

Основы метода Монте-Карло

В.В. Некруткин

кафедра статистического моделирования <http://statmod.ru>, матмех СПбГУ
Материал к специальному курсу, 2018 г.

Содержание

1	Вычисление интегралов методом Монте-Карло	3
1.1	Заряды и их свойства	3
1.2	Метод Монте-Карло для вычисления интегралов. Общая схема	6
1.2.1	Оценки и доверительные интервалы	6
1.2.2	Трудоемкость	10
1.2.3	Одновременное оценивание нескольких интегралов	10
1.3	Уменьшение трудоемкости в методе Монте-Карло	13
1.3.1	Выделение главной части интеграла	13
1.3.2	Интегрирование по части области	14
1.3.3	Симметризация оценок	16
1.3.4	Понижение порядка интегрирования	18
1.3.5	Метод расщепления	20
1.3.6	Расслоенная выборка	24
1.3.7	Метод существенной выборки	26
2	Решение линейных уравнений методом Монте-Карло	29
2.1	Линейные алгебраические уравнения	29
2.1.1	Условия мажорируемой сходимости	29
2.1.2	Выбор распределения и оценка «по поглощению»	31
2.1.3	Дисперсия оценки «по поглощению»	35
2.1.4	Задача о минимальной дисперсии	36
2.1.5	Оценивание скалярного произведения (H, X)	38
2.1.6	Примеры	41
2.2	Линейные интегральные уравнения	43
2.2.1	Леммы о марковских цепях и минимальных решениях	43
2.2.2	Интегральные уравнения и условие мажорируемой сходимости	51
2.2.3	Оценка «по поглощению» и ее свойства	54
2.2.4	Оценка «по столкновениям». Примеры	59
2.2.5	Уравнения относительно мер и простейшая задача переноса излучений	61
2.3	Внутренняя задача Дирихле для оператора Лапласа	66
2.3.1	Построение оценки	66
2.4	Среднее число шагов сферического процесса	71
2.4.1	Лемма Вальда и элементарная теорема восстановления	71
2.4.2	Сферический процесс в полупространстве	72
2.4.3	Сферический процесс в выпуклой области	73
	Список литературы	75

1 Вычисление интегралов методом Монте-Карло

1.1 Заряды и их свойства

Определение 1.1. Пусть $(D, \mathcal{A})$ — измеримое пространство. Зарядом¹ называется отображение $\nu : \mathcal{A} \mapsto [-\infty, +\infty]$, которое удовлетворяет следующим свойствам 1) $\nu(\emptyset) = 0$; 2) не существует таких множеств $A_1, A_2 \in \mathcal{A}$, что $\nu(A_1) = +\infty$ и $\nu(A_2) = -\infty$ и 3) ν является счетно-аддитивным.

Имеет место следующая теорема,² носящая название «разложение Хана-Жордана».

Теорема 1. 1. Для всякого заряда существует такое $G \in \mathcal{A}$, что $\nu(A) \geq 0$ для любого измеримого $A \subset G$ и $\nu(B) \leq 0$ для любого измеримого $B \subset G^c$.

2. Положим $\nu^+(A) = \nu(A \cap G)$ и $\nu^-(A) = -\nu(A \cap G^c)$ для любого $A \in \mathcal{A}$. Тогда меры ν^+ и ν^- не зависят от выбора G , причем³ $\nu = \nu^+ - \nu^-$.

Определение 1.2. Мера $|\nu| = \nu^+ + \nu^-$ называется полной вариацией заряда ν . Заряд ν является конечным, если $|\nu|(D) < \infty$.

Замечание 1. Меры ν^+ и ν^- являются взаимно сингулярными в том смысле, что $\nu^+(G^c) = \nu^-(G) = 0$ независимо от конкретного выбора G .

Пример 1. Приведем естественный пример описанных выше конструкций для конечных зарядов. Пусть μ — некоторая (неотрицательная) мера, определенная на $\mathcal{A}$, а f — измеримая относительно $\mathcal{A}$ суммируемая с μ функция.

Положим $\nu(A) = \int_A f d\mu$, $A \in \mathcal{A}$. Конечно, ν представляет собой конечный заряд. Пусть теперь $G = \{x \in D : f(x) \geq 0\}$, $f^+(x) = f(x) \mathbb{I}_G(x)$ и $f^-(x) = -f(x) \mathbb{I}_{G^c}(x)$. Тогда $f = f^+ - f^-$ и $|f| = f^+ + f^-$, причем неотрицательные функции f^+ и f^- имеют дизъюнктные носители.

