здесь величины N_1 и N_2 определяются соотношениями (1.2.7), а величины Δ_1 и Δ_2 – соотношениями (1.2.6), (1.2.13)).

Таблица 1.5 констатирует то, что для рассматриваемой здесь задачи приближения решения (1.2.2) одномерного уравнения (1.2.1) ядерный алгоритм 1.4 оказывается далеко не лучшим по эффективности. Он выигрывает только у проекционного алгоритма 1.3 в случае, когда отрезок длины M ортонормированного базиса (В.12), (1.1.10) выбран неудачно (например, взяты функции Эрмита (1.2.11) вместо функций Лагерра (1.2.12) – см. подраздел 1.2.4) или избыточно ($M = 10$ вместо $M = 5$ – см. таблицу 1.5).

Алгоритм	N_1	N_2	$n = N_0$	максимальная погрешность	$[D\zeta(x)]_{max}$	Δ_1	Δ_2	время, сек
1.1	$3 \cdot 10^3$	$47 \cdot 10^3$	$8 \cdot 10^3$	0,002923	0,046037	0,0019	0,0072	0,028
1.2	$10 \cdot 10^3$	$150 \cdot 10^3$	$41 \cdot 10^3$	0,002623	0,149148	0,0015	0,0057	0,152
1.3 ($M=10$)	$36 \cdot 10^3$	$52 \cdot 10^3$	$18,4 \cdot 10^3$	0,002878	0,520075	0,0013	0,0050	0,499
1.3 ($M=5$)	$36 \cdot 10^3$	$520 \cdot 10^3$	$118 \cdot 10^3$	0,002961	0,522008	0,0017	0,0063	0,161
1.4	$55 \cdot 10^3$	$780 \cdot 10^3$	$276 \cdot 10^3$	0,002908	0,774749	0,0013	0,0050	0,246

Таблица 1.5. Результаты применения функциональных статистических алгоритмов 1.1–1.4 для приближения решения (1.2.2) уравнения (1.2.1) с параметрами (1.2.4).

Этот результат отнюдь не отменяет замечаний из разделов 1.1 и 1.2 данной диссертации о преимуществах использования ядерных алгоритмов 1.4, 1.5 для решения практически значимых задач. Эти преимущества связаны, в том числе, с определенными недостатками применения алгоритмов 1.1–1.3 для решения многомерных прикладных задач. Так, алгоритм 1.1 часто неприменим из-за невозможности прямого подсчета значений ядра $k(x', x)$ в заданных точках; кроме того, для оценки погрешности этого алгоритма требуется повышенная гладкость этого ядра по переменной x (а это на практике далеко не всегда выполнено) – см. замечания 1.1, 1.12. Алгоритм 1.2 часто неэффективен из-за необходимости моделирования отдельного набора траекторий (1.1.8) для каждого узла сетки (1.1.4) – см. замечание 1.2. Алгоритм 1.3 весьма чувствителен к выбору ортонормированного базиса (В.12)

(это проявилось даже для рассматриваемой в этом разделе одномерной тестовой задачи (1.2.1)); имеются трудности с оптимизацией этого алгоритма – см. замечания 1.3, 1.4. С другой стороны, имеются определенные успехи применения ядерных алгоритмов 1.4, 1.5 при решении практически значимых задач, описанные в разделе 1.2 данной диссертации.

Таким образом, проигрыш в эффективности ядерного алгоритма 1.4, представленный в таблице 1.5, не показателен (с точки зрения практического применения функциональных вычислительных статистических алгоритмов) и определяется «простотой» одномерной задачи (1.2.1).

1.3. Условная оптимизация функционального ядерного вычислительного алгоритма приближения вероятностных плотностей

[55, 57, 59, 60, 62, 64 – 67]

1.3.1. Задача оперативной обработки больших данных

Не умаляя важности практического применения функционального проекционно-сеточного вычислительного статистического алгоритма 1.4 (примеры такого применения описаны в подразделе 1.1.7 данной диссертации), особо выделим перспективность использования основанного на теории аппроксимации функций функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 для решения практически значимых задач.

В связи с замечаниями 1.6, 1.8 можно предложить конструктивные подходы решения следующей *задачи оперативной обработки больших данных*.

ЗАДАЧА 1.1. По заданной выборке $\{\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_{\hat{n}}\}$ построить численное приближение неизвестной плотности $\varphi(\boldsymbol{x}) = f_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{x})$; $\boldsymbol{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^d$ случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\eta} \in X \subseteq \mathbb{R}^d$ с заданной точностью $L > 0$ и с наименьшими вычислительными затратами.

Сформулированная задача может быть весьма актуальной при оперативной обработке больших данных (т. е. при $\hat{n} \gg 1$). Использование всех имеющихся данных может оказаться малоэффективным и даже вредным (см., например, работы [132, 133]).

Наше предложение состоит в том, чтобы, используя относительно небольшую часть $\{\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_n; n \ll \hat{n}\}$ исходных данных, реализовать алгоритм 1.5 с условно-оптимальными параметрами $M_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$, $n = n_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ для выбранного подхода к оценке погрешности (В.17) или (В.18) (проще всего брать $M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$, $n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$) и для заданного уровня погрешности $L > 0$.

В связи с этим весьма актуальной становится разработка теории условной оптимизации алгоритма 1.5, которая реализована в данном разделе.

1.3.2. Компоненты погрешности и выбор аппроксимационного базиса

Применим методологию условной оптимизации из работ [27–30, 34, 75, 79, 90, 93–95]. По аналогии с соотношениями (1.1.19), (1.1.20), для \mathbb{L}_2 -подхода (В.17) и \mathbb{C} -подхода (В.18) запишем погрешности

$$\delta^{(\mathbb{B})}(M, n) = \|f_{\boldsymbol{\eta}} - L^{(M, n)} \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}\|_{\mathbb{B}(X)}$$

для $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X) \vee \mathbb{L}_2(X)$ в виде суммы трех компонент: детерминированной $\delta_{det}^{(\mathbb{B})}(M)$, стохастической $\delta_{stoch}^{(\mathbb{B})}(M, n)$ и компоненты смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{B})}(M)$; здесь, напоминаем,

$$L^{(M, n)} \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)} \left[\tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}^{(x_1)}(n), \dots, \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}^{(x_M)}(n) \right] \chi^{(i)}(\mathbf{x});$$

$$\tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}^{(x_i)}(n) = Z_n(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j); \quad i = 1, \dots, M$$

(см. формулы (1.1.22), (1.1.26)).

Для \mathbb{C} -подхода имеем

$$\delta^{(\mathbb{C})}(M, n) = \sup_{\mathbf{x} \in X} |f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) - L^{(M, n)} \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x})| \leq \delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) + \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) + \delta_{bias}^{(\mathbb{C})}(M), \quad (1.3.1)$$

где $\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) = \|f_\eta - L^{(M)}f_\eta\|_{\mathbb{C}(X)}$, $\delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) = \|L^{(M)}\bar{f}_\eta - L^{(M,n)}\tilde{f}_\eta\|_{\mathbb{C}(X)}$,
 $\delta_{bias}^{(\mathbb{C})}(M) = \|L^{(M)}f_\eta - L^{(M)}\bar{f}_\eta\|_{\mathbb{C}(X)}$. Здесь

$$\begin{aligned} L^{(M)}f_\eta(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^M w^{(i)} [f_\eta(\mathbf{x}_1), \dots, f_\eta(\mathbf{x}_M)] \chi^{(i)}(\mathbf{x}), \\ L^{(M)}\bar{f}_\eta(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^M w^{(i)} [\mathbf{E}\kappa^{(\mathbf{x}_1)}(\boldsymbol{\eta}), \dots, \mathbf{E}\kappa^{(\mathbf{x}_M)}(\boldsymbol{\eta})] \chi^{(i)}(\mathbf{x}); \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

последняя формула – это аналог функции (1.1.18).

Для \mathbb{L}_2 -подхода получаем

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}\delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n)]^2 &= \left[\mathbf{E} \left(\int_X [f_\eta(\mathbf{x}) - L^{(M,n)}\tilde{f}_\eta(\mathbf{x})]^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 \leq \\ &\leq 2 [\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M)]^2 + \delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) + 2 [\delta_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M)]^2, \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

где $\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M) = \|f_\eta - L^{(M)}f_\eta\|_{\mathbb{L}_2(X)}$, $\delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) = \int_X \mathbf{D}L^{(M,n)}\tilde{f}_\eta(\mathbf{x}) dx$, $\delta_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M) = \|L^{(M)}f_\eta - L^{(M)}\bar{f}_\eta\|_{\mathbb{L}_2(X)}$.

В книгах и диссертациях [22, 28, 30, 34, 75, 79] и сопутствующих статьях [93–95] приведены весомые аргументы в пользу использования в качестве функций (В.12) *базиса Стренга – Фикса* [117]

$$\chi^{(i,r)}(\mathbf{x}) = \beta^{(r)}\left(\frac{x^{(1)}}{h} - j_i^{(1)}\right) \times \dots \times \beta^{(r)}\left(\frac{x^{(d)}}{h} - j_i^{(d)}\right); \quad \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}); \quad (1.3.4)$$

для сетки $\mathbf{x}_i = (j_i^{(1)}h, \dots, j_i^{(d)}h)$ из (1.1.15) (здесь, напоминаем, $j_i^{(k)}$; $k = 1, \dots, d$; $i = 1, \dots, M$ – целые числа) в прямоугольной области X , для которой число M узлов сетки пропорционально величине h^{-d} , т. е. существует константа $H^{(h \rightarrow M)}$, такая, что

$$h = H^{(h \rightarrow M)} M^{-\frac{1}{d}}. \quad (1.3.5)$$

В формуле (1.3.4) функция $\beta^{(r)}(u)$ представляет собой B -сплайн порядка r , который можно определить с помощью следующих рекуррентных формул

$$\beta^{(r)}(u) = \beta^{(r-1)} * \beta^{(0)}(u) = \int \beta^{(r-1)}(u-v)\beta^{(0)}(v) dv; \quad \beta^{(0)}(u) = \begin{cases} 1 & \text{при } |u| \leq \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{при } |u| > \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (1.3.6)$$

Учитывая вид линейных преобразований координат $\{x^{(1)}, \dots, x^{(d)}\}$ в формуле (1.3.4), важным является требование того, что B -сплайн $\beta^{(r)}(u)$ должен представлять собой кусочно-гладкую функцию, причем границы разбиения интервала, на котором $\beta^{(r)}(u) > 0$, на соответствующие полуинтервалы, должны быть целыми точками. Это требование выполняется, когда параметр r является натуральным нечетным числом: $r = 1, 3, 5 \dots$

Чаще всего используется B -сплайн первого порядка (или «функция–крышка» – см. формулы (1.1.14)); при этом приближение (1.3.2) с базисными функциями $\{\chi^{(i,1)}(\mathbf{x}); i = 1, \dots, M\}$ вида (1.1.14) и с коэффициентами

$$\mathbf{W}^{(M)}(\mathbf{f}_\eta) = \{w^{(1)}[f_\eta(\mathbf{x}_1), \dots, f_\eta(\mathbf{x}_M)], \dots, w^{(M)}[f_\eta(\mathbf{x}_1), \dots, f_\eta(\mathbf{x}_M)]\} \quad (1.3.7)$$

простейшего вида

$$w^{(i)}[f_\eta(\mathbf{x}_1), \dots, f_\eta(\mathbf{x}_M)] = f_\eta(\mathbf{x}_i) \quad (1.3.8)$$

(это аналог формул (1.1.17) и (1.1.25)) определяет *мульти-линейную аппроксимацию плотности* $f_\eta(\mathbf{x})$ (см. [22, 28, 30, 34], а также подраздел 1.1.3 данной диссертации).

1.3.3. Верхние границы для детерминированных компонент

\mathbb{L}_2 - и \mathbb{C} -погрешностей

На основании подходов из работ [75, 117] можно получить следующие результаты.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.1. *Если функция $f_\eta(\mathbf{x})$ принадлежит пространству $\mathbb{C}^{r+1}(X)$ и в приближении (1.3.2) используются базисные функции $\{\chi^{(i,r)}(\mathbf{x}); i = 1, \dots, M\}$ из (1.3.4), то найдутся такие коэффициенты (1.3.7), что справедливы неравенства*

$$\|f_\eta - L^{(M)} f_\eta\|_{\mathbb{C}^s(X)} \leq \tilde{H}_r^{(\mathbb{C}^s)} h^{r+1-s} \|f_\eta\|_{\mathbb{C}^{r+1}(X)}, \quad 0 \leq s \leq r,$$

причем константы $\tilde{H}_r^{(\mathbb{C}^s)}$ не зависят от функции $f_\eta(\mathbf{x})$ и параметра h .

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.2. Если функция $f_\eta(\mathbf{x})$ принадлежит пространству $\mathbb{W}_2^{r+1}(X)$ и в приближении (1.3.2) используются базисные функции (1.3.4), то найдутся такие коэффициенты (1.3.7), что справедливы неравенства

$$\|f_\eta - L^{(M)}f_\eta\|_{\mathbb{W}_2^s(X)} \leq \tilde{H}_r^{(\mathbb{W}_2^s)} h^{r+1-s} \|f_\eta\|_{\mathbb{W}_2^{r+1}(X)}, \quad 0 \leq s \leq r,$$

причем константы $\tilde{H}_r^{(\mathbb{W}_2^s)}$ не зависят от функции $f_\eta(\mathbf{x})$ и параметра h .

Учитывая, что

$$\|g\|_{\mathbb{C}^s(X)} = \sup_{\mathbf{x} \in X} \sum_{\mathbf{m}: |\mathbf{m}| \leq s} |D^{\mathbf{m}}g(\mathbf{x})|, \quad \|\tilde{g}\|_{\mathbb{W}_2^s(X)} = \left(\sum_{\mathbf{m}: |\mathbf{m}| \leq s} \int_X |D^{\mathbf{m}}\tilde{g}(\mathbf{x})|^2 dx \right)^{1/2}$$

для функций $g \in \mathbb{C}^s(X)$ и $\tilde{g} \in \mathbb{W}_2^s(X)$, утверждение 1.2 является « \mathbb{L}_2 -обобщением» утверждения 1.1; здесь

$$D^{\mathbf{m}}g(\mathbf{x}) = \frac{\partial^{|\mathbf{m}|}}{\partial(x^{(1)})^{m_1} \dots \partial(x^{(d)})^{m_d}} g(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}), \quad \mathbf{m} = (m_1, \dots, m_d),$$

а m_i – целые неотрицательные числа, $|\mathbf{m}| = m_1 + \dots + m_d$.

Заметим, что

$$\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) = \|f_\eta - L^{(M)}f_\eta\|_{\mathbb{C}^0(X)} \quad \text{и} \quad \delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M) = \|f_\eta - L^{(M)}f_\eta\|_{\mathbb{W}_2^0(X)}.$$

Из утверждений 1.1 и 1.2 и соотношений (1.3.5) получаем неравенства

$$\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) \leq \tilde{H}_r^{(\mathbb{C})} [H^{(h \rightarrow M)}]^{r+1} M^{-\frac{r+1}{d}} \|f_\eta\|_{\mathbb{C}^{r+1}(X)}, \quad (1.3.9)$$

$$\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M) \leq \tilde{H}_r^{(\mathbb{L}_2)} [H^{(h \rightarrow M)}]^{r+1} M^{-\frac{r+1}{d}} \|f_\eta\|_{\mathbb{W}_2^{r+1}(X)} \quad (1.3.10)$$

для некоторых коэффициентов (1.3.7) и констант $\tilde{H}_r^{(\mathbb{C})}$ и $\tilde{H}_r^{(\mathbb{L}_2)}$.

Особую проблему представляет собой нахождение коэффициентов (1.3.7), обеспечивающих выполнение неравенств (1.3.9), (1.3.10). Относительно несложным является лишь случай $r = 1$.

ТЕОРЕМА 1.1. [75, 117]. Базисные функции (1.1.14) и коэффициенты (1.3.8) определенной выше мульти-линейной аппроксимации обеспечивают выполнение неравенств вида (1.3.9), (1.3.10)

$$\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) \leq H_{det}^{(\mathbb{C})} M^{-\frac{2}{d}}, \quad \delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M) \leq H_{det}^{(\mathbb{L}_2)} M^{-\frac{2}{d}} \quad (1.3.11)$$

для случаев $f_\eta \in \mathbb{C}^2(X)$ и $f_\eta \in \mathbb{W}_2^2(X)$, соответственно; при этом

$$H_{det}^{(\mathbb{C})} = \frac{[H^{(h \rightarrow M)}]^2}{8} \sum_{s=1}^d \max_{x \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial (x^{(s)})^2} f_\eta(x) \right|; \quad H_{det}^{(\mathbb{L}_2)} = H_{det}^{(\mathbb{C})} \times \sqrt{\text{mes } X}. \quad (1.3.12)$$

В случае $r > 1$ выбор подходящих коэффициентов (1.3.7), обеспечивающих выполнение неравенств вида (1.3.9), (1.3.10), существенно более сложен. Аналог теоремы 1.1 доказан для функций (1.3.4) с $r = 3$, т. е. для образующей функции

$$\beta^{(3)}(u) = \begin{cases} \frac{(2-u)^3}{6} & \text{при } 1 \leq u \leq 2; \\ \frac{1 + 3(1-u) + 3(1-u)^2 - 3(1-u)^3}{6} & \text{при } 0 \leq u \leq 1; \\ 0 & \text{при } u \geq 2 \text{ и } \beta^{(3)}(-u) \text{ при } u \leq 0, \end{cases} \quad (1.3.13)$$

в работе [75]; при этом получены коэффициенты (1.3.7), представляющие собой специальные (существенно отличные от (1.3.8)) комбинации значений $\{f_\eta(x_1), \dots, f_\eta(x_M)\}$ и обеспечивающие максимальный порядок $M^{-4/d}$ (см. утверждения 1.1, 1.2 и соотношение (1.3.5)) величин $\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M)$, $\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$ для $f_\eta \in \mathbb{C}^4(X)$ и $f_\eta \in \mathbb{W}_2^4(X)$, соответственно.

Дальнейшие рассуждения показывают, что для исследуемого функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 достаточно (и даже необходимо) рассмотреть случая $r = 1$ (т. е. использование мульти-линейного восполнения (1.1.14) с коэффициентами (1.3.8)) и выполнение принципиальных соотношений (1.3.11), (1.3.12). В частности, это обусловлено тем, что компоненты смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{C})}(M)$, $\delta_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$ имеют порядок $M^{-2/d}$ (как и детерминированные компоненты из соотношений (1.3.11)), во всяком случае, для простейшей ядерной функции (1.1.16) – см. следующий подраздел 1.3.4.

1.3.4. Верхние границы для компонент смещения \mathbb{L}_2 - и \mathbb{C} -погрешностей

Для обоснования последнего замечания из предыдущего раздела нам понадобится следующий факт.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.3. *Базис Стренга – Фикса (1.3.4) является разложением единицы, т. е. $\sum_i \chi^{(i,r)}(x) \equiv 1$ для всех $x = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) \in \mathbb{R}^d$ и $r \in \mathbb{N}$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Используем метод математической индукции по размерности d пространства \mathbb{R}^d .

Для $d = 1$ утверждение доказываем индукцией по порядку r сплайна $\beta^{(r)}(u)$. Пусть $r = 0$ и $x \in \mathbb{R}$. Найдется единственное целое число \hat{i} такое, что $\hat{i}h - h/2 \leq x < \hat{i}h + h/2$. Тогда $\sum_i \beta^{(0)}\left(\frac{x}{h} - i\right) = \sum_i \beta^{(0)}\left(\frac{x - ih}{h}\right) \equiv 1$ (см. соотношения (1.3.6)), т. к. в этой сумме все слагаемые равны нулю, кроме \hat{i} -го, которое равно единице.

Пусть теперь

$$\sum_i \beta^{(r-1)}\left(\frac{x - ih}{h}\right) \equiv 1 \quad (1.3.14)$$

для всех $x \in \mathbb{R}$. Тогда, согласно определению B -сплайна (см. соотношения (1.3.6)), имеем

$$\begin{aligned} \sum_i \beta^{(r)}\left(\frac{x - ih}{h}\right) &= \sum_i \int_{-\infty}^{+\infty} \beta^{(0)}(y) \beta^{(r-1)}\left(\frac{x - ih}{h} - y\right) dy = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\beta^{(0)}(y) \sum_i \beta^{(r-1)}\left(\frac{x - ih}{h} - y\right) \right] dy = \int_{-1/2}^{1/2} \sum_i \beta^{(r-1)}\left[\frac{(x - yh) - ih}{h}\right] dy. \end{aligned}$$

Используя индуктивное предположение (1.3.14) для $(x - yh)$ вместо x , получаем $\sum_i \beta^{(r)}\left(\frac{x - ih}{h}\right) \equiv 1$, т. е. утверждение 1.3 верно для $d = 1$.

Наконец, индуктивный переход по размерности d следует из соотношений (1.1.14) и

$$\begin{aligned} \sum_i \chi^{(i,r)}(\mathbf{x}) &= \sum_{j_i^{(1)}, \dots, j_i^{(d-1)}, j_i^{(d)}} \chi_{(j_i^{(1)}, \dots, j_i^{(d-1)}, j_i^{(d)})}^{(r)}(x^{(1)}, \dots, x^{(d-1)}, x^{(d)}) = \\ &= \sum_{j_i^{(1)}, \dots, j_i^{(d-1)}} \chi_{(j_i^{(1)}, \dots, j_i^{(d-1)})}^{(r)}(x^{(1)}, \dots, x^{(d-1)}) \times \sum_{j_i^{(d)}} \beta^{(r)}\left(\frac{x^{(d)} - j_i^{(d)}h}{h}\right). \end{aligned}$$

Утверждение 1.3 доказано.

Из утверждения 1.3 следует, что константа Лебега (1.2.9) равна единице

$$K(\Xi^{(M)}) = \sup_{\mathbf{x} \in X} \sum_{i=1}^M |\chi^{(i,r)}(\mathbf{x})| = \sup_{\mathbf{x} \in X} \sum_{i=1}^M \chi^{(i,r)}(\mathbf{x}) = 1$$

и в случае, когда в алгоритме 1.5 используются базис Стренга – Фикса (1.3.4) и коэффициенты (1.3.7) простейшего вида (1.3.8), выполнены соотношения

$$\begin{aligned} \delta_{bias}^{(\mathbb{C})}(M) &= \|L^{(M)}f_{\eta} - L^{(M)}\bar{f}_{\eta}\|_{\mathbb{C}(X)} = \sup_{x \in X} \left| \sum_{i=1}^M f_{\eta}(x_i)\chi^{(i)}(x) - \sum_{i=1}^M \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\eta)\chi^{(i)}(x) \right| \leq \\ &\leq K^{(\Xi^{(M)})} \max_{i=1, \dots, M} |f_{\eta}(x_i) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\eta)| = \max_{i=1, \dots, M} |f_{\eta}(x_i) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\eta)|; \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

$$\begin{aligned} \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) &= \|L^{(M)}\bar{f}_{\eta} - L^{(M, n)}\tilde{f}_{\eta}\|_{\mathbb{C}(X)} = \sup_{x \in X} \left| \sum_{i=1}^M \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\eta)\chi^{(i)}(x) - \sum_{i=1}^M \tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n)\chi^{(i)}(x) \right| \leq \\ &\leq K^{(\Xi^{(M)})} \max_{i=1, \dots, M} |\tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\eta)| = \max_{i=1, \dots, M} |Z_n(x_i) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\eta)| \end{aligned} \quad (1.3.16)$$

(это аналоги соотношения (1.2.10)).

Заметим, что в работе [75] для аппроксимации Стренга – Фикса (1.3.4) с кубической производящей функцией (1.3.13) (т. е. для $r = 3$) для специального вида коэффициентов (1.3.7), дающих, согласно утверждениям 1.1 и 1.2, максимальный порядок $M^{-4/d}$ величин $\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M)$, $\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$, получено $K^{(\Xi^{(M)})} = 3$ (что тоже неплохо). А вот, например, для одномерной интерполяции Лагранжа константа Лебега $K^{(\Xi^{(M)})}$ растет с увеличением числа M узлов равномерной сетки как 2^M [131].

Предположим, что I является номером узла x_I , в котором достигается максимум $\max_{i=1, \dots, M} |f_{\eta}(x_i) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\eta)|$ в правой части соотношения (1.3.15). Тогда, согласно соотношению (1.1.23),

$$\delta_{bias}^{(\mathbb{C})}(M) \leq \left| f_{\eta}(x_I) - \int_X \kappa^{(x_I)}(\mathbf{y})f_{\eta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right|. \quad (1.3.17)$$

Построение верхней границы для величины в правой части неравенства (1.3.17) относительно несложно получается для случая, когда ядерная функция $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$ имеет вид простейший (1.1.16). В этом случае имеем

$$\left| f_{\eta}(x_I) - \int_X \kappa^{(x_I)}(\mathbf{y})f_{\eta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right| = \frac{\left| h^d f_{\eta}(x_I) - \int_{\Delta(x_I)} f_{\eta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right|}{h^d}, \quad (1.3.18)$$

где, напомним,

$$\Delta^{(x)} = \left\{ \mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d)}): x^{(s)} - \frac{h}{2} \leq y^{(s)} \leq x^{(s)} + \frac{h}{2}; s = 1, \dots, d; \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}) \right\}.$$

(см. формулу (1.1.16)).

Далее проводим следующие рассуждения с использованием подходов теории численного интегрирования, касающихся обоснования квадратурной формулы центральных прямоугольников (см., например, § 1 главы 3 из книги [37]).

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.4. Если $f_\eta \in \mathbb{C}^2(X)$, то справедливо неравенство

$$J^{(x_I)} = \frac{\left| h^d f_\eta(x_I) - \int_{\Delta(x_I)} f_\eta(y) dy \right|}{h^d} \leq \frac{h^2}{24} \sum_{s=1}^d \max_{x \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial (x^{(s)})^2} f_\eta(x) \right|, \quad (1.3.19)$$

здесь $\mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d)})$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим сначала случай $d = 1$. Здесь $\Delta(x_I) = \left\{ y: x_I - \frac{h}{2} \leq y \leq x_I + \frac{h}{2} \right\}$. Несложно показать, что

$$h f_\eta(x_I) = \int_{\Delta(x_I)} [f_\eta(x_I) + f'_\eta(x_I)(y - x_I)] dy.$$

Кроме того, согласно формуле Тейлора, имеем

$$f_\eta(y) = f_\eta(x_I) + f'_\eta(x_I)(y - x_I) + D_1,$$

где $y \in \Delta(x_I)$ и $D_1 \leq \frac{(y-x_I)^2}{2} \max_{y \in \Delta(x_I)} |f''_\eta(y)|$. Тогда

$$J^{(x_I)} \leq \frac{1}{h} \max_{y \in \Delta(x_I)} |f''_\eta(y)| \int_{\Delta(x_I)} \frac{(y - x_I)^2}{2} dy = \frac{h^2}{24} \max_{y \in \Delta(x_I)} |f''_\eta(y)|.$$

Очевидная индукция по размерности d дает соотношение (1.3.19). Утверждение 1.4 доказано.

ТЕОРЕМА 1.2. Для алгоритма 1.5 с аппроксимационным базисом (1.1.14), коэффициентами (1.3.8) и ядерной функцией (1.1.16) справедливы неравенства

$$\delta_{bias}^{(C)}(M) \leq H_{bias}^{(C)} M^{-\frac{2}{d}}, \quad \delta_{bias}^{(L_2)}(M) \leq H_{bias}^{(L_2)} M^{-\frac{2}{d}} \quad (1.3.20)$$

при $f_\eta \in \mathbb{C}^2(X)$ и $f_\eta \in \mathbb{W}_2^2(X)$, соответственно; здесь

$$H_{bias}^{(C)} = \frac{[H^{(h \rightarrow M)}]^2}{24} \sum_{s=1}^d \max_{x \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial (x^{(s)})^2} f_\eta(x) \right|; \quad H_{bias}^{(L_2)} = H_{bias}^{(C)} \times \sqrt{\text{mes } X}. \quad (1.3.21)$$

Утверждение теоремы 1.2 следует из соотношений (1.3.5), (1.3.15), (1.3.17)–(1.3.19) и очевидного неравенства $\delta_{bias}^{(L_2)}(M) \leq \sqrt{\text{mes } X} \times \delta_{bias}^{(C)}(M)$.

Сравнивая соотношения (1.3.11), (1.3.12) и (1.3.20), (1.3.21), можно сделать вывод о том, что упомянутая выше возможность рассмотрения базиса (1.3.4) с кубической производящей функцией (1.3.13) для получения порядка $M^{-4/d}$ величин $\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M)$, $\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$ для рассматриваемого алгоритма 1.5 не имеет смысла, т. к. компоненты смещения имеют порядок $M^{-2/d}$.

Также можно высказать весьма правдоподобную гипотезу (имеющую некоторые численные обоснования – см., в частности, подраздел 1.2.5 данной диссертации, но требующую, впрочем, отдельной тщательной проверки) о том, что использование в алгоритме 1.5 ядерных функций (1.1.28) с «коэффициентами размытости» $h^{(s)}(n) \equiv \hat{h}(n)$ и функций $\hat{\kappa}^{(s)}(y) \equiv \hat{\kappa}(y)$ (здесь $s = 1, \dots, d$), отличных от (1.1.34) (в частности, коэффициентов и функций из работы [103] – см. соотношения (1.1.33)) не позволит получить верхних границ компонент смещения, лучших, чем (1.3.20).

Из теоремы 1.2 и двух последних соображений вытекает следующий важный вывод.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.13. Для решения сформулированной в подразделе 1.3.1 задачи 1.1 наилучшим является применение следующего приближения алгоритма 1.5 с аппроксимационным базисом $\Xi^{(M)}$ вида (1.1.14), простейшими аппроксимационными коэффициентами (1.3.7) вида (1.3.8) и ядерной функцией $\kappa^{(x)}(\mathbf{y})$ простейшего вида (1.1.16):

$$L^{(M,n)} \tilde{f}_{\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M \tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) \chi^{(i,1)}(\mathbf{x}); \quad \tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) = \frac{1}{nh^d} \sum_{j=1}^n X^{(\Delta^{(x_i)})}(\eta_j); \quad (1.3.22)$$

здесь $X^{(\Delta^{(x_i)})}(\mathbf{y})$ – индикатор множества $\Delta^{(x_i)}$: при $\mathbf{y} \in \Delta^{(x_i)}$ имеем $X^{(\Delta^{(x_i)})}(\mathbf{y}) = 1$, а при $\mathbf{y} \notin \Delta^{(x_i)}$ выполнено $X^{(\Delta^{(x_i)})}(\mathbf{y}) = 0$.

По аналогии с теорией функциональных вычислительных статистических алгоритмов приближения решения интегрального уравнения Фредгольма, назовем вариант алгоритма 1.5, описанный в теореме 1.2 и в замечании 1.13 (см. соотношение (1.3.22)), **многомерным аналогом метода полигона частот**. Такой термин

здесь более чем удачен, т. к. в одномерном случае $d = 1$ алгоритм 1.5 из теоремы 1.2 и замечания 1.13 дает в точности полигон частот.

В связи с замечанием 1.13 мы займемся выводом формул для условно-оптимальных параметров именно для многомерного аналога метода полигона частот (1.3.22) (т.е. получим аналоги соотношений (1.1.21)). Для простоты везде далее будем полагать, что

$$f_{\boldsymbol{\eta}} \in \mathbb{C}^2(X) \subset \mathbb{W}_2^2(X). \quad (1.3.23)$$

1.3.5. Верхняя граница для стохастической компоненты \mathbb{L}_2 -погрешности

Построим верхние границы стохастических компонент погрешности $\delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n), \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n)$ из соотношений (1.3.1), (1.3.3) для многомерного аналога метода полигона частот (1.3.22). Докажем сначала следующее вспомогательное утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.5. Для приближения $f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) \approx L^{(M,n)} \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M \left[\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j) \right] \chi^{(i,1)}(\mathbf{x})$ справедливо соотношение

$$\delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) = \int_X \mathbf{D}L^{(M,n)} \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \leq \frac{\text{mes } X \times \max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{n}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. С учетом известного тождества $\mathbf{D}\tau = \mathbf{D}(\tau + C); C = \text{const}$, справедливого для любой случайной величины τ (см., например, [134]), и соотношения (1.3.22) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}L^{(M,n)} \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) &= \mathbf{D}[L^{(M,n)} \tilde{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) - L^{(M)} \bar{f}_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x})] = \mathbf{D} \left[\sum_{i=1}^M \left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j) \right) \chi^{(i,1)}(\mathbf{x}) - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{i=1}^M \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}) \chi^{(i,1)}(\mathbf{x}) \right] = \mathbf{D} \left[\sum_{i=1}^M \left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \tilde{\zeta}_j^{(i)} \right) \chi^{(i,1)}(\mathbf{x}) \right] \end{aligned}$$

где $\tilde{\zeta}_j^{(i)} = \kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j)$ (здесь мы трактуем $\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_n$ как независимые, одинаково распределенные – как $\boldsymbol{\eta}$ – случайные величины).

