

СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ВАРИАНТОВ РАНДОМИЗАЦИИ МЕТОДА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ*

А. В. ВОЙТИШЕК, Е. Г. КАВЛУКОВА

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН, Новосибирск, Россия*
e-mail: vav@osmf.sscs.ru

О. С. ГЕРАСИМОВА

Новосибирский государственный университет, Россия
e-mail: gos@gorodok.net

Numerical algorithms for approximation of a solution of an integral equation of the second kind are investigated. Randomization of finite and infinite segments of Neumann series is used. Possibilities of exploitation of the homogeneous Markov chain segments of finite and random length or effective discrete-stochastic methods of numerical integration are examined. A test example is provided for which the displaced deterministic-stochastic estimates of the solution are advantageous.

1. Метод последовательных приближений

Рассмотрим функцию $f(x)$, $x = (x^{(1)}, \dots, x^{(l)})$, $x \in X \subseteq R^l$, из нормированного функционального пространства B с нормой $\|f\|_B$ и расстоянием $d_B(f_1, f_2) = \|f_1 - f_2\|_B$, а также оператор

$$Kf(x) = \int_X k(x', x)f(x') dx', \quad dx' = dx'^{(1)} \dots dx'^{(l)}, \quad (1)$$

действующий из B в B : $K : B \rightarrow B$. Выражение (1) определяет интегральный оператор Фредгольма с ядром k . Рассмотрим также интегральное уравнение Фредгольма второго рода для неизвестной функции φ :

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

функция $f \in B$ и ядро k заданы. В качестве пространства B далее будем рассматривать $B = C(X)$. Для решения уравнения (2) рассмотрим метод последовательных приближе-

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 06-01-00046) и Президентской программы "Ведущие научные школы" (грант № НШ-4774.2006.1).

© Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 2006.

ний:

$$\gamma_{m+1} = f + K\gamma_m, \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

с начальным элементом $\gamma_0 = f$. Полагаем $\|K\|_B \leq q < 1$. В этом случае решение уравнения (2) существует и единственно и справедливо неравенство [2]

$$\|\varphi - \gamma_m\|_B \leq \frac{q^m}{1-q} \|\gamma_1 - \gamma_0\|_B. \quad (3)$$

Решение уравнения (2) представимо в виде ряда Неймана

$$\varphi(x) = f(x) + Kf(x) + K^2f(x) + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} K^i f(x), \quad (4)$$

где

$$K^i f(x) = \int_X \dots \int_X f(y_0) k(y_0, y_1) k(y_1, y_2) \times \dots \times k(y_{i-1}, x) dy_0 \dots dy_{i-1}. \quad (5)$$

В силу равенства (5) и линейности операторов K^i соотношение (4) представляет собой сумму интегралов бесконечно возрастающей кратности, зависящих от параметра x .

2. Рандомизация приближения линейного функционала

Для многих теоретических и прикладных проблем (см., например, [1]) важной является возможность приближенного вычисления линейных функционалов вида

$$I_h = (\varphi, h) = \int_X \varphi(x) h(x) dx. \quad (6)$$

Комбинируя соотношения (4)–(6), имеем

$$I_h = \sum_{i=0}^{\infty} \int_X \dots \int_X f(y_0) k(y_0, y_1) k(y_1, y_2) \times \dots \times k(y_{i-1}, y_i) h(y_i) dy_0 \dots dy_{i-1} dy_i. \quad (7)$$

Таким образом, функционал (6) представляет собой сумму интегралов бесконечно возрастающей кратности.