В этих обозначениях

$$\begin{aligned}\nu^+(A) &= \int_A f^+ d\mu, \quad \nu^-(A) = \int_A f^- d\mu, \quad \nu(A) = \int_A f^+ d\mu - \int_A f^- d\mu \quad \text{и} \\ |\nu|(A) &= \int_A f^+ d\mu + \int_A f^- d\mu = \int_A |f| d\mu.\end{aligned}$$

Замечание 2. На самом деле любой конечный заряд ν может быть представлен как интеграл от некоторой измеримой функции f по некоторой мере μ . Действительно, положим $\mu = |\nu|$ и

$$f(x) = \begin{cases} +1 & \text{при } x \in G, \\ -1 & \text{при } x \in G^c. \end{cases}$$

Тогда, так как $\nu^+(G^c) = \nu^-(G) = 0$, то

$$\begin{aligned}\nu(A) &= \nu(A \cap G) + \nu(A \cap G^c) = \nu^+(A \cap G) - \nu^-(A \cap G^c) = \int_A \mathbb{I}_G d\nu^+ + \int_A (-\mathbb{I}_{G^c}) d\nu^- = \\ &= \int_A \mathbb{I}_G d(\nu^+ + \nu^-) + \int_A (-\mathbb{I}_{G^c}) d(\nu^+ + \nu^-) = \int_A f d\mu.\end{aligned}$$

Наконец, остановимся на вопросах абсолютной непрерывности заряда относительно (положительной) меры и существования соответствующей производной Радона-Никодима. Определение абсолютной непрерывности такое же, как и в случае двух мер: заряд ν абсолютно непрерывен относительно меры μ , если для любого измеримого A , удовлетворяющего условию $\mu(A) = 0$, следует, что $\nu(A) = 0$.

¹Синонимы: «обобщенная мера» [1], «мера со знаком» [2], «знакоопределенная мера» [3]. В англоязычной литературе — «signed measure».

²см. [1, §29].

³Вообще говоря, выбор G не является однозначным. Отсюда и необходимость доказательства этого утверждения.

Лемма 1. Для того, чтобы заряд ν был абсолютно непрерывен относительно меры μ (как и раньше, это обозначается $\nu \prec \mu$), необходимо и достаточно, чтобы меры ν^+ и ν^- были абсолютно непрерывны относительно μ .

Доказательство. 1. Пусть заряд ν абсолютно непрерывен относительно меры μ . Возьмем некоторое измеримое A , удовлетворяющее равенству $\mu(A) = 0$. Поскольку $\mu(A) = \mu(A \cap G) + \mu(A \cap G^c)$, то $\nu(A \cap G) = \nu(A \cap G^c) = 0$. Но $\nu(A \cap G) = \nu^+(A)$ и $\nu(A \cap G^c) = -\nu^-(A)$, откуда сразу же следует, ν^+ и ν^- что абсолютно непрерывны относительно μ .

2. Снова рассмотрим некоторое A , для которого $\mu(A) = 0$. Если обе меры ν^+ и ν^- абсолютно непрерывны относительно μ , то $\nu(A) = \nu^+(A) - \nu^-(A) = 0$, что и заканчивает доказательство. $\square$

Замечание 3. Из Леммы 1 сразу же следует эквивалентность соотношений $\nu \prec \mu$ и $|\nu| \prec \mu$.

Определение 1.3. Говорят, что измеримая⁴ функция $r : D \mapsto [-\infty, +\infty]$ является производной Радона-Никодима заряда ν относительно меры μ , если для любого $A \in \mathcal{A}$ выполняется равенство $\nu(A) = \int_A r d\mu$.⁵ При этом функция r называется производной Радона-Никодима ν относительно μ и обозначается $r = d\nu/d\mu$.⁶

Если ν является мерой, а μ — σ -конечной мерой, то, согласно теореме Радона-Никодима для мер, существование (неотрицательной) производной $r = d\nu/d\mu$ и абсолютная непрерывность $\nu \prec \mu$ оказываются эквивалентными.⁷ Выведем отсюда теорему Радона-Никодима для зарядов, дополнив ее простыми, но нужными для дальнейшего утверждениями.

Предложение 1. 1. Производная Радона-Никодима $r = d\nu/d\mu$ существует тогда и только тогда, когда $\nu \prec \mu$. При этом функция r единственна с точности до множества μ -меры ноль.

2. Производная Радона-Никодима $r = d\nu/d\mu$ существует тогда и только тогда, когда существуют производные Радона-Никодима $r^+ = d\nu^+/d\mu$ и $r^- = d\nu^-/d\mu$. При этом $r = r^+ - r^-$ почти всюду по мере μ и функции r^+, r^- обладают носителями, дизъюнктивными с точностью до множества μ -меры ноль. Кроме того, функция $|r| = r^+ + r^-$ является производной Радона-Никодима $d|\nu|/d\mu$.⁸

3. Если $d\nu = d\mu$ и $\int |rf| d\mu < \infty$, то $\int f d\nu = \int f r d\mu$.