Зафиксируем $\mathbf{x} = \mathbf{z}_0 \in X$. Учитывая, что $\mathbf{E}\tilde{\zeta}_j^{(i)} = 0$ для всех $i = 1, \dots, M$ и $j = 1, \dots, n$, получаем равенство

$$\begin{aligned} \mathbf{DL}^{(M,n)} \tilde{f}_\eta(\mathbf{z}_0) &= \sum_{i=1}^M \mathbf{D} \left[\frac{\chi^{(i,1)}(\mathbf{z}_0)}{n} \sum_{j=1}^n \tilde{\zeta}_j^{(i)} \right] + \\ &+ \frac{1}{n} \sum_{i_1, i_2=1, \dots, M; i_1 \neq i_2} \chi^{(i_1,1)}(\mathbf{z}_0) \chi^{(i_2,1)}(\mathbf{z}_0) \mathbf{E}(\tilde{\zeta}^{(i_1)} \tilde{\zeta}^{(i_2)}), \end{aligned}$$

где $\tilde{\zeta}^{(i)}$ – случайная величина, распределенная как независимые для разных j , одинаково распределенные величины $\tilde{\zeta}_j^{(i)}$.

Далее, применяя вероятностный аналог неравенства Коши – Буняковского

$$\mathbf{E}|\tilde{\zeta}^{(i_1)} \tilde{\zeta}^{(i_2)}| \leq \sqrt{\mathbf{E}[\tilde{\zeta}^{(i_1)}]^2 \times \mathbf{E}[\tilde{\zeta}^{(i_2)}]^2} = \sqrt{\mathbf{D}\tilde{\zeta}^{(i_1)} \times \mathbf{D}\tilde{\zeta}^{(i_2)}}$$

(см., например, [134]) и соотношения $\mathbf{D}\tilde{\zeta}^{(i)} = \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})$ для $i = 1, \dots, M$, получаем оценку сверху:

$$\begin{aligned} \mathbf{DL}^{(M,n)} \tilde{f}_\eta(\mathbf{z}_0) &\leq \frac{\max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{n} \times \left[\sum_{i=1}^M \left(\chi^{(i,1)}(\mathbf{z}_0) \right)^2 + \right. \\ &\left. + \sum_{i_1, i_2=1, \dots, M; i_1 \neq i_2} \chi^{(i_1,1)}(\mathbf{z}_0) \chi^{(i_2,1)}(\mathbf{z}_0) \right] = \frac{\max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{n} \times \left[\sum_{i=1}^M \chi^{(i,1)}(\mathbf{z}_0) \right]^2. \end{aligned}$$

Наконец, в силу утверждения 1.3 и произвольности $\mathbf{z}_0 \in X$, имеем

$$\sup_{\mathbf{x} \in X} \mathbf{DL}^{(M,n)} \tilde{f}_\eta(\mathbf{x}) \leq \frac{\max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{n} \quad \text{и} \quad \delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) \leq \frac{\text{mes } X \times \max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{n}.$$

Утверждение 1.5 доказано.

ТЕОРЕМА 1.3. *Для многомерного аналога полигона частот (1.3.22) (т. е. для алгоритма 1.5 с аппроксимационным базисом (1.1.14), коэффициентами (1.3.8) и ядерной функцией (1.1.16)) при выполнении условия (1.3.23) справедливы неравенства*

$$\max_{i=1, \dots, M} \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}) \leq \frac{f_{max} \times M}{[H^{(h \rightarrow M)}]^d} \quad \text{и} \quad \delta_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(M, n) \leq \frac{H_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)} M}{n}, \quad (1.3.24)$$

где

$$H_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)} = \frac{f_{max} \times \text{mes } X}{[H^{(h \rightarrow M)}]^d} \quad \text{и} \quad f_{max} = \max_{\mathbf{x} \in X} f_\eta(\mathbf{x}). \quad (1.3.25)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для ядерной функции (1.1.16) имеем

$$\mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}) = \frac{I_i - I_i^2}{h^{2d}}, \quad \text{где } I_i = \int_{\Delta^{(x_i)}} f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}.$$

Учитывая условие (1.3.23) и теорему о среднем для определенного интеграла от непрерывной функции (см., например, [135]), имеем

$$I_i = f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_i) \times h^d \quad \text{и} \quad \mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}) = \frac{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_i)}{h^d} - f_{\boldsymbol{\eta}}^2(\mathbf{z}_i), \quad (1.3.26)$$

где $\mathbf{z}_i \in \Delta^{(x_i)}$ и

$$f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_i) = \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}). \quad (1.3.27)$$

В силу ограниченности функции $f_{\boldsymbol{\eta}} \in \mathbb{C}^2(X)$ на компакте X , из утверждения 1.5 и соотношений (1.3.5), (1.3.26) получаем соотношения (1.3.24), (1.3.25). Теорема 1.3 доказана.

1.3.6. Верхняя граница для стохастической компоненты \mathbb{C} -погрешности

Для \mathbb{C} -подхода, используя формулу (1.3.16), получаем

$$\begin{aligned} \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) &\leq \max_{i=1, \dots, M} |Z_n(x_i) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})| = \max_{i=1, \dots, M} \left| \sum_{j=1}^n \frac{\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{n} \right| \\ &= \max_{i=1, \dots, M} \left| \sqrt{\frac{\mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{n}} \times \sum_{j=1}^n \frac{\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{\sqrt{\mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}) \times n}} \right|. \end{aligned}$$

С учетом соотношений (1.3.24) имеем

$$\delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) \leq \sqrt{\frac{f_{max} \times M}{[H^{(h \rightarrow M)}]^d \times n}} \times \max_{i=1, \dots, M} \left| \sum_{j=1}^n \frac{\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{\sqrt{\mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}) \times n}} \right|.$$

В силу центральной предельной теоремы для одинаково распределенных случайных величин (см., например, [134]), суммы

$$\omega^{(i, M)}(n) = \sum_{j=1}^n \frac{\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}_j) - \mathbf{E}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta})}{\sqrt{\mathbf{D}\kappa^{(x_i)}(\boldsymbol{\eta}) \times n}}$$

сходятся (по распределению) при $n \rightarrow \infty$ к стандартным гауссовским величинам $\gamma^{(i, M)}$. Следовательно, при фиксированном M для любого $\varepsilon_1 > 0$ найдется такое натуральное $N_1(\varepsilon_1, M)$, что при $n > N_1(\varepsilon_1, M)$ выполнено

$$\mathbf{P} \left\{ \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) \leq \frac{H_{stoch,1}^{(\mathbb{C})}(\varepsilon_1) \sqrt{M}}{\sqrt{n}} \times \max_{i=1, \dots, M} |\gamma^{(i,M)}| \right\} > 1 - \varepsilon_1; \quad (1.3.28)$$

где

$$H_{stoch,1}^{(\mathbb{C})}(\varepsilon_1) = B_1(\varepsilon_1) \sqrt{\frac{f_{max}}{[H^{(h \rightarrow M)}]^d}}, \quad (1.3.29)$$

а $B_1(\varepsilon_1)$ – небольшая константа, близкая к величине H из соотношения (1.2.6).

Подробному изучению распределений и асимптотических (при $M \rightarrow \infty$) свойств величин типа $\Upsilon^{(M)} = \max_{i=1, \dots, M} \gamma^{(i,M)}$ посвящена монография [136]. Некоторая особенность рассматриваемого здесь случая состоит в том, что величины $\{\gamma^{(i,M)}; i = 1, \dots, M\}$ являются зависимыми. Однако эта зависимость «ослабевает» с ростом M . Конкретнее, для ковариаций

$$\text{cov}[\gamma^{(i_1, M)}, \gamma^{(i_2, M)}] = \mathbf{E}[\gamma^{(i_1, M)} \gamma^{(i_2, M)}]; \quad i_1 \neq i_2; \quad i_1, i_2 = 1, \dots, M \quad (1.3.30)$$

справедливы соотношения

$$\begin{aligned} |\text{cov}[\gamma^{(i_1, M)}, \gamma^{(i_2, M)}]| &= |\text{cov}[\omega^{(i_1, M)}(n), \omega^{(i_2, M)}(n)]| = \\ &= \left| \frac{\mathbf{E}[\kappa^{(x_{i_1})}(\boldsymbol{\eta}) \times \kappa^{(x_{i_2})}(\boldsymbol{\eta})] - \mathbf{E}\kappa^{(x_{i_1})}(\boldsymbol{\eta}) \times \mathbf{E}\kappa^{(x_{i_2})}(\boldsymbol{\eta})}{\sqrt{\mathbf{D}\kappa^{(x_{i_1})}(\boldsymbol{\eta}) \times \mathbf{D}\kappa^{(x_{i_2})}(\boldsymbol{\eta})}} \right| = \\ &= \frac{[H^{(h \rightarrow M)}]^d \sqrt{f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_{i_1}) f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_{i_2})}}{\sqrt{M^2 - M[H^{(h \rightarrow M)}]^d [f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_{i_1}) + f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_{i_2})] + [H^{(h \rightarrow M)}]^{2d} f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_{i_1}) f_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{z}_{i_2})}} \end{aligned}$$

Здесь использованы соотношения (1.3.5), (1.3.26), (1.3.27) и то, что для ядерной функции (1.1.16) выполнено $\kappa^{(x_{i_1})}(\boldsymbol{\eta}) \times \kappa^{(x_{i_2})}(\boldsymbol{\eta}) \equiv 0$ при $i_1 \neq i_2$.

Из последнего соотношения следует, что ковариации (1.3.30) убывают по модулю с ростом M со скоростью порядка $1/M$; при этом найдется натуральное число \hat{M}_1 (например, $\hat{M}_1 \approx 2f_{max}[H^{(h \rightarrow M)}]^d$) и «универсальная» константа $B_2 > 0$ (например, $B_2 \approx \sqrt{2}f_{max}[H^{(h \rightarrow M)}]^d$) такие, что

$$|\text{cov}[\gamma^{(i_1, M)}, \gamma^{(i_2, M)}]| \leq \frac{B_2}{M} \quad \text{при } M > \widehat{M}_1. \quad (1.3.31)$$

Используя технологию изучения порядковых статистик из книги [136] по аналогии с работой [90], можно получить следующий результат.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.6 [90, 136]. *Если для набора стандартных нормальных случайных величин $\{\gamma^{(i, M)}; i = 1, \dots, M\}$ выполнены соотношения (1.3.31), то асимптотическое при $M \rightarrow \infty$ распределение максимума $\Upsilon^{(M)} = \max_{i=1, \dots, M} \gamma^{(i, M)}$ таково, что*

$$\mathbf{P}\{a_M(\Upsilon^{(M)} - b_M) < y\} \rightarrow \exp(-e^y) = G(y),$$

где

$$a_M = \sqrt{2 \ln M}, \quad b_M = \sqrt{2 \ln M} - \frac{\ln \ln M + \ln(4\pi)}{\sqrt{2 \ln M}}. \quad (1.3.32)$$

В силу симметрии стандартного нормального распределения и с учетом соотношений

$$\begin{aligned} \max_{i=1, \dots, M} |\gamma^{(i, M)}| &= \max \left\{ \max_{i=1, \dots, M} \gamma^{(i, M)}, -\min_{i=1, \dots, M} \gamma^{(i, M)} \right\}; \\ \min_{i=1, \dots, M} \gamma^{(i, M)} &= \max \{-\gamma^{(1, M)}, \dots, -\gamma^{(M, M)}\}, \end{aligned}$$

получаем, что

$$\mathbf{P}\{a_M(|\Upsilon^{(M)}| - b_M) < y\} \rightarrow \exp(-2e^y) = G^2(y),$$

где коэффициенты a_M, b_M имеют вид (1.3.32).

Из последнего соотношения следует, что для любого $\varepsilon_2 > 0$ существует константа $B_3(\varepsilon_2)$ и натуральное число \widehat{M}_2 , такие, что

$$\mathbf{P}\left\{|\Upsilon^{(M)}| < \frac{B_3(\varepsilon_2)}{a_M} + b_M\right\} > 1 - \varepsilon_2 \quad \text{при } M > \widehat{M}_2. \quad (1.3.33)$$

С учетом соотношений (1.3.28), (1.3.29), (1.3.33) получаем следующий результат.

ТЕОРЕМА 1.4. *Для многомерного аналога полигона частот (1.3.22) (т. е. для алгоритма 1.5 с аппроксимационным базисом (1.1.14), коэффициентами (1.3.8) и ядерной функцией (1.1.16)) при выполнении условия (1.3.23) для любого $\varepsilon > 0$ существуют положительные действительные константы $H_{stoch,1}^{(C)}(\varepsilon), H_{stoch,2}^{(C)}(\varepsilon)$ и*

натуральное число \hat{M} такие, что для любого $M > \hat{M}$ существует натуральное число $\hat{N}(\varepsilon, M)$ такое, что для всех $n > \hat{N}(\varepsilon, M)$ выполнено

$$\mathbf{P} \left\{ \delta_{stoch}^{(\mathbb{C})}(M, n) \leq \frac{H_{stoch,1}^{(\mathbb{C})}(\varepsilon)\sqrt{M}}{\sqrt{n}} \times \left[\sqrt{2 \ln M} + \frac{H_{stoch,2}^{(\mathbb{C})}(\varepsilon) - \frac{\ln \ln M}{2}}{\sqrt{2 \ln M}} \right] \right\} > 1 - \varepsilon. \quad (1.3.34)$$

1.3.7. Условно-оптимальные параметры для \mathbb{L}_2 - и \mathbb{C} -подходов

Полученные в теоремах 1.1–1.4 верхние границы (1.3.11), (1.3.20), (1.3.24), (1.3.34) для компонент погрешности $\delta^{(\mathbb{B})}(M, n)$ позволяют вывести выражения для условно-оптимальных параметров $M_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ и $n_{opt}^{(\mathbb{B})}(L)$ для $\mathbb{B}(X) = \mathbb{C}(X) \vee \mathbb{L}_2(X)$ по методу В.1.

Важной отличительной особенностью алгоритма 1.5 состоит в том, что затраты S этого алгоритма пропорциональны величине $n \times t$, где t – время определения того, в какой из кубов $\Delta^{(x_i)}$ попадает очередное выборочное значение η_j случайной величины η ; $i = 1, \dots, M$; $j = 1, \dots, n$. Несложно добиться того, чтобы время t не зависело от числа M кубов $\Delta^{(x_i)}$. Таким образом, затраты оптимизированных версий алгоритма 1.5 явно не зависят от M . К слову, последнее обстоятельство продемонстрировано на тестовом примере в подразделе 1.4.2 данной диссертации.

В оптимизационных процедурах метода В.1 зависимость затрат S от параметра M возникает из-за наличия уравнений вида (В.16), определяющих зависимость параметра n (а значит, и затрат S) от M .

Рассмотрим такую процедуру для \mathbb{L}_2 -подхода. Здесь требуется решать такую оптимизационную задачу: найти значения $M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$ и $n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$, для которых достигается минимум

$$\min_{M,n} S(M, n) = \min_{M,n} [t \times n(M, L) + S_0] \quad (1.3.35)$$

(здесь S_0 – время вычисления 2^d ненулевых слагаемых $\tilde{f}_\eta^{(x_i)}(n)\chi^{(i,1)}(\mathbf{x})$ в сумме (1.3.22) для заданной точки $\mathbf{x} \in X$) при условии

$$\frac{A_1^{(\mathbb{L}_2)}}{M^{\frac{4}{d}}} + \frac{A_2^{(\mathbb{L}_2)}M}{n} = L^2, \quad (1.3.36)$$

где $A_1^{(\mathbb{L}_2)} = 2 \left[H_{det}^{(\mathbb{L}_2)} \right]^2 + 2 \left[H_{bias}^{(\mathbb{L}_2)} \right]^2$, $A_2^{(\mathbb{L}_2)} = H_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}$ – см. соотношения (1.3.3), (1.3.11), (1.3.12), (1.3.20), (1.3.21), (1.3.24), (1.3.25).

Из равенств (1.3.35) и (1.3.36) имеем

$$n = \frac{A_2^{(\mathbb{L}_2)} \times M}{L^2 - \frac{A_1^{(\mathbb{L}_2)}}{M\bar{d}}} \quad \text{и} \quad \tilde{S}^{(\mathbb{L}_2, L)}(M) = \frac{t \times A_2^{(\mathbb{L}_2)} \times M}{L^2 - \frac{A_1^{(\mathbb{L}_2)}}{M\bar{d}}} + S_0.$$

Найдем теперь минимум функции $\tilde{S}^{(\mathbb{L}_2, L)}(M)$ по M . Продифференцируем эту функцию

$$\frac{\partial \tilde{S}^{(\mathbb{L}_2, L)}(M)}{\partial M} = t \times A_2^{(\mathbb{L}_2)} \times \frac{L^2 - \frac{A_1^{(\mathbb{L}_2)}}{M\bar{d}} - \frac{4A_1^{(\mathbb{L}_2)}}{d \times M\bar{d}}}{\left[L^2 - \frac{A_1^{(\mathbb{L}_2)}}{M\bar{d}} \right]^2}$$

и найдем критическое значение (точку минимума), а затем и **условно-оптимальные параметры для \mathbb{L}_2 -подхода**

$$M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = \left[A_1^{(\mathbb{L}_2)} \right]^{\frac{d}{4}} \left(\frac{d+4}{d} \right)^{\frac{d}{4}} L^{-d/2}, \quad (1.3.37)$$

$$n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = \frac{A_2^{(\mathbb{L}_2)} \left[A_1^{(\mathbb{L}_2)} \right]^{\frac{d}{4}} (d+4)^{\frac{d}{4}+1}}{4d^{\frac{d}{4}}} L^{-2-\frac{d}{2}}. \quad (1.3.38)$$

Для \mathbb{C} -подхода решается задача нахождения минимума (1.3.35) при условии

$$\frac{A_1^{(\mathbb{C})}}{M\bar{d}} + \frac{A_2^{(\mathbb{C})} \sqrt{M}}{\sqrt{n}} \times \left[\sqrt{2 \ln M} + \frac{A_3^{(\mathbb{C})} - \frac{\ln \ln M}{2}}{\sqrt{2 \ln M}} \right] = L, \quad (1.3.39)$$

где $A_1^{(\mathbb{C})} = H_{det}^{(\mathbb{C})} + H_{bias}^{(\mathbb{C})}$, $A_2^{(\mathbb{C})} = H_{stoch,1}^{(\mathbb{C})}(\varepsilon)$, $A_3^{(\mathbb{C})} = H_{stoch,2}^{(\mathbb{C})}(\varepsilon)$ – см. соотношения (1.3.1), (1.3.11), (1.3.12), (1.3.20), (1.3.21), (1.3.29), (1.3.34).

Выражение в левой части уравнения (1.3.39) является относительно сложным, и мы применим следующий прием из работы [90], позволяющий заменить это выражение на более простое. Используя промежуточный результат из доказательства теоремы 1.5.3 из [136], вместо (1.3.39) можно рассмотреть соотношение

$$\frac{A_1^{(\mathbb{C})}}{M^{\frac{d}{2}}} + \frac{A_2^{(\mathbb{C})}\sqrt{M}}{\sqrt{n}} \sqrt{2 \ln M - \ln \ln M + 2A_3^{(\mathbb{C})}} = L. \quad (1.3.40)$$

Несложно показать, что для любых фиксированных $\bar{M} \in \mathbb{N}$ и $a > 0$ найдется $b > 0$ такое, что при $M > \bar{M}$ выполнено

$$\sqrt{2 \ln M - \ln \ln M + 2A_3^{(\mathbb{C})}} \leq bM^a. \quad (1.3.41)$$

С учетом соотношений (1.3.40), (1.3.41), заменим равенство (1.3.39) на следующее:

$$\frac{A_1^{(\mathbb{C})}}{M^{\frac{d}{2}}} + \frac{A_2^{(\mathbb{C})}\sqrt{M}}{\sqrt{n}} \times bM^a = L. \quad (1.3.42)$$

Из формул (1.3.35), (1.3.42) имеем

$$n = \frac{[A_2^{(\mathbb{C})}]^2 b^2 M^{2a+1}}{\left[L - \frac{A_1^{(\mathbb{C})}}{M^{\frac{d}{2}}}\right]^2} \quad \text{и} \quad \tilde{S}^{(\mathbb{C},L)}(M) = \frac{t [A_2^{(\mathbb{C})}]^2 b^2 M^{2a+1}}{\left[L - \frac{A_1^{(\mathbb{C})}}{M^{\frac{d}{2}}}\right]^2} + S_0. \quad (1.3.43)$$

Дифференцируем функцию $\tilde{S}^{(\mathbb{C},L)}(M)$ по M

$$\frac{\partial \tilde{S}^{(\mathbb{C},L)}(M)}{\partial M} = \frac{t [A_2^{(\mathbb{C})}]^2 b^2 (2a+1) M^{2a}}{\left[L - \frac{A_1^{(\mathbb{C})}}{M^{\frac{d}{2}}}\right]^3} \times \left(L - \frac{A_1^{(\mathbb{C})} [(2a+1)d + 4]}{M^{\frac{d}{2}} (2a+1)d} \right)$$

и найдем точку минимума – она же *условно-оптимальное значение параметра M для \mathbb{C} -подхода*

$$M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L) = \left(\frac{A_1^{(\mathbb{C})} [(2a+1)d + 4]}{(2a+1)d} \right)^{\frac{d}{2}} L^{-\frac{d}{2}}. \quad (1.3.44)$$

Несколько слов о том, как выбирать параметр b . С одной стороны, его следует брать по возможности малым, так как множитель b^2 входит в выражение для трудоемкости (1.3.43). С другой стороны, для значения $M_{opt}^{(C)}(L)$ должно выполняться неравенство (1.3.41). Поэтому выберем b из условия равенства в соотношении (1.3.41) при $M = M_{opt}^{(C)}(L)$:

$$b^2 = \frac{2 \ln M_{opt}^{(C)}(L) - \ln \ln M_{opt}^{(C)}(L) + 2A_3^{(C)}}{\left[M_{opt}^{(C)}(L)\right]^{2a}}. \quad (1.3.45)$$

Из соотношений (1.3.43)–(1.3.45) получаем *условно-оптимальное значение параметра n для C -подхода*

$$n_{opt}^{(C)}(L) = \frac{\left[A_1^{(C)}\right]^{\frac{d}{2}} \left[A_2^{(C)}\right]^2 \left[(2a+1)d+4\right]^{2+\frac{d}{2}}}{16\left[(2a+1)d\right]^{\frac{d}{2}}} \times \\ \times \left[2 \ln M_{opt}^{(C)}(L) - \ln \ln M_{opt}^{(C)}(L) + 2A_3^{(C)}\right] L^{-2-\frac{d}{2}}. \quad (1.3.46)$$

Наконец, для важного предельного случая $a = 0$ имеем

$$M_{opt}^{(C)}(L) = \left[\frac{A_1^{(C)}(d+4)}{d}\right]^{\frac{d}{2}} L^{-\frac{d}{2}}, \\ n_{opt}^{(C)}(L) = \frac{\left[A_1^{(C)}\right]^{\frac{d}{2}} \left[A_2^{(C)}\right]^2 (d+4)^{2+\frac{d}{2}}}{16d^{d/2}} \left[2 \ln M_{opt}^{(C)}(L) - \ln \ln M_{opt}^{(C)}(L) + 2A_3^{(C)}\right] L^{-2-\frac{d}{2}}.$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1.14. *Формулы (1.3.44), (1.3.46) заметно сложнее формул (1.3.37), (1.3.38). Поэтому на практике целесообразнее использовать \mathbb{L}_2 -подход к условной оптимизации алгоритма 1.5, что вполне соответствует рекомендациям из работ [97, 101–103].*

Значения в правых частях соотношений (1.3.37), (1.3.38), (1.3.44), (1.3.46) могут быть нецелыми, поэтому на практике в качестве параметров $M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$, $n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$, $M_{opt}^{(C)}(L)$, $M_{opt}^{(C)}(L)$ следует брать ближайшие к этим значениям целые числа.

Отметим также наличие проблемы выбора или приближенного подсчета констант (1.3.12), (1.3.21), (1.3.25), (1.3.29), входящих в выражения (1.3.36)–(1.3.46). Некоторые нюансы этой проблемы отражены в следующем разделе 1.4, в котором представлены результаты тестовых и прикладных расчетов с использованием функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5.

1.4. Тестирование и применение функционального ядерного вычислительного алгоритма приближения вероятностных плотностей

[54, 55, 58, 65 – 67]

1.4.1. О применении приближений плотностей при рандомизации математических моделей

В этом подразделе мы покажем, как соображения из замечания 1.13 могут пригодиться при рандомизации математических моделей. Приведем *общую схему рандомизации* из [26]. Рассмотрим широко распространенную ситуацию, когда вычислительная вероятностная модель того или иного процесса или явления связана с приближенным численным приближением математического ожидания

$$\hat{I} = \mathbf{E}_{\hat{\xi}}[q(\lambda, \hat{\xi})] = \int_{\mathbb{R}^m} q(\lambda, \mathbf{y}) f_{\hat{\xi}}(\mathbf{y}; \lambda) d\mathbf{y}, \quad (1.4.1)$$

где $\lambda = (\lambda^{(1)}, \dots, \lambda^{(d)}) \in X \subseteq \mathbb{R}^d$ – набор фиксированных (не случайных) параметров, а $\hat{\xi} = (\hat{\xi}^{(1)}, \dots, \hat{\xi}^{(m)})$ – исходный набор m случайных параметров, распределенных в \mathbb{R}^m согласно плотности $f_{\hat{\xi}}(\mathbf{y}; \lambda)$. При этом можно использовать алгоритм метода Монте-Карло

$$\hat{I} \approx \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N \hat{\zeta}_s; \quad \hat{\zeta}_s = q(\lambda, \hat{\xi}_s), \quad (1.4.2)$$

где выборочные значения $\hat{\xi}_1, \dots, \hat{\xi}_N$ численно моделируются (реализуются на ЭВМ) согласно плотности $f_{\hat{\xi}}(\mathbf{y}; \lambda)$.

Часто случается ситуация, когда дополнительные экспериментальные замеры параметра λ дают числа

$$\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_n, \quad (1.4.3)$$

имеющие значительный разброс и позволяющие предположить случайность параметра $\boldsymbol{\lambda}$. Это означает, что рассматриваемая модель требует *рандомизации*. Вместо параметра $\boldsymbol{\lambda}$ вводится случайный вектор $\hat{\boldsymbol{\eta}} = (\hat{\eta}^{(1)}, \dots, \hat{\eta}^{(d)})$, распределенный согласно плотности $f_{\hat{\boldsymbol{\eta}}}(\boldsymbol{x})$; при этом актуальным становится приближенное вычисление значения

$$I = \mathbf{E}q(\hat{\boldsymbol{\gamma}}) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^m} q(\mathbf{y}, \mathbf{x}) f_{\hat{\boldsymbol{\gamma}}}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) d\mathbf{y} d\mathbf{x} \quad (1.4.4)$$

вместо величины \hat{I} из соотношения (1.4.1). Здесь

$$\hat{\boldsymbol{\gamma}} = (\hat{\boldsymbol{\eta}}, \hat{\boldsymbol{\xi}}) = (\hat{\gamma}^{(1)} = \hat{\eta}^{(1)}, \dots, \hat{\gamma}^{(d)} = \hat{\eta}^{(d)}, \hat{\gamma}^{(d+1)} = \xi^{(1)}, \dots, \hat{\gamma}^{(d+m)} = \xi^{(m)})$$

является случайным вектором размерности $k = d + m$, распределенным в \mathbb{R}^k согласно плотности $f_{\hat{\boldsymbol{\gamma}}}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = f_{\hat{\boldsymbol{\eta}}}(\mathbf{x}) \times f_{\hat{\boldsymbol{\xi}}}(\mathbf{y}|\mathbf{x})$; при этом $f_{\hat{\boldsymbol{\xi}}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = f_{\hat{\boldsymbol{\xi}}}(\mathbf{y}; \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{x})$ – условная плотность случайной компоненты $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ вектора $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ при фиксированном $\hat{\boldsymbol{\eta}}$.

По аналогии с соотношением (1.4.2), для вычисления величины (1.4.4) можно применить алгоритм метода Монте-Карло:

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N \zeta_s; \quad \zeta_s = q(\hat{\boldsymbol{\gamma}}_s), \quad (1.4.5)$$

где выборочные значения $\hat{\boldsymbol{\gamma}}_1 = (\hat{\boldsymbol{\eta}}_1, \hat{\boldsymbol{\xi}}_1), \dots, \hat{\boldsymbol{\gamma}}_n = (\hat{\boldsymbol{\eta}}_n, \hat{\boldsymbol{\xi}}_n)$ моделируются согласно плотности $f_{\hat{\boldsymbol{\gamma}}}(\mathbf{y}, \mathbf{x})$; при этом $\hat{\boldsymbol{\eta}}_s$ моделируются согласно плотности $f_{\hat{\boldsymbol{\eta}}}(\mathbf{x})$, а значения $\hat{\boldsymbol{\xi}}_s$ реализуются согласно плотностям $f_{\hat{\boldsymbol{\xi}}}(\mathbf{y}|\hat{\boldsymbol{\eta}}_s)$.

Скорость сходимости погрешности $\delta(N)$ алгоритма (1.4.5) к нулю при $N \rightarrow \infty$ является относительно низкой (конкретнее, $\delta(N)$ имеет порядок $1/\sqrt{N}$ – см., например, [22], а также соотношение (1.2.6)). Поэтому справедливо следующее соображение.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.15. При рандомизации модели, т. е. при выборе случайного параметра (набора параметров) $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ и его плотности распределения $f_{\hat{\boldsymbol{\eta}}}(\mathbf{x})$, следует заботиться о том, чтобы компьютерное моделирование выборочных значений $\hat{\boldsymbol{\eta}}_s$ было экономичным.

При выборе плотности $f_{\hat{\eta}}(x)$ целесообразно использовать значения (1.4.3). Согласно замечаниям 1.9, 1.13, хорошим (и в определенном смысле, наилучшим – см. далее замечание 1.16) приближением функции $f_{\hat{\eta}}(x)$ является многомерный аналог метода полигона частот (1.3.22).

Обсуждение проблемы использования приближения $L^{(M,n)}\tilde{f}_{\eta}(x) = \sum_{i=1}^M \tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n)\chi^{(i,1)}(x)$ из (1.3.22) в описанной схеме рандомизации начнем с одномерного случая: $x \in [a, b] \subseteq \mathbb{R}$ и $\hat{\eta} \in \left[a - \frac{h}{2}, b + \frac{h}{2}\right]$.

В книге [26] отмечено, что в целом ряде приложений *принято использовать* в качестве функции $f_{\hat{\eta}}(x)$ *плотности бета-, гамма- или нормального распределений* с соответствующим выбором параметров этих распределений, обеспечивающим близость этих плотностей к функции $L^{(M,n)}\tilde{f}_{\eta}(x)$ из (1.3.22). Эти распределения весьма удобны для получения аналитических соотношений, связанных с изучаемой моделью.

Однако наши подробные исследования показали, что из-за относительно высокой трудоемкости многократных обращений к генератору стандартных случайных чисел и вычислений логарифмических, степенных и тригонометрических функций в случайных точках, *моделирующие формулы и алгоритмы для бета-, гамма- и нормального распределений являются неэффективными (не экономичными)* – см., например, разделы 12, 13 книги [26]. Поэтому, следуя рекомендациям из замечания 1.15, при рандомизации вычислительных вероятностных моделей и использовании алгоритмов вида (1.4.5) желательно (если это возможно) избегать выбора в качестве $f_{\hat{\eta}}(x)$ плотностей этих трех распределений.

В качестве первой альтернативы можно предложить выбирать $f_{\hat{\eta}}(x)$ из некоторого «банка» элементарных (эффективно моделируемых) вероятностных плотностей, близких по форме к функции $L^{(M,n)}\tilde{f}_{\eta}(x)$ из (1.3.22) (технологии формирования такого банка представлены в работе [26]).

Второй альтернативой выбору бета-, гамма- или нормального распределений является использование приближений неизвестных или сложно моделируемых плотностей, в частности, таких, которые построены на основании известных (например, полученных с помощью натуральных экспериментов или измерений) данных вида (1.4.3). Конкретнее, можно непосредственно *взять в качестве одномерной или многомерной плотности $f_{\hat{\eta}}(x)$ саму функцию $L^{(M,n)}\tilde{f}_{\eta}(x)$* из (1.3.22) в виде

$$f_{\hat{\eta}}(x) = L^{(M,n)}\tilde{f}_{\eta}(x) = \sum_{i=1}^M p_i f_i(x); \quad p_i = \tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) \times h^d, \quad f_i(x) = \frac{\chi^{(i,1)}(x)}{h^d}. \quad (1.4.6)$$

Для плотности распределения (1.4.6) можно предложить эффективный (экономичный) алгоритм вычислительного моделирования выборочных значений $\hat{\eta}_s$ для последующего использования в вычислениях вида (1.4.5). Вид плотности (1.4.6) указывает на возможность применения *метода дискретной суперпозиции* (см., например, раздел 11.1 учебника [26]).