Можно задаться некоторым $s < \infty$ и взять приближение

$$I_h \approx I_h^{(s)} = \sum_{i=0}^s (K^i f, h). \quad (8)$$

Заметим, что

$$|I_h - I_h^{(s)}| \leq \max_{x \in X} |h(x)| \times \|\varphi - \gamma_s\|_{C(X)}, \quad \gamma_s = \sum_{i=0}^s K^i f.$$

В свою очередь, из неравенства (3) следует, что

$$\|\varphi - \gamma_s\|_{C(X)} \leq \frac{q^s}{1-q} \|Kf - f\|_{C(X)}.$$

Тогда величину s следует выбирать так, чтобы было выполнено неравенство

$$\max_{x \in X} |h(x)| \times \frac{q^s}{1-q} \|Kf - f\|_{C(X)} < \tilde{\varepsilon}_s^{(1)}. \quad (9)$$

Для приближения интегралов из суммы $I_h^{(s)}$, имеющих максимальную кратность $\tilde{l} = l(s+1)$, можно построить серию кубатурных формул $F_{h,n_1}^{(\tilde{l})}$ с числом узлов n_1 , обеспечивающим выполнение неравенства $|I_h^{(s)} - F_{h,n_1}^{(\tilde{l})}| < \tilde{\varepsilon}_s^{(2)}$. Положительные константы $\tilde{\varepsilon}_s^{(1)}$ и $\tilde{\varepsilon}_s^{(2)}$ в сумме должны составлять величину допустимой погрешности $\tilde{\varepsilon}_s$.

Достаточно содержательной (и непростой) является задача оптимального согласованного выбора параметров s и n_1 . Трудности, в частности, связаны с оценкой величин q и $\|Kf - f\|_{C(X)}$ в левой части неравенства (9). Кроме того, требуется учитывать суммарную трудоемкость $S(s, n_1)$ получаемого алгоритма. Здесь применим подход, используемый при оптимизации дискретно-стохастических алгоритмов глобальной аппроксимации функций [3]: из уравнения $\tilde{\varepsilon}_s^{(1)} + \tilde{\varepsilon}_s^{(2)}(n_1) = \tilde{\varepsilon}_s$ выражаем n_1 через s и подставляем полученное выражение $n_1 = g(s)$ в формулу для S . Далее исследуем функцию одного переменного $S(s, g(s))$ на минимум, находя $s = s_{\min}$. При проведении практических расчетов полагаем $s \approx s_{\min}$, $n_1 \approx g(s_{\min})$. Пример соответствующего рассуждения для конкретной тестовой задачи из разд. 3 приведен в разд. 5.

Для малых $\tilde{\varepsilon}_s$ и $\tilde{\varepsilon}_s^{(1)}$ величина \tilde{l} может быть достаточно большой, поэтому в качестве $F_{h,n_1}^{(\tilde{l})}$ следует выбирать простейшую стохастическую кубатурную формулу (т.е. метод Монте-Карло). При этом возникает проблема разумного выбора плотности соответствующего \tilde{l} -мерного случайного вектора. Согласно методу выборки по важности (см., например, [1, 3]), наименьшая дисперсия получается для плотности

$$p(\mathbf{y}) = C \left| \sum_{i=0}^s \left(f(y_0)h(y_0) + \sum_{j=0}^{i-1} f(y_0)k(y_0, y_1)k(y_1, y_2) \dots k(y_j, y_{j+1})h(y_{j+1}) \right) \right|, \quad (10)$$

где $\mathbf{y} = (y_0, y_1, \dots, y_s)$ и C — соответствующая нормирующая константа. Выражение (10) является, как правило, достаточно громоздким, не дающим возможность построить эффективный алгоритм получения выборочных значений \bar{x} случайного вектора $\tilde{x}_1 = (x_1, \dots, x_i)$ согласно плотности $p(\mathbf{y})$.

Отметим, что если требуется вычислить лишь одно слагаемое сумм (7) или (8) ($K^i f, h$), то использование плотности

$$p(y_0, y_1, \dots, y_i) \approx C f(y_0)k(y_0, y_1)k(y_1, y_2) \dots k(y_{i-1}, y_i)h(y_i)$$

может дать эффективный алгоритм метода Монте-Карло (см. разд. 3).