Доказательство. Будем доказывать первые два пункта одновременно.⁹

Пусть ν — заряд. Если он имеет производную Радона-Никодима r относительно меры μ , то конечно, $\nu \prec \mu$, так как $\nu(A) = \int_A r d\mu$. Кроме того,

$$\nu^+(A) = \nu(A \cap G) = \int_{A \cap G} r d\mu = \int_A r \mathbb{I}_G d\mu$$

и

$$\nu^-(A) = -\nu(A \cap G^c) = - \int_{A \cap G^c} r d\mu = \int_A (-r \mathbb{I}_{G^c}) d\mu.$$

⁴Множество $[-\infty, +\infty]$ оснащено σ -алгеброй $\sigma(\mathcal{B}_R \cup \mathcal{B}_\infty)$, где $\mathcal{B}_R$ — борелевская σ -алгебра подмножеств $\mathbb{R}$, а $\mathcal{B}_\infty = \{-\infty, +\infty\}$.

⁵В случае, когда $\mu(A) = 0$, а $|r(x)| = \infty$ при $x \in A$, интеграл $\int_A r d\mu$ полагается равным нулю.

⁶Конечно, это определение просто перенесено с определения производной Радона-Никодима одной положительной меры относительно другой. Как и раньше, в этом случае используется сокращенное обозначение $d\nu = r d\mu$.

⁷Более того, производная Радона-Никодима является единственной с точностью до множества μ -меры ноль, а $\int f d\nu = \int f r d\mu$, если только последний интеграл существует.

⁸То есть

$$\frac{d|\nu|}{d\mu} = \left| \frac{d\nu}{d\mu} \right|.$$

⁹А третий выведите сами.

Обозначим $r^+ = r \mathbb{I}_G$ и $r^- = -r \mathbb{I}_{G^c}$, так что $r = r^+ - r^-$. Тогда $d\nu^+/d\mu = r^+$ и $d\nu^-/d\mu = r^-$. Ясно, что r^+ и r^- имеют дизъюнктные носители и поэтому $|r| = r^+ + r^- = d\nu^+/d\mu + d\nu^-/d\mu = d|\nu|/d\mu$.

Если же $\nu \prec \mu$, то по Лемме 1 меры ν^+ и ν^- абсолютно непрерывны относительно меры μ . Поэтому¹⁰ $d\nu^+ = r^+d\mu$ и $d\nu^- = r^-d\mu$. Наконец,

$$\nu(A) = \nu^+(A) - \nu^-(A) = \int_A r^+ d\mu - \int_A r^- d\mu = \int_A (r^+ - r^-) d\mu \quad (1.1.1)$$

и $d\nu = r d\mu$ с $r = r^+ - r^-$, причем единственность r (с точностью до множества μ -меры ноль) следует из такой же единственности функций r^+ и r^- . $\square$

В случае, когда заряд ν и мера μ сами абсолютно непрерывны относительно некоторой меры λ , условие существования производной Радона-Никодима $d\nu/d\mu$ (и ее вид) могут быть выписаны явно.

Предложение 2. Рассмотрим конечный заряд ν и (положительную) меру μ . Пусть $d\nu = f d\lambda$ и $d\mu = g d\lambda$, где λ — некоторая мера.

Для того, чтобы существовала производная Радона-Никодима $r = d\nu/d\mu$ необходимо и достаточно, чтобы

$$\lambda\{x : f(x) \neq 0 \text{ и } g(x) = 0\} = 0.$$

При этом

$$r(x) = \begin{cases} \frac{f(x)}{g(x)} & \text{при } g(x) \neq 0, \\ 0 & \text{при } g(x) = 0. \end{cases} \quad (1.1.2)$$

Доказательство. Приведем лишь краткую схему доказательства.¹¹ Согласно Примеру 1, $d\nu = d\nu^+ - d\nu^- = f^+ d\mu - f^- d\mu$, где (неотрицательные) функции f^+ и f^- имеют дизъюнктные носители.

Для мер ν^+ и ν^- утверждение Предложения 2 уже известно. Отсюда легко получить это утверждение и для заряда ν . $\square$

¹⁰По теореме о производной Радона-Никодима для мер.

¹¹Проведите это доказательство в деталях.

1.2 Метод Монте-Карло для вычисления интегралов. Общая схема

1.2.1 Оценки и доверительные интервалы

Пусть $(D, \mathcal{A})$ — некоторое измеримое пространство и $\nu : \mathcal{A} \mapsto \mathbb{R}$ — конечный заряд. Обозначим $J = \nu(D)$ и $\bar{J} = |\nu|(D)$. Будем предполагать, что $|\nu|(D) > 0$. Наша задача — оценить (построить приближенное значение) величины J . Как уже говорилось в предыдущем разделе, такая задача, в частности, включает в себя задачу приближенного вычисления абстрактного интеграла $\int_D f d\mu$.