Проиллюстрируем эту возможность в одномерном случае. Здесь функция (1.4.6) является кусочно-линейной и для сетки (1.2.3) на отрезке $[a, b]$ ее удобно представить в виде

$$f_{\hat{\eta}}(x) = \sum_{i=1}^{M-1} \tilde{p}_i \tilde{f}_i(x); \quad \tilde{p}_i = \frac{[\tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) + \tilde{f}_{\eta}^{(x_{i+1})}(n)]h}{2}; \quad \tilde{f}_i(x) = A_i x + B_i;$$

$$A_i = \frac{2[\tilde{f}_{\eta}^{(x_{i+1})}(n) - \tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n)]}{[\tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) + \tilde{f}_{\eta}^{(x_{i+1})}(n)]h^2}, \quad B_i = \frac{2[\tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n)x_{i+1} - \tilde{f}_{\eta}^{(x_{i+1})}(n)x_i]}{[\tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) + \tilde{f}_{\eta}^{(x_{i+1})}(n)]h^2}; \quad i = 1, \dots, M-1.$$

Получаем следующий *алгоритм модифицированного метода дискретной суперпозиции* (см. раздел 11.2 учебника [26]).

АЛГОРИТМ 1.15 [26]. 1. Моделируем стандартное случайное число α_0 (т. е. выборочное значение случайной величины $\alpha \in U(0,1)$, равномерно распределенной в интервале $(0,1)$) и, используя наиболее эффективный (экономичный) из хорошо известных и разнообразных методов моделирования целочисленной случайной величины ρ с распределением

$$P\{\rho = i\} = \tilde{p}_i; \quad i = 1, \dots, M-1$$

(см. в первую очередь алгоритмы 10.2, 10.5–10.8 из книги [26]), получаем выборочное значение $\rho_0 = m$.

2. Моделируем выборочное значение $\hat{\eta}_0$ случайной величины $\hat{\eta}$, распределенной согласно плотности $f_{\hat{\eta}}(x)$, по формуле

$$\hat{\eta}_0 = \frac{-B_m + \sqrt{(B_m + A_m x_{m-1})^2 + 2A_m \beta_0(\alpha_0)}}{A_m},$$

где $\beta_0(\alpha_0) = (\alpha_0 - \sum_{i=1}^{m-1} \tilde{p}_i) \tilde{p}_m^{-1}$ для алгоритмов 10.2, 10.6, 10.7 из книги [26] и $\beta_0(\alpha_0) = M\alpha_0 - m + 1$ для алгоритмов 10.5, 10.8 из книги [26].

Аналог алгоритма 1.15 для плотности (1.4.6) несложно строится и в многомерном случае (подробности см. в разделах 17, 18 книги [137]). Здесь принципиальным является то обстоятельство, что образующая функция базиса Стренга – Фикса $\{\chi^{(i,r)}(\mathbf{x}); r \in \mathbb{N}; i = 1, \dots, M\}$ (см. формулы (1.3.4)) – B -сплайн r -го порядка $\beta^{(r)}(u)$ – является плотностью распределения случайной величины $\tau^{(r)}$, имеющей простую моделирующую формулу $\tau_0^{(r)} = \alpha_1 + \dots + \alpha_r + \alpha_{r+1} - \frac{r+1}{2}$ (здесь α_j – стандартные случайные числа) – см. пример 7 из главы 3 § 5 книги [134]; в частности, для $r = 1$ имеем моделирующую формулу $\tau_0^{(1)} = \alpha_1 + \alpha_2 - 1; \alpha_1, \alpha_2 \in U(0,1)$.

В заключение этого подраздела отметим, что в целом ряде работ (см., в частности, [31–33, 35, 36]) выдвигаются соображения о возможности (и даже целесообразности) широкого использования проекционного алгоритма 1.7 приближения вероятностной плотности $f_{\hat{\eta}}(\mathbf{x})$ по заданным выборочным значениям (1.4.3). Однако приближения

$$f_{\hat{\eta}}(\mathbf{x}) \approx L^{(M,n)} \tilde{f}_{\hat{\eta}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w^{(i)}(n) \chi^{(i)}(\mathbf{x}); \quad w^{(i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \chi^{(i)}(\boldsymbol{\eta}_j)$$

этого алгоритма не позволяют, в частности, строить аналоги алгоритма 1.15 из-за того, что функции $\{\chi^{(i)}(\mathbf{x}); i = 1, \dots, M\}$ ортонормированного базиса (В.12) являются знакопеременными. Более того, содержание всех разделов первой главы данной диссертации и, в частности, замечания 1.3–1.5, 1.8, 1.13 позволяют сделать следующее важное уточнение замечания 1.9 для случая (В.10).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.16. Многомерный аналог полигона частот (1.3.22) (функциональный ядерный вычислительный алгоритм 1.5 с аппроксимационным базисом (1.1.14), коэффициентами (1.3.8) и ядерной функцией (1.1.16)) является эффективным и универсальным алгоритмом приближения неизвестной вероятностной плотности $f_{\eta}(\mathbf{x})$ по заданным выборочным значениям (1.4.3) (превосходящим, в частности, проекционный алгоритм 1.7) с точки зрения возможностей его применения для решения практически значимых задач, а также для решения задачи 1.1 (с выбором подходящих условно-оптимальных параметров) и рандомизации (применения плотностей вида (1.4.6) в расчетах по методу Монте-Карло вида (1.4.5)).

**1.4.2. О зависимости затрат и погрешности функционального
ядерного вычислительного алгоритма 1.5 от параметра M
(тестовый пример)**

Нюансы решения задачи 1.1, сформулированной в подразделе 1.3.1, были изучены нами на примере одномерной выборки, которая моделировалась численно по формулам

$$\eta_j = -\frac{\ln[1 - \alpha_j(1 - e^{-\lambda A})]}{\lambda}; \quad j = 1, \dots, \hat{n}; \quad \lambda > 0, A > 0; \quad (1.4.7)$$

здесь $\alpha_j \in U(0,1)$ – стандартные случайные числа. Ситуация здесь является тестовой по той причине, что соотношения (1.4.7) представляют собой **формулы метода обратной функции распределения** для вычислительного моделирования одномерной случайной величины η , имеющей **плотность усеченного экспоненциального распределения**

$$f_{\eta}(x) = \frac{\lambda e^{-\lambda x}}{1 - e^{-\lambda A}}; \quad 0 < x < A; \quad \lambda > 0 \quad (1.4.8)$$

(см. пример 11.7 из раздела 11.6 учебника [26]).

Следуя замечанию 1.16, будем изучать свойства **одномерного полигона частот** вида (1.3.22):

$$f_{\eta}(x) \approx L^{(M,n)} \tilde{f}_{\eta}(x) = \sum_{i=1}^M \tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) \beta^{(1)}\left(\frac{x-x_i}{h}\right); \quad (1.4.9)$$

$$\tilde{f}_{\eta}^{(x_i)}(n) = \frac{1}{nh} \sum_{j=1}^n X^{(x_i-\frac{h}{2}, x_i+\frac{h}{2})}(\eta_j); \quad x_i = (i-1)h + \frac{h}{2}; \quad h = \frac{A}{M}; \quad i = 1, \dots, M.$$

Здесь $X^{(x_i-\frac{h}{2}, x_i+\frac{h}{2})}(x)$ – индикатор множества $(x_i - \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2})$, а η_1, \dots, η_n – подмножество (1.4.3) набора значений (1.4.7) нужного объема n .

Справедливости ради можно отметить, что конкретно для тестовой функции (1.4.8), схожей с решением (1.2.2) тестового интегрального уравнения (1.2.1), скорее всего, справедлива ситуация, отраженная в подразделах 1.2.4, 1.2.6 данной диссертации: приближение плотности (1.4.8) с помощью проекционного алгоритма 1.7 с базисом Эрмита (1.2.11) будет иметь неудовлетворительную точность, а вот тот же проекционный алгоритм 1.7 с базисом Лагерра (1.2.12) может оказаться более эффективным, чем приближение (1.4.9) (при удачном выборе параметра M). Но в любом случае для алгоритма 1.7 не приходится рассуждать о выборе условно-оптимальных параметров.

Для функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 и, в частности, для его вариации (1.4.9) для плотности (1.4.8) можно численно подтвердить соображения теории условной оптимизации из раздела 1.3 данной диссертации. Опишем соответствующие результаты.

В расчетах и в рассуждениях условной оптимизации были выбраны следующие параметры:

$$A = 1; \quad \lambda = 1; \quad L = 0,003. \quad (1.4.10)$$

Первое, что нам удалось подтвердить – это отсутствие прямой зависимости затрат (1.3.35) вычислительной схемы (1.4.9) от параметра M . Для подтверждения этого факта был проведен следующий численный эксперимент. Были зафиксированы десять значений параметра M :

$$M = 7; M = 11; M = 12; M = 14; M = 15; M = 16; M = 21; M = 28; M = 70; M = 140$$

(выбор таких значений был увязан с найденным для параметров (1.4.10) оптимальным значением $M_{opt}^{(L_2)}(L) \approx 14$ – см. далее соотношения (1.4.12), а именно, брались

соответственно 50%, 80%, 90%, 110%, 120%, 150%, 200%, 500%, 1000% от найденного оптимального $M_{opt}^{(L_2)}(L)$) и для каждого значения M реализовывались по 11 вычислений (1.4.9) с разным количеством n выборочных значений (1.4.7):

$$n = 325687, n = 1628438, n = 2605501, n = 2931189, n = 3256877, n = 3582564, \\ n = 3908252, n = 4885315, n = 6513754, n = 16284385, n = 32568770$$

(эти значения увязаны с найденным для параметров (1.4.10) оптимальным значением $n_{opt}^{(L_2)}(L) \approx 3256877$ – см. далее соотношения (1.4.12), аналогично выбирались соответственно 10%, 50%, 80%, 90%, 110%, 120%, 150%, 200%, 500%, 1000% от найденного оптимального $n_{opt}^{(L_2)}(L)$).

На рисунке 1.4 показано, что время работы ядерного метода (1.4.9) приближения вероятностной плотности (1.4.8) для различных M при одинаковых n одинаково (время измеряется в миллисекундах).

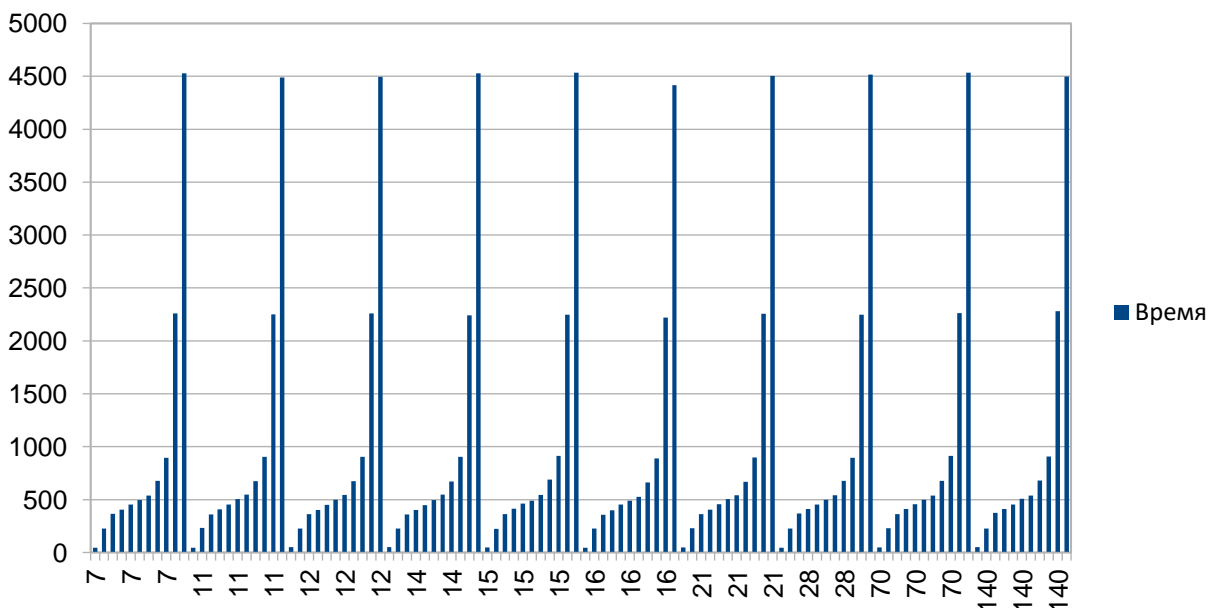


Рис. 1.4. Иллюстрация сохранения затрат многомерного аналога метода полигона частот с ростом параметра M на примере приближения (1.4.9) плотности (1.4.8).

Интересным оказался и тот факт, что для того же выбора десяти значений M и одиннадцати значений n обнаружился рост максимума погрешности приближения (1.4.9) функции (1.4.8) для больших M – см. рисунок 1.5. Таким образом, параметр

M оптимальных версий функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 имеет определенные ограничения сверху.

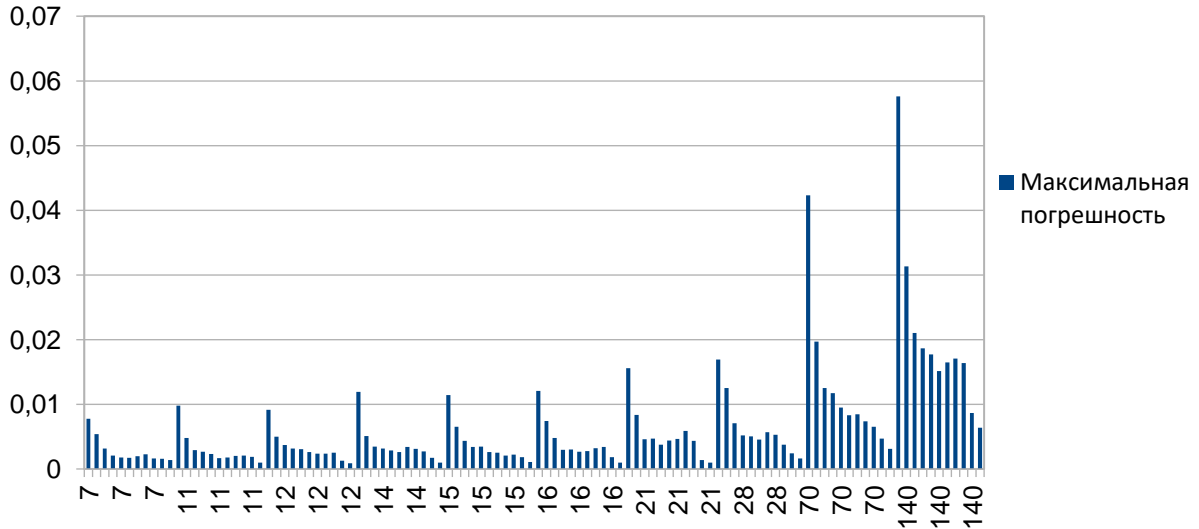


Рис. 1.5. Иллюстрация роста максимума погрешности многомерного аналога метода полигона частот с ростом параметра M на примере приближения (1.4.9) плотности (1.4.8).

1.4.3. Условно-оптимальные параметры для тестового примера

Следуя замечанию 1.14, рассмотрим формулы

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

(см. соотношения (1.3.37), (1.3.38)) для условно-оптимальных параметров приближения (1.4.9) функции (1.4.8) для \mathbb{L}_2 -подхода. В этих формулах $d = 1$,

$$A_1^{(\mathbb{L}_2)} = 2 [H_{det}^{(\mathbb{L}_2)}]^2 + 2 [H_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}]^2, A_2^{(\mathbb{L}_2)} = H_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)};$$

$$H_{det}^{(\mathbb{L}_2)} = \frac{[H^{(h \rightarrow M)}]^2}{8} \max_{x \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} f_\eta(x) \right| \sqrt{\text{mes } X}, H_{bias}^{(\mathbb{C})} = \frac{[H^{(h \rightarrow M)}]^2}{24} \max_{x \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} f_\eta(x) \right| \sqrt{\text{mes } X} = \frac{H_{det}^{(\mathbb{L}_2)}}{3};$$

$$H_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)} = \frac{f_{max} \times \text{mes } X}{H^{(h \rightarrow M)}}, \quad \text{где } f_{max} = \max_{x \in X} f_\eta(x);$$

см. формулы (1.3.5), (1.3.12), (1.3.21), (1.3.25).

Для функции (1.4.8) $X = (0, A)$; $\text{mes } X = A$; $H^{(h \rightarrow M)} = A$;

$$f_{max} = f_{\eta}(0) = \frac{\lambda}{1 - e^{-\lambda A}}; \quad \max_{x \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} f_{\eta}(x) \right| = \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} f_{\eta}(0) \right| = \frac{\lambda^3}{1 - e^{-\lambda A}}. \quad (1.4.11)$$

Итого получаем

$$A_1^{(\mathbb{L}_2)} = 2 \times \frac{10}{9} \times \left[\frac{A^2}{8} \times \frac{\lambda^3}{1 - e^{-\lambda A}} \times \sqrt{A} \right]^2 = \frac{5A^5 \lambda^6}{145(1 - e^{-\lambda A})^2}; \quad A_2^{(\mathbb{L}_2)} = \frac{\lambda}{1 - e^{-\lambda A}}.$$

Таким образом,

$$M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = \frac{5^{\frac{1}{4}} A^{\frac{5}{4}} \lambda^{\frac{3}{2}}}{2 \times 3^{\frac{1}{2}} (1 - e^{-\lambda A})^{\frac{1}{2}}} \times 5^{\frac{1}{4}} \times L^{-\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{3}} \times \frac{\sqrt[4]{A^5} \sqrt{\lambda^3}}{\sqrt{L(1 - e^{-\lambda A})}},$$

$$n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) = \frac{\lambda}{1 - e^{-\lambda A}} \times \frac{5^{\frac{1}{4}} A^{\frac{5}{4}} \lambda^{\frac{3}{2}}}{2 \times 3^{\frac{1}{2}} (1 - e^{-\lambda A})^{\frac{1}{2}}} \times 5^{\frac{5}{4}} \times \frac{L^{-\frac{5}{2}}}{4} = \frac{\sqrt{125}}{8\sqrt{3}} \times \frac{\sqrt[4]{A^5} \sqrt{\lambda^5}}{\sqrt{L^5(1 - e^{-\lambda A})^3}}.$$

Особо отметим, что успешному получению последних формул способствовал относительно простой способ подсчета величин (1.4.11) для известной тестовой плотности (1.4.8).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.17. Для реальных расчетов, когда задана выборка (1.4.3), а сама плотность $f_{\eta}(x)$ неизвестна, требуется разработка и применение специальных подходов для приближения максимумов на компакте X как самой функции $f_{\eta}(x)$, так и ее вторых производных по компонентам $(x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$ векторной переменной x .

Для расчетных параметров (1.4.10) получаем

$$M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) \approx 14; \quad n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) \approx 3256877. \quad (1.4.12)$$

Для подтверждения оптимальности параметров (1.4.12) были проведены две серии экспериментов.

В первой серии экспериментов для фиксированного условно-оптимального $n = n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) \approx 3256877$ строились приближения (1.4.9) для различных M (см. таблицу 1.6 и рисунок 1.6). Посчитывались: максимальная погрешность, максимальная дисперсия $[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}$, величины $\Delta_1 = \Delta(n; 0,80; [\mathbf{D}\zeta(x)]_{max})$, $\Delta_2 =$

$\Delta(n; 3; [\mathbf{D}\zeta(x)]_{max})$ (см. формулы (1.2.6), (1.2.13)), а также время работы алгоритма в секундах.

M	n	Максимальная погрешность	$[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}$	Δ_1	Δ_2	Время (сек.)
7	3256877	0,00175903	8,14807	0,00126537	0,00474513	0,453
11	3256877	0,00231084	14,3475	0,0016791	0,00629663	0,454
12	3256877	0,003064	15,9139	0,00176839	0,00663146	0,450
14	3256877	0,00287162	19,0364	0,00193411	0,00725293	0,446
15	3256877	0,00345719	20,6136	0,00201264	0,00754741	0,461
16	3256877	0,00302873	22,2067	0,00208896	0,00783361	0,452
21	3256877	0,0037414	30,0369	0,0024295	0,00911063	0,455
28	3256877	0,00502378	41,1605	0,002844	0,010665	0,453
70	3256877	0,0094731	107,53	0,00459678	0,0172379	0,457
140	3256877	0,0177308	218,208	0,00654825	0,0245559	0,453

Таблица 1.6. Результаты реализации приближения (1.4.9) плотности (1.4.8)

для фиксированного $n = n_{opt}^{(l_2)}(L) \approx 3256877$ и для различных M .

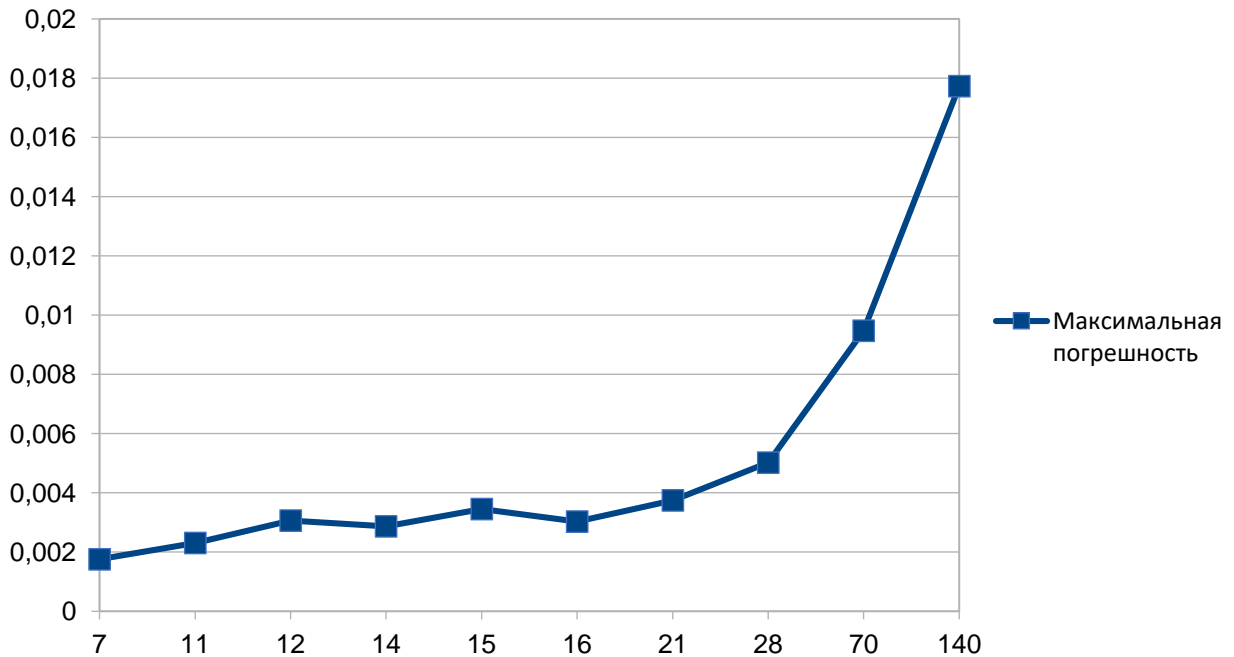


Рис. 1.6. Максимальная погрешность приближения (1.4.9) плотности (1.4.8)

для фиксированного $n = n_{opt}^{(l_2)}(L) \approx 3256877$ и для различных M .

По аналогии с комментариями к рисунку 1.4 из подраздела 1.4.2, можно отметить, что времена расчетов одинаковы для разных M . При увеличении числа M узлов сетки максимальная дисперсия $[\mathbf{D}\zeta(x)]_{max}$ возрастает (что вполне соответствует соображениям из подраздела 1.1.6 – см. в частности, формулу (1.3.24)). Важным является и то, что при $M = 14$ максимальная погрешность меньше заданной верхней границы $L = 0,003$.

Вторая серия экспериментов проводилась для фиксированного условно-оптимального $M = M_{opt}^{(L_2)}(L) \approx 14$; здесь строились приближения (1.4.9) для различных n (см. таблицу 1.7 и рисунок 1.7). Посчитывались те же величины: максимальная погрешность, максимальная дисперсия $[D\zeta(x)]_{max}$, величины Δ_1 , Δ_2 , время работы алгоритма в секундах.

M	n	Максимальная погрешность	$[D\zeta(x)]_{max}$	Δ_1	Δ_2	Время (сек.)
14	325687	0,0119271	19,0867	0,00612427	0,022966	0,050
14	1628438	0,00508729	19,0262	0,00273452	0,0102544	0,226
14	2605501	0,00345071	19,0501	0,00216318	0,00811193	0,359
14	2931189	0,00317623	19,0445	0,00203917	0,00764688	0,402
14	3256877	0,00287162	19,0364	0,00193411	0,00725293	0,446
14	3582564	0,00261716	19,0395	0,00184426	0,00691596	0,496
14	3908252	0,00341862	19,0462	0,00176605	0,00662268	0,546
14	4885315	0,00309792	19,0581	0,0015801	0,00592536	0,672
14	6513754	0,0027305	19,0613	0,00136852	0,00513195	0,903
14	16284385	0,00169939	19,0555	0,0008654	0,00324523	2,241

Таблица 1.7. Результаты реализации приближения (1.4.9) плотности (1.4.8)

для фиксированного $M = M_{opt}^{(L_2)}(L) \approx 14$ и для различных n .

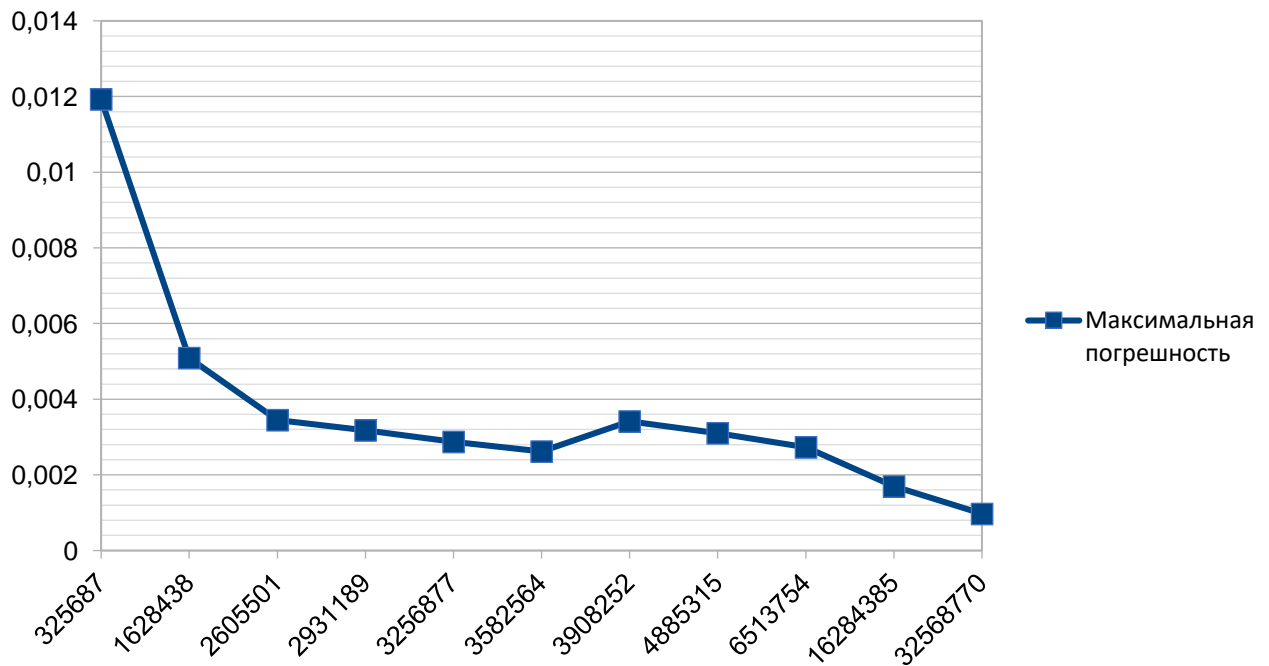


Рис. 1.7. Максимальная погрешность приближения (1.4.9) плотности (1.4.8)

для фиксированного $M = M_{opt}^{(L_2)}(L) \approx 14$ и для различных n .

Прежде всего отметим, что максимальная погрешность начинает быть меньше заданной верхней границы погрешности $L = 0,003$ начиная с оптимального $n = n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L) \approx 3256877$. При увеличении числа n используемых значений (1.4.3) (по сравнению с $n = n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L)$) растет время работы алгоритма (1.4.9), а при уменьшении n не достигается заданный уровень верхней границы погрешности L .

При обсуждении результатов оптимизации и расчетов из приведенных в данном подразделе тестовых примеров было отмечено, что использование максимума $\max_{x \in X} \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} f_\eta(x) \right|$ в оценках сверху для детерминированной компоненты $\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$ и компоненты смещения $\delta_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$ кажется достаточно «жестким» по сравнению с оценками вида $\left[\tilde{\delta}_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M) \right]^2 \leq \tilde{H}_{bias}^{(\mathbb{L}_2)} M^{-4}$; $\tilde{H}_{bias}^{(\mathbb{L}_2)} = \frac{[H^{(h \rightarrow M)}]^4}{576} \int_0^A \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} f_\eta(x) \right]^2 dx$ для классических «непрерывных» ядерных статистических оценок плотности (см., например, [101, 102]). В связи с этим возникла идея попробовать использовать следующую двух-стадийную технологию выбора параметров для используемого в исследуемом примере приближения плотности (1.4.8) полигона частот (1.4.9) (по аналогии с рассмотренным далее – в главе 2 – методом 2.1).

Сначала выбираем параметр $M = \tilde{M}$ по формулам

$$2 \times 16 \times \frac{[H^{(h \rightarrow M)}]^4 \tilde{M}^{-4}}{576} \int_0^A \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} f_\eta(x) \right]^2 dx = \frac{L^2}{2} \quad \text{или} \quad \tilde{M} = \frac{H^{(h \rightarrow M)}}{\sqrt{3L}} \left(\int_0^A \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} f_\eta(x) \right]^2 dx \right)^{1/4};$$

здесь учтено соотношение (1.3.3), а также то, что в рассматриваемом примере $\delta_{det}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$ примерно в 3 раза больше $\delta_{bias}^{(\mathbb{L}_2)}(M)$ (1.3.12), (1.3.21). Для рассматриваемого примера имеем $\tilde{M} = 11$.

Далее рассматриваем уравнение

$$\tilde{\delta}_{stoch}^{(\mathbb{L}_2)}(\tilde{M}, \tilde{n}) = \frac{f_{max} \times \text{mes } X \times \tilde{M}}{H^{(h \rightarrow M)} \tilde{n}} = \frac{L^2}{2} \quad \text{или} \quad \tilde{n} = \frac{2f_{max} \times \text{mes } X \times \tilde{M}}{H^{(h \rightarrow M)} L^2}.$$

Для рассматриваемого примера имеем $\tilde{n} = 3779382$. Полученные параметры \tilde{M} и \tilde{n} дают погрешность 0,00169891 и временные затраты 0,542 секунд. Таким обра-

зом, выбранные по двух-стадийному методу параметры дали погрешность, примерно в два раза меньше требуемой, но временные затраты (а именно они являются критерием оптимальности) заметно выросли (по сравнению со случаем условно-оптимальных параметров, полученных по методу В.1).

1.5. Основные выводы главы 1

В первом разделе главы 1 представлены различные функциональные вычислительные статистические алгоритмы. Для приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (В.2) определены: локальный алгоритм метода зависимых испытаний (алгоритм 1.1), алгоритм метода сопряженных блужданий (алгоритм 1.2), проекционный статистический алгоритм (алгоритм 1.3), ядерный (проекционно-сеточный) статистический алгоритм (алгоритм 1.4). 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 В.1.

Для решения методической задачи (см. замечание 1.10) приближения интеграла, зависящего от параметра $\varphi(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$, представлены: алгоритм метода зависимых испытаний (алгоритм 1.8), алгоритм с независимыми оценками в узлах (алгоритм 1.9), а также малоиспользуемые ядерный и проекционный алгоритмы (алгоритмы 1.6 и 1.10).

Для численного решения весьма актуальной задачи оперативного вычислительного приближения вероятностных плотностей $f_\eta(\mathbf{x})$ (см. задачу 1.1 из подраздела 1.3.1) по заданным выборочным значениям сформулирован проекционный алгоритм (алгоритм 1.7), а также предложен (основанный на классических подходах теории аппроксимации функций) функциональный ядерный вычислительный алгоритм (алгоритм 1.5).

Кроме того, для задачи приближения решения $\varphi(\mathbf{x})$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (В.2) описаны малоэффективные детерминированные и

статистические алгоритмы, основанные на применении кубатурных формул (алгоритмы 1.11–1.13).

Для представленных алгоритмов 1.1–1.13 описаны их преимущества и недостатки (см. в первую очередь замечания 1.1–1.5, 1.9, 1.11). Из этого перечня особо выделено замечание 1.9 о том, что ядерные алгоритмы 1.4, 1.5 наиболее универсальны в смысле их применения для решения практически значимых задач (в том числе, по причине возможности выбора условно-оптимальных параметров по методу В.1). Оценке соответствующих перспектив посвящен дальнейший материал первой главы диссертации.