В качестве альтернативы подходу (8) рассмотрим стандартную несмещенную оценку по столкновениям [1, 3]:

$$I_h = \mathbf{E}\xi \approx \frac{\xi_1 + \dots + \xi_n}{n}, \quad \xi = \sum_{i=0}^N Q_i h(x_i). \quad (11)$$

В соотношении (11) x_0, x_1, \dots, x_N — однородная цепь Маркова, обрывающаяся с вероятностью единица в состоянии x_N (номер N — случайный) [3], начальной плотностью $\pi(x)$ и переходной функцией

$$p(x', x) = r(x', x)(1 - p_a(x')).$$

Здесь $r(x', x)$ — плотность перехода, а $p_a(x')$ — вероятность обрыва траектории;

$$Q_0 = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_i = Q_{i-1} \frac{k(x_{i-1}, x_i)}{p(x_{i-1}, x_i)}.$$

3. Сравнение подходов (8) и (11)

Численное сравнение подходов (8) и (11) проводилось на примере решения известного тестового интегрального уравнения второго рода из [1, 3], соответствующего анизотропному рассеянию при переносе излучения.

Рассмотрим следующую модель переноса малых частиц. Частицы двигаются из точки $x = 0$ в положительном направлении оси x случайными пробегами, длины которых распределены с плотностью e^{-x} , $x > 0$. В конце пробега с вероятностью p частица поглощается, а с вероятностью $q = 1 - p$ совершает очередной пробег $x_{m-1} \rightarrow x_m$. Поставим задачу оценки вероятности $P(H)$ вылета частицы за точку $x = H$.

Переходная функция для цепи столкновений определяется выражением $p(x', x) = q \exp(-(x - x'))\chi(x - x')$, где $\chi(w) = 1$ при $w \geq 0$ и $\chi(w) = 0$ при $w < 0$. Плотность начального состояния x_0 равна $\pi(x) = e^{-x}$, $x > 0$. Для функции плотности столкновений $\varphi(x)$ можно записать уравнение

$$\varphi(x) = q \int_0^x e^{-(x-x')} \varphi(x') dx' + e^{-x}, \quad x > 0, \quad (12)$$

точное решение которого равно $\varphi(x) = e^{-px}$.

Рассмотрим локальную оценку (см., например, [1, 3]), учитывая, что в данной ситуации происходит прямое моделирование ($f(x) = \pi(x)$, $k(x', x) = p(x', x)$):

$$P(H) = \varphi(H) = \mathbf{E}\xi^{(H)} + e^{-H} \approx \frac{\xi_1^{(H)} + \dots + \xi_n^{(H)}}{n} + e^{-H}, \quad (13)$$

$$\xi^{(H)} = \sum_{m=0}^N q \exp(-(H - x_m))\chi(H - x_m).$$

В качестве x_N выбирается либо точка поглощения, для которой $x_N < H$, либо первая точка, для которой выполнено неравенство $x_N > H$. Функция $h(x)$, определяющая вычисляемый функционал

$$I_h = (\varphi, h) = P(H) - e^{-H} = \mathbf{E}\xi^{(H)}, \quad (14)$$

равна $h(x) = q \exp(-(H - x))\chi(H - x)$.

Рассмотрим также метод последовательных приближений (8) для подсчета вероятности $P(H)$. Погрешность такого приближения в метрике C можно оценить следующим образом:

$$\varepsilon_s^{(1)} = \|I_h - I_h^{(s)}\|_C = \left\| \left(\sum_{i=s+1}^{\infty} K^i f, h \right) \right\|_C \leq \left\| \sum_{i=s+1}^{\infty} K^i f \right\|_C \|h\|_C.$$

Вычислим

$$K^i f(x) = \int \dots \int q^i e^{-x_0} e^{-(x-x_{i-1})} \times \dots \times e^{-(x_1-x_0)} \chi(x - x_{i-1}) \times \dots \times$$

$$\times \chi(x_1 - x_0) dx_0 \dots dx_{i-1} = \frac{q^i x^i}{i!} e^{-x}.$$

Далее имеем

$$\left\| \sum_{i=s+1}^{\infty} K^i f \right\|_C = \max_{x \in [0, H]} \left| e^{-x} \sum_{i=s+1}^{\infty} \frac{q^i x^i}{i!} \right| \leq \max_{x \in [0, H]} \frac{e^{-x} q^{s+1} e^{q\delta} x^{s+1}}{(s+1)!}, \quad \delta \in [0, x].$$