Опишем, как это можно сделать стохастическими методами. Рассмотрим некоторое вероятностное пространство $(\Omega, \mathcal{F})$ и случайную величину¹² $\eta : (\Omega, \mathcal{F}) \mapsto (D, \mathcal{A})$. Обозначим $\mathcal{P} = \mathcal{P}_\eta$ распределение случайной величины η , которое является вероятностной мерой в $(D, \mathcal{A})$.

Предположим, что существует производная Радона-Никодима $m = d\nu/d\mathcal{P}_\eta$ (в дальнейшем в этом случае мы будем говорить, что распределение $\mathcal{P}$ согласовано с зарядом ν). Тогда имеет место следующее простое утверждение.

Предложение 3. 1. Случайная величина $\xi = m(\eta)$ является суммируемой, причем $E|m(\eta)| = |\nu|(D)$, а $Em(\eta) = \nu(D)$.

Доказательство. 1. Поскольку случайная величина $|m(\eta)|$ неотрицательна, то, согласно Предложению 1,

$$E|m(\eta)| = \int_D |m| d\mathcal{P} = \int_D \left| \frac{d\nu}{d\mathcal{P}} \right| d\mathcal{P} = \int_D \frac{d|\nu|}{d\mathcal{P}} d\mathcal{P} = |\nu|(D) < \infty.$$

2. Поскольку $m(\eta)$ суммируема, то

$$Em(\eta) = \int_D \frac{d\nu}{d\mathcal{P}} d\mathcal{P} = \nu(D).$$

Утверждение доказано. □

Замечание 4. Из Предложения 3 сразу же вытекает следующая вероятностная схема оценивания величины конечного заряда $J = \nu(D)$.

Пусть $\eta_1, \dots, \eta_n, \dots$ — последовательность независимых одинаково распределенных случайных величин, каждая из которых имеет распределение $\mathcal{P}$. Тогда по (слабому) Закону Больших Чисел при $n \rightarrow \infty$

$$\hat{J}_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m(\eta_1) + \dots + m(\eta_n)}{n} \xrightarrow{\mathcal{P}} J.$$

Иначе говоря, для любого $\varepsilon > 0$

$$\mathcal{P} \left(|\hat{J}_n - J| \leq \varepsilon \right) \rightarrow 1 \quad (1.2.1)$$

при $n \rightarrow \infty$.¹³

Таким образом, для получения приближенного значения J нам нужно выбрать распределение $\mathcal{P}$, удовлетворяющее условию $\nu \prec \mathcal{P}$, промоделировать (независимым образом) n раз это распределение (результат этого моделирования — $\eta_1, \dots, \eta_n$), сосчитать производные Радона-Никодима $m = d\nu/d\mathcal{P}$ в точках $\eta_1, \dots, \eta_n$ и взять среднее арифметическое $\hat{J}_n$ полученных результатов. Тогда при большом n мы должны получить хорошее приближение $\hat{J}_n$ к J .

В этом, собственно, и состоит общая схема применения метода Монте-Карло к вычислению зарядов и интегралов.

¹²Точнее, «случайную величину со значениями в $(D, \mathcal{A})$ ». Иногда такой объект называют «случайным элементом».

¹³А еще иначе говоря, $\hat{J}_n$ является несмещенной и состоятельной оценкой J .

В случае, когда $\nu(A) = \int_A f d\lambda$,¹⁴ а $dP = p d\lambda$, условие абсолютной непрерывности $\nu \prec P$ переписывается (см. Предложение 2) в виде

$$\lambda\{x : f(x) \neq 0 \text{ и } p(x) = 0\} = 0, \quad (1.2.2)$$

а производная Радона-Никодима m имеет вид

$$m(x) = \frac{f}{p}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{f(x)}{p(x)} & \text{при } p(x) \neq 0, \\ 0 & \text{при } p(x) = 0. \end{cases}$$

Если заменить условие (1.2.2) на более слабое, но более понятное «если $f(x) \neq 0$, то $p(x) \neq 0$ » и учесть, что $p(\eta) > 0$ с вероятностью 1,¹⁵ то оценка $\hat{J}_n$ приобретет более привычный для учебников по Монте-Карло вид¹⁶

$$\hat{J}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(\eta_i)}{p(\eta_i)}. \quad (1.2.3)$$

Будем для удобства ссылок называть этот частный случай описанной общей схемы *традиционным*.