В частности, приведен достаточно основательный обзор практически значимых интегральных уравнений Фредгольма второго рода (В.2). Описаны задачи переноса излучения (в том числе, нелинейные), кинетические задачи, краевые задачи математической физики. Отмечено, что ядра $k(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ практически значимых уравнений (В.2) содержат особенности, не допускающие вычисление $k(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ в случайных точках (за редким исключением). Отмечено, что функциональные ядерные вычислительные статистические алгоритмы 1.4, 1.5 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 из раздела 4.10 учебника [22], позволившие провести подробный сравнительный анализ функциональных статистических алгоритмов 1.1–1.4. Здесь, в частности, получено согласие с выводами из предыдущих работ [27, 28], связанных со сравнением алгоритмов 1.1, 1.2, 1.4. Подтверждены численная неустойчивость и крайняя зависимость проекционного алгоритма 1.3 от выбираемого базиса; кроме того, при проведении расчетов отмечено и учтено, что этот алгоритм не допускает на сегодняшний день применения метода В.1 для получения условно-оптимальных параметров (см. замечание 1.4).

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 1.4, отличные от многомерного аналога метода полигона частот, так и провести объективное сравнение алгоритмов 1.1–1.4. К сожалению, в этом сравнении ядерный алгоритм 1.4 оказался едва ли не худшим, однако из приведенного в подразделе 1.1.7 обзора, следует, что такое соотношение верно только для упрощенной тестовой одномерной задачи.

Одним из основных преимуществ предложенного в подразделе 1.1.4 функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 приближения вероятностных плотностей $f_{\eta}(x)$ является возможность его условной оптимизации по методу В.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 $M_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L), n_{opt}^{(\mathbb{L}_2)}(L), M_{opt}^{(\mathbb{C})}(L), n_{opt}^{(\mathbb{C})}(L)$ для заданного уровня погрешности L .

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).

Результаты главы 1 опубликованы в работах [50–67].

В заключение отметим, что, в силу замечаний 1.9, 1.16, актуальным и целесообразным является интенсивное развитие теории и приложений многомерных ана-

логов метода полигона частот (алгоритмов 1.4, 1.5). В частности, весьма перспективными видятся применения соответствующего варианта функционального ядерного вычислительного алгоритма 1.5 для обработки больших данных (см. задачу 1.1). При этом достаточно глубоко должны быть разработаны подходы, упомянутые в замечании 1.17, для эффективной оценки максимумов самой приближаемой плотности и ее покомпонентных вторых производных.

ГЛАВА 2. ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЕТОЧНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ

2.1. Условная оптимизация функциональных итерационных алгоритмов [50 – 53]

2.1.1. Условная оптимизация функционального итерационного алгоритма с умножением на «большие» матрицы (С-подход)

В этой главе и в приложении представлены результаты «старых» (проведенных более десятилетия назад) исследований по оптимизации и тестированию функциональных вычислительных статистических алгоритмов из работ [38–53]. С точки зрения замечаний 1.1, 1.9–1.13, 1.16, перспективы применения представленных в данной главе функциональных вычислительных статистических алгоритмов для приближения решения $\varphi(x)$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода (В.2) и интеграла, зависящего от параметра $\varphi(x) = \int_Y g(x, y) dy$, в практически значимых вычислениях кажутся неясными. Тем не менее, сразу целый ряд результатов главы 2 и приложения имеют методическое значение, настолько весомое, что они включены научным руководителем и соавтором наших работ проф. А. В. Войтишеком в специальные курсы для студентов и аспирантов НГУ и ИВМиМГ СО РАН и в соответствующие методические издания [30, 118, 120, 137].

В данном подразделе мы проведем оптимизацию по методу В.1 детерминированного (нерандомизированного) функционального алгоритма 1.11 приближения решения одномерного уравнения (В.2).

Рассмотрим случай, когда в качестве аппроксимационного базиса (В.12) используются функции линейной аппроксимации (1.1.14), а в качестве коэффициентов (1.1.1) – простейшие коэффициенты (1.1.17):

$$\varphi(x) \approx L^{(M,S)} \hat{\varphi}(x) = \sum_{i=1}^M \hat{\varphi}_i^{(S)} \beta^{(1)} \left[\frac{x - a - (i - 1)h}{h} \right] \quad (2.1.1)$$

(это аналог формул (1.3.22), (1.4.9)) для сетки $x_i = a + (i - 1)h; h = \frac{b-a}{M-1}; i = 1, \dots, M$ (см. соотношения (1.1.38)). В формуле (2.1.1) $\hat{\varphi}_i^{(S)}$ – это i -я компонента вектора $\mathbf{y}^{(S)} = \sum_{s=0}^S \mathbf{A}^s \mathbf{b}$, получающегося в результате реализации итерационного процесса

$$\mathbf{y}^{(s+1)} = \mathbf{A}\mathbf{y}^{(s)} + \mathbf{b}; \quad \mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{b}; \quad s = 0, 1, \dots, S - 1 \quad (2.1.2)$$

(см. формулы (1.1.42), (1.1.43)) для приближения решения системы

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b}; \quad \mathbf{A} = \{a_{ij} = hk(x_j, x_i); i, j = 1, \dots, M\}; \quad \mathbf{b} = (f(x_1), \dots, f(x_M))^{(T)} \quad (2.1.3)$$

(см. формулу (1.1.40)).

Используем детерминированную версию \mathbb{C} -подхода (B.18) и по аналогии с формулами (1.1.19) разложим погрешность

$$\delta^{(\mathbb{C})}(M, S) = \|\varphi - L^{(M, S)}\hat{\varphi}\|_{\mathbb{C}(X)} = \sup_{x \in [a, b]} |\varphi(x) - L^{(M, S)}\hat{\varphi}(x)|$$

в сумму детерминированной и «счетной» погрешности итерационного процесса (2.1.2):

$$\delta^{(\mathbb{C})}(M, S) \leq \delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) + \delta_{iter}^{(\mathbb{C})}(M, S); \quad (2.1.4)$$

$$\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) = \|\varphi - L^{(M)}\varphi\|_{\mathbb{C}(X)}; \quad \delta_{iter}^{(\mathbb{C})}(M, S) = \|L^{(M)}\varphi - L^{(M, S)}\hat{\varphi}\|_{\mathbb{C}(X)}.$$

Из теоремы 1.1 (примененной для функции $\varphi(x)$ вместо $f_\eta(x)$) следует, что

$$\delta_{det}^{(\mathbb{C})}(M) \leq \frac{\hat{A}_1^{(\mathbb{C})}}{(M-1)^2}; \quad \hat{A}_1^{(\mathbb{C})} = \frac{(b-a)^2}{8} \max_{x \in [a, b]} \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) \right|. \quad (2.1.5)$$

Из утверждения 1.3, по аналогии с соотношениями (1.3.15), (1.3.16), получаем

$$\delta_{iter}^{(\mathbb{C})}(M, S) \leq \max_{i=1, \dots, M} |\varphi(x_i) - \hat{\varphi}_i^{(S)}| \stackrel{\text{def}}{=} \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^{(S)}\|_{l_1}. \quad (2.1.6)$$

Для любой векторно-матричной нормы $\|\mathbf{z}\|, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^M$ справедливо следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2.1 [138]. Если выполнено соотношение $\|\mathbf{A}\| < 1$, то последовательность векторов $\mathbf{y}^{(S)} = \sum_{s=0}^S \mathbf{A}^s \mathbf{b}$ сходится к единственному решению \mathbf{y} уравнения $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b}$, причем

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{y}^{(S)}\| \leq \frac{\|\mathbf{A}\|^S}{1 - \|\mathbf{A}\|} \|\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{b}\|. \quad (2.1.7)$$

Из соотношений (2.1.6) и (2.1.7) следует, что при выполнении условия

$$\|\mathbf{A}\|_{l_1} \stackrel{\text{def}}{=} \max_{j=1, \dots, M} \sum_{i=1}^M |a_{ij}| < 1 \quad (2.1.8)$$

справедливо неравенство

$$\delta_{iter}^{(C)}(M, S) \leq \hat{A}_2^{(C)} \|\mathbf{A}\|_{l_1}^S; \quad \hat{A}_2^{(C)} = \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{b}\|_{l_1}}{1 - \|\mathbf{A}\|_{l_1}}. \quad (2.1.9)$$

Из соотношений (2.1.4), (2.1.5), (2.1.9) получаем верхнюю оценку погрешности $\delta^{(C)}(M, S)$ версии (2.1.1) алгоритма 1.11:

$$\delta^{(C)}(M, S) \leq \frac{\hat{A}_1^{(C)}}{(M-1)^2} + \hat{A}_2^{(C)} \|\mathbf{A}\|_{l_1}^S = UP^{(C)}(M, S).$$

Особо отметим, что на практике имеются проблемы нахождения констант $\hat{A}_1^{(C)}$ (эта величина, согласно соотношению (2.1.5), зависит от максимума второй производной неизвестной приближаемой функции $\varphi(x)$ – это аналог замечания 1.17) и $\hat{A}_2^{(C)}$ (здесь, в особенности для случая $M \gg 1$, затруднено прямое вычисление величин $\|\mathbf{A}\|_{l_1}$ и $\|\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{b}\|_{l_1}$). К слову, последние две величины могут быть приближены с помощью предварительных расчетов с использованием обсуждаемой далее рандомизации матрицы \mathbf{A} из алгоритма 1.13 (см. подразделы 1.1.6, 2.1.2–2.1.5).

Продолжая рассуждения метода В.1, отметим, что затраты ЭВМ на получение приближения $L^{(M,S)} \hat{\varphi}(x)$ из (2.1.1) зависят от параметров M и S следующим образом:

$$\hat{S}(M, S) = A_3 M^2 S + \hat{S}_0; \quad (2.1.10)$$

здесь \hat{S}_0 – время вычисления двух ненулевых слагаемых $\hat{\varphi}_i^{(S)} \beta^{(1)} \left[\frac{x-a-(i-1)h}{h} \right]$ в сумме (2.1.1) для заданной точки $x \in [a, b]$.

Зафиксируем допустимый уровень погрешности L и рассмотрим уравнение вида $UP^{(C)}(M, S) = L$ (см. соотношение (В.16)):

$$\frac{\hat{A}_1^{(C)}}{(M-1)^2} + \hat{A}_2^{(C)} \|\mathbf{A}\|_{l_1}^S = L.$$

Из последнего уравнения получаем

$$M = \sqrt{\frac{\hat{A}_1^{(C)}}{L - \hat{A}_2^{(C)} \|A\|_{l_1}^S}} + 1.$$

Подставим это выражение в соотношение (2.1.10) и рассмотрим функцию

$$\tilde{S}^{(C,L)}(S) = \frac{A_3 \hat{A}_1^{(C)} S}{L - \hat{A}_2^{(C)} \|A\|_{l_1}^S} + 2A_3 S \sqrt{\frac{\hat{A}_1^{(C)}}{L - \hat{A}_2^{(C)} \|A\|_{l_1}^S}} + A_3 S + \hat{S}_0.$$

Нахождение минимума этой функции крайне затруднено, а значит, трудно получить условно-оптимальные значения параметров M и S .

При выборе параметров M и S алгоритма 1.11 более простые выкладки дает следующий подход.

МЕТОД 2.1. *Выбираются положительные значения L_{det} и L_{iter} – допустимые уровни для компонент погрешностей (2.1.5) и (2.1.9), соответственно (при этом $L_{det} + L_{iter} = L$). Эти значения приравниваются верхним границам погрешностей, что дает выражения для параметров вычислительной схемы.*

Например, для приближения $L^{(M,S)} \hat{\varphi}(x)$ из (2.1.1) имеем

$$M = \sqrt{\frac{\hat{A}_1^{(C)}}{L_{det}}} + 1; \quad S = \log_{\|A\|_{l_1}} L_{iter} - \log_{\|A\|_{l_1}} \hat{A}_2^{(C)}. \quad (2.1.11)$$

Однако для этой «упрощенной» методологии выбора параметров алгоритма (2.1.1) возникает проблема определения величин L_{det} и L_{iter} . Чаще всего берут $L_{det} \approx L_{iter}$ (так, например, сделано ниже в подразделах 2.1.2–2.1.5 данной работы), однако здесь значения вида (2.1.11) часто не гарантируют достижения минимума величины трудоемкости $\hat{S}(M, S)$.

2.1.2. Погрешность функционального итерационного алгоритма с рандомизацией «больших» матриц (\mathbb{L}_2 -подход)

Рассмотрим функциональный итерационный алгоритм с рандомизацией «больших» матриц (алгоритм 1.13) и, следуя замечанию 1.14, для простоты применим \mathbb{L}_2 -подход для построения верхней границы погрешности для случая, когда в качестве аппроксимационного базиса (В.12) используются функции линейной аппроксимации (1.1.14), а в качестве коэффициентов (1.1.1) – простейшие коэффициенты (1.1.17):

$$\delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n, S) = \left(\int_a^b [\varphi(x) - L^{(M, n, S)} \tilde{\varphi}(x)]^2 dx \right)^{1/2},$$

где

$$L^{(M, n, S)} \tilde{\varphi}(x) = \sum_{i=1}^M \tilde{\varphi}_i^{(S)}(n) \beta^{(1)} \left[\frac{x - a - (i - 1)h}{h} \right]. \quad (2.1.12)$$

В последнем соотношении $\tilde{\varphi}_i^{(S)}(n)$ – это i -я компонента вектора $\tilde{\mathbf{y}}^{(S)}(n) = \frac{\xi_1^{(S)} + \dots + \xi_n^{(S)}}{n}$ (см. соотношение (1.1.48)), а $\xi_j^{(S)}$ – это j -е состояние S -го итерационного процесса вида (1.1.47):

$$\xi_j^{(s+1)} = \mathbf{G}_j^{(s)} \xi_j^{(s)} + \mathbf{b}, \quad s = 0, 1, \dots, S - 1; \quad \xi_j^{(0)} = \mathbf{b} \quad (2.1.13)$$

(это рандомизация итерационного процесса (2.1.2)). В формуле (2.1.13) $\mathbf{G}_j^{(0)}, \mathbf{G}_j^{(1)}, \dots, \mathbf{G}_j^{(S-1)}$; $j = 1, \dots, n$ – реализации независимых одинаково распределенных (как \mathbf{G} , такая, что $\mathbf{E}\mathbf{G} = \mathbf{A}$) случайных матриц.

По аналогии с рассуждениями раздела 1.1.3 (см. формулу (1.1.20)), для \mathbb{L}_2 -подхода, применяя неравенство Коши – Буняковского и теорему Фубини, получаем

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{E} \delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n, S) \right]^2 &\leq \mathbf{E} \left(\int_a^b [\varphi(x) - L^{(M, n, S)} \tilde{\varphi}(x)]^2 dx \right) \times \mathbf{E} 1 = \\ &= \int_a^b \mathbf{E} [\varphi(x) - L^{(M, n, S)} \tilde{\varphi}(x)]^2 dx. \end{aligned}$$

Далее заметим, что

$$\mathbf{E} [\varphi(x) - L^{(M, n, S)} \tilde{\varphi}(x)]^2 = \mathbf{E} ([\varphi(x) - L^{(M)} \varphi(x)] + [L^{(M)} \varphi(x) - L^{(M, S)} \hat{\varphi}(x)] +$$

$$+ [L^{(M,S)}\hat{\varphi}(x) - L^{(M,n,S)}\tilde{\varphi}(x)]^2 = ([\varphi(x) - L^{(M)}\varphi(x)] + [L^{(M)}\varphi(x) - L^{(M,S)}\hat{\varphi}(x)])^2 + \\ + \mathbf{E}[L^{(M,S)}\hat{\varphi}(x) - L^{(M,n,S)}\tilde{\varphi}(x)]^2;$$

здесь учтено, что $\mathbf{E}L^{(M,n,S)}\tilde{\varphi}(x) = L^{(M,S)}\hat{\varphi}(x)$. Используя очевидное неравенство $(a + b)^2 \leq 2a^2 + 2b^2$, получаем

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}\delta^{(\mathbb{L}_2)}(M, n, S)]^2 &\leq 2 \int_a^b [\varphi(x) - L^{(M)}\varphi(x)]^2 dx + \quad (2.1.14) \\ &+ 2 \int_a^b [L^{(M)}\varphi(x) - L^{(M,S)}\hat{\varphi}(x)]^2 dx + \int_a^b \mathbf{E}[L^{(M,S)}\hat{\varphi}(x) - L^{(M,n,S)}\tilde{\varphi}(x)]^2 dx. \end{aligned}$$

Слагаемые в правой части неравенства (2.1.14) описывают детерминированную компоненту, вклад от итерационного процесса (2.1.2) приближения решения системы (2.1.3) вида (2.1.13) и стохастическую компоненту погрешности алгоритма (2.1.12), соответственно. Следуя методу 2.1, построим верхнюю границу для каждого слагаемого и, приравнявая эти границы положительным величинам L_{det}, L_{iter} и L_{stoch} (такими, что их сумма равна заданному уровню погрешности $L = L_{det} + L_{iter} + L_{stoch}$), предложим вариант выбора параметров M, n, S (и некоторых других) для алгоритма (2.1.12).

Для первого слагаемого из правой части неравенства (2.1.14), согласно теореме 1.1, имеем

$$2 \int_a^b [\varphi(x) - L^{(M)}\varphi(x)]^2 dx \leq \frac{\hat{A}_1^{(\mathbb{L}_2)}}{(M-1)^4}; \quad \hat{A}_1^{(\mathbb{L}_2)} = \frac{(b-a)^3}{32} \left[\max_{x \in [a,b]} \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) \right| \right]^2.$$

Таким образом, можно предложить выбирать значение M из уравнения

$$\frac{\hat{A}_1^{(\mathbb{L}_2)}}{(M-1)^4} = L_{det}, \text{ которое дает } M = \sqrt[4]{\frac{\hat{A}_1^{(\mathbb{L}_2)}}{L_{det}}} + 1.$$

Для второго слагаемого из правой части неравенства (2.1.14), из утверждения 1.3, по аналогии с соотношениями (1.3.15), (1.3.16), (2.1.6), получаем

$$2 \int_a^b [L^{(M)}\varphi(x) - L^{(M,S)}\hat{\varphi}(x)]^2 dx \leq 2(b-a) \left[\max_{i=1, \dots, M} |\varphi(x_i) - \hat{\varphi}_i^{(S)}| \right]^2 \leq 2(b-a) \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^{(S)}\|_{l_1}^2.$$

Из утверждения 2.1 следует, что при выполнении условия (2.1.8) второе слагаемое из правой части неравенства (2.1.14) оценивается сверху величиной

$$2 \int_a^b [L^{(M)} \varphi(x) - L^{(M,S)} \hat{\varphi}(x)]^2 dx \leq \hat{A}_2^{(\mathbb{L}_2)} \|A\|_{l_1}^{2S}; \quad \hat{A}_2^{(\mathbb{L}_2)} = \frac{2(b-a) \|Ab - b\|_{l_1}^2}{(1 - \|A\|_{l_1})^2}.$$

Таким образом, можно предложить выбирать значение S из уравнения

$$\hat{A}_2^{(\mathbb{L}_2)} \|A\|_{l_1}^{2S} = L_{iter}, \text{ которое дает } S = \log_{\|A\|_{l_1}} \sqrt{L_{iter}} - \log_{\|A\|_{l_1}} \sqrt{\hat{A}_2^{(\mathbb{L}_2)}}. \quad (2.1.15)$$

Для третьего слагаемого из правой части неравенства (2.1.14), из утверждения 1.3, по аналогии с соотношениями (1.3.15), (1.3.16), (2.1.6), получаем

$$\begin{aligned} \int_a^b \mathbf{E} [L^{(M,S)} \hat{\varphi}(x) - L^{(M,n,S)} \tilde{\varphi}(x)]^2 dx &\leq (b-a) \mathbf{E} \left[\max_{i=1, \dots, M} |\tilde{\varphi}_i^{(S)}(n) - \hat{\varphi}_i^{(S)}| \right]^2 \leq \\ &\leq (b-a) \mathbf{E} \sum_{i=1}^M [\tilde{\varphi}_i^{(S)}(n) - \hat{\varphi}_i^{(S)}]^2 = (b-a) \sum_{i=1}^M \mathbf{D} \tilde{\varphi}_i^{(S)}(n) = \\ &= (b-a) \mathbf{E} \|\tilde{\mathbf{y}}^{(S)}(n) - \mathbf{y}^{(S)}\|_2^2 = \frac{b-a}{n} \mathbf{E} \|\xi^{(S)} - \mathbf{y}^{(S)}\|_2^2 \leq \quad (2.1.16) \\ &\leq \frac{\hat{A}_3^{(\mathbb{L}_2)}}{n}; \quad \hat{A}_3^{(\mathbb{L}_2)} = (b-a) \max_S \mathbf{E} \|\xi^{(S)} - \mathbf{y}^{(S)}\|_2^2. \end{aligned}$$

где $\|\mathbf{z}\|_2 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{[z^{(1)}]^2 + \dots + [z^{(M)}]^2}$; $\mathbf{z} = (z^{(1)}, \dots, z^{(M)})$. Здесь использованы очевидные соотношения

$$\|\mathbf{z}\|_{l_1} = \max_{i=1, \dots, M} |z^{(i)}| \leq \sqrt{[z^{(1)}]^2 + \dots + [z^{(M)}]^2} = \|\mathbf{z}\|_2; \quad \mathbf{E} \tilde{\varphi}_i^{(S)}(n) = \hat{\varphi}_i^{(S)}; \quad \mathbf{D} \tilde{\varphi}_i^{(S)}(n) = \frac{\mathbf{D} \xi^{(S,i)}}{n};$$

здесь $\xi^{(S)} = (\xi^{(S,1)}, \dots, \xi^{(S,M)})$.

В работах [19, 104] показана конечность величины $\max_S \mathbf{E} \|\xi^{(S)} - \mathbf{y}^{(S)}\|_2^2$, входящей в константу $\hat{A}_3^{(\mathbb{L}_2)}$ (см. соотношение (2.1.16)). Из соотношения $\frac{\hat{A}_3^{(\mathbb{L}_2)}}{n} = L_{stoch}$

тогда получаем $n = \frac{\hat{A}_3^{(\mathbb{L}_2)}}{L_{stoch}}$.

2.1.3. Гипотеза о минимуме затрат по количества выбираемых столбцов при рандомизации матрицы

Рассмотрим теперь известную рандомизацию

$$\mathbf{G} = \{g_{mm'}; m, m' = 1, \dots, M\}; g_{mm'} = \begin{cases} \frac{Ma_{mm'}}{K} & \text{при } m' \in \mathbf{J}^{(K)}; \\ 0 & \text{иначе;} \end{cases} \quad (2.1.17)$$

здесь $\mathbf{J}^{(K)}$ – случайный вектор, состоящий из K равновероятных отличных друг от друга натуральных чисел $J_k; 1 \leq J_k \leq M; k = 1, \dots, K$ (см., например, [19, 52, 53, 86, 104–106, 120], а также подраздел 1.1.6 и формулу (1.1.49) данной работы). Аналогичную рандомизацию можно построить и для вектора $\xi^{(0)} = \mathbf{b}$. Заметим, что при $K = 1$ итерационный процесс (1.1.47) с рандомизацией (2.1.17) превращается в широко известный рандомизированный метод простой итерации (см., например, раздел 1.7.3 учебника [22]). Однако в подразделах 2.1.4, 2.1.5 нам будет особо интересен случай $K > 1$.

Исследуем затраты алгоритма 1.13 простейшего вида (2.1.12) с рандомизацией (2.1.17). Обозначим через $\mathbf{J}_j^{(K,s)}$ массив номеров, полученный на s -м шаге процесса (2.1.13) (см. также формулу (1.1.47)); здесь $s = 0, 1, \dots, S - 1; j = 1, \dots, n$.

Вследствие того, что построенная матрица \mathbf{G} из (2.1.17) имеет только K ненулевых столбцов, для вычисления вектора $\xi_j^{(s+1)}$ необходимы лишь K компонент вектора $\xi_j^{(s)}$ с номерами из массива $\mathbf{J}_j^{(K,s)}$, которые, в свою очередь, получаются на предыдущем шаге через K компонент вектора $\xi_j^{(s-1)}$ с номерами из массива $\mathbf{J}_j^{(K,s-1)}$.

Следовательно, объем вычислений, необходимых для определения m компонент вектора $\xi_j^{(s+1)}$ пропорционален величине $mK + sK^2$. Таким образом, для затрат алгоритма (2.1.12) справедлива следующая формула затрат, аналогичная соотношению (2.1.10):

$$\hat{S}(M, n, S, K) = \hat{A}n[MK + (S-1)K^2] + \hat{S}_0; \hat{A} = \text{const.} \quad (2.1.18)$$

Для наиболее интересного для нас случая «больших» матриц (т. е. для $M \gg 1$) эта величина может оказаться меньше, чем (2.1.10).

Но самым замечательным в работе [104] (а также в сопутствующих работах [105, 106], а также в рассуждениях 1.7.3 книги [19]) явилось следующее предположение (*гипотеза о минимуме количества выбираемых столбцов при рандомизации матрицы*).

ГИПОТЕЗА 2.1. *Функция затрат итерационного процесса (2.1.13) с рандомизацией матрицы \mathbf{A} вида (2.1.17) и с заданным уровнем приемлемой погрешности L , подсчитываемая согласно следующему аналогу формулы (2.1.18)*

$$\bar{S}^{(L)}(n, S, K) = \bar{A}n(S - 1)K^2; \quad \bar{A} = \text{const}, \quad (2.1.19)$$

имеет минимум по параметру K при фиксированных n и S .

Более того, в работе [106] для матрицы \mathbf{A} с элементами

$$\mathbf{A} = \left\{ a_{mm'} = \frac{1}{M} \exp(-|m - m'|); m, m' = 1, \dots, M \right\} \quad (2.1.20)$$

показаны результаты реализации процесса (2.1.13) с приемлемой точностью $L = 0,06$ в виде графика функции

$$\bar{\bar{S}}^{(L)}(n, S, K) = K^2(S - 1) \|\mathbf{D}\xi^{(S,n)}\|_{l_1}, \quad (2.1.21)$$

значения которой, в силу соотношения (1.2.6), пропорциональны значениям функции (2.1.19); здесь $\mathbf{D}\xi^{(S,n)}$ – вектор несмещенных статистических оценок дисперсий $\mathbf{D}\xi^{(S)} = (\mathbf{D}\xi^{(S,1)}, \dots, \mathbf{D}\xi^{(S,M)})$. Таким образом,

$$\|\mathbf{D}\xi^{(S,n)}\|_{l_1} = \max_{i=1, \dots, M} \left(\frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n [\xi_j^{(S,i)}]^2 - \frac{1}{n(n-1)} \left[\sum_{j=1}^n \xi_j^{(S,i)} \right]^2 \right); \quad (2.1.22)$$

здесь $\xi_j^{(S,i)}$ – i -я компонента вектора $\xi_j^{(S)}$ (см., например, формулу (3.9) из учебника [22]).

График функции (2.1.21), представленный в работе [106] (см. также рисунок 2.1), имел ярко вырожденный минимум $\bar{\bar{S}}_{min}^{(L)}(S, K) = \bar{\bar{S}}^{(L)}(S, K_{min})$, причем точка K_{min} заметно отстояла от значений $K = 1$ и $K = M$.

Этот результат, безусловно, заслуживает пристального внимания, поскольку получается, что *предложен достаточно точный статистический алгоритм*

умножения на матрицу A (2.1.13), превосходящий по эффективности (экономичности) детерминированную процедуру (2.1.2); при этом матрица A не обязана быть «большой». Учитывая, что умножения на матрицы A («большие» и «малые») используются в подавляющем числе случаев применения сеточных вычислительных методов, гипотеза 2.1 открывает широчайшие перспективы перед использованием процедуры (2.1.13) с рандомизацией (2.1.17).

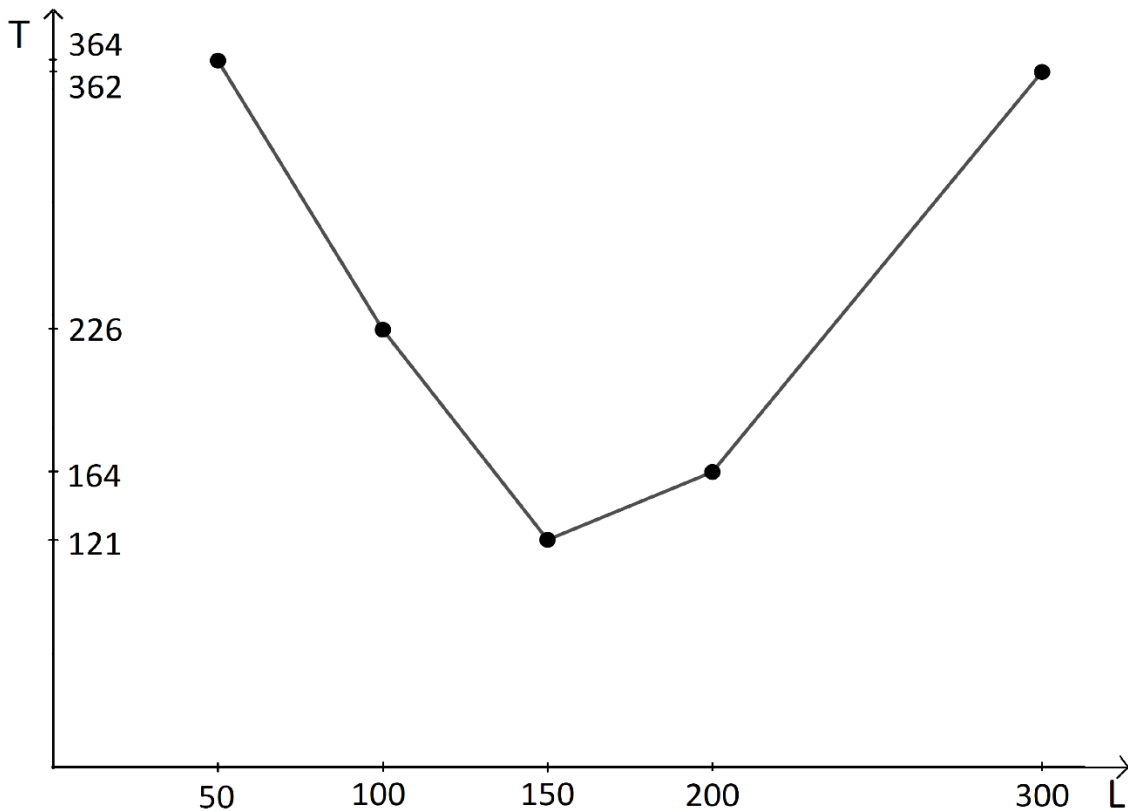


Рис. 2.1 [106]. График функции $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ (в других обозначениях: $\bar{S}^{(L)} \leftrightarrow T$; $K \leftrightarrow L$).

Последнее обстоятельство побудило нас провести самое тщательное исследование и протестировать алгоритмы выбора номеров $J^{(K)}$ в процедуре (2.1.17) из работы [140] (здесь особенно был интересен случай $M \gg 1$).

Одним из самых эффективных оказался следующий алгоритм из работы [140] (он и был использован в расчетах, результаты которых представлены далее в подразделе 2.1.5).

Рассмотрим массив \mathbf{R} , заполненный различными целыми числами от 1 до M . В частности, можно положить

$$\mathbf{R}(r) := r; \quad r = 1, \dots, M; \quad (2.1.23)$$

здесь $\mathbf{R}(r)$ является r -ым элементом массива \mathbf{R} , а знак « $:=$ » обозначает операцию переприсваивания: число в правой части соотношения (2.1.23) помещается в ячейку $\mathbf{R}(r)$.

АЛГОРИТМ 2.1 (выбор с перемешиванием [140]). *Выбираем компоненту J_1 вектора $\mathbf{J}^{(K)}$. Для этого реализуем случайный номер m_1 из M номеров, используя формулу моделирования равномерного дискретного распределения (см., например, алгоритм 1.5 учебника [22]):*

$$m_1 = [\alpha_1 M] + 1. \quad (2.1.24)$$

Здесь, как и ранее, буквой α с индексом обозначается реализация стандартного случайного числа. В свою очередь, символы $[C]$ обозначают целую часть числа C .

Полагаем $J_1 = \mathbf{R}(m_1)$. Меняем местами значения, хранящиеся в ячейках $\mathbf{R}(m_1)$ и $\mathbf{R}(M)$:

$$q := \mathbf{R}(m_1), \quad \mathbf{R}(m_1) := \mathbf{R}(M), \quad \mathbf{R}(M) := q.$$

Далее для $k = 2, 3, \dots, K$ выбираем компоненты J_k вектора $\mathbf{J}^{(K)}$ следующим образом. Реализуем равномерно распределенный случайный номер m_k из $M - k + 1$ номеров по формуле типа (2.1.24):

$$m_k = [\alpha_k (M - k + 1)] + 1. \quad (2.1.25)$$

Полагаем $J_k = \mathbf{R}(m_k)$ и меняем местами значения, хранящиеся в ячейках $\mathbf{R}(m_k)$ и $\mathbf{R}(M - k + 1)$:

$$q := \mathbf{R}(m_k), \quad \mathbf{R}(m_k) := \mathbf{R}(M - k + 1), \quad \mathbf{R}(M - k + 1) := q.$$

После окончания работы алгоритма 2.1 массив \mathbf{R} будет содержать различные целые числа от 1 до M , т. е. будет пригоден для нового использования алгоритмом 2.1. Можно также заметить, что компоненты J_1, \dots, J_K вектора $\mathbf{J}^{(K)}$ окажутся записанными в ячейках $\mathbf{R}(M), \mathbf{R}(M - 1), \dots, \mathbf{R}(M - K + 1)$, соответственно.