Здесь использовано то обстоятельство, что выражение $\sum_{i=s+1}^{\infty} \frac{q^i x^i}{i!}$ является остатком разложения Тейлора формулы e^{qx} . Следовательно,

$$\left\| \sum_{i=s+1}^{\infty} K^i f \right\|_C \leq \frac{q^{s+1} H^{s+1}}{(s+1)!}, \quad \|h\|_C = \max_{x \in [0, H]} |q e^{-(H-x)}| = q, \quad \varepsilon_s^{(1)} \leq \frac{q^{s+2} H^{s+1}}{(s+1)!}. \quad (15)$$

Выражения $(K^i f, h)$ представляют собой интегралы увеличивающейся (с ростом i) размерности. Для их приближенного вычисления применим алгоритм выборки по важности из [4]. Необходимое количество интегралов s в сумме (8) можно найти исходя из требуемой погрешности, преобразовав неравенство для $\varepsilon_s^{(1)}$ в равенство и воспользовавшись формулой Стирлинга:

$$\varepsilon_s^{(1)} = \frac{q^{s+2} (eH)^{s+1}}{\sqrt{2\pi(s+1)} (s+1)^{s+1}}.$$

Отметим, что такая оценка числа слагаемых завышенная. Минимальное количество слагаемых можно найти исходя из известного точного решения уравнения (12):

$$\varepsilon_s^{(1)} \leq \left| e^{-pH} - e^{-H} \sum_{i=0}^s \frac{q^i H^i}{i!} \right|. \quad (16)$$

В проведенных численных экспериментах для приближения интегралов выбирались плотности, являющиеся кусочно-постоянными приближениями подынтегральных функций, с числом m промежутков постоянства вдоль одной координаты не больше десяти. В частности, для интегралов малой размерности ($i \leq 6$) выбиралось $m = 10$, для интегралов большей кратности $m < 10$. В табл. 1 приведены затраты на вычисление вероятности $P(H)$ вылета частицы за границу H (в секундах) при использовании локальной оценки (строки LocEst) и метода последовательных приближений (строки Stepapp) для разных

Т а б л и ц а 1. Сравнение трудоемкости метода последовательных приближений и локальной оценки

H	$q = 0.1$	$q = 0.3$	$q = 0.5$
1, LocEst	1.77	6.0	24.0
1, Stepapp	0.215	1.51	19.5
10, LocEst	5.9	5.51	1.52
10, Stepapp	0.11	2.3	29
20, LocEst	618	4886	102
20, Stepapp	0.1	—	—

групп параметров H, q . При вычислении вероятности $P(H)$ вводилась величина допустимой погрешности e_1 , для которой выполнялось требование

$$e_1 \leq 0.01 \cdot P(H) = 0.01 (e^{-pH} + e^{-H}).$$

Для локальной оценки достижение соответствующей величины контролировалось выражением $e_1 \leq \sqrt{\mathbf{D}\xi_H}/\sqrt{n_2}$, где n_2 — число моделируемых траекторий; величина $\mathbf{D}\xi_H$ вычисляется точно [1]. В методе последовательных приближений количество интегралов s находилось из выражения (16). При этом i -й интеграл суммы (8) вычислялся с точностью $\varepsilon = e_1/(2s)$, $i = 1, \dots, s$.

Проведенные расчеты позволяют сделать следующий вывод. В модели переноса частиц с анизотропным рассеянием алгоритм, связанный с использованием локальной оценки для подсчета вероятности $P(H)$, уступает по трудоемкости методу последовательных приближений лишь в случае малой вероятности $P(H)$ выхода за границу H и малых значений вероятности рассеяния $q < 0.5$, т. е. при вычислении небольшого количества интегралов ($s \leq 10$). Для $q \geq 0.5$ трудоемкость локальной оценки меньше. Отметим, что если требуется вычислить лишь одно слагаемое суммы (8) ($K^i f, h$), то использование метода выборки по важности может быть очень эффективно.