Из (1.2.1) сразу же видно различие между детерминированными и стохастическими методами вычислений. При детерминированном численном решении какой-нибудь задачи ставится вопрос о числе операций, гарантирующем решение этой задачи с заданной точностью ε . Например, если мы вычисляем интеграл с помощью некоторого набора квадратурных формул, то естественно поинтересоваться, сколько нужно взять узлов этих квадратурных формул, чтобы добиться нужной точности.¹⁷

Формула (1.2.1) показывает, что для вероятностных методов решения детерминированных задач все по-другому. А именно, при фиксированном ε , вообще говоря,¹⁸ никакой выбор n не гарантирует нам неравенства $|\hat{J}_n - J| \leq \varepsilon$.¹⁹

Поэтому здесь постановка задачи другая.²⁰ А именно, кроме необходимой нам точности ε мы задаем еще и надежность $1 - \gamma$ наших рассуждений и ставим задачу нахождения такого²¹ $n_0 = n_0(\varepsilon, \gamma)$, что при $n \geq n_0$ выполняется неравенство

$$P(|\hat{J}_n - J| \leq \varepsilon) \geq 1 - \gamma.$$

Таким образом, мы хотим гарантировать себе достижения заданной точности ε оценивания J с заданной надежностью $1 - \gamma$.²² Это, конечно, связано со скоростью сходимости левой части (1.2.1) к единице при $n \rightarrow \infty$.

Вообще говоря, эта скорость сходимости может быть очень медленной²³ и, следовательно, на практике в этом случае нужно брать очень большие n . Существует, однако, одна стандартная ситуация, для которой при очень широких условиях скорость сходимости левой части (1.2.1) к единице легко определяется.

¹⁴То есть когда перед нами стоит задача вычисления «настоящего» интеграла $J = \int_D f d\lambda$.

¹⁵Действительно, $P(p(\eta) = 0) = \int_{\{x: p(x)=0\}} p(x)\lambda(dx) = 0$, а $P(p(\eta) > 0) = 1$.

¹⁶С формальной точки зрения правая часть (1.2.3) определена только почти всюду. А почему?

¹⁷Другое дело, что такая задача может оказаться очень сложной.

¹⁸А откуда взялась эта оговорка?

¹⁹А почему?

²⁰Собственно говоря, эта постановка характерна для математической статистики.

²¹В идеале — минимального.

²²Обозначение надежности $1 - \gamma$ (вместо, скажем, γ) вызвано желанием подчеркнуть, что оба параметра ε и γ по смыслу являются малыми положительными числами.

²³и не всегда легко оцениваемой.

А именно, предположим дополнительно, что $Em^2(\eta) < \infty$.²⁴ Тогда $\sigma^2 \stackrel{\text{def}}{=} Dm(\eta) < \infty$ и, при условии $\sigma^2 > 0$ ²⁵ имеет место Центральная Предельная Теорема (теорема П. Леви)²⁶:

$$\mathcal{L}\left(\sqrt{n}(\hat{J}_n - J)/\sigma\right) \Rightarrow N(0, 1),$$

откуда немедленно следует,²⁷ что при $n \rightarrow \infty$ для любого $x > 0$

$$P\left(|\hat{J}_n - J| < \sigma x / \sqrt{n}\right) \rightarrow \Phi(x) - \Phi(-x), \quad (1.2.4)$$

где $\Phi(x)$ — функция распределения стандартного нормального закона.

Возьмем $0 < \gamma < 1$ и обозначим x_γ решение уравнения $\Phi(x) - \Phi(-x) = 1 - \gamma$ (такое решение существует и единственно, так как на промежутке $[0, +\infty)$ функция $H(x) = \Phi(x) - \Phi(-x)$ строго возрастает и непрерывна, причем $H(0) = 0$ и $H(x) \rightarrow 1$ при $x \rightarrow +\infty$).²⁸

Как и в статистике, стандартными значениями γ являются $\gamma = 0.05$ и $\gamma = 0.003$. Тогда надежность равна 0.95 и 0.997, а x_γ (приблизленно) — 1.96 и 3.00 соответственно.²⁹

Зафиксировав γ , мы получим, что при $n \rightarrow \infty$

$$P\left(|\hat{J}_n - J| < \sigma x_\gamma / \sqrt{n}\right) \rightarrow 1 - \gamma. \quad (1.2.5)$$

Соотношение (1.2.5) позволяет построить (теоретический)³⁰ асимптотический доверительный интервал уровня $1 - \gamma$ для неизвестного значения J : при больших n

$$P\left(\hat{J}_n - \sigma x_\gamma / \sqrt{n} < J < \hat{J}_n + \sigma x_\gamma / \sqrt{n}\right) \approx 1 - \gamma. \quad (1.2.6)$$

Чтобы получить реализуемый доверительный интервал, достаточно заменить в (1.2.5) неизвестный параметр σ на любую его состоятельную оценку.³¹ Конечно, наиболее популярной оценкой σ является выборочный стандарт

$$\hat{s}_n = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m^2(\eta_i) - \hat{J}_n^2}$$