Трудоёмкость алгоритма 2.1, очевидно, имеет порядок K . Следует, однако, отметить, что из-за необходимости хранения массива \mathbf{R} в оперативной памяти ЭВМ алгоритм 2.1 реализуем только при $M \leq M_0$, где M_0 – объём эффективной оперативной памяти для хранения массивов. Такого ограничения не имеет следующий вполне экономичный (как показали наши тестовые расчёты) алгоритм.

Предположим, что номера $\{1, 2, \dots, M\}$ расположены в порядке возрастания, т.е. выполнено соотношение (2.1.23). Заведём массив \mathbf{Q} размерности K – для хранения выигрышных номеров.

АЛГОРИТМ 2.2 (алгоритм просмотра предыдущих [140]). *Сначала по формуле (2.1.24) выбираем случайный номер m_1 из M номеров и объявляем его первым выигрышным номером: $J_1 = m_1$. Полагаем $\mathbf{Q}(1) := m_1$.*

Далее для $k = 2, 3, \dots, K$ выбираем компоненты J_k вектора $\mathbf{J}^{(K)}$ следующим образом. Выбираем случайный номер m_k из $M - k + 1$ номеров по формуле (2.1.25). Проверяем последовательно неравенства

$$m_k + 1 > \mathbf{Q}(1), m_k + 2 > \mathbf{Q}(2), \dots, m_k + k - 1 > \mathbf{Q}(k - 1). \quad (2.1.26)$$

Если все эти неравенства окажутся выполненными, то полагаем $J_k = m_k + k - 1$ и $\mathbf{Q}(k) := m_k + k - 1$.

В противном случае для первого встреченного I такого, что $m_k + I \leq \mathbf{Q}(I)$, последовательно для $i = k, k - 1, \dots, I + 1$ производим переприсваивания $\mathbf{Q}(i) := \mathbf{Q}(i - 1)$, после чего заносим в $\mathbf{Q}(I)$ значение $m_k + I - 1$, которое и объявляем k -м выигрышным номером: $J_k = m_k + I - 1$.

После завершения k -го шага алгоритма 2.2 (т. е. после выбора k -го выигрышного номера) в первых k ячейках массива \mathbf{Q} окажутся первые k выигрышных номеров, упорядоченных по возрастанию.

Ввиду того, что на выбор k -го выигрышного номера требуется порядка k операций (см. соотношения (2.1.26)), трудоёмкость алгоритма 2.2 имеет порядок K^2 (ведь $1 + 2 + \dots + K = (K + 1)K/2$).

2.1.4. Численная проверка гипотезы о минимуме количества выбираемых столбцов при рандомизации матрицы

К сожалению, тщательные численные эксперименты, результаты которых частично представлены в данном подразделе 2.1.5, показали, что гипотеза 2.1, по всей видимости, неверна.

Особо отметим, что проведенное тестирование потребовало использования значительных вычислительных ресурсов. Численные эксперименты проводились на многопроцессорной системе Сибирского суперкомпьютерного центра при ИВ-МиМГ СО РАН.

В первую очередь мы попытались повторить и тщательнейшим образом проверить расчеты из [106], ставшие основой для формулировки гипотезы 2.1.

Рассматривалась, в частности, следующая тестовая задача. Элементы матрицы \mathbf{A} задавались в виде (2.1.20) $\mathbf{A} = \{a_{mm'} = \frac{1}{M} \exp(-|m-m'|); m, m' = 1, \dots, M\}$. Для подсчета спектрального радиуса матрицы \mathbf{A} использовался степенной метод (см., например, [122], [139]).

Считалось, что решение системы $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b}$ из (2.1.3) известно и равно $\mathbf{y} = (1, \dots, 1)^{(T)}$. При этом вектор \mathbf{b} имеет вид $\mathbf{b} = \mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{y}$.

По аналогии с работой [106] изучалась зависимость от K величины трудоемкости (2.1.21), (2.1.22) при фиксированных уровнях «итерационной» и стохастической погрешностей L_{iter} и L_{stoch} .

Для приводимых здесь результатов тестовых расчетов число итераций, вычисляемое по формуле (2.1.15), равнялось $S = 5$ (при $M = 1\,000$ для рассматриваемой матрицы (2.1.20) это соответствовало $L_{iter} = 0,032$).

При фиксированных K и S число испытаний n выбиралось из условия, что относительная погрешность $\delta_{stoch,otn}^{(l_1)}(\bar{n}) = \|\mathbf{y}^{(S)} - \tilde{\mathbf{y}}^{(S)}(\bar{n})\|_{l_1} / \|\tilde{\mathbf{y}}^{(S)}(\bar{n})\|_{l_1}$ меньше заданного уровня L_{stoch} . Используя соотношения (1.2.6) и (2.1.22) для погрешности и выборочной дисперсии, получаем, что для достаточно больших \bar{n} с вероятностью, близкой к единице, выполнены соотношения

$$\begin{aligned} \delta_{stoch,otn}^{(l_1)}(\bar{n}) &= \frac{\max_{i=1,\dots,M} |y_i^{(S)} - \tilde{\varphi}_i^{(S)}(\bar{n})|}{\max_{i=1,\dots,M} |\tilde{\varphi}_i^{(S)}(\bar{n})|} < \frac{\max_{i=1,\dots,M} H \sqrt{\frac{\mathbf{D}\xi^{(S,\bar{n},i)}}{\bar{n}}}}{\max_{i=1,\dots,M} |\tilde{\varphi}_i^{(S)}(\bar{n})|} = \\ &= \frac{\max_{i=1,\dots,M} H \sqrt{\frac{1}{\bar{n}-1} \sum_{j=1}^{\bar{n}} [\xi_j^{(S,i)}]^2 - \frac{1}{\bar{n}(\bar{n}-1)} \left[\sum_{j=1}^{\bar{n}} \xi_j^{(S,i)} \right]^2}}{\max_{i=1,\dots,M} \frac{1}{\sqrt{\bar{n}}} \left| \sum_{j=1}^{\bar{n}} \xi_j^{(S,i)} \right|} = \tilde{\delta}(\bar{n}); \end{aligned}$$

здесь $y_i^{(S)}$ – i -я компонента вектора $\mathbf{y}^{(S)}$. Константа H считалась равной 2 (это соответствует уровню $L_{stoch} = 0,028$).

Тестирование проводилось для различных значений M . На рисунке 2.2 для относительно небольшого значения $M = 100$ показано поведение трудоемкости $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ из (2.1.21) и нормы дисперсии $\|\mathbf{D}\xi^{(S,n)}\|_{l_1}$ из (2.1.22) при изменении параметра K от единицы до M .

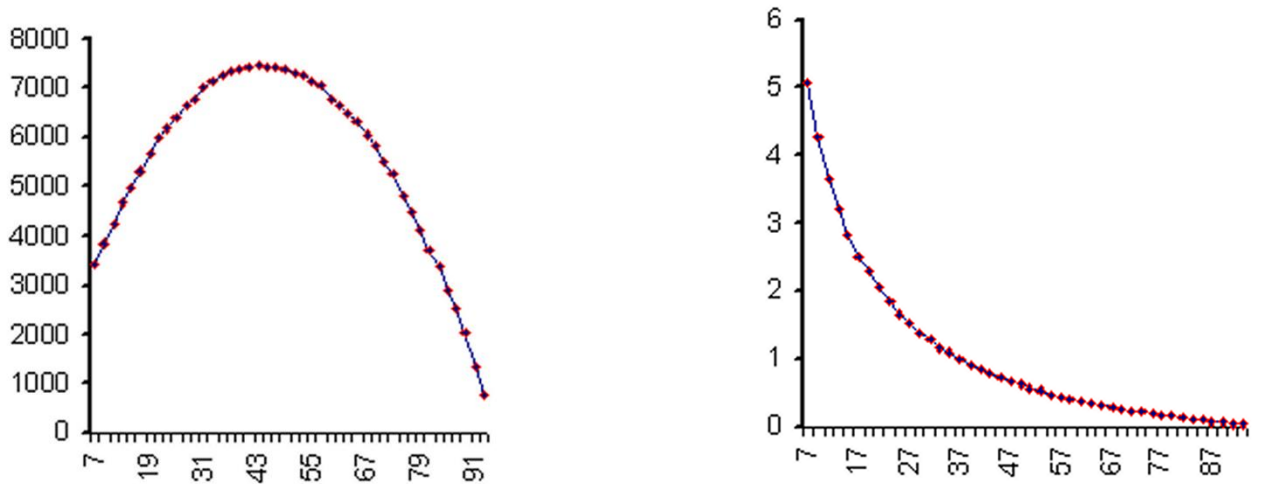


Рис. 2.2. Зависимости трудоемкости $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ и нормы дисперсии $\|\mathbf{D}\xi^{(S,n)}\|_{l_1}$ алгоритма (2.1.13) с рандомизацией (2.1.17) от параметра K для $M = 100$.

Особо отметим, что в проведенных тестовых расчетах характер зависимости величины (2.1.21), (2.1.22) от параметра K полностью соответствовал характеру зависимости от K реальных затрат $s(K)$, требующихся для достижения заданной точности приближенного решения $\tilde{\mathbf{y}}^{(S)}(n) = \left(\tilde{\varphi}_1^{(S)}(n), \dots, \tilde{\varphi}_M^{(S)}(n) \right)^{(T)}$ (при учете точного решения $\mathbf{y} = (1, \dots, 1)^{(T)}$ рассматриваемой тестовой задачи).

Такая картина наблюдалась как для случая «умеренных» M (например, для $M = 100$), так и для практически важного случая больших M . В частности, на рисунках 2.3 и 2.4 показаны графики трудоемкости $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ из (2.1.21) и реальных затрат $s(K)$ для случая $M = 1\,000$.

Особо отметим *принципиальное отличие рисунков 2.2–2.4 от графика трудоемкости из работы [106] – см. рисунок 2.1.*

По результатам расчетов можно сформулировать следующие выводы.

1. Формула (2.1.21) для трудоемкости $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ достаточно адекватно воспроизводит зависимость реальных затрат алгоритма (2.1.13) с рандомизацией (2.1.17) от параметров K, S, n при заданном уровне погрешности L .

2. Подтвердилось замечание из работ [19, 104–106] о том, что трудоемкость $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ алгоритма (2.1.13) с рандомизацией (2.1.17) может быть малой при относительно небольших значениях параметра K .

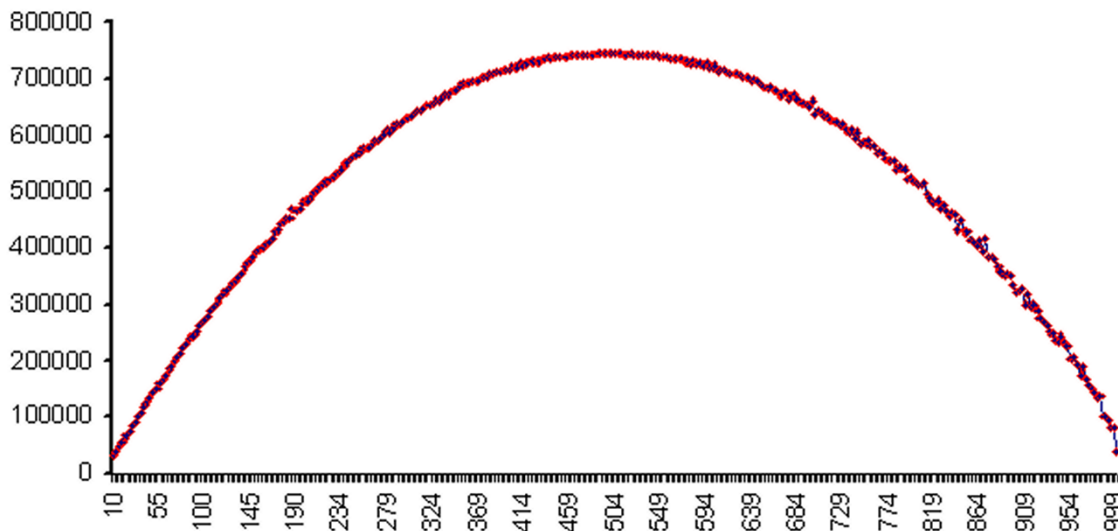


Рис. 2.3. Зависимость трудоемкости $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ алгоритма (2.1.13) с рандомизацией (2.1.17) от параметра K для $M = 1\,000$.

3. Не подтвердилось утверждение из работ [104–106] о наличии минимума трудоемкости $\bar{S}^{(L)}(n, S, K)$ как функции от K при фиксированном уровне погрешности L . Более того, можно говорить скорее о наличии максимума, причем подобная картина наблюдается не только для матрицы (2.1.20), но и для других матриц

(см., в частности, наши работы [50, 51]). Таким образом, гипотеза 2.1, по всей видимости, неверна.

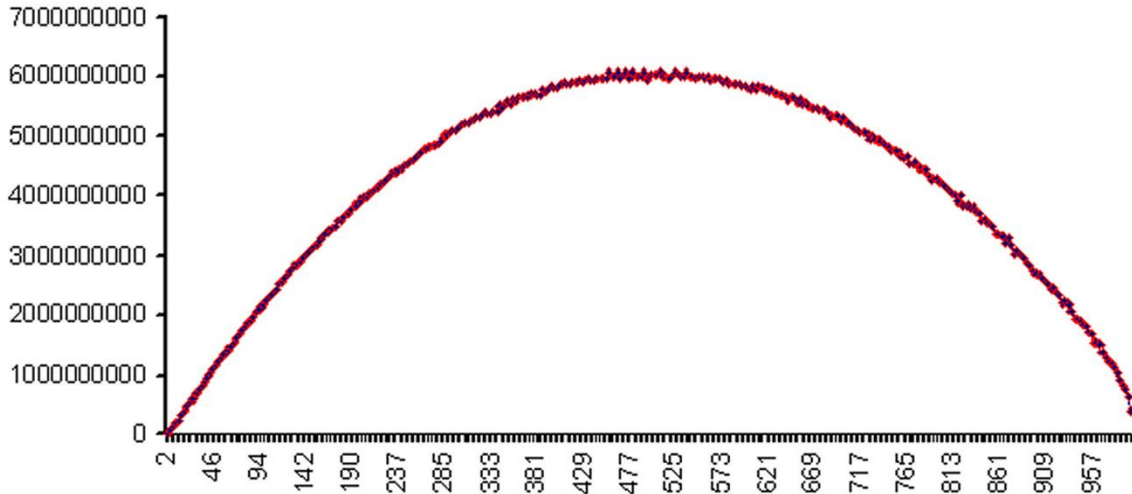


Рис. 2.4. Зависимость затрат $s(K)$ алгоритма (2.1.13) с рандомизацией (2.1.17) от параметра K для $M = 1\,000$.

Тем не менее, рандомизация (2.1.13), (2.1.17) для больших размеров матриц $M \gg 1$ и относительно небольших значениях параметра K с успехом применяется при решении ряда содержательных прикладных задач (см., в частности, диссертацию [86] и сопутствующие статьи).

2.2. Конструирование и оптимизация функционального двустороннего геометрического вычислительного статистического алгоритма [38 – 40, 44 – 49]

2.2.1. Модификации геометрического алгоритма

В этом разделе, пойдет речь о модификациях алгоритма 1.8 метода зависимых испытаний для приближения интеграла, зависящего от параметра $\varphi^{(1)}(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$; $\mathbf{x} \in X$ (см. формулу (B.9)).

Рассмотрим случай, когда в качестве аппроксимационного базиса (В.12) используются функции линейной аппроксимации (1.1.14), а в качестве коэффициентов (1.1.1) – простейшие коэффициенты (1.1.17):

$$\varphi^{(1)}(\mathbf{x}) \approx L^{(M_x, n)} \tilde{\varphi}^{(1)}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{M_x} \tilde{\varphi}^{(1, i)}(n) \chi^{(i, 1)}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in X, \quad (2.2.1)$$

где

$$\tilde{\varphi}^{(1, i)}(n) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \psi_j^{(i)}; \quad \psi_j^{(i)} = q(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}_j) = \frac{g(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}_j)}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}_j)}. \quad (2.2.2)$$

Здесь $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{M_x}$ – узлы сетки $\mathbf{X}^{(M_x)}$ (см. соотношение (1.1.4)) в области $X \subset \mathbb{R}^{d_x}$; $\psi_1^{(i)}, \dots, \psi_n^{(i)}$ – выборочные значения несмещенного оценителя $\psi^{(i)} = q(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) = \frac{g(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})}$ интеграла $\mathbf{E}\psi^{(i)} = \varphi^{(1)}(\mathbf{x}_i) = \int_Y g(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int_Y q(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}) f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$, а $\boldsymbol{\theta}_1, \dots, \boldsymbol{\theta}_n$ – выборочные значения d_y -мерного случайного вектора $\boldsymbol{\theta} = (\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(d_y)})$, распределенного в области $Y \subseteq \mathbb{R}^{d_y}$ согласно выбранной плотности $f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})$.

Зафиксируем номер $i = I$ и рассмотрим приближение $\tilde{\varphi}^{(1, I)}(n)$ интеграла $\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I) = \int_Y g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$ (см. формулы (2.2.2)) для случая, когда **функция** $g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})$ (а значит, и функция $q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) = \frac{g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})}$), зависящая от d_y -мерной переменной $\mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d_y)})$, **является трудно вычислимой**. В наших работах [38, 39] для этого случая в качестве альтернативы стандартному приближению $\tilde{\varphi}^{(1, I)}(n)$ представлен следующий алгоритм, который можно назвать **модифицированным геометрическим вычислительным статистическим алгоритмом**.

Полагаем, что $0 \leq q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) = \frac{g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})} \leq G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})$. Введем дополнительную координату $y^{(d_y+1)}$ и в $(d_y + 1)$ -мерном пространстве $(y^{(1)}, \dots, y^{(d_y)}, y^{(d_y+1)}) = (\mathbf{y}, y^{(d_y+1)})$ рассмотрим область $Y_{G^{(up)}}^{(I)} = Y \times [0, G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})]$, а в ней – случайную точку $(\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(d_y)}, \theta^{(d_y+1)}) = (\boldsymbol{\theta}, \theta^{(d_y+1)})$, распределенную согласно плотности

$$\tilde{f}_I(\mathbf{y}^{(1)}, \dots, \mathbf{y}^{(d_y)}, \mathbf{y}^{(d_y+1)}) = \tilde{f}_I(\mathbf{y}, \mathbf{y}^{(d_y+1)}) = \frac{f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})}{G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})}, \quad \mathbf{y} \in Y. \quad (2.2.3)$$

Из последнего соотношения следует, что вектор $\boldsymbol{\theta}$ по-прежнему распределен согласно плотности $f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})$ в Y , а случайная величина $\theta^{(d_y+1)}$ равномерно (условно) распределена на отрезке $[0, G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})]$.

АЛГОРИТМ 2.3. 1. Численно моделируем \bar{N} выборочных значений $\boldsymbol{\theta}_1, \dots, \boldsymbol{\theta}_{\bar{N}}$ d_y -мерного случайного вектора $\boldsymbol{\theta} \in Y$ согласно плотности $f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})$.

2. Для j -й реализации $\boldsymbol{\theta}_j$ вектора $\boldsymbol{\theta}$ моделируем выборочное значение $\theta_j^{(d_y+1)}(\mathbf{x}_I)$ случайной величины $\theta^{(d_y+1)}(\mathbf{x}_I)$, равномерно распределенной на отрезке $[0, G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \boldsymbol{\theta}_j)]$; здесь $j = 1, \dots, \bar{N}$.

3. Строим статистическую оценку интеграла:

$$\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I) = \int_Y g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) d\mathbf{y} \approx Z_{\bar{n}}^{(\mathbf{x}_I)} = \frac{1}{\bar{N}} \sum_{j=1}^{\bar{N}} \tilde{\Psi}_j^{(I)};$$

$$\tilde{\Psi}_j^{(I)} = G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \boldsymbol{\theta}_j) \times X^{(D_q^{(I)})}[\boldsymbol{\theta}_j, \theta_j^{(d_y+1)}(\mathbf{x}_I)];$$

здесь $\tilde{\Psi}_1^{(I)}, \dots, \tilde{\Psi}_{\bar{N}}^{(I)}$ – выборочные значения оценителя $\tilde{\Psi}^{(I)} = G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \boldsymbol{\theta}) \times X^{(D_q^{(I)})}[\boldsymbol{\theta}, \theta^{(d_y+1)}(\mathbf{x}_I)]$, а $X^{(D_q^{(I)})}[\mathbf{y}, \mathbf{y}^{(d_y+1)}]$ – индикатор множества

$$D_q^{(I)} = \{(\mathbf{y}, \mathbf{y}^{(d_y+1)}): \mathbf{y} \in Y; 0 \leq \mathbf{y}^{(d_y+1)} \leq q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})\} -$$

подграфика функции $q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) = \frac{g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y})}$.

В разделе 2.2 книги И. М. Соболя под названием «геометрический метод» представлен частный случай алгоритма 2.3 для $d_y = 2$ и $G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) = \text{const}$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2.2. Оценитель $\tilde{\Psi}^{(I)}$ является несмещенным:

$$\mathbf{E}\tilde{\Psi}^{(I)} = \varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I) = \int_Y g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2.2.4)$$

и, кроме того,

$$\mathbf{D}\tilde{\Psi}^{(I)} \geq \mathbf{D}\psi^{(I)}. \quad (2.2.5)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Соотношение (2.2.4) следует из того простого наблюдения, что алгоритм 2.3 является стандартным весовым алгоритмом вида

$$\tilde{I} = \int \tilde{g}(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \int \frac{\tilde{g}(\mathbf{u})}{\tilde{f}_{\xi}(\mathbf{u})} \tilde{f}_{\xi}(\mathbf{u}) d\mathbf{u} \approx \tilde{Z}_{\tilde{n}} = \frac{1}{\tilde{n}} \sum_{j=1}^{\tilde{n}} \frac{\tilde{g}(\xi_j)}{\tilde{f}_{\xi}(\xi_j)}$$

(см., например, раздел 3.1.1 учебника [22]) для вычисления $(d_y + 1)$ -кратного интеграла

$$\begin{aligned} \tilde{I} &= \int_{D_{G^{(up)}}^{(I)}} G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) X^{(D_q^{(I)})}[\mathbf{y}, y^{(d_y+1)}] \tilde{f}_I(\mathbf{y}, y^{(d_y+1)}) d\mathbf{y} dy^{(d_y+1)} = \\ &= \int_Y \int_0^{q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})} f_{\theta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} dy^{(d_y+1)} = \int_Y q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) f_{\theta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int_Y g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) d\mathbf{y} = \varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I) \end{aligned}$$

с плотностью $\tilde{f}_{\xi}(\mathbf{u})$ вида (2.2.3). В последних соотношениях $D_{G^{(up)}}^{(I)}$ обозначает область

$$D_{G^{(up)}}^{(I)} = \{(\mathbf{y}, y^{(d_y+1)}): \mathbf{y} \in Y; 0 \leq y^{(d_y+1)} \leq G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})\} -$$

подграфик функции $G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})$.

Далее имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\tilde{\Psi}^{(I)} &= \int_{D_{G^{(up)}}^{(I)}} [G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})]^2 \left(X^{(D_q^{(I)})}[\mathbf{y}, y^{(d_y+1)}] \right)^2 \tilde{f}_I(\mathbf{y}, y^{(d_y+1)}) d\mathbf{y} dy^{(d_y+1)} - [\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I)]^2 = \\ &= \int_Y \int_0^{q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})} G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) f_{\theta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} dy^{(d_y+1)} - [\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I)]^2 = \\ &= \int_Y q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) G^{(up)}(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) f_{\theta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} - [\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I)]^2 \geq \\ &\geq \int_Y [q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y})]^2 f_{\theta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} - [\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I)]^2 = \mathbf{D}\psi^{(I)}. \end{aligned}$$

Утверждение 2.2 доказано.

Утверждение 2.2 показывает, что использование алгоритма 2.3 вместо приближения $\tilde{\varphi}^{(1,I)}(n)$ не дает уменьшения дисперсии (2.2.5).

В работах [6, 38, 39] указано, что применение алгоритма 2.3 может оказаться полезным в достаточно редких, «экзотических» случаях, когда вычисление значений $q(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}) = \frac{g(\mathbf{x}_i, \mathbf{y})}{f_{\theta}(\mathbf{y})}$ (и, в частности, числителя $g(\mathbf{x}_i, \mathbf{y})$) для всех узлов \mathbf{x}_i сетки $\mathbf{X}^{(M_x)}$ является трудоемким, а проверку неравенства

$$\theta_j^{(d_y+1)}(\mathbf{x}_i) \leq q(\mathbf{x}_i, \theta_j) \quad (2.2.6)$$

(при выполнении которого $X^{(D_q^{(l)})}[\theta_j, \theta_j^{(d_y+1)}(\mathbf{x}_i)] = 1$ и $\tilde{\Psi}_j^{(l)} \neq 0$) удается упростить, заменив его на равносильное.

Более конструктивный алгоритм дает следующая, предложенная в работах [153, 154] (см. также диссертацию [79] и книгу [118]), эффективная модификация аналога алгоритма 2.3 для $d_x = 0$ (т. е. для «чистого», непараметрического интегрирования), основанная на идеологии двустороннего метода исключения (см. раздел 1.7.4 учебника [22]) и предполагающая сокращение количества вычислений подынтегральной функций $q(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ и $g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ при подсчете значения $\varphi^{(1)}(\mathbf{x})$ для нужных точек $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i; i = 1, \dots, M_x$.

Выберем мажоранту $G^{(up)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ функции $q(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ таким образом, чтобы вычисление значений $G^{(up)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ было экономичным (малозатратным). Кроме того, строим миноранту $G^{(down)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, такую, что

$$0 \leq G^{(down)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{g(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{f_{\theta}(\mathbf{y})} \leq G^{(up)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

и вычисление значений $G^{(down)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ также является экономичным.

Дополнительно введем семейство бернуллиевских случайных величин $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ таких, что $\mathbf{P}\{\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1\} = \frac{q(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{G^{(up)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}$ и $\mathbf{P}\{\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0\} = 1 - \frac{q(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{G^{(up)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}$.

Опишем **функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм.**

АЛГОРИТМ 2.4. 1. Численно моделируем N выборочных значений $\theta_1, \dots, \theta_N$ d_y -мерного случайного вектора $\theta \in Y$ согласно плотности $f_{\theta}(\mathbf{y})$.

2. Для j -й реализации θ_j вектора θ для всех узлов x_i сетки $\mathbf{X}^{(M_x)}$ моделируем выборочные значения $\theta_j^{(d_y+1)}(x_i)$ случайных величин $\theta^{(d_y+1)}(x_i)$, равномерно распределенных на отрезках $[0, G^{(up)}(x_i, \theta_j)]$, соответственно; здесь $i = 1, \dots, M_x$; $j = 1, \dots, N$.

3. Для каждого $i = 1, \dots, M_x$ проверяем неравенство

$$\theta_j^{(d_y+1)}(x_i) \leq G^{(down)}(x_i, \theta_j). \quad (2.2.7)$$

Если неравенство (2.2.7) выполнено, то полагаем $\Delta(x_i, \theta_j) = 1$ и идем на пункт 4; иначе проверяем неравенство (2.2.6). Если неравенство (2.2.6) выполнено, то полагаем $\Delta(x_i, \theta_j) = 1$; иначе $\Delta(x_i, \theta_j) = 0$.

4. Для каждого $i = 1, \dots, M_x$ вычисляем вклады $\Psi_j^{(i)} = G^{(up)}(x_i, \theta_j) \times \Delta(x_i, \theta_j)$.

5. По результатам моделирования выборочных значений $\theta_1, \dots, \theta_N$ и последующих манипуляций из пунктов 2–4 формируем приближения

$$\varphi^{(1)}(x_i) = \int_Y g(x_i, y) dy \approx Z_N^{(x_i)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Psi_j^{(i)} \quad \text{и} \quad (2.2.8)$$

$$\varphi^{(1)}(x) \approx L^{(M_x, N)} \tilde{\Phi}^{(1)}(x) = \sum_{i=1}^{M_x} Z_N^{(x_i)} \chi^{(i,1)}(x), \quad x \in X.$$

Если мажоранта $G^{(up)}(x, y)$ и миноранта $G^{(down)}(x, y)$ достаточно близки и вычисление их значений является экономичным (малозатратным), то в алгоритме 2.4 в подавляющем числе случаев будет проверяться «экономичное» неравенство (2.2.7), а трудоемкое (из-за необходимости вычислять значения функций $q(x, y)$ и $g(x, y)$) неравенство (2.2.6) будет использоваться редко.

Отметим, что монте-карловские оценки из алгоритмов 2.3 и 2.4 совпадают:

$$\tilde{\Psi}^{(l)} = G^{(up)}(x_l, \theta) \times X^{(D_q^{(l)})}[\theta, \theta^{(d_y+1)}(x_l)] = G^{(up)}(x_l, \theta) \times \Delta(x_l, \theta) = \Psi^{(l)}, \quad (2.2.9)$$

однако получение выборочных значений $\Psi_j^{(l)}$ в алгоритме 2.4 может быть намного экономичней по сравнению с получением значений $\tilde{\Psi}_j^{(l)}$ в алгоритме 2.3.

2.2.2. Использование кусочно-постоянных мажоранты и миноранты: двумерный случай

Вполне естественным и целесообразным (см. [79, 118, 154]) является выбор в качестве «просто вычисляемых» мажоранты $G^{(up)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ и миноранты $G^{(down)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ кусочно-постоянных приближений сверху и снизу функции $q(\mathbf{x}, \mathbf{y})$.

Проведем подробный анализ такого подхода для $d_y = 2$. Снова, как и в предыдущем подразделе 2.2.1, зафиксируем $\mathbf{x} = \mathbf{x}_I$.

По аналогии с подразделом 2.2.1 для простоты рассмотрим $Y = [0,1] \times [0,1]$ и $f_{\theta}(\mathbf{y}) \equiv 1$ при $\mathbf{y} = (y^{(1)}, y^{(2)}) \in Y$ (при этом $q(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) = q(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)}) = g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)})$).

Строим равномерную сетку с шагом, равным $h_y^{(I)} = 1/K_y^{(I)}$. Полагаем $g_m^{(I-)} \leq g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)}) \leq g_m^{(I+)}$ при $(y^{(1)}, y^{(2)}) \in B_m^{(I)}$, где $B_m^{(I)}$ – ячейка вида

$$B_m^{(I)} = \{(y^{(1)}, y^{(2)}): (t_m^{(1)} - 1)h_y^{(I)} \leq y^{(1)} \leq t_m^{(1)}h_y^{(I)}; (t_m^{(2)} - 1)h_y^{(I)} \leq y^{(2)} \leq t_m^{(2)}h_y^{(I)}\}; \quad (2.2.10)$$

здесь $t_m^{(1)}, t_m^{(2)}$ – целые числа в пределах от 1 до $K_y^{(I)}$, при этом $m = 1, \dots, M_y^{(I)} = \lfloor K_y^{(I)} \rfloor^2$.

В этом случае вклад $\Psi_j^{(I)}$ из соотношения (2.2.8) в статистическую оценку $Z_n^{(x_I)}$ интеграла $\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I) = \int_Y g(\mathbf{x}_I, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$ выглядит следующим образом. Реализуется соответствующий вариант метода дискретной суперпозиции (см., например, подраздел 1.6.2 учебника [22]). Разыгрывается номер m_0 ячейки (2.2.10) по формуле $m_0 = \lfloor \alpha_0 M_y^{(I)} \rfloor + 1$ (см. алгоритм 1.5 из учебника [22]); здесь α_0 – стандартное случайное число.

В выбранной ячейке $B_{m_0}^{(I)}$ разыгрывается случайная точка $(\theta_j^{(1, m_0)}, \theta_j^{(2, m_0)}, \theta_j^{(3, m_0)}(\mathbf{x}_I))$ согласно плотности $\tilde{f}_I^{(m_0)}(y^{(1)}, y^{(2)}, y^{(3)}) \equiv \frac{1}{g_{m_0}^{(I+)}}$ при

$(y^{(1)}, y^{(2)}) \in B_{m_0}^{(I)}$; $y^{(3)} \in [0, g_{m_0}^{(I+)}]$. Соответствующие моделирующие формулы таковы: $\theta_j^{(1, m_0)} = \alpha_j^{(1, m_0)}$; $\theta_j^{(2, m_0)} = \alpha_j^{(2, m_0)}$; $\theta_j^{(3, m_0)}(x_I) = \alpha_j^{(3, m_0)} \times g_{m_0}^{(I+)}$, где $\alpha_j^{(1, m_0)}$, $\alpha_j^{(2, m_0)}$, $\alpha_j^{(3, m_0)}$ – стандартные случайные числа.

Если $\theta_j^{(3, m_0)}(x_I) \leq g_{m_0}^{(I-)}$, то полагаем $\Psi_j^{(I)} = g_{m_0}^{(I+)}$; иначе проверяем неравенство $\theta_j^{(3, m_0)}(x_I) \leq g(x_I, \theta_j^{(1, m_0)}, \theta_j^{(2, m_0)})$. Если последнее неравенство выполнено, то $\Psi_j^{(I)} = g_{m_0}^{(I+)}$; иначе $\Psi_j^{(I)} = 0$.