4. Использование специального функционала

Следует заметить, что функционал (14) дает не самую убедительную иллюстрацию преимущества метода последовательных приближений (8) из-за отсутствия “длинных” траекторий в оценке (13) (ведь вылет за H обрывает траекторию). Это видно, в частности, из приводимой ниже табл. 2, где использованы следующие обозначения: ε — расчетная погрешность; n_2 и t_2 — число моделируемых траекторий и время реализации для приближения (13) и соответственно n_1, t_1 — для приближения (8); s — номер обрыва траектории.

Более показательные результаты дает выбор функции $h(x)$, распределенной вдоль всей положительной полуоси, например,

$$h(x) = e^{-Ax}, \quad x > 0 \quad (17)$$

(однако при этом теряется “физический смысл” функционала I_h). Для приближения соответствующего функционала (8) использовалась оценка $\xi^{(s)} = \sum_{i=0}^s h(x_i)$, причем отрезок цепи Маркова x_0, x_1, \dots, x_s получался с помощью прямого моделирования.

Из табл. 3 видно, что для функционала (6) с функцией (17) метод последовательных приближений более эффективен, чем стандартный алгоритм с оценкой по столкновениям. По аналогии с рассуждениями при получении соотношения (15) можно рассмотреть

Т а б л и ц а 2. Сравнение приближений (8) и (13) для функционала (14)

H	q	ε	n_2	t_2	n_1	t_1	s
30	0.999	0.0032	55 000	0 : 09	60 000	0 : 10	45
70	0.999	0.0074	20 000	0 : 13	21 000	0 : 14	91
30	0.99	0.006	20 000	0 : 05	25 000	0 : 06	43
70	0.99	0.005	25 000	0 : 12	27 000	0 : 13	87

погрешность $\varepsilon_s^{(1)}$ для функционала I_h с функцией (17). Вычислим

$$\begin{aligned} (K^i f, h) &= \int_0^{+\infty} \dots \int_0^{+\infty} q^i e^{-x_0} e^{-(x_i - x_{i-1})} \times \dots \times e^{-(x_1 - x_0)} \chi(x_i - x_{i-1}) \times \\ &\times \chi(x_1 - x_0) e^{-Ax_i} dx_0 \dots dx_{i-1} dx_i = q^i \int_0^{+\infty} e^{-x_i(A+1)} \left(\int_0^x \frac{x_{i-1}^{i-1}}{(i-1)!} dx_{i-1} \right) dx_i = \\ &= \frac{q^i}{i!} \int_0^{\infty} e^{-x_i(A+1)} x_i^i dx_i = \frac{q^i}{(A+1)^{i+1}}. \end{aligned}$$

Здесь использовано известное свойство гамма-функции

$$\Gamma(\nu) = \int_0^{\infty} w^{\nu-1} e^{-w} dw : \quad \Gamma(i+1) = i!.$$

Используя формулу суммы членов бесконечно убывающей геометрической прогрессии, имеем

$$\varepsilon_s^{(1)} = \|I_h - I_h^{(s)}\|_C = \left\| \left(\sum_{i=s+1}^{\infty} K^i f, h \right) \right\|_C = \left(\frac{q}{A+1} \right)^{s+1} \frac{1}{A+1-q}.$$

Общую погрешность ε_s алгоритма (8) перепишем в виде суммы

$$\varepsilon_s = \varepsilon_s^{(1)} + \varepsilon_s^{(2)} \approx \left(\frac{q}{A+1} \right)^{s+1} \frac{1}{A+1-q} + \frac{d(s)}{\sqrt{n_1}},$$

где $d(s) = \sqrt{\mathbf{D}\xi^{(s)}}$. При проведении численных экспериментов рассмотрены следующие предельные случаи.

1. При $s \rightarrow \infty$ подтверждено, что ε_s ведет себя как погрешность для метода Монте-Карло без обрыва.