или его «исправленный» аналог. Как бы то ни было, если $\hat{s}_n$ является какой-нибудь (положительной) состоятельной оценкой σ , то асимптотический доверительный интервал уровня $1 - \gamma$ для неизвестного значения J будет иметь вид³²

$$\left(\hat{J}_n - \hat{s}_n x_\gamma / \sqrt{n}, \hat{J}_n + \hat{s}_n x_\gamma / \sqrt{n}\right). \quad (1.2.7)$$

²⁴В случае, когда оценивается $J = \int_D f d\lambda$ и используемая оценка $\hat{J}_n$ имеет вид (1.2.3), это условие приобретает традиционный вид

$$Em^2(\eta) = E\left(\frac{f(\eta)}{p(\eta)}\right)^2 = \int_D \frac{f^2(x)}{p^2(x)} \mathcal{P}(dx) = \int_D \frac{f^2(x)}{p^2(x)} p(x) \lambda(dx) = \int_D \frac{f^2(x)}{p(x)} \lambda(dx) < \infty.$$

При этом подразумевается, что $f(x)/p(x) = 0$ при $p(x) = 0$, так что на самом деле интегрирование производится по множеству $\{x : p(x) \neq 0\}$.

²⁵Это условие все время будет неявно предполагаться. Иначе $m(\eta) \equiv J$ и задача на самом деле оказывается детерминированной.

²⁶Нам эта теорема нужна именно в такой форме.

²⁷А как?

²⁸Проверьте этот факт.

²⁹Отсюда и взялись знаменитые «правила 2-х и 3-х сигм».

³⁰Так как величина σ неизвестна.

³¹Сам факт сходимости (1.2.5) от такой замены не изменится, это следует из общей теории слабой сходимости распределений.

³²Сразу же отметим, что построение доверительных интервалов вида (1.2.7) является обязательным при любом Монте-Карловском моделировании!

Соотношения (1.2.5) и (1.2.6) дают возможность утверждать, что в данном контексте скорость сходимости метода Монте-Карло для вычисления интегралов имеет порядок $O(n^{-1/2})$ — так уменьшается длина доверительного интервала с ростом n .

Вообще говоря, это достаточно медленная скорость. Для иллюстрации рассмотрим простейший пример численного вычисления интеграла $J = \int_0^1 f(x)dx$.

Если функция f обладает ограниченной первой производной на отрезке $[0, 1]$, то обычный метод прямоугольников с шагом $h = n^{-1}$ дает нам погрешность вычисления интеграла J вида $O(n^{-1})$. При существовании ограниченной второй производной использование метода трапеций приводит к погрешности $O(n^{-2})$ и так далее. В то же время, как это показано только что, метод Монте-Карло обладает скоростью сходимости всего лишь $O(n^{-1/2})$ даже в этой простой задаче.³³

В тоже время этот метод обладает рядом достоинств, достаточно точно описывающих разумную область его применения. Главное — это большая общность условий, при которых этот метод работает. Действительно, в традиционном случае нам нужно лишь, чтобы

$$p(x) \neq 0 \text{ при } f(x) \neq 0 \text{ и } \int_D \frac{f^2(x)}{p(x)} \lambda(dx) < \infty.$$

Ну и, конечно, нужно уметь достаточно эффективно моделировать случайную величину с распределением $\mathcal{P}(dx) = p(x)\lambda(dx)$.

А вот, скажем, природа множества D здесь совершенно не существенна. Порядок сходимости $O(n^{-1/2})$ будет одинаков что в случае $D = \mathbb{R}$, что для $D = \mathbb{R}^{10}$, в то время как для обычных методов численного интегрирования это совсем не так. К тому же евклидовость множества D тоже совсем не обязательна.³⁴

Из этих рассуждений можно сделать такие выводы. Во-первых, метод Монте-Карло имеет смысл применять на практике для сложных задач, когда обычные детерминированные методы работают плохо.³⁵ Во-вторых, медленная сходимость метода Монте-Карло означает, что нас интересует относительно небольшая точность решения задачи.

Эта ситуация характерна для решения нового (сложного и важного для практики) класса задач. Здесь, как правило, опробованные методы не годятся, а требуется для начала получить хоть какое-то решение проблемы. В дальнейшем (в основном — в связи с развитием вычислительной техники) вероятностные методы вытесняются более точными детерминированными, то есть задача уходит из раздела «сложных». Зато через некоторое время возникает новая сложная задача и снова вероятностные методы оказываются широко востребованными.

Именно так исторически развивался метод Монте-Карло, который возник из потребности расчета ядерных реакторов³⁶ и широко использовался для моделирования полета космических аппаратов через плотные слои атмосферы. Сейчас (в основном в результате компьютерной революции) влияние метода Монте-Карло на эти области знания ослабло, хотя и не исчезло.