По аналогии с выкладками в доказательстве утверждения 2.2, с учетом соотношения (2.2.9) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\Psi^{(I)} &= \sum_{m=1}^{M_y^{(I)}} g_m^{(I+)} \int_{B_m^{(I)}} g(x_I, y^{(1)}, y^{(2)}) dy^{(1)} dy^{(2)} - [\varphi^{(1)}(x_I)]^2 \geq \\ &\geq \sum_{m=1}^{M_y^{(I)}} \int_{B_m^{(I)}} [g(x_I, y^{(1)}, y^{(2)})]^2 dy^{(1)} dy^{(2)} - [\varphi^{(1)}(x_I)]^2 = \mathbf{D}\psi^{(I)}. \end{aligned}$$

Несмотря на полученное соотношение дисперсий, попытаемся найти условие на количество точек разбиения $K_y^{(I)}$ по каждой из координат области интегрирования $Y = [0, 1] \times [0, 1]$ так, чтобы при его выполнении статистическая оценка $Z_N^{(x_I)}$ из (2.2.8) оказалась бы, тем не менее, предпочтительней (экономичнее) оценки $\tilde{\varphi}^{(1, I)}(n)$ из (2.2.2).

Будем предполагать, что подынтегральная функция $g(x_I, y^{(1)}, y^{(2)})$ удовлетворяет условию Липшица с константой Lip_y по координатам $y^{(1)}$ и $y^{(2)}$.

Пусть a – время, которое затрачивается на сравнение двух чисел, b – время вычисления функции $g(x_I, y^{(1)}, y^{(2)})$ в некоторой точке $(y^{(1)}, y^{(2)})$ и c – время получения стандартного случайного числа с помощью соответствующего датчика случайных чисел. Полагаем также, что $a \ll b, c \ll b$ (т. е. функция $g(x_I, y^{(1)}, y^{(2)})$ является трудно вычислимой).

Затраты на реализацию приближения $\tilde{\varphi}^{(1, I)}(n)$ (см. [149]) для рассматриваемого случая равны

$$s^{(I)} = 2nc + nb. \quad (2.2.11)$$

Здесь первое слагаемое – это затраты на моделирование случайных компонент $\theta_j^{(1)} = \alpha_j^{(1)}$; $\theta_j^{(2)} = \alpha_j^{(2)}$, второе – затраты на вычисление значений $q(x_I, \theta_j^{(1)}, \theta_j^{(2)}) = g(x_I, \theta_j^{(1)}, \theta_j^{(2)})$.

Затраты на реализацию приближения $Z_{N^{(I)}}^{(x_I)}$ двустороннего геометрического метода равны

$$S^{(I)} = b(K_y^{(I)} + 1)^2 + 3a[K_y^{(I)}]^2 + 4cN^{(I)} + N^{(I)}[ap^{(I)} + (1 - p^{(I)})(a + b)]. \quad (2.2.12)$$

Здесь первые два слагаемых – это затраты на построение мажоранты и миноранты, третье – затраты на реализацию случайного номера m_0 и случайных компонент $\theta_j^{(1, m_0)} = \alpha_j^{(1, m_0)}$; $\theta_j^{(2, m_0)} = \alpha_j^{(2, m_0)}$; $\theta_j^{(3, m_0)}(x_I) = \alpha_j^{(3, m_0)} \times g_{m_0}^{(I+)}$, четвертое – затраты на проверку неравенств вида (2.2.6), (2.2.7). Величина $p^{(I)}$ равна вероятности попадания случайной точки $(\theta_j^{(1, m_0)}, \theta_j^{(2, m_0)}, \theta_j^{(3, m_0)}(x_I))$ в подграфик миноранты:

$$p^{(I)} = P\{\theta^{(1, m)}, \theta^{(2, m)}, \theta^{(3, m)}(x_I) \in D_{G^{(down)}}^{(I)}\} = \sum_{m=1}^{M_y^{(I)}} [P\{\theta^{(3, m)}(x_I) \leq g_m^{(I-)}\} \times \\ \times P\{(\theta^{(1, m)}, \theta^{(2, m)}) \in B_m^{(I)}\}] = \frac{1}{M_y^{(I)}} \sum_{m=1}^{M_y^{(I)}} \frac{g_m^{(I-)}}{g_m^{(I+)}}.$$

Отсюда

$$S^{(I)} = b(K_y^{(I)} + 1)^2 + 3a[K_y^{(I)}]^2 + N^{(I)} \left[a + 4c + \frac{b}{[K_y^{(I)}]^2} \sum_{m=1}^{M_y^{(I)}} \frac{g_m^{(I+)} - g_m^{(I-)}}{g_m^{(I+)}} \right],$$

и поэтому

$$S^{(I)} \leq b(K_y^{(I)} + 1)^2 + 3a[K_y^{(I)}]^2 + N^{(I)} \left[a + 4c + \frac{2Lip_y b}{g_{min}^{(I)} \times K_y^{(I)}} \right], \quad (2.2.13)$$

где $g_{min}^{(I)} = \min_{m=1, \dots, M_y^{(I)}} g_m^{(I+)}$.

Мы ищем такие значения $K_y^{(I)}$, для которых $S^{(I)} \leq s^{(I)}$ (см. соотношения (2.2.11)–(2.2.13)), т. е.

$$b \left(K_y^{(I)} + 1 \right)^2 + 3a \left[K_y^{(I)} \right]^2 + N^{(I)} \left[a + 4c + \frac{2b \text{Lip}_y}{g_{\min}^{(I)} \times K_y^{(I)}} \right] \leq 2nc + nb. \quad (2.2.14)$$

Согласно «правилу трех сигма», при приближении математического ожидания $E\psi$ случайной величины ψ средним арифметическим выборочных значений $\frac{1}{\tilde{n}} \sum_{j=1}^{\tilde{n}} \psi_j$ для достаточно большого \tilde{n} с большой вероятностью (около 0,997) выполнено соотношение $L_{stoch} = 3 \sqrt{\frac{D\psi}{\tilde{n}}}$, где L_{stoch} – достаточно «надежная» верхняя граница стохастической компоненты погрешности для \mathbb{C} -подхода (см. следующий подраздел 2.2.3). Используя последнее равенство и формулы для дисперсий оценителей $\psi^{(I)}$ и $\Psi^{(I)}$, получаем

$$n = \frac{9}{L_{stoch}^2} \left[\int_Y [g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)})]^2 dy - [\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I)]^2 \right],$$

$$N^{(I)} = \frac{9}{L_{stoch}^2} \left[\sum_{m=1}^{M_y^{(I)}} g_m^{(I+)} \int_{B_m^{(I)}} g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)}) dy^{(1)} dy^{(2)} - [\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I)]^2 \right].$$

Отсюда

$$N^{(I)} - n = \frac{9}{L_{stoch}^2} \sum_{m=1}^{M_y^{(I)}} \int_{B_m^{(I)}} [g_m^{(I+)} - g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)})] g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)}) dy^{(1)} dy^{(2)}.$$

Используя условие Липшица для функции $g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)})$, оцениваем сверху разность $g_m^{(I+)} - g(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)}) \leq \frac{2\text{Lip}_y}{K_y^{(I)}}$, и, учитывая, что, $\varphi^{(1)}(\mathbf{x}_I) \leq \varphi^{(up)}(\mathbf{x}_I) =$

$\int_Y G^{(up)}(\mathbf{x}_I, y^{(1)}, y^{(2)}) dy^{(1)} dy^{(2)}$, получаем

$$N^{(I)} \leq n + \frac{B^{(I)}}{K_y^{(I)}}; \quad B^{(I)} = \frac{18\text{Lip}_y \times \varphi^{(up)}(\mathbf{x}_I)}{L_{stoch}^2} = \text{const.} \quad (2.2.15)$$

Отсюда, предполагая, что $K_y^{(I)} + 1 \approx K_y^{(I)}$, из неравенства (2.2.14) получаем выражение:

$$(3a + b) [K_y^{(I)}]^4 + (a - b + 2c)n [K_y^{(I)}]^2 + \frac{(a + 4c)B^{(I)}g_{min}^{(I)} + 2bnLip_y}{g_{min}^{(I)}} K_y^{(I)} + \frac{2bB^{(I)}Lip_y}{g_{min}^{(I)}} < 0. \quad (2.2.16)$$

Для каждого конкретного случая последнее соотношение (2.2.16), вообще говоря, дает свое выражение для подходящего параметра $K_y^{(I)}$.

Важным частным случаем использования функционального геометрического алгоритма 2.4 (например, при неоднократном использовании этого алгоритма), рассматриваемом нами далее, является ситуация, когда в выражениях (2.2.12)–(2.2.14), (2.2.16) затратами на построение мажоранты и миноранты можно пренебречь. Тогда вместо соотношения (2.2.16) можно рассмотреть квадратное неравенство

$$(a - b + 2c)n [K_y^{(I)}]^2 + \frac{(a + 4c)B^{(I)}g_{min}^{(I)} + 2bnLip_y}{g_{min}^{(I)}} K_y^{(I)} + \frac{2bB^{(I)}Lip_y}{g_{min}^{(I)}} < 0. \quad (2.2.17)$$

В рассматриваемом случае $a \ll b, c \ll b$ ветви квадратного трехчлена (относительно переменной $K_y^{(I)}$) в левой части неравенства (2.2.17) направлены вниз, корни существуют и они – разных знаков. По смыслу задачи нам интересен случай положительных $K_y^{(I)}$; поэтому решением неравенства (2.2.17) в нашем случае будет

$$K_y^{(I)} > \frac{\frac{(a + 4c)B^{(I)}g_{min}^{(I)} + 2bnLip_y}{g_{min}^{(I)}} + \sqrt{\left[\frac{(a + 4c)B^{(I)}g_{min}^{(I)} + 2bnLip_y}{g_{min}^{(I)}}\right]^2 + \frac{8nb(b - a - 2c)B^{(I)}Lip_y}{g_{min}^{(I)}}}}{2n(b - a - 2c)}. \quad (2.2.18)$$

Таким образом, в рассматриваемом случае при выполнении неравенства (2.2.18) функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм 2.4 оказывается эффективнее простейшей версии (2.2.1) алгоритма метода зависимых испытаний (алгоритма 1.8).

2.2.3. Согласованный выбор параметров

Хорошо известно (см., например, подраздел 5.3.7 учебника [22]), что для алгоритма (2.2.1) несложно получить выражения для условно-оптимальных параметров по методу В.1. Например, для С-подхода и для заданного уровня погрешности L имеем

$$M_{opt}^{(C)}(L) = A_1^{(C)} \left(\frac{d_x + 4}{d_x} \right)^{\frac{d_x}{2}} L^{-\frac{d_x}{2}}; n_{opt}^{(C)}(L) = A_2^{(C)} (d_x + 4)^2 L^{-2} \quad (2.2.19)$$

для констант $A_1^{(C)}, A_2^{(C)}$ специального вида.

Формулы (2.2.19) получаются при минимизации трудоемкости $S(M_x, n) = H_1 M_x \times n$ при выполнении соотношения

$$\frac{H_1^{(C)}}{M_x^{2/d_x}} + \frac{H_2^{(C)}}{\sqrt{n}} = L. \quad (2.2.20)$$

Первое слагаемое в левой части равенства (2.2.20) – это верхняя граница для детерминированной компоненты погрешности (см. теорему 1.1), а второе слагаемое – верхняя граница для стохастической компоненты погрешности.

Заметим, что если нас интересует только порядок по L оптимальных параметров $M_{opt}^{(C)}(L)$ и $n_{opt}^{(C)}(L)$, т. е. соотношения вида

$$M_{opt}^{(C)}(L) \approx L^{-\frac{d_x}{2}}; n_{opt}^{(C)}(L) \approx L^{-2}$$

и трудоемкость $S(M_x, n)$ пропорциональна произведению $M_x \times n$, то достаточно приравнять детерминированную и стохастическую компоненты погрешности и получить требуемый порядок из соотношения (2.2.19) (это соображение в определенной степени оправдывает представленный выше в подразделе 2.1.1 метод 2.1).

Последнее рассуждение позволяет рекомендовать величину $L_{stoch} = \frac{L}{2}$ (здесь L – по-прежнему допустимый уровень погрешности) при подсчете констант $B^{(I)}; I = 1, \dots, M_x$ из (2.2.15) для выбора параметров функционального двустороннего геометрического вычислительного статистического алгоритма 2.4.

В целом выбор параметров алгоритма 2.4 предлагается осуществлять следующим образом. Для заданного уровня погрешности L из равенства

$$\frac{H_1^{(C)}}{M_x^{\frac{2}{d_x}}} = \frac{H_2^{(C)}}{\sqrt{n}} = \frac{L}{2} = L_{det} = L_{stoch}$$

выбираем

$$M_x = \frac{[H_1^{(C)}]^{d_x}}{L_{det}^2} = \left[2H_1^{(C)}\right]^{\frac{d_x}{2}} L^{-\frac{d_x}{2}}, \quad n = \frac{[H_2^{(C)}]^2}{L_{stoch}^2} = \left[2H_2^{(C)}\right]^2 L^{-2}. \quad (2.2.21)$$

Согласно формуле (2.2.15) для всех $i = 1, \dots, M_x$ вычисляем $B^{(i)} = \frac{72 \times \text{Lip}_y \times \varphi^{(up)}(x_i)}{L^2}$. Интегралы $\varphi^{(up)}(x_i) = \int_Y G^{(up)}(x_i, y^{(1)}, y^{(2)}) dy^{(1)} dy^{(2)}$ можно вычислить с помощью предварительных расчетов с использованием относительно «грубой» сетки по $y = (y^{(1)}, y^{(2)})$.

Далее вычисляем $N^{(i)} = n + \frac{B^{(i)}}{K_y}$, где

$$K_y^{(i)} = \frac{\frac{(a+4c)B^{(i)}g_{min}^{(i)} + 2bn\text{Lip}_y}{g_{min}^{(i)}} + \sqrt{\left[\frac{(a+4c)B^{(i)}g_{min}^{(i)} + 2bn\text{Lip}_y}{g_{min}^{(i)}}\right]^2 + \frac{8nb(b-a-2c)B^{(i)}\text{Lip}_y}{g_{min}^{(i)}}}}{2n(b-a-2c)}$$

(см. формулу (2.2.18)); затраты b и константа Липшица Lip_y полагаются равными для всех узлов $\{x_i\}$.

Выбираем

$$[K_y]_{opt} = \max\{K_y^{(1)}, \dots, K_y^{(M_x)}\}; \quad N_{opt} = \max\{N^{(1)}, \dots, N^{(M_x)}\} \quad (2.2.22)$$

и используем полученные значения в функциональном двустороннем геометрическом алгоритме 2.4 с кусочно-постоянными мажорантой и минорантой.

2.2.4. Результаты численных экспериментов

Нами была проведена серия численных экспериментов по обоснованию эффективности функционального двустороннего геометрического алгоритма 2.4 с кусочно-постоянными мажорантой и минорантой (по сравнению с простейшей версией (2.2.1) алгоритма метода зависимых испытаний (алгоритма 1.8)).

В частности, в качестве примера рассматривалась тестовая функция

$$g(x, y^{(1)}, y^{(2)}) = \exp(-x + y^{(1)} + y^{(2)}); \quad 0 \leq x, y^{(1)}, y^{(2)} \leq 1; \quad (2.2.23)$$

при этом $\varphi^{(1)}(x) = (e-1)^2 e^{-x}$. Эта функция не является трудно вычисляемой, но в экспериментах при вычислении каждого значения функции (2.2.23) использовалась задержка времени, равная $7,81 \cdot 10^{-5}$ секунд.

Верхний уровень погрешности L задавался равным 0,03. Были измерены (в секундах) величины $a = 2,02 \cdot 10^{-8}$; $b = 8,04 \cdot 10^{-5}$; $c = 4,01 \cdot 10^{-8}$.

Использовались следующие отдельно полученные приближения констант из соотношений (2.2.21): $H_1^{(C)} = 1,00321$; $H_2^{(C)} = 1,7217$; при этом $M_x = 8$, $n = 13\ 174$. Оптимальные значения $[K_y]_{opt}$ и N_{opt} вычислялись по формулам (2.2.22) (см. предыдущий подраздел 2.2.3).

	$[K_y]_{opt} = 65$	$K_y = 55$	$K_y = 75$	$K_y = 25$	$K_y = 95$
N	46 737	44 906	36 444	82 985	31 545
δ	$4,48 \cdot 10^{-3}$	$1,32 \cdot 10^{-2}$	$9,70 \cdot 10^{-3}$	$1,34 \cdot 10^{-3}$	$3,22 \cdot 10^{-3}$
t	8,382	8,542	8,562	8,503	8,482
Δ	$2,48 \cdot 10^{-3}$	$4,69 \cdot 10^{-3}$	$1,20 \cdot 10^{-2}$	$7,62 \cdot 10^{-3}$	$3,43 \cdot 10^{-3}$
T	4,356	3,896	4,937	5,825	7,050

Таблица 2.1. Результаты сравнения приближения (2.2.1) и алгоритма 2.4 (с различными значениями параметра K_y) для подынтегральной функции (2.2.23).

В таблице 2.1 приводятся погрешности δ и Δ и времена счета t и T для приближения (2.2.1) и алгоритма 2.4, соответственно. В качестве погрешностей вычислений δ и Δ , как и в подразделах 2.2.2, 2.2.3, был выбран максимум модуля разностей точной и приближенной функции $\varphi^{(1)}(x)$ в 100 равномерно распределенных случайных точках в области определения $[0,1]$.

Таблица 2.1 подтверждает оптимальность значения $[K_y]_{opt}$ вида (2.2.22): при другом выборе значения K_y затраты алгоритма 2.4 возрастают.

Тестовые эксперименты подтвердили преимущество алгоритма 2.4 по сравнению с алгоритмом (2.2.1) и показали, что выбор параметров, описанный в подразделе 2.2.3, дает близкую к оптимальной трудоемкость функционального двустороннего геометрического вычислительного статистического алгоритма 2.4 с кусочно-постоянными мажорантой и минорантой.

Отметим также, что убедительные тестовые примеры, показывающие эффективность двустороннего геометрического алгоритма с кусочно-постоянными мажорантой и минорантой для случая «чистого» интегрирования (т. е. для $d_x = 0$), приведены в работах Е. Г. Каблуковой [79, 154]; при этом в качестве подынтегральных функций $g(\mathbf{y})$ использованы, в том числе, элементы $G^{(A,K)}(\mathbf{y})$ разработанной автором диссертации (совместно с А. В. Войтишеком и Е. Г. Каблуковой) стохастической тестовой системы функций (см. [40, 44-46]).

2.3. Основные выводы главы 2

В главе 2 представлены: функциональный итерационный вычислительный статистический алгоритм с умножением на «большие» матрицы и функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм.

Оптимизация по методу В.1 для этих алгоритмов по разным причинам затруднена, и поэтому применен подход метода 2.1, подразумевающий разбиение допустимого значения погрешности на соразмерные компоненты, что позволяет осуществить конструктивный выбор параметров вычислений.

Получены следующие содержательные методические результаты.

На основании многочисленных компьютерных экспериментов (включающих вычисления на многопроцессорных системах Сибирского суперкомпьютерного центра при ИВМиМГ СО РАН) показано, что перспективная гипотеза о существовании «внутреннего» минимума по числу выбираемых столбцов трудоемкости вычислительного статистического алгоритма умножения на «большие» матрицы, не выполнена.

Для случая, когда в интеграле, зависящем от параметра, подынтегральная функция является трудно вычислимой, сконструирован функциональный двусторонний геометрический вычислительный статистический алгоритм, включающий введение просто вычисляемых 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.

Следует особо выделить то обстоятельство, что при проведении упомянутых многочисленных экспериментов использовались, в том числе, элементы стохастической тестовой системы функций.

Результаты главы 2 опубликованы в работах [38 – 40, 44–53].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

3.1. Научная новизна результатов диссертации

Научная новизна полученных результатов состоит в следующем.

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 [56, 57, 59–61, 63, 64, 67].

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 [54, 55, 57, 58, 60, 62, 64–66].

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 [50–53].

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 [38–40, 44–49].

5. Впервые проведено подробное численное исследование многоуровневых сеточных вычислительных статистических алгоритмов приближения интеграла, зависящего от параметра, и решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода [40–46].

3.2. Положения и результаты, выносимые на защиту

На защиту выносятся следующие результаты исследований.

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.

3.3. 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 и др.), математической

физики, теории вероятностей, математической статистики, функционального анализа, а также алгоритмы вычислительного статистического моделирования (методы Монте-Карло).

Предметом изучения стали функциональные вычислительные статистические алгоритмы приближения решений интегральных уравнений Фредгольма второго рода, интегралов, зависящих от параметра, и вероятностных плотностей.

В ходе исследований были разработаны конструкции и построена теория условной оптимизации функционального «быстрого» ядерного вычислительного алгоритма приближения вероятностных плотностей и геометрического функционального вычислительного статистического алгоритма приближения интеграла, зависящего от параметра.

Разработаны и (или) применены специальные подходы к численному исследованию алгоритмов с рандомизацией матриц, функционального геометрического двустороннего вычислительного статистического алгоритма, функциональных многоуровневых вычислительных статистических алгоритмов и для сравнительного тестирования сеточных, проекционных и ядерных функциональных вычислительных статистических алгоритмов приближения решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода.

3.4. Теоретическая и практическая значимость диссертационной 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 ста-

тистическом 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.

3.5. 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.

3.6. Личное участие автора в получении результатов

Постановки задач исследования были сформулированы научным руководителем, доктором физико-математических наук, профессором А. В. Войтишкой. 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.

3.7. Соответствие паспорту специальности

Данное диссертационное исследование выполнено согласно паспорту специальности 01.01.07 «Вычислительная математика». Результаты диссертации соответствуют всем четырем пунктам паспорта специальности.

1. Создание алгоритмов численного решения задач алгебры, анализа, дифференциальных и интегральных уравнений, математической физики, теории вероятностей и статистики, типичных для приложений математики к различным областям науки и техники.

2. Разработка теории численных методов, анализ и обоснование алгоритмов, вопросы повышения их эффективности.

3. Особенности численных методов и связанных с ними программных комплексов, отражающие рост производительности современных ЭВМ и способствующие повышению эффективности вычислений.

4. Реализация численных методов в решении прикладных задач, возникающих при математическом моделировании естественнонаучных и научно-технических проблем, соответствие рассматриваемых алгоритмов специфике рассматриваемых задач.

3.8. Представление результатов работы на семинарах и конференциях

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 [41]; Зальцбург, Австрия, 2–6 сентября 2019 года [60];

- V International Workshop «Applied Methods of Statistical Analysis. Statistical Computation and Simulation»; НГТУ, Новосибирск, 18–20 сентября 2019 года [62];
- X Международная конференция «Optimization and Applications»; Петровац, Черногория; 30 сентября – 4 октября 2019 года [66];
- III International Conference on Mathematics and Statistics; American University of Shariah, ОАЭ, 6–9 февраля 2020 года [67];
- V, VII, VIII международные семинары-совещания «Кубатурные формулы и их приложения»: Красноярск, 13–18 сентября 1999 года [38]; Красноярск, 18–23 августа 2003 года [45, 46]; Улан-Удэ, 15–22 августа 2005 года [47, 48];
- X Международная Петрозаводская конференция «Вероятностные методы в дискретной математике»; Петрозаводск, 22–26 мая 2019 года [54];
- XVIII, XIX Международные конференции имени А. Ф. Терпугова «Информационные технологии и математическое моделирование»; Саратов, 26–30 июня 2019 года [55, 56]; Томск, 2–5 декабря 2020 года;
- Международные конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» («Марчуковские чтения»); ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 1–5 июля 2019 года [57, 64]; 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 [58, 59];
- Международная конференция «Аналитические и численные методы решения задач гидродинамики, математической физики и биологии», посвященная 100-летию К. И. Бабенко; Пушкино Московской области, 26–29 августа 2019 года [61];
- XV Международная Азиатская школа-семинар «Проблемы оптимизации сложных систем»; Новосибирск, 26–30 августа 2019 года [66];
- конференции молодых ученых ИВМиМГ СО РАН: апрель 2001 года [42]; апрель 2002 года [43]; апрель 2006 года [49]; апрель 2010 года [53];
- XLI, XLV, XLVI Международные студенческие конференции «Студент и научно-технический прогресс» (Новосибирский государственный университет): апрель 2003 года [44]; апрель 2007 года [50]; апрель 2008 года [51].

3.9. Публикации

По результатам диссертации Т. Е. Булгаковой опубликовано 30 работ [38–67]; из них 8 работ в изданиях (журналы, сборники статей конференций), индексируемых в Web of Science или Scopus [39, 40, 46, 48, 52, 62, 63, 66]; 13 статей в материалах конференций [38, 41–43, 45, 47, 53–56, 64, 65] и 9 тезисов докладов на конференциях [44, 50, 51, 57–61, 67].

3.10. 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.

**ПРИЛОЖЕНИЕ. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
МНОГОУРОВНЕВЫХ СЕТОЧНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ
СТАТИСТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ [40 – 46]**

**П.1. Основы теории функциональных многоуровневых сеточных
вычислительных статистических алгоритмов**

В работах [91, 92] были предложены и исследованы функциональные многоуровневые сеточные вычислительные статистические алгоритмы (а точнее, специальные модификации алгоритмов 1.1, 1.8 метода зависимых испытаний) для численного решения задач приближения интеграла, зависящего от параметра

$$\varphi^{(1)}(x) = \int_Y g(x, y) dy; \quad x \in X \quad (\text{П. 1})$$

(см. формулу (В.9)), и решения $\varphi^{(2)}(x)$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода

$$\varphi^{(2)}(x) = \int_Y k(y, x)\varphi^{(2)}(y) dy + f(x); \quad x \in X = Y \quad (\text{П. 2})$$

(см. формулу (В.2)).

Построенные на основе теории информационной сложности, которая имеет обобщающий, «философский» характер, эти оптимальные (в смысле этой теории) алгоритмы, тем не менее, имеют вид, вполне пригодный для практического применения. Данный раздел посвящен исследованию возможности использования многоуровневых алгоритмов в реальных вычислениях.

Функциональные многоуровневые сеточные вычислительные статистические алгоритмы были построены в [91, 92] для получения верхних границ оптимальной погрешности $\tilde{\delta}_J(\text{МС})$ для специальных классов вычислительных статистических алгоритмов МС, имеющих мощность (число вычислительных операций, затраты) J , в рамках *теории сложности* [141–144]. Ключевым моментом алгоритмов из класса МС является метод выделения главной части, который позволяет уменьшать дисперсию, но одного его недостаточно для получения оптимальной скорости

сходимости, поэтому реализуется многоуровневая процедура, корректирующая решение на последовательно уплотняющихся сетках.

Кратко сформулируем основные результаты из [91, 92]. Здесь потребуются многочисленные (и довольно абстрактные) понятия и утверждения из теории сложности (см. в первую очередь [141–144]).

В работах [91, 92] для задач (П.1) и (П.2) рассматриваются множества X и Y , являющиеся многомерными единичными кубами: $\mathbf{x} \in X = [0,1]^{d_x}$; $\mathbf{y} \in Y = [0,1]^{d_y}$ (для функции $\varphi^{(2)}(\mathbf{x})$ имеем $d_x = d_y$).

Предполагается, что функции $\varphi^{(1)}(\mathbf{x})$ и $\varphi^{(2)}(\mathbf{x})$ из (П.1) и (П.2) принадлежат пространству $\mathbb{C}(X)$; при этом функции $g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ и $f(\mathbf{x})$ принадлежат множествам функций определенной гладкости [28].

В частности, в задаче (П.1) предполагается, что $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{G} = \mathbb{C}^r(X \times Y)$.

Для задачи (П.2) фиксируются константы $H_1^{(k)} > 0$, $0 < H_2^{(k)} < 1$, $H^{(f)} > 0$ и предполагается, что ядро $k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ и свободный член $f(\mathbf{x})$ принадлежат множествам

$$\mathbb{K} = \left\{ k(\cdot, \cdot) \in \mathbb{C}^r(X \times X) : \|k(\cdot, \cdot)\|_{\mathbb{C}^r(X \times X)} < H_1^{(k)}, \|k(\cdot, \cdot)\|_{\mathbb{C}(X \times X)} < H_2^{(k)} \right\};$$

$$\mathbb{F} = \left\{ f(\cdot) \in \mathbb{C}^r(X) : \|f(\cdot)\|_{\mathbb{C}^r(X)} < H^{(f)} \right\}.$$

Вводится также множество $\mathbb{X}_0 = \mathbb{K} \times \mathbb{F}$.

Задачи приближения функций $\varphi^{(1)}(\mathbf{x})$ и $\varphi^{(2)}(\mathbf{x})$ из (П.1) и (П.2) можно рассматривать как численную аппроксимацию операторов решения

$$(\Phi^{(1)}[g])(\mathbf{x}) = \int_Y g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}; \quad \mathbf{x} \in X \quad \text{и} \quad \text{(П. 3)}$$

$$\Phi^{(2)}: \mathbb{X}_0 \rightarrow \mathbb{C}(X), \quad (\Phi^{(2)}[k(\cdot, \cdot), f(\cdot)])(\mathbf{x}) = \varphi^{(2)}(\mathbf{x}) = \left[(E - I^{(k(\cdot, \cdot))})^{-1}(f) \right](\mathbf{x}); \quad \text{(П. 4)}$$

здесь E — тождественный оператор на $\mathbb{C}(X)$ и $I^{(k(\cdot, \cdot))}$ — интегральный оператор, действующий в $\mathbb{C}(X)$ как $I^{(k(\cdot, \cdot))}[\tilde{f}](\mathbf{x}) = \int_Y k(\mathbf{y}, \mathbf{x})\tilde{f}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$ для $\tilde{f} \in \mathbb{C}(X)$.

Вводится весьма широко понимаемый (включающий, в частности, алгоритмы из раздела 1.1 данной диссертации) класс всех абстрактных методов Монте-Карло

$$\text{MC} = \{MC = [(\Omega, \Sigma, \pi), (N_\omega, [Alg]_\omega)_{\omega \in \Omega}]\}. \quad \text{(П. 5)}$$

Элемент MC из класса (П.5) включает вероятностное пространство (Ω, Σ, π) , где Ω – непустое множество, Σ – σ -алгебра подмножеств Ω , а π – вероятностная мера на Σ . Кроме того, элемент MC содержит т. н. стандартный информационный оператор N_ω [141] и соответствующий алгоритм $[Alg]_\omega$.

При этом композиция $([Alg]_\omega^{(1)} \circ N_\omega)[g]$ дает вычислительную статистическую аппроксимацию оператора $\Phi^{(1)}$ из (П.3), а $([Alg]_\omega^{(2)} \circ N_\omega)[k(\cdot, \cdot), f(\cdot)]$ – приближение оператора $\Phi^{(2)}$ из (П.4).

Погрешность фиксированного метода $MC^{(i)} \in \mathbb{MC}^{(i)}$ по отношению к оператору решения $\Phi^{(i)}$; $i = 1, 2$ определяется как

$$\tilde{\delta}(\Phi^{(i)}, MC^{(i)}) = \sup_{z \in \mathbb{Z}} \int_{\Omega} \left| \Phi^{(i)}[z] - ([Alg]_\omega^{(i)} \circ N_\omega)[z] \right| d\pi(\omega),$$

где $\mathbb{Z} = \mathbb{G}_0$ – единичный шар в \mathbb{G} для $i = 1$ и $\mathbb{Z} = \mathbb{X}_0$ для $i = 2$.

Наконец, минимальная погрешность всех методов Монте-Карло мощности (количества вычислительных операций), не превосходящей J , равна

$$\tilde{\delta}_J(\mathbb{MC}^{(i)}) = \inf_{MC^{(i)} \in \mathbb{MC}^{(i)}} \{ \tilde{\delta}(\Phi^{(i)}, MC^{(i)}) : \text{card}[MC^{(i)}] \leq J \},$$

где $\text{card}[MC^{(i)}]$ – мощность фиксированного алгоритма Монте-Карло $MC^{(i)}$ (эта величина имеет смысл трудоемкости конкретного алгоритма из рассматриваемого класса $\mathbb{MC}^{(i)}$ [141]).

Приводимые ниже формулировки содержат обозначение $a_J \asymp b_J$ (здесь a_J, b_J – вещественные неотрицательные последовательности), которое следует понимать как одновременное выполнение соотношений $a_J \leq b_J$ и $a_J \geq b_J$. В свою очередь, $a_J \leq b_J$ означает, что существуют константа $A > 0$ и номер $J_0 \in \mathbb{N}$ такие, что $a_J \leq Ab_J$ для всех $J \geq J_0$.

Рассмотрим задачу приближения функционала (П.3).