Т а б л и ц а 3. Приближения (8) и (13) для функционала (6) с функцией $h(x) = e^{-Ax}$

A	q	ε	n_2	t_2	n_1	t_1	s
0.5	0.999	0.01	50 000	0 : 43	300 000	0 : 03	19
0.1	0.99	0.023	60 000	0 : 05	65 000	0 : 03	60
0.3	0.999	0.014	50 000	0 : 43	1 000 000	0 : 19	21

Т а б л и ц а 4. Близость погрешностей ε_s и $\varepsilon_s^{(1)}$ при $n_1 \gg 1$

s	ε_s	$\varepsilon_s^{(1)}$
3	0.392955	0.392698
6	0.116376	0.116006
10	0.023428	0.022823
12	0.010377	0.010123
16	0.002193	0.001991

2. При $n_1 \rightarrow \infty$ подтверждено, что погрешность ε_s зависит только от s (т. е. $\varepsilon_s = \varepsilon_s^{(1)}$). Соответствующие результаты расчетов для $q = 0.999$, $A = 0.5$, $n_1 = 10^7$ представлены в виде табл. 4.

5. Условная оптимизация алгоритма

Продemonстрируем на рассматриваемом тестовом примере работу сформулированной в разд. 2 процедуры согласованного выбора параметров s и n_1 в алгоритме (8). Заметим, что трудоемкость этого алгоритма пропорциональна величине $\tilde{S} = sn_1$. Задаем уровень погрешности $\tilde{\varepsilon}_s$ и рассматриваем равенство

$$\tilde{\varepsilon}_s = \tilde{\varepsilon}_s^{(1)} + \tilde{\varepsilon}_s^{(2)} = \left(\frac{q}{A+1}\right)^{s+1} \frac{1}{A+1-q} + \frac{d(s)}{\sqrt{n_1}}. \quad (18)$$

Полагаем $d(s) \approx d = \text{const}$, так как при малом значении $\tilde{\varepsilon}_s$ выполнено

$$\mathbf{D}\xi^{(s)} \approx \mathbf{D}\xi \left(1 - \left(\frac{q}{2A+1}\right)^{s+1}\right).$$

Выражая n_1 через s из соотношения (18), имеем

$$\tilde{S}(s) = d^2 s / \left(\tilde{\varepsilon}_s - \left(\frac{q}{A+1}\right)^{s+1} \frac{1}{A+1-q}\right)^2. \quad (19)$$

Последняя функция численно исследовалась на минимум по s . Поиск минимума сводится к решению уравнения

$$\tilde{\varepsilon}_s - \left(\frac{q}{A+1}\right)^{s+1} \frac{1}{A+1-q} + 2 \left(\frac{q}{A+1}\right)^{s+1} \frac{s}{A+1-q} \ln \left(\frac{q}{A+1}\right) = 0.$$

Это условие равенства нулю производной функции (19).

В частности, для $\tilde{\varepsilon}_s = 0.01$, $q = 0.999$, $A = 0.5$ и $d = 2.1$ удалось установить, что минимум функции $\tilde{S}(s)$ достигается примерно при $s = 19$. Заметим также, что для $s = 19$ получилось совпадение теоретического и практического результатов (т. е. при $s = 19$ для получения заданного уровня погрешности потребовалось минимальное время счета — табл. 5).

Т а б л и ц а 5. Оптимизация алгоритма (8) по s

s	n_1	t, c
13	469 223	5.55
16	77 651	1.10
18	59 919	0.94
19	56 221	0.93
20	53 944	0.94
22	51 577	0.99
30	49 867	1.26
40	49 801	1.70

Подведем итоги. Рандомизация метода последовательных приближений для решения интегрального уравнения второго рода, связанная с приближением конечного отрезка ряда Неймана, дает смещенные оценки вычисляемых функционалов. Тем не менее в ряде случаев эти оценки позволяют построить численную процедуру метода Монте-Карло, более эффективную (т. е. дающую заданный уровень погрешности за меньшее время), чем соответствующий стандартный алгоритм, реализуемый на основании несмещенной оценки по столкновениям.

Список литературы

- [1] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
- [2] Канторович Л.В., Акилов Г.П. Функциональный анализ. М.: Наука, 1977.
- [3] Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Методы Монте-Карло. М.: Академия, 2006.
- [4] Войтишек А.В., Каблукова Е.Г. Исследование адаптивных дискретно-стохастических алгоритмов численного интегрирования // Матер. VI Междунар. семинара-совещания “Кубатурные формулы и их приложения”. Уфа, июль 2001. С. 46–52.

Поступила в редакцию 15 сентября 2006 г.