Замечание 5. Пусть нас интересует не просто значение заряда $J = \nu(D)$, а некоторая функция H от J , то есть число $I = H(J)$. Если функция H непрерывно дифференцируема, то появляется возможность построения доверительного интервала для I . Действительно, в этом случае (см. [4,

³³Можно заметить, что понятия погрешности для детерминированных и вероятностных методов вычисления интегралов отличаются, в связи с чем возникает сомнение в корректности их сравнения. Для того, чтобы соединить эти понятия, удобно использовать язык математической статистики. На этом языке детерминированные методы характеризуются смещением используемых оценок и их нулевой дисперсией. Наоборот, случайная величина $\hat{J}_n$ является несмещенной оценкой J с дисперсией, убывающей как $O(n^{-1})$. Если рассматривать смещение и дисперсию не по-отдельности, а вместе — а именно, использовать среднееквадратическое отклонение оценки от оцениваемой величины, — то сравнение погрешностей детерминированных и вероятностных методов становится корректным.

³⁴В дальнейшем мы столкнемся со случаем, когда, например, $D = \cup_{m=1}^{\infty} \mathbb{R}^m$, причем этот пример будет отнюдь не искусственным.

³⁵Ну, например, вычислять методом Монте-Карло интегралы вида $\int_0^1 f(x)dx$ следует либо в учебных целях, либо в очень специфических ситуациях.

³⁶И вообще — для решения практических проблем ядерной физики.

§9.4]) (асимптотический) доверительный интервал уровня $1 - \gamma$ будет иметь вид

$$\left(H(\hat{J}_n) - |H'(\hat{J}_n)| \hat{s}_n x_\gamma / \sqrt{n}, H(\hat{J}_n) + |H'(\hat{J}_n)| \hat{s}_n x_\gamma / \sqrt{n} \right), \quad (1.2.8)$$

если только $H'(J) \neq 0$. В противном случае скорость сходимости метода Монте-Карло окажется выше, чем $O(n^{-1/2})$.

Замечание 6. Построение доверительных интервалов вида (1.2.7) или (1.2.8) является обязательным при любом использовании метода Монте-Карло. При этом обычно рассматривают несколько значений n (например, $n = N$ и $n = 2N$ при достаточно большом N), чтобы убедиться, что выборочные средние $\hat{J}_n$ и выборочные дисперсии $\hat{s}_n^2$ в (1.2.7) стабилизировались. В (1.2.8) это требование относится также к $H(\hat{J}_n)$ и $H'(\hat{J}_n)$.

1.2.2 Трудоемкость

Теперь займемся понятием трудоемкости метода Монте-Карло. А именно, постараемся понять, сколько и каких операций нам следует совершить, чтобы оценить интеграл J при помощи $\hat{J}_n$ с точностью ε и надежностью $1 - \gamma$.

Зафиксируем ε и обратимся (опять же с фиксированным γ) к предельному соотношению (1.2.5). Если приравнять $\sigma x_\gamma / \sqrt{n}$ к ε , то мы получим, что примерное равенство

$$P(|\hat{J}_n - J| < \varepsilon) \approx 1 - \gamma$$

будет достигаться при

$$n = \sigma^2 x_\gamma^2 / \varepsilon^2. \quad (1.2.9)$$

Следовательно, для того, чтобы оценить величину J с помощью случайной величины $\hat{J}_n$,³⁷ понадобится примерно $\sigma^2 x_\gamma^2 / \varepsilon^2$ раз моделировать случайные величины η_i и вычислять производную Радона-Никодима m в точках η_i .³⁸

Обозначим t_η среднее время моделирования случайной величины η , $t_m(\eta)$ — (случайное) время вычисления функции m в точке η и $t_m = Et_m(\eta)$ — среднее время вычисления функции m . Тем самым время, потраченное на получение (при вычислении интеграла J) точности ε с надежностью $1 - \gamma$ будет примерно равно

$$n(t_\eta + t_m) = \sigma^2(t_\eta + t_m)x_\gamma^2/\varepsilon^2.$$

Если считать, что точность ε и надежность $1 - \gamma$ у нас фиксированы, то естественно назвать *трудоемкостью метода Монте-Карло* величину $C = \sigma^2(t_\eta + t_m)$.

1.2.3 Одновременное оценивание нескольких интегралов

Пусть нам нужно вычислить значения $\nu_1(D), \dots, \nu_p(D)$ конечных зарядов $\nu_1, \dots, \nu_p$, заданных на одном измеримом пространстве $(D, \mathcal{A})$.

Конечно, можно попытаться подобрать для каждого ν_k случайные величины $\eta^{(k)}$ с распределениями $\mathcal{P}_k$ такие, что существуют производные Радона-Никодима $m_k = d\nu_k/d\mathcal{P}_k$ и $Dm_k(\eta^{(k)}) < \infty$. Тогда к каждому $J^{(k)} = \nu_k(D)$ можно применить отдельную процедуру оценивания, описанную

³⁷с точностью ε и надежностью $1 - \gamma$

³⁸Поскольку все наши рассуждения асимптотические, то эта фраза имеет смысл только тогда, когда получающееся значение n является большим.