УТВЕРЖДЕНИЕ П.1 [92]. *Справедливы соотношения*

$$\tilde{\delta}_J(\mathbb{MC}^{(1)}) = \begin{cases} J^{-\frac{2r+d_y}{2(d_x+d_y)}}(\log J)^{\frac{1}{2}} & \text{при } r > \frac{d_x}{2}; \\ J^{-\frac{r}{d_x}}(\log J)^{\frac{1}{2}} & \text{при } r < \frac{d_x}{2}; \end{cases}$$

$$J^{-\frac{1}{2}}(\log J)^{\frac{1}{2}} \leq \tilde{\delta}_J(\mathbb{MC}^{(1)}) \leq J^{-\frac{1}{2}}(\log J)^{\frac{3}{2}} \quad \text{при } r = \frac{d_x}{2}.$$

Доказательство этого утверждения состоит из трех частей [92]. В первой строится *многоуровневый вычислительный статистический алгоритм метода зависимых испытаний* $MC_{opt}^{(1)}$, являющийся конкретной аппроксимацией оператора (П.3). Во второй части доказательства проводится анализ поведения $\tilde{\delta}(\Phi^{(1)}, MC_{opt}^{(1)})$, что позволяет получить верхнюю границу для $\tilde{\delta}_J(\mathbb{MC}^{(1)})$. Наконец, обосновывается оптимальность построенного алгоритма $MC_{opt}^{(1)}$, т. е. показывается, что его скорость сходимости неулучшаема (доказывается, что нижняя граница для $\tilde{\delta}_J(\mathbb{MC}^{(1)})$ имеет тот же порядок по J , что и погрешность построенного алгоритма $MC_{opt}^{(1)}$).

Приведем схему построения многоуровневого вычислительного статистического алгоритма метода зависимых испытаний $MC_{opt}^{(1)}$ из [92].

Фиксируется $q \in \{0, 1, 2, \dots\}$ и через $\Pi_q^{(\cdot)}$ обозначается разбиение единичного куба $[0, 1]^d$ на непересекающиеся кубы с длиной ребра 2^{-q} (для $d = d_x$ получаем разбиение $\Pi_q^{(x)}$ области X , а при $d = d_y$ – разбиение $\Pi_q^{(y)}$ области Y).

Для функций из $\mathbb{C}^r([0, 1]^d)$ вводятся также равномерные сетки $\Gamma_q^{(\cdot)}$ на $[0, 1]^d$ с шагом $h_q^{(r)} = \frac{1}{r 2^q}$ по каждой координате:

$$\Gamma_q^{(\cdot)} = \left\{ \left(i_1 h_q^{(r)}, \dots, i_d h_q^{(r)} \right); 0 \leq i_1, \dots, i_d \leq r 2^q \right\}. \quad (\text{П. 6})$$

Кроме того, через $P_q^{(\cdot)}: \mathbb{C}([0, 1]^d) \rightarrow \mathbb{P}(\Pi_q^{(\cdot)})$ обозначается детерминированная комбинированная d -мерная интерполяция порядка r на $\Gamma_q^{(\cdot)}$. Здесь $\mathbb{P}(\Pi_q^{(\cdot)})$ является

пространством функций $\tilde{P}(\cdot)$ из $\mathbb{C}([0,1]^d)$ таких, что для любого подкуба Δ из разбиения $\Pi_q^{(\cdot)}$ функция $\tilde{P}(\mathbf{s})$; $\mathbf{s} \in \Delta$ является полиномом порядка меньшего или равного r .

При заданной подынтегральной функции $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{G} = \mathbb{C}^r(X \times Y)$ отображение $P_q^{(x)}$ однозначно определяется значениями $g(\mathbf{x}, \cdot)$, $\mathbf{x} \in \Gamma_q^{(x)}$, а отображение $P_q^{(y)}$ – значениями $g(\cdot, \mathbf{y})$, $\mathbf{y} \in \Gamma_q^{(y)}$. Можно также рассматривать оператор $P_q^{(\cdot)}$ как действующий в пространстве $\mathbb{C}(X \times Y)$, имея в виду то, что производится интерполяция по одной из переменных \mathbf{x} или \mathbf{y} при фиксированной второй переменной. Например, $P_q^{(x)}$ можно определить для функции $g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ как $[P_q^{(x)} g](\mathbf{x}, \mathbf{y}) = [P_q^{(x)} g(\cdot, \mathbf{y})](\mathbf{x})$.

АЛГОРИТМ П.1 [92]. 1. Вводятся входные данные: параметр мощности J (заданное количество вычислительных операций) и подынтегральная функция $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}): X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$.

2. Вычисляются уровневые параметры: стартовый уровень

$$\tilde{L}_b = \begin{cases} \hat{L} = \left\lfloor \frac{\log_2 J}{d_x + d_y} + 1 \right\rfloor, & \text{если } r \geq \frac{d_x}{2}; \\ 0 & \text{иначе;} \end{cases}$$

($[A]$ обозначает целую часть числа A), и последний уровень

$$\tilde{L}_e = \begin{cases} \left\lfloor \left(1 + \frac{d_y}{2r}\right) \hat{L} \right\rfloor, & \text{если } r \geq \frac{d_x}{2}; \\ \left\lfloor \left(1 + \frac{d_y}{d_x}\right) \hat{L} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{\log_2 \hat{L}}{d_x} \right\rfloor & \text{иначе} \end{cases}$$

($[A]$ обозначает минимальное целое число, большее или равное числу A).

3. На l -ом уровне, $l = \tilde{L}_b, \dots, \tilde{L}_e$, рассматривается детерминированная сетка $\Gamma_l^{(x)}$ по переменной \mathbf{x} с числом точек $M_{x,l} = (r2^l + 1)^{d_x}$ и задается количество случайных узлов по переменной \mathbf{y} :

$$n_{y,l} = \begin{cases} \left\lceil 2^{d_y \tilde{L} - (r + \frac{d_x}{2})(l - \tilde{L}_b)} \right\rceil, & \text{если } r \geq \frac{d_x}{2}; \\ \left\lceil 2^{(d_x + d_y)\tilde{L} - d_x l - (\frac{d_x}{2} - r)(\tilde{L}_e - l)} \right\rceil & \text{иначе.} \end{cases}$$

4. Моделируются случайные векторы $\boldsymbol{\theta}_j^{(l)} = (\alpha_j^{(l,1)}, \dots, \alpha_j^{(l,d_y)})$; $l = \tilde{L}_b, \dots, \tilde{L}_e$; $j = 1, \dots, n_{y,l}$ – независимые, равномерно распределенные в $Y = [0,1]^{d_y}$; здесь $\{\alpha_j^{(l,k)}\}$; $k = 1, \dots, d_y$ – стандартные случайные числа.

5. Для начального уровня \tilde{L}_b реализуется метод Монте-Карло по следующей схеме: если $r \geq \frac{d_x}{2}$, то для всех $\mathbf{x} \in \Gamma_{\tilde{L}_b}^{(x)}$ вычисляется

$$z_{\tilde{L}_b}(\mathbf{x}) = \int_Y [P_{\tilde{L}_b}^{(y)} g](\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} + \frac{1}{n_{y,\tilde{L}_b}} \sum_{j=1}^{n_{y,\tilde{L}_b}} [g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_j^{(\tilde{L}_b)}) - [P_{\tilde{L}_b}^{(y)} g](\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_j^{(\tilde{L}_b)})]$$

(можно заметить, что в последнем соотношении интеграл на самом деле является детерминированной комбинированной квадратурой Ньютона – Котеса [37], а усредненная сумма представляет собой метод Монте-Карло с выделением главной части); если же $r < \frac{d_x}{2}$, то для всех $\mathbf{x} \in \Gamma_{\tilde{L}_b}^{(x)}$ вычисляется

$$z_{\tilde{L}_b}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n_{y,\tilde{L}_b}} \sum_{j=1}^{n_{y,\tilde{L}_b}} g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_j^{(\tilde{L}_b)});$$

для $\tilde{L}_b = 0$ получается классический метод Монте-Карло на самой грубой сетке.

6. На последующих уровнях $l = \tilde{L}_b + 1, \dots, \tilde{L}_e$ метод Монте-Карло реализуется следующим образом: для всех $\mathbf{x} \in \Gamma_l^{(x)}$ вычисляется

$$z_l(\mathbf{x}) = \frac{1}{n_{y,l}} \sum_{j=1}^{n_{y,l}} g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_j^{(l)}).$$

7. Окончательная аппроксимация функции $(\Phi^{(1)}[g])(\mathbf{x})$ из (П.3) имеет вид

$$\widetilde{MC}_{opt}^{(1)}(\mathbf{x}) = P_{\tilde{L}_b}^{(x)} z_{\tilde{L}_b}(\mathbf{x}) + \sum_{l=\tilde{L}_b+1}^{\tilde{L}_e} [P_l^{(x)} - P_{l-1}^{(x)}] z_l(\mathbf{x}).$$

Таким образом, алгоритм П.1 представляет собой многоуровневую процедуру, в которой число $n_{y,l}$ случайных точек $\{\boldsymbol{\theta}_j^{(l)}\}$ из Y уменьшается с ростом l , в то время как детерминированная сетка $\Gamma_l^{(x)}$ в X становится более подробной. В результате

детерминированная погрешность становится меньше, а стохастическая больше, и при указанном в пунктах 1–3 алгоритма П.1 выборе параметров можно уравнивать эти погрешности. Это позволяет получить оптимальный порядок сходимости алгоритма и доказать утверждение П.1.

Теперь рассмотрим задачу приближения функционала (П.4).

УТВЕРЖДЕНИЕ П.2 [91]. *Справедливы соотношения*

$$\tilde{\delta}_J(\text{MC}^{(2)}) = \begin{cases} J^{-\frac{r}{2d_y} - \frac{\{-\frac{r}{2d_y} - \frac{1}{4}\}}{4}} (\log J)^{\frac{1}{2}} & \text{при } r > \frac{d_y}{2}; \\ J^{-\frac{r}{d_y}} (\log J)^{\frac{1}{2}} & \text{при } r < \frac{d_y}{2}; \end{cases}$$

$$J^{-\frac{1}{2}} (\log J)^{\frac{1}{2}} \leq \tilde{\delta}_J(\text{MC}^{(2)}) \leq J^{-\frac{1}{2}} (\log J)^{\frac{3}{2}} \quad \text{при } r = \frac{d_y}{2};$$

здесь $\{A\}$ обозначает дробную часть числа A .

По аналогии с утверждением П.1, получение нижней границы основано на методе приведения к т. н. среднему случаю, тогда как верхняя граница устанавливается представлением и анализом конкретного **многоуровневого вычислительного статистического алгоритма метода зависимых испытаний** [91]. Алгоритм состоит из детерминированной и стохастической частей.

АЛГОРИТМ П.2 [91]. 1. *Вводятся исходные данные: параметр мощности (количество вычислительных операций) J , ядро и правая часть уравнения $[k(\cdot, \cdot), f(\cdot)] \in \mathbb{X}_0$, а также начальная плотность используемых далее прикладных цепей Маркова $\{\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)}\}$, тождественно равная единице в $Y = X = [0, 1]^{d_x}$, и переходная функция тех же прикладных цепей Маркова, тождественно равная вероятности выживания $1 - p^{(a)}$ в $X = Y$, причем*

$$\|k(\cdot, \cdot)\|_{\mathbb{C}(X \times X)} < H_2^{(k)} < p^{(a)} < 1. \quad (\text{П. 7})$$

2. *Вычисляются уровневые параметры: стартовый уровень*

$$L_b = \left\lceil \frac{\log_2 J}{2d_x} + 1 \right\rceil$$

и последний уровень

$$L_e = \begin{cases} \left\lceil \left(1 + \frac{d_x}{2r}\right) L_b \right\rceil, & \text{если } r \geq \frac{d_x}{2}; \\ 2L_b - \left\lfloor \frac{\log_2 J}{d_x} \right\rfloor & \text{иначе.} \end{cases}$$

3. **Детерминированная часть.** Строим приближение $V_0(\mathbf{x}) \in l_\infty(\Gamma_{L_b}^{(x)})$ к точному решению $[\varphi^{(2)}(\mathbf{x})]_{\mathbf{x} \in \Gamma_{L_b}^{(x)}}$ на сетке $\Gamma_{L_b}^{(x)}$, используя детерминированный алгоритм, обеспечивающий выполнение соотношения:

$$\left\| [\varphi^{(2)}(\mathbf{x})]_{\mathbf{x} \in \Gamma_{L_b}^{(x)}} - V_0(\mathbf{x}) \right\|_{l_\infty(\Gamma_{L_b}^{(x)})} \leq H 2^{-r L_b}; \quad H = \text{const} \quad (\text{П. 8})$$

(это «грубая» аппроксимация, которая будет использоваться в качестве предпосылки более тонкой аппроксимации методом Монте-Карло). Определим $V(\mathbf{x}) = P_{L_b}^{(x)} V_0(\mathbf{x}) \in \mathbb{C}(X)$ и $W(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = [P_{L_b}^{(y)} \otimes P_{L_b}^{(x)}] k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \in \mathbb{C}(Y \times X)$ и вычислим $\bar{\varphi}^{(2)}(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) - I^{(W(\cdot, \cdot))}[V](\mathbf{x})$. Так как $V(\mathbf{x})$ и $W(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ – кусочно-полиномиальные функции, то детерминированное приближение $\bar{\varphi}^{(2)}(\mathbf{x})$ вычисляется точно, поэтому $V(\mathbf{x})$ является точным решением интегрального уравнения с ядром $W(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ и правой частью $\bar{\varphi}^{(2)}(\mathbf{x})$.

4. **Стохастическая часть.** Для каждого $l = L_b, \dots, L_e$ задается количество траекторий прикладной цепи Маркова для получения приближения по переменной интегрирования \mathbf{y} :

$$n_{y,l} = \begin{cases} \left\lceil 2^{d_x L_b - (r + \frac{d_x}{2})(l - L_b)} \right\rceil, & \text{если } r \geq \frac{d_x}{2}; \\ \left\lceil 2^{d_x(2L_b - l) - (\frac{d_x}{2} - r)(2L_b - l - \lfloor \frac{\log_2 L_b}{d_x} \rfloor)} \right\rceil & \text{иначе.} \end{cases}$$

5. Моделируются независимые траектории прикладной цепи Маркова $\Xi_j^{(l)} = \left\{ \xi_j^{(l,0)}, \xi_j^{(l,1)}, \dots, \xi_j^{(l, N_j^{(l)})} \right\}$, определенной в пункте 1 (здесь $j = 1, \dots, n_{y,l}$ и $l = L_b, \dots, L_e$).

6. Для каждого $j = 1, \dots, n_{y,l}$ на L_b -ом уровне, определяем

$$\zeta_j^{(L_b)}(\mathbf{x}, \Xi_j^{(L_b)}) = \frac{1}{p^{(a)}[1 - p^{(a)}]^{N_j^{(L_b)}}} \left[f(\xi_j^{(L_b,0)}) k(\xi_j^{(L_b,0)}, \xi_j^{(L_b,1)}) \times \dots \times k\left(\xi_j^{(L_b, N_j^{(L_b)} - 1)}, \xi_j^{(L_b, N_j^{(L_b)})}\right) k\left(\xi_j^{(L_b, N_j^{(L_b)})}, \mathbf{x}\right) - \bar{\varphi}^{(2)}(\xi_j^{(L_b,0)}) W(\xi_j^{(L_b,0)}, \xi_j^{(L_b,1)}) \times \dots \times W\left(\xi_j^{(L_b, N_j^{(L_b)} - 1)}, \xi_j^{(L_b, N_j^{(L_b)})}\right) W\left(\xi_j^{(L_b, N_j^{(L_b)})}, \mathbf{x}\right) \right].$$

Это оценка по поглощениям для разности $\int_Y k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \varphi^{(2)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} - \int_Y W(\mathbf{y}, \mathbf{x}) V(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$. Полагаем

$$\zeta_j^{(L_b)}(\Xi_j^{(L_b)}) = \left[\zeta_j^{(L_b)}(\mathbf{x}, \Xi_j^{(L_b)}) \right]_{\mathbf{x} \in \Gamma_{L_b}^{(x)}}.$$

7. Для $L_b < l \leq L_e$ последовательно определяем $W^{(l)}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) - P_{l-1}^{(x)} k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$,

$$\zeta_j^{(l)}(\mathbf{x}, \Xi_j^{(l)}) = \frac{f(\xi_j^{(l,0)}) k(\xi_j^{(l,0)}, \xi_j^{(l,1)}) \times \dots \times k\left(\xi_j^{(l, N_j^{(l)} - 1)}, \xi_j^{(l, N_j^{(l)})}\right) W^{(l)}\left(\xi_j^{(l, N_j^{(l)})}, \mathbf{x}\right)}{p^{(a)}[1 - p^{(a)}]^{N_j^{(l)}}}$$

и полагаем $\zeta_j^{(l)}(\Xi_j^{(l)}) = \left[\zeta_j^{(l)}(\mathbf{x}, \Xi_j^{(l)}) \right]_{\mathbf{x} \in \Gamma_l^{(x)}}$.

8. Для каждого $L_b \leq l \leq L_e$ реализуем усреднение метода Монте-Карло

$$Z_{n_{y,l}}^{(l)} = \frac{1}{n_{y,l}} \sum_{j=1}^{n_{y,l}} \zeta_j^{(l)}(\Xi_j^{(l)}) -$$

это $l_\infty(\Gamma_l^{(x)})$ -значная величина.

9. Окончательная аппроксимация функции $(\Phi^{(2)}[k(\dots), f(\dots)])(\mathbf{x})$ из (П.4) имеет вид

$$\widetilde{MC}_{opt}^{(2)}(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) - \bar{\varphi}^{(2)}(\mathbf{x}) + P_{L_e}^{(x)} f(\mathbf{x}) + \sum_{l=L_b}^{L_e} \left[P_l^{(x)} Z_{n_{y,l}}^{(l)} \right](\mathbf{x}).$$

Особо отметим, что алгоритм П.2 – это аналог локального алгоритма 1.1 метода зависимых испытаний: здесь осуществляется многоуровневая процедура приближения функции $\int_Y k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \varphi^{(2)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$, в которой число траекторий $n_{y,l}$ из Y уменьшается с ростом l , а детерминированная сетка в Y становится более подробной. В итоге детерминированная погрешность уменьшается, а стохастическая –

увеличивается, и при указанном выборе параметров можно уравнивать эти погрешности. Это позволяет получить оптимальный порядок сходимости алгоритма и доказать утверждение П.2.

П.2. Численное тестирование многоуровневого статистического алгоритма приближения интеграла, зависящего от параметра

Нами были проведены многочисленные серии тестовых расчетов по исследованию алгоритмов П.1 и П.2. В подразделах П.2 и П.3 мы приведем частичное описание результатов этих численных экспериментов (см. также наши работы [42, 43]). Особо отметим, что расчеты проводились, в том числе, с использованием разработанной нами стохастической системы тестовых функций (см. [30, 40, 44–46, 79, 118]).

Из соображений о разумном сочетании аппроксимационных свойств и свойств устойчивости базисов (В.12) в функциональных вычислительных статистических алгоритмах (подробности см. в разделе 1.3 данной диссертации) следует, что с практической точки зрения для рассматриваемых в алгоритмах функций $z(\mathbf{x})$ использовать аппроксимацию Стренга – Фикса

$$L^{(M_l)} z(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{M_l} w^{(i,l)} \left[z(\mathbf{x}_1^{(l)}), \dots, z(\mathbf{x}_{M_l}^{(l)}) \right] \chi^{(m,r-1,l)}(\mathbf{x})$$

с базисными функциями вида (1.3.4):

$$\chi^{(m,r-1,l)}(\mathbf{x}) = \beta^{(r-1)} \left(\frac{x^{(1)}}{h_l^{(r)}} - i_1^{(m,l)} \right) \times \dots \times \beta^{(r-1)} \left(\frac{x^{(d)}}{h_l^{(r)}} - i_d^{(m,l)} \right) \quad (\text{П.9})$$

(здесь $\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)})$) для узлов $\{\mathbf{x}_1^{(i,l)}, \dots, \mathbf{x}_{M_l}^{(i,l)}\}$ соответствующей сетки $\Gamma_l^{(\cdot)}$ из (П.6).

Утверждение 1.1 позволяет, в частности, получать соотношения вида (П.8), при этом замена аппроксимации $P_l^{(x)} z(\mathbf{x})$ на $L^{(M_l)} z(\mathbf{x})$ не приводит к искажениям утверждений П.1, П.2. Кроме того, в силу финитности базисных функций (П.9), при использовании интерполяций проще вычислять соответствующие приближения функций из алгоритмов П.1, П.2 в различных (в том числе, случайных) точках.

Как указано в подразделе 1.3.3, обеспечение нужного порядка r в соотношениях вида (П.8) связано с усложненным поиском обеспечивающих этот порядок коэффициентов $w^{(i,l)} [z(\mathbf{x}_1^{(l)}), \dots, z(\mathbf{x}_{M_l}^{(l)})]$. Поэтому, как и в разделе 1.3 данной работы, в наших расчетах мы ограничились рассмотрением случая $r = 2$. Здесь функции (П.9) оказываются базисом мульти-линейного восполнения (1.1.14), и поэтому можно использовать простейшие коэффициенты $w^{(i,l)} [z(\mathbf{x}_1^{(l)}), \dots, z(\mathbf{x}_{M_l}^{(l)})] = z(\mathbf{x}_i^{(l)})$ (они обеспечивают порядок аппроксимации $r = 2$ – см. теорему 1.1 из подраздела 1.3.3 данной диссертации).

Главный недостаток конструкций теории сложности, частично представленной в подразделе П.1 (см. также [91, 92, 141–144]), состоит в несколько поверхностном учете реальных вычислительных затрат на различных стадиях реализации оптимальных алгоритмов. В частности, при доказательстве утверждений П.1, П.2 в [91, 92] используется *простейшая стоимостная модель*, предполагающая, что затраты на вычисление значений функции (в том числе, в случайных точках), арифметическую операцию или сравнения одинаковы.

Такой подход не отражает реальную ситуацию. Более того, на практике *многоуровневые алгоритмы* П.1 и П.2 *часто проигрывают по эффективности (экономичности) более простым схемам метода Монте-Карло* (при одинаковом уровне погрешности). В этом подразделе мы приведем результаты расчетов, иллюстрирующих такую ситуацию для алгоритма П.1.

Алгоритм многоуровневого метода сравнивался с простым («одноуровневым») алгоритмом метода зависимых испытаний (алгоритм 1.8 с $f_\theta(\mathbf{y}) \equiv 1; \mathbf{y} \in Y$ и с выделением главной части).

В качестве критерия сравнения была выбрана величина вычислительной трудоемкости

$$S^{(i)} = [\delta^{(i)}]^2 \times t^{(i)} \times n^{(i)} \quad (\text{П. 10})$$

(значение $i = 1$ соответствует алгоритму многоуровневого метода, $i = 2$ соответствует простому алгоритму метода зависимых испытаний), где $\delta^{(i)}$ – погрешность вычислений, $t^{(i)}$ – время (в секундах) на вычисление одного значения вида $g(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}_j)$, а $n^{(i)}$ – суммарное количество таких вкладов (по всем уровням).

В качестве погрешности вычислений $\delta^{(i)}$, как и в [145], был выбран максимум модуля разности точной и приближенной функции в 100 равномерно распределенных случайных точках $\{\boldsymbol{\alpha}^{(k)}; k = 1, \dots, 100\}$ области определения (подробному обоснованию такого подхода к приближению функций посвящены работы [146–148]).

d_x	1	3	3	3	5
d_y	1	3	4	5	4
J	16384	256	64	128	256
$\delta^{(1)}$	$4,14 \cdot 10^{-7}$	$1,60 \cdot 10^{-2}$	$1,45 \cdot 10^{-1}$	$4,13 \cdot 10^{-2}$	$1,73 \cdot 10^{-1}$
$t^{(1)}$	43,93	0,92	0,27	0,33	1,36
$n^{(1)}$	198	1245	57	111	71
$S^{(1)}$	$4,14 \cdot 10^{-13}$	$8,17 \cdot 10^{-5}$	$9,04 \cdot 10^{-5}$	$1,73 \cdot 10^{-5}$	$8,05 \cdot 10^{-4}$
$\delta^{(2)}$	$1,58 \cdot 10^{-7}$	$2,06 \cdot 10^{-2}$	$2,33 \cdot 10^{-2}$	$2,66 \cdot 10^{-2}$	$8,15 \cdot 10^{-1}$
$t^{(2)}$	11,85	10,99	15,54	4,90	0,98
$n^{(2)}$	3	5	1	1	1
$S^{(2)}$	$2,47 \cdot 10^{-16}$	$6,51 \cdot 10^{-6}$	$2,36 \cdot 10^{-6}$	$9,82 \cdot 10^{-7}$	$1,81 \cdot 10^{-4}$

Таблица П.1. Результаты тестирования алгоритма 2.3 для полиномиальной функции из [145]

$$\text{вида } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{k_x=1}^{d_x} \left([x^{(k_x)}]^2 + x^{(k_x)} + 1 \right) + \sum_{k_y=1}^{d_y} \left([y^{(k_y)}]^2 + y^{(k_y)} + 1 \right);$$

$$\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d_x)}); \mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d_y)}).$$

Проводился согласованный выбор: для многоуровневого метода – параметра мощности J , для простого метода Монте-Карло – уровень допустимой погрешности L . При тестировании использовались как функции из [145] (полиномиальные, гармонические и др.), так и функции $G^{(A,K)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ тестовой системы из [40, 44-46]. Результаты вычислений частично представлены в таблицах П.1–П.3.

Как достоинство многоуровневого метода можно отметить то, что на каждом уровне алгоритм имеет дело с небольшим количеством операций, не считая затраты

на вычисление значений функции; а как недостаток то, что для практической реализации предложенного алгоритма требуются специальные приемы программирования, в частности, действия с динамическими массивами. При этом возникают проблемы нехватки оперативной памяти ЭВМ (особенно для больших размерностей d_x и d_y и мощности J).

A	0,5	0,5	0,5	0,5	2,5
K	100	500	500	1 000	500
J	64	64	16	64	16
$\delta^{(1)}$	$1,33 \cdot 10^{-1}$	$8,54 \cdot 10^{-2}$	$1,59 \cdot 10^{-2}$	$1,92 \cdot 10^{-1}$	$2,08 \cdot 10^{-1}$
$t^{(1)}$	3,78	18,67	7,73	37,18	3,94
$n^{(1)}$	24	24	12	24	12
$S^{(1)}$	$4,48 \cdot 10^{-4}$	$9,08 \cdot 10^{-4}$	$6,52 \cdot 10^{-6}$	$9,10 \cdot 10^{-3}$	$5,69 \cdot 10^{-4}$
$\delta^{(2)}$	$1,19 \cdot 10^{-1}$	$4,53 \cdot 10^{-2}$	$5,62 \cdot 10^{-2}$	$6,77 \cdot 10^{-2}$	$4,00 \cdot 10^{-1}$
$t^{(2)}$	0,27	1,36	1,25	3,63	1,53
$n^{(2)}$	1	1	1	3	3
$S^{(2)}$	$1,07 \cdot 10^{-6}$	$7,77 \cdot 10^{-7}$	$1,10 \cdot 10^{-6}$	$1,38 \cdot 10^{-5}$	$2,04 \cdot 10^{-4}$

Таблица П.2. Результаты тестирования алгоритма 2.3 для функций $g(x, y) = G^{(A,K)}(x, y)$ из стохастической тестовой системы (см. [40, 44-46]) для $d_x = d_y = 1$:

исследование зависимости от параметров A и K .

Заметим, что в работе [145] были сформулированы соображения о выборе условно-оптимальных параметров (количество узлов в сетки и количество испытаний) по методу В.1 для одноуровневого алгоритма метода зависимых испытаний (см. также [27, 28, 30, 34]). Для рассмотренных тестовых примеров такой выбор затруднен (особенно для больших размерностей d_x и d_y) в связи с необходимостью вычисления констант, входящих в выражения для условно-оптимальных параметров (см. замечание 1.17 данной диссертации).

Главный вывод из проведенных экспериментов состоит в том, что **одноуровневый алгоритм метода** (алгоритм 1.8 с $f_\theta(y) \equiv 1$; $y \in Y$ и с выделением главной части) **заметно превосходит многоуровневый алгоритм** П.1 по выбранному критерию (П.10).

Для полиномиальной тестовой функции из работы [145] (таблица П.1) многоуровневый алгоритм часто выполняется быстрее одноуровневого (время вычислялось в секундах), однако по критерию $S^{(i)}$ из (П.10) одноуровневый метод все равно оказывается эффективней (характерным, к примеру, является случай $d_x = d_y = 3$ и $J = 256$).

d_x	1	2	4	3	4
d_y	2	3	2	2	1
J	32	512	32	512	512
$\delta^{(1)}$	$2,47 \cdot 10^{-2}$	$7,41 \cdot 10^{-2}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$1,10 \cdot 10^{-2}$	$1,01 \cdot 10^{-2}$
$t^{(1)}$	9,89	782,95	6,05	38,84	42,28
$n^{(1)}$	24	85	19	313	147
$S^{(1)}$	$4,03 \cdot 10^{-5}$	$1,01 \cdot 10^{-1}$	$3,41 \cdot 10^{-6}$	$4,06 \cdot 10^{-4}$	$1,56 \cdot 10^{-4}$
$\delta^{(2)}$	$6,02 \cdot 10^{-3}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,65 \cdot 10^{-2}$	$2,37 \cdot 10^{-2}$	$9,32 \cdot 10^{-3}$
$t^{(2)}$	30,91	8,84	11,70	109,31	4,56
$n^{(2)}$	5	1	1	1	3
$S^{(2)}$	$1,56 \cdot 10^{-6}$	$6,89 \cdot 10^{-7}$	$8,87 \cdot 10^{-7}$	$1,71 \cdot 10^{-5}$	$1,10 \cdot 10^{-7}$

Таблица П.3. Результаты тестирования алгоритма 2.3 для функций $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = G^{(A,K)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ из стохастической тестовой системы (см. [40, 44-46]) для $A = 0,1$; $K = 500$: исследование зависимости от размерностей d_x и d_y .

Для функций $G^{(A,K)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ из стохастической тестовой системы (см. [40, 44-46]) было проведено исследование зависимости погрешностей исследуемых алгоритмов от наращивания сложности вычисления функции (за счет параметра K), варьирования ширины спектра A и от размерностей d_x и d_y – см. таблицы П.2, П.3. И здесь одноуровневый метод оказался эффективнее.

Таким образом, указанные в [92, 105] и в утверждении П.1 параметры многоуровневого алгоритма П.1 аппроксимации интеграла, зависящего от параметра (П.1), на деле не являются оптимальными. Причиной этого является то, что предположения простой стоимостной модели не выполняются. Поэтому здесь целесообразно ввести веса, учитывающие реальные вычислительные затраты, и строить

алгоритм П.1 уже с учетом этих весов. Можно предположить, что при этом значительно улучшатся численные результаты. Однако доказательство оптимальности модифицированного таким образом алгоритма П.1 (то есть аналога утверждения П.1) может оказаться существенно более сложным.

П.3. Численное тестирование многоуровневого статистического алгоритма приближения решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода

Многочисленные серии тестовых экспериментов были проведены также для многоуровневого алгоритма П.2 для приближения решения $\varphi^{(2)}(\mathbf{x})$ уравнения (П.2).

Одним из недостатков этого алгоритма является то, что при его описании в [92] не указан конкретный алгоритм получения приближения $V_0(\mathbf{x})$, указан лишь порядок требуемой точности (см. пункт 3 алгоритма П.2 и соотношение (П.8)). Мы следовали рекомендациям работы [150] и в детерминированной части алгоритма использовали замену интеграла $\int_{\mathcal{Y}} k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \varphi^{(2)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$ в правой части уравнения (П.2) т. н. конечной квадратуемой суммой [151], в которой коэффициенты вычислялись по формулам трапеций и Симпсона. Тестовые результаты показали, что результаты для обеих формул дают одинаковый порядок погрешности. Поэтому ниже в таблицах П.4–П.8 приведены результаты расчетов для формулы трапеций в описанной процедуре. Для решения получающейся здесь системы линейных уравнений использовался метод Гаусса (см., например, [37]).

Как известно (см., например, [37]), переход к многомерным случаям в детерминированных методах, в том числе и для интегрирования, ведет к существенной потере точности вычислений. Поэтому нами было предложено *получать приближение* $V_0(\mathbf{x})$ не описанным выше детерминированным методом, а *одним из методов Монте-Карло* из раздела 1.1 данной диссертации. Конкретнее, при тестировании многоуровневого алгоритма П.2 для этой цели был использован алгоритм 1.1 с моделируемым числом траекторий прикладной цепи Маркова, равном 2^{2L_b} (столько траекторий требуется для достижения нужной точности из соотношения

(П.8)). Как видно из таблиц, эта замена приводит к увеличению времени вычислений и, следовательно, к увеличению трудоемкости. Отметим, однако, что тестирование проведено только для одномерного случая, а для многомерного случая следует ожидать изменения ситуации: детерминированный метод существенно усложниться, а метод Монте-Карло останется практически неизменным.

J	512	2 048	8 192	32 768
$n^{(1)}$	50	98	198	395
$\delta^{(1, det)}$	$2,6829 \cdot 10^{-4}$	$3,6185 \cdot 10^{-5}$	$8,4586 \cdot 10^{-6}$	$1,0924 \cdot 10^{-6}$
$t^{(1, det)}$	$3,0000 \cdot 10^{-2}$	$1,9100 \cdot 10^{-1}$	$1,2720 \cdot 10^0$	$9,4140 \cdot 10^0$
$S^{(1, det)}$	$1,0797 \cdot 10^{-7}$	$2,4508 \cdot 10^{-8}$	$1,8020 \cdot 10^{-8}$	$4,4372 \cdot 10^{-9}$
$\delta^{(1, mc)}$	$2,5061 \cdot 10^{-4}$	$1,0880 \cdot 10^{-4}$	$4,4317 \cdot 10^{-5}$	$1,1139 \cdot 10^{-5}$
$t^{(1, mc)}$	$1,6000 \cdot 10^{-1}$	$1,1510 \cdot 10^0$	$8,9530 \cdot 10^0$	$7,0271 \cdot 10^{+1}$
$S^{(1, mc)}$	$5,0246 \cdot 10^{-7}$	$1,3353 \cdot 10^{-6}$	$3,4816 \cdot 10^{-6}$	$3,4441 \cdot 10^{-6}$
$n^{(2)}$	100	50	50	30
$\delta^{(2)}$	$8,6356 \cdot 10^{-3}$	$1,4709 \cdot 10^{-2}$	$1,9316 \cdot 10^{-2}$	$3,0342 \cdot 10^{-2}$
$t^{(2)}$	$2,0000 \cdot 10^{-2}$	$1,0000 \cdot 10^{-2}$	$2,0000 \cdot 10^{-2}$	$3,0000 \cdot 10^{-2}$
$S^{(2)}$	$1,4915 \cdot 10^{-4}$	$1,0818 \cdot 10^{-4}$	$3,7310 \cdot 10^{-4}$	$8,2856 \cdot 10^{-4}$

Таблица П.4. Результаты тестирования алгоритма 2.4 для заданных полиномиальных

функций из работы [145]: $k(y, x) = \frac{2xy - x^2}{7}$; $f(x) \equiv 1$; $\varphi^{(2)}(x) = 1 + \frac{57x}{484} + \frac{123x^2}{242}$
и для $p^{(a)} = 0,87$.

В качестве недостатка многоуровневого алгоритма П.2 стоит отметить то, что в первом пункте этого алгоритма вероятность обрыва траектории $p^{(a)}$ на переходе прикладной цепи Маркова задается не произвольно, а из условия (П.7), т. е. предварительно надо вычислять норму $\|k(\dots)\|_{C(X \times X)}$ ядра интегрального уравнения. При тестировании, вопреки наложенным ограничениям, были исследованы также ядра $k(\mathbf{y}, \mathbf{x})$, не удовлетворяющие неравенству (П.7), и это не привело к искажению результатов (см., в частности, таблицу П.6).

По аналогии с предыдущим подразделом П.2, многоуровневый алгоритм П.2 сравнивался с «одноуровневым» локальным алгоритмом метода зависимых испытаний (алгоритмом 1.1) с базисом мульти-линейного восполнения (1.1.14) на соответствующей сетке $\Gamma_l^{(c)}$ из (П.6).

J	512	2 048	8 192	32 768
$n^{(1)}$	50	98	198	395
$\delta^{(1, det)}$	$1,6629 \cdot 10^{-1}$	$1,2166 \cdot 10^{-1}$	$1,0778 \cdot 10^{-1}$	$1,2063 \cdot 10^{-1}$
$t^{(1, det)}$	$1,0000 \cdot 10^{-1}$	$4,9100 \cdot 10^{-1}$	$3,1750 \cdot 10^0$	$2,2222 \cdot 10^{+1}$
$S^{(1, det)}$	$1,3826 \cdot 10^{-1}$	$7,1216 \cdot 10^{-1}$	$7,3033 \cdot 10^0$	$1,2772 \cdot 10^{+2}$
$\delta^{(1, mc)}$	$1,5599 \cdot 10^{-1}$	$1,6369 \cdot 10^{-1}$	$1,5898 \cdot 10^{-1}$	$1,6127 \cdot 10^{-1}$
$t^{(1, mc)}$	$5,1100 \cdot 10^{-1}$	$3,8350 \cdot 10^0$	$2,9662 \cdot 10^{+1}$	$2,3357 \cdot 10^{+2}$
$S^{(1, mc)}$	$6,2174 \cdot 10^{-1}$	$1,0071 \cdot 10^{+1}$	$1,4843 \cdot 10^{+2}$	$2,3994 \cdot 10^{+3}$
$n^{(2)}$	100	250	300	230
$\delta^{(2)}$	$1,8695 \cdot 10^{-2}$	$2,2549 \cdot 10^{-2}$	$3,3067 \cdot 10^{-2}$	$2,3088 \cdot 10^{-2}$
$t^{(2)}$	$1,0000 \cdot 10^{-2}$	$1,0000 \cdot 10^{-2}$	$1,0000 \cdot 10^{-2}$	$1,0000 \cdot 10^{-2}$
$S^{(2)}$	$3,4951 \cdot 10^{-4}$	$1,0169 \cdot 10^{-3}$	$3,2802 \cdot 10^{-3}$	$1,2260 \cdot 10^{-3}$

Таблица П.5. Результаты тестирования алгоритма 2.4 для заданных гармонических функций

$$k(y, x) = 2 \sin x \cos y; f(x) = \frac{(\cos 2+1) \sin x}{2}; \varphi^{(2)}(x) = \sin x \text{ и для } p^{(s)} = 0,92.$$

В качестве критерия сравнения была выбрана величина вычислительной трудоемкости $S^{(i)}$ из (П.10). В свою очередь, (i) принимает значения $(i) = (1, det), (1, mc)$ и $(i) = (2)$, где $(1, det)$ и $(1, mc)$ соответствуют версиям многоуровневого алгоритма, в которых приближения $V_0(x)$ вычисляются детерминированным методом и методом Монте-Карло, соответственно, а $(i) = (2)$ соответствует алгоритму 1.1. В таблицах П.4–П.8 имеется также обозначение $n^{(1)} = n^{(1, det)} = n^{(1, mc)}$.

При тестировании использовались различные тестовые функции $k(y, x), f(x), \varphi^{(2)}(x)$, удовлетворяющие уравнению (П.2): полиномиальные, гармонические, экспоненциальные (см. таблицы П.4–П.6). Применялись также функции тестовой системы (см. [40, 44–46]) (см. таблицы П.7, П.8); при этом решение, ядро и свободный член уравнения (П.2) имели вид

$$k(y, x) = \frac{xy}{2}; f(x) = A \sum_{k=1}^K \left(\frac{-2 \ln \alpha_{k,1}}{K} \right)^{1/2} \left[\cos(\lambda_k x + 2\pi\alpha_{k,2}) - \frac{x}{2\lambda_k} \left(\sin(\lambda_k + 2\pi\alpha_{k,2}) + \frac{\cos(\lambda_k + 2\pi\alpha_{k,2})}{\lambda_k} - \frac{\cos(2\pi\alpha_{k,2})}{\lambda_k} \right) \right]; \quad (\text{П. 11})$$

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

$p^{(a)}$	0,95	0,80	0,40	0,10
$\delta^{(1, det)}$	$8,1425 \cdot 10^{-2}$	$7,9699 \cdot 10^{-2}$	$6,5800 \cdot 10^{-2}$	$8,0131 \cdot 10^{-2}$
$t^{(1, det)}$	$1,1000 \cdot 10^{-1}$	$6,0000 \cdot 10^{-2}$	$4,0000 \cdot 10^{-2}$	$5,0000 \cdot 10^{-2}$
$S^{(1, det)}$	$3,6466 \cdot 10^{-2}$	$1,9056 \cdot 10^{-2}$	$8,6593 \cdot 10^{-3}$	$1,6052 \cdot 10^{-2}$

Таблица П.6. Результаты тестирования алгоритма 2.4 для заданных экспоненциальных функций

$$k(y, x) = \frac{-x(e^{xy}-1)}{4}; f(x) = \frac{e^x - x + 3}{4}; \varphi^{(2)}(x) \equiv 1: \text{исследование зависимости от } p^{(a)}$$

(использованы, в том числе, значения $p^{(a)}$, нарушающие условие (П.7)).

Для стохастических тестовых функций (П.11) было проведено также исследование зависимости погрешностей от наращивания сложности функции и варьирования ширины спектра – см. таблицу П.8.

Главный вывод из проведенных экспериментов состоит в том, что **одноуровневый метод** (алгоритмом 1.1 с базисом мульти-линейного восполнения (1.1.14)) **заметно превосходит многоуровневый алгоритм** П.2 по выбранному критерию (П.10) (исключение составляют расчеты для полиномиальных тестовых функций – см. таблицу П.4).

Таким образом, указанные в [91] и в утверждении П.2 параметры алгоритма П.2 аппроксимации решения интегрального уравнения (П.2) на деле не являются оптимальными. Причиной этого является невыполнение предположений простой стоимостной модели. Как и в подразделе П.2, здесь можно говорить о целесообразности введения весов, учитывающих реальные вычислительные затраты, и о конструировании алгоритма П.2 уже с учетом этих весов. Можно предположить, что при этом значительно улучшатся численные результаты. Однако доказательство оптимальности модифицированного таким образом алгоритма П.2 (то есть аналога утверждения П.2) может оказаться существенно более сложным.

J	512	2 048	8 192
$n^{(1)}$	50	98	198
$\delta^{(1, det)}$	$4,9357 \cdot 10^{-4}$	$1,2166 \cdot 10^{-4}$	$4,8768 \cdot 10^{-4}$
$t^{(1, det)}$	$1,1920 \cdot 10^0$	$4,9100 \cdot 10^0$	$1,8366 \cdot 10^{+1}$
$S^{(1, det)}$	$1,4519 \cdot 10^{-5}$	$7,1216 \cdot 10^{-4}$	$8,6487 \cdot 10^{-4}$
$\delta^{(1, mc)}$	$4,9195 \cdot 10^{-4}$	$1,6369 \cdot 10^{-4}$	$5,0109 \cdot 10^{-4}$
$t^{(1, mc)}$	$1,2317 \cdot 10^{+1}$	$3,8350 \cdot 10^{+1}$	$7,1312 \cdot 10^{+2}$
$S^{(1, mc)}$	$1,4904 \cdot 10^{-4}$	$1,0071 \cdot 10^{-3}$	$3,5454 \cdot 10^{-2}$
$n^{(2)}$	100	100	100
$\delta^{(2)}$	$4,9921 \cdot 10^{-4}$	$7,0290 \cdot 10^{-4}$	$4,9511 \cdot 10^{-4}$
$t^{(2)}$	$9,0000 \cdot 10^{-2}$	$8,0000 \cdot 10^{-2}$	$8,0000 \cdot 10^{-2}$
$S^{(2)}$	$2,2429 \cdot 10^{-6}$	$3,9526 \cdot 10^{-6}$	$1,9611 \cdot 10^{-6}$

Таблица П.7. Результаты тестирования алгоритма 2.4 для функций (П.11) при $A = 0,1$; $K = 500$ и для $p^{(a)} = 0,60$.

A	0,1	0,1	0,5	0,5	0,5
K	100	1 000	100	500	1 000
$\delta^{(1, det)}$	$1,90 \cdot 10^{-3}$	$6,81 \cdot 10^{-4}$	$9,86 \cdot 10^{-3}$	$2,49 \cdot 10^{-3}$	$3,42 \cdot 10^{-3}$
$t^{(1, det)}$	$2,61 \cdot 10^{-1}$	$2,35 \cdot 10^0$	$2,60 \cdot 10^{-1}$	$1,18 \cdot 10^0$	$2,35 \cdot 10^0$
$S^{(1, det)}$	$4,72 \cdot 10^{-5}$	$5,46 \cdot 10^{-5}$	$1,27 \cdot 10^{-3}$	$3,66 \cdot 10^{-4}$	$1,37 \cdot 10^{-3}$
$\delta^{(1, mc)}$	$1,92 \cdot 10^{-3}$	$6,77 \cdot 10^{-4}$	$9,63 \cdot 10^{-3}$	$2,50 \cdot 10^{-3}$	$3,36 \cdot 10^{-3}$
$t^{(1, mc)}$	$2,55 \cdot 10^0$	$2,46 \cdot 10^{+1}$	$2,54 \cdot 10^0$	$1,23 \cdot 10^{+1}$	$2,46 \cdot 10^{+1}$
$S^{(1, mc)}$	$4,71 \cdot 10^{-4}$	$5,63 \cdot 10^{-4}$	$1,18 \cdot 10^{-2}$	$3,86 \cdot 10^{-3}$	$1,39 \cdot 10^{-2}$
$n^{(2)}$	80	100	100	100	150
$\delta^{(2)}$	$1,44 \cdot 10^{-3}$	$4,47 \cdot 10^{-4}$	$8,88 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^{-3}$	$2,93 \cdot 10^{-3}$
$t^{(2)}$	$1,00 \cdot 10^{-2}$	$1,71 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-2}$	$1,80 \cdot 10^{-1}$	$4,30 \cdot 10^{-1}$
$S^{(2)}$	$1,65 \cdot 10^{-6}$	$3,41 \cdot 10^{-6}$	$1,58 \cdot 10^{-4}$	$1,35 \cdot 10^{-4}$	$5,55 \cdot 10^{-4}$

Таблица П.8. Результаты тестирования алгоритма 2.4 для функций (П.11) и для $J = 512$;

$n^{(1)} = 50$; $p^{(a)} = 0,60$: исследование зависимости от параметров A и K .

Как и выше (в начале подраздела П.1), отметим, что исследования данного раздела носят методический характер, и, с точки зрения замечаний 1.1, 1.9–1.13, 1.16, перспективы применения представленных здесь функциональных алгоритмов П.1,

П.2 для приближения интеграла, зависящего от параметра (П.1), и решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода (П.2) в практически значимых вычислениях кажутся неясными.

Отметим, что в целом теоретические построения в вычислительной математике, основанные на рассмотрении целых классов алгоритмов, функций и т. п. (такие, например, как теория сложности вычислительных алгоритмов [141–144] или теория кубатурных формул [37, 151, 152]), носят методический характер: здесь возникают содержательные математические конструкции и утверждения, но нет очевидных способов использования построенного научного аппарата в реальных вычислениях на ЭВМ. И даже если и возникают какие-то применимые в расчетах конструкции, оптимальные в рамках рассматриваемой общей теории (такие, например, как алгоритмы П.1 и П.2, оптимальные в рамках теории сложности, основанной на простейшей стоимостной модели), то они оказываются несостоятельными по естественному, корректному критерию оптимальности, требующему достижения заданного уровня погрешности вычислений за меньшее компьютерное время.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method // Journal of American Statistical Association. – 1949. – Vol. 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, Inc., 1964.
4. Freiberger W., Grenander U. A Short Course in Computational Probability and Statistics. – Springer, 1971.
5. Спанье Дж., Гелбард З. Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов. – М.: Атомиздат, 1972.
6. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973.
7. Михайлов Г. А. Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. – Новосибирск: Наука, 1974.
8. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1974.
9. Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А., Каргин Б. А., Дарбинян Р. А., Елепов Б. С. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. – Новосибирск: Наука, 1976.
10. Франк-Каменецкий А.Д. Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. – М.: Атомиздат, 1978.
11. Елепов Б. С., Кронберг А. А., Михайлов Г. А., Сабельфельд К. К. Решение краевых задач методом Монте-Карло. – Новосибирск: Наука, 1980.
12. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.
13. Kalos M. H., Whitlock P. A. Monte Carlo Methods. – New York: John Wiley and Sons, 1986.

14. Михайлов Г. А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. – М.: Наука, 1987.
15. Сабельфельд К. К. Методы Монте-Карло в краевых задачах. – Новосибирск: Наука, 1989.
16. Mikhailov G. A. Minimization of computational costs of non-analogue Monte Carlo methods // Series of Soviet and East European Mathematics. – Vol. 5. – Singapore: World Scientific, 1991.
17. Mikhailov G. A. New Monte Carlo Methods with Estimating Derivatives. –Utrecht: VSP, 1995.
18. Ogorodnikov V. A., Prigarin S. M. Numerical Modelling of Random Processes and Fields: Algorithms and Applications. – Utrecht: VSP, 1996.
19. Михайлов Г. А. Весовые методы Монте-Карло. – Новосибирск: изд-во СО РАН, 2000.
20. Михайлов Г. А. Весовые алгоритмы статистического моделирования. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2003.
21. Пригарин С. М. Методы численного моделирования случайных процессов и полей. – Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2005.
22. Михайлов Г. А., Войтишек А. В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. – М.: Изд. центр «Академия», 2006.
23. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло в вычислительной математике. Вводный курс. – СПб.: Невский диалект; М.: БИНОМ, 2009.
24. Михайлов Г. А., Медведев И. Н. Использование сопряженных уравнений в методе Монте-Карло. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2009.
25. Михайлов Г. А., Войтишек А. В. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. – М.: Изд-во «Юрайт» 2018.
26. Войтишек А. В. Лекции по численным методам Монте-Карло. – Новосибирск: НГУ, 2018.
27. Шкарупа Е. В. Сходимость и оптимизация численных дискретно-стохастических процедур: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2000.

28. Войтишек А. В. Дискретно-стохастические численные методы: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2001.
29. Войтишек А. В. Основы метода Монте-Карло в алгоритмах и задачах. Часть VI. Вычисление значений линейных функционалов от решения интегрального уравнения второго рода. Дискретно-стохастические методы решения интегрального уравнения второго рода. – Новосибирск: НГУ, 2004.
30. Войтишек А. В. Функциональные оценки метода Монте-Карло. – Новосибирск: НГУ, 2007.
31. Михайлов Г. А., Трачева Н. В., Ухинов С. А. Рандомизированный проекционный метод для оценки угловых распределений поляризованного излучения на основе численного статистического моделирования // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2016. – Т. 56, № 9. – С. 1560–1570.
32. Rogazinsky S. V. Statistical modelling algorithm for solving the nonlinear Boltzmann equation based on the projection method // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2017. – Vol. 32, № 3. – P. 197–202.
33. Tracheva N. V., Ukhinov S. A. Numerical statistical study of the angular distribution of the polarized radiation scattered by medium // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2017. – V. 32, № 2. – P. 135–146.
34. Войтишек А. В. Основы метода Монте-Карло в алгоритмах и задачах. Часть V. Вычисление многократных интегралов. Аппроксимация интегралов, зависящих от параметра. – Новосибирск: НГУ, 1999.
35. 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.
36. Ченцов Н. Н. Статистические решающие правила и оптимальные выводы. – М.: Наука, 1972.
37. Бахвалов Н. С. Численные методы. – М.: Наука, 1975.

38. 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.
39. 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.
40. 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.
41. 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.
42. **Булгакова Т. Е.** Исследование многоуровневого метода зависимых испытаний // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2001. – С. 177–185.
43. **Булгакова Т. Е.** Исследование многоуровневого метода решения интегрального уравнения второго рода // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2002. – С. 25–32.
44. 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.
45. **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.

46. 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.
47. **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.
48. **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.
49. **Булгакова Т. Е.** Оптимизация функционального двустороннего геометрического метода Монте-Карло // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2006. – С. 28–35.
50. 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.
51. 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.
52. **Булгакова Т. Е.**, Войтишек А. В. Условная оптимизация рандомизированного итерационного метода // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2009. – Т. 49, № 7. – С. 1148–1157.

53. **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.
54. **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.
55. **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 математическое моделирование» (Саратов, 26–30 июня 2019 года). – Часть 2. – Томск: Изд-во НТЛ, 2019. – С. 322–328.
56. **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 математическое моделирование» (Саратов, 26–30 июня 2019 года). – Часть 2. – Томск: Изд-во НТЛ, 2019. С. 329–334.
57. 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.
58. **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.

59. **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.
60. 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.
61. **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.
62. 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.
63. **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>
64. **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.
65. **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.
66. 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.
 67. **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.
 68. Макаров Р. Н. Решение эллиптических краевых задач методом Монте-Карло: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2000.
 69. Меньщиков Б. В. Решение краевых задач для параболических уравнений методом Монте-Карло на основе преобразования Фурье: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2001.
 70. Марченко М. А. Оптимизация и параллельная реализация статистического моделирования диффузионных процессов: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2002.
 71. Бурмистров А. В. Оценка производных от решения стационарного диффузионного уравнения методом Монте-Карло: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2003.
 72. Ухинова О. С. Вероятностные модели гидрометеорологических процессов и полей: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2004.
 73. Лукинов В. Л. Скалярные алгоритмы метода Монте-Карло для решения метагармонических уравнений: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2005.

74. Медведев И. Н. Исследование и уменьшение дисперсии весовых оценок в методе Монте-Карло: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2005.
75. Милосердов В. В. Дискретно-стохастические численные алгоритмы со сплайн-восполнениями: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2006.
76. Берковский Н. А. Модернизация полустатистического метода численного решения интегральных уравнений: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / С-ПГУ. – Санкт-Петербург, 2006.
77. Коротченко М. А. Весовые параметрические алгоритмы статистического моделирования для решения нелинейных кинетических уравнений: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2008.
78. Трачева Н. В. Методы Монте-Карло для оценки параметров асимптотического решения уравнения переноса излучения с учетом поляризации: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2008.
79. Каблукова Е. Г. Адаптивные дискретно-стохастические алгоритмы численного интегрирования: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2008.
80. Рогазинский С. В. Алгоритмы статистического моделирования для решения нелинейных кинетических уравнений больцмановского типа: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2010.
81. Ухинов С. А. Методы Монте-Карло для решения задач поляризованного излучения: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2011.
82. Роженко С. А. Использование свойств симметрии и подобия в алгоритмах метода Монте-Карло: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2013.

83. Блощицына О. В. Весовые методы мажорантной частоты для статистического моделирования решения пространственно-однородных нелинейных кинетических уравнений бoльцмановского типа: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2013.
84. Каргаполова Н. А. Численное моделирование и исследования нестационарных случайных процессов с периодическими характеристиками: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2013.
85. Корда (Чимаева) А. С. Весовые алгоритмы статистического моделирования переноса поляризованного излучения и решения задачи восстановления индикатрисы рассеяния: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2013.
86. Моцартова Н. С. Рандомизированные методы решения задач математической физики: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2014.
87. Амбос А. Ю. Разработка вычислительных моделей мозаичных сред с приложением в теории переноса излучения: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2016.
88. Сересева О. В. Разработка алгоритмов численного статистического моделирования специальных негауссовских процессов и полей: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2016.
89. Марченко М. А. Численное статистическое моделирование кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц с использованием распределенных вычислений: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук / РАН. Сиб. отд-ние, ИВМиМГ. – Новосибирск, 2017.
90. Шкарупа Е. В. Оценка погрешности и оптимизация метода полигона частот для глобального решения интегрального уравнения второго рода // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1998. – Т. 38, № 4. – С. 612–627.
91. Heinrich S. Monte Carlo complexity of global solution of integral equations // Journal of Complexity. – 1998. – V. 14. № 2. – P. 151–175.

92. Heinrich S., Sindambiwe E. Monte Carlo complexity of parametric integration // *Journal of Complexity*. – 1999. – V. 15. – P. 317–341.
93. Shkarupa E. V., Voytishchek 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.
94. Войтишек А. В., Головкин Н. Г., Шкарупа Е. В. Оценка погрешности многомерного аналога метода полигона частот // *Сибирский журнал вычислительной математики*. – 2002. – Т. 5, № 1. – С. 11–24.
95. Voytishchek A. V., Kablukova E. G. Using the approximation functional bases in Monte Carlo methods // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. – 2003. – V. 18, № 6. – P. 521–542.
96. Voytishchek A. V., Shvets V. V. Complete optimization of a discrete stochastic numerical procedure for globally estimating the solution of an integral equation of the second kind // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. – 2006. – V. 21, № 3. – P. 251–267.
97. Михайлов Г. А., Медведев И. Н. Среднеквадратическая оптимизация глобальных алгоритмов метода Монте-Карло // *Доклады Российской Академии наук*. – 2010. – Т. 433, № 1. – С. 16–20.
98. Voytishchek A. V., Shipilov N. M. On randomized algorithms for numerical solution of applied Fredholm integral equations of the second kind // *AIP Conference Proceedings* 1907, 030015 (2017).
99. Войтишек А. В. Классификация и возможности практического применения рандомизированных функциональных численных алгоритмов решения интегральных уравнений Фредгольма второго рода // *Математический анализ. Итоги науки и техники. Серия: Современная математика и ее приложения. Тематические обзоры*. – 2018. – Т. 155. – С. 3–19.

100. Войтишек А. В. Разработка и оптимизация рандомизированных функциональных численных методов решения практически значимых интегральных уравнений Фредгольма второго рода // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2018. – Т. 21. № 2 (74). – С. 32–45.
101. Михайлов Г. А. Улучшение многомерных рандомизированных алгоритмов метода Монте-Карло с «расщеплением» // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2019. – Т. 59, № 5. – С. 822–828.
102. Михайлов Г. А. Рандомизированные алгоритмы метода Монте-Карло для задач со случайными параметрами (метод «двойной рандомизации») // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2019. – Т. 22, № 2. – С. 187–200.
103. Епанечников В. А. Непараметрическая оценка многомерной плотности вероятности // Теория вероятностей и ее применения. – 1969. – Т. 14. Вып. 1. – С. 156–161.
104. Bulavski Yu. V. Randomized method of successive approximations for linear systems of algebraic equations // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 1995. – V. 10, № 6. – P. 481–493.
105. Bulavsky Yu. V. and Temnikov S. A. Randomized method of successive approximations // Proceedings of the Petersburg Workshop «Mathematical Methods in Stochastic Simulation and Experimental Design». – St.Petersburg University Publishing House. 1996. – P. 64–68.
106. Темников С. А. Решение задачи светорассеяния ансамблем фрактальных кластеров методом Монте-Карло // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ВЦ СО РАН, 1995. – С. 160–172.
107. Шкарупа Е. В. Оптимизация метода полигона частот с оценками по пробегу для глобального решения уравнения переноса // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2003. – Т. 43, № 3. – С. 440–452.
108. Sabelfeld K. K., Shkarupa E. V. Functional Random Walk on Spheres algorithm for biharmonic equation: optimization and error estimation // Monte Carlo Methods and Applications. – 2003. – V. 9, № 1. – P. 51–65.

109. Шкарупа Е. В. Оценка погрешности и оптимизация функциональных алгоритмов блуждания по решетке решения задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца // Сибирский математический журнал. – 2003. – Т. 44, № 5. – С. 1163–1182.
110. Шкарупа Е. В. Функциональный алгоритм блуждания по решетке для бигармонического уравнения. Оценка погрешности и оптимизация // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2005. – Т. 8, № 2. – С. 163–176.
111. Plotnikov M. Yu., Shkarupa E. V. The discrete-stochastic approaches to solving the linearized Boltzmann equation // Monte Carlo Methods and Applications. – 2005. – V. 11, № 4. – P. 447–462.
112. Makarov R. N., Shkarupa E. V. Stochastic algorithms with Hermit cubic spline interpolation for global estimation of solutions of boundary value problems // SIAM Journal of Scientific Computing. – 2008. – V. 30, № 1. – P. 169–188.
113. Плотников М. Ю., Шкарупа Е. В. Оценка статистической погрешности метода прямого статистического моделирования // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2010. – Т. 50, № 2. – С. 1–10.
114. Plotnikov M. Yu., Shkarupa E. V. Some approaches to error analysis and optimization of the DSMC method // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2010. – V. 25, № 2. – P. 147–167.
115. Лотова Г. З., Михайлов Г. А. Исследование и улучшение смещенных оценок метода Монте-Карло // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2015. – Т. 55, № 1. – С. 10–21.
116. Mikhailov G. A., Prigarin S. M., Rozhenko S. A. Weighted Monte Carlo estimators for angular distributions of the solar radiation reflected from the cloud layer // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2016. – V. 31, № 4. P. 197–205.
117. Марчук Г. И., Агошков В. И. Введение в проекционно-сеточные методы. – М.: Наука, 1981.

118. Войтишек А. В. Дискретно-стохастические модификации стандартного метода Монте-Карло. – Новосибирск: НГУ, 2009.
119. Рамазанов М. Д., Рахматуллин Д. Я., Валеева Л. З., Банникова Е. Л. Решение интегральных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах // Журнал Сибирского федерального университета. Техника и технологии. – 2009. – Т. 2, № 1. – С. 69–87.
120. Войтишек А. В. Рандомизированные итерационные численные модели и алгоритмы. – LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2017.
121. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1980.
122. Коновалов А. Н. Введение в вычислительные методы линейной алгебры. – Новосибирск: Наука, 1993.
123. Иванов В. М., Кульчицкий О. Ю. Метод численного решения интегральных уравнений на случайной сетке // Дифференциальные уравнения. – 1990. Т. 26, № 2. – С. 333–341.
124. Шипилов Н. М. Сравнительный анализ рандомизированных проекционных, сеточных и проекционно-сеточных функциональных алгоритмов численного решения уравнений Фредгольма второго рода: Магистерская диссертация / НГУ. – Новосибирск, 2018.
125. Mikhailov G. A., Voytishek A. V. Numerical constructing of special non-Gaussian fields in solving problems of the radiation transfer theory for stochastically inhomogeneous media // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modeling. – 1995. – V. 10, № 3. – P. 213–232.
126. Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. – М.: Наука, 1989.
127. Владимиров В. С. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1981.
128. Новиков Н. С. Численные алгоритмы решения уравнения И. М. Гельфанда – Б. М. Левитана – М. Г. Крейна: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / НГУ. – Новосибирск, 2018.

129. Кабанихин С. И. Проекционно-разностные методы определения коэффициентов гиперболических уравнений. – Новосибирск: Наука, 1988.
130. Plotnikov M. Yu., Shkarupa E. V. Error estimation and optimization in \mathbb{C} -space of Monte Carlo iterative solution of nonlinear integral equations // Monte Carlo Methods and Applications. – 1998. – V. 4, № 1. – P. 53–70.
131. Бахвалов Н. С., Корнеев А. А., Чижонков Е. В. Численные методы. Решение задач и упражнения. – М.: Лаборатория знаний, 2016.
132. Lemeshko B. Yu., Lemeshko S. B., Semenova M. A. Features of testing statistical hypotheses under big data analysis // 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. 122–137.
133. Лемешко Б. Ю., Лемешко С. Б., Блинов П. Ю. Критерии проверки статистических гипотез при анализе больших выборок: проблемы и их решение // Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 1–5 июля 2019 года). – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2019. – С. 277–283.
134. Боровков А. А. Теория вероятностей. – М.: Наука, 1986.
135. Фихтенгольц Г. М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 2. – М.: Наука, 1969.
136. Литбеттер М., Ротсен Х., Лингрен Г. Экстремумы случайных последовательностей и процессов. – М.: Мир, 1989.
137. Войтишек А. В. Дополнительные сведения о численном моделировании случайных элементов. – Новосибирск: НГУ, 2007.
138. Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ. – М.: Наука, 1984.
139. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. – М.: Наука, 1984.
140. Rouzankin P. S., Voytishek A. V. On the cost of algorithms for random selection // Monte Carlo Methods and Applications. – 1999. – V. 5, № 1. – P. 39–54.

141. Traub J. F., Wasilkowski G. W. and Wozniakowski H. Information-based Complexity. – New York: Academic Press, 1988.
142. Novak E. Deterministic and Stochastic Error Bounds in Numerical Analysis // Lecture Notes in Mathematics. – V. 1349. – Springer Verlag, 1988.
143. Heinrich S. Random approximation in numerical analysis // Functional Analysis. – Marcel Dekker, 1994. – P. 123–171.
144. Heinrich S. Complexity of Monte Carlo algorithms // The Mathematics in Numerical Analysis (Lectures in Applied Mathematics). – Utah: Park City, 1996. – P. 1621–1633.
145. Sindambiwe E. Optimal Algorithms for Parametric Integration. – Doctorial thesis. Aachen: Shaker, 1999.
146. Ченцов Н. Н., Корякин А. И. Оценивание функций и их моментов по наблюдениям в случайных узлах. – 1985. – 24 с. – (Препринт / ИПМ АН СССР; 33).
147. Ченцов Н. Н., Корякин А. И. Рандомизированная оценка функций и их моментов с почти оптимальной контролируемой погрешностью на классах \mathcal{W} . – 1987. – 22 с. – (Препринт / ИПМ АН СССР; 81).
148. Ченцов Н. Н., Корякин А. И. Об оценивании заданной в случайных узлах функции методом наименьших квадратов // Теория вероятностей и ее применения. – 1990. – Т. 35, № 4. – С. 771–774.
149. Войтишек А. В. Дискретно-стохастические процедуры оценки интеграла, зависящего от параметра // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1996. – Т. 36, № 8. – С. 23–38.
150. Емельянов К. В., Ильин А. М. О числе арифметических действий, необходимом для приближенного решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода. – Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1967. – Т. 7. – С. 905–910.
151. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 1. – М.: Физматгиз, 1962.
152. Соболев С. Л. Введение в теорию кубатурных формул. – М.: Наука, 1974.

153. Войтишек А. В., Ухинов С. А. Использование существенной выборки в методе Монте-Карло // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2001. – Т. 4, № 2. – С. 111–122.
154. Каблукова Е. Г. Двусторонний геометрический метод Монте-Карло // Труды конференции молодых ученых. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2002. – С. 76–81.