в предыдущем разделе и получить соответствующие доверительные интервалы. Точнее, при каждом k рассматриваются независимые случайные величины $\eta_i^{(k)}$, $1 \leq i \leq n_k$,³⁹ по которым строятся оценки

$$\widehat{J}_{n_k}^{(k)} = \frac{m_k(\eta_1^{(k)}) + \dots + m_k(\eta_{n_k}^{(k)})}{n_k}$$

величин $J^{(k)}$. Поскольку обычно в такой процедуре используют независимые между собой наборы $\eta_i^{(k)}$,⁴⁰ то (вообще говоря) вероятность

$$\mathbb{P} \left(\max_{1 \leq k \leq p} |\widehat{J}_{n_k}^{(k)} - J^{(k)}| < \varepsilon \right) = \prod_{k=1}^p \mathbb{P} \left(|\widehat{J}_{n_k}^{(k)} - J^{(k)}| < \varepsilon \right)$$

одновременного достижения точности ε для всех p оцениваемых интегралов будет гораздо меньше, чем аналогичная вероятность для каждого из них.⁴¹

Можно действовать и по-другому. Если мы умеем моделировать случайную величину η , имеющую такое распределение $\mathcal{P}$, что $d\nu_k = m_k d\mathcal{P}$ и $Dm_k(\eta) = \sigma_k^2 < \infty$ для всех k , то мы получим сразу все оценки

$$\widehat{J}_n^{(k)} = \frac{m_k(\eta_1) + \dots + m_k(\eta_n)}{n}$$

величин $J^{(k)} = \nu_k(D)$, используя n независимых реализаций $\eta_1, \dots, \eta_n$ случайной величины η для всех интегралов сразу. Этот прием носит название *метод зависимых испытаний*.

Как обычно, здесь можно строить состоятельные оценки дисперсий σ_k^2 и, соответственно, доверительные интервалы для каждого из $J^{(k)}$ по-отдельности. Эта возможность, как уже было показано, является следствием одномерной теоремы Леви.

Разница с предыдущим случаем состоит в том, что теперь оценки $\widehat{J}_n^{(k)}$ коррелированы и их совместное предельное распределение описывается многомерной теоремой Леви.

А именно, если обозначить Σ ковариационную матрицу случайного вектора $(m_1(\eta), \dots, m_k(\eta))^T$, $\mathcal{J}$ — вектор с координатами $J^{(k)}$ и $\widehat{\mathcal{J}}_n$ — вектор с координатами $\widehat{J}_n^{(k)}$, то окажется, что

$$\mathcal{L} \left(\sqrt{n}(\widehat{\mathcal{J}}_n - \mathcal{J}) \right) \Rightarrow N(\mathbf{0}, \Sigma). \quad (1.2.10)$$

Соотношение (1.2.10) дает возможность строить различные доверительные области для вектора $\mathcal{J}$,⁴² но нас сейчас интересует другое.

Оказывается, что большие (положительные или отрицательные) коэффициенты корреляции между случайными величинами $m_k(\eta)$ могут обеспечить хорошую точность оценивания величин $J^{(k)}$ сразу для всех k . Поясним это на следующем (на самом деле вырожденном) примере.

Пусть $p = 3$, причем $\rho(m_1(\eta), m_2(\eta)) = +1$ и $\rho(m_1(\eta), m_3(\eta)) = -1$. Предположим также, что $\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq \sigma_3^2$. Тогда⁴³

$$m_2(\eta) = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} m_1(\eta) + b_{21} \quad \text{и} \quad m_3(\eta) = -\frac{\sigma_3}{\sigma_1} m_1(\eta) + b_{31}$$

³⁹с распределением $\mathcal{P}_k$

⁴⁰то есть независимые не только при разных i и фиксированном k , но и при различных k . Алгоритмически это понятно: сначала мы оцениваем $J^{(1)}$, потом — продолжая моделировать — $J^{(2)}$ и т.д.

⁴¹То есть, если каждый интеграл будет оцениваться с точностью ε и надежностью $1 - \gamma$, то общая надежность (с той же точностью для каждого интеграла) будет всего лишь $(1 - \gamma)^p$.

⁴²Для этого необходимо использовать такие состоятельные оценки ковариационной матрицы Σ , которые были бы неотрицательно определены. А как такие оценки получить?

⁴³А почему? И чему равны свободные члены b_{ij} ?

и поэтому

$$\hat{J}_n^{(2)} = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \hat{J}_n^{(1)} + b_{21} \quad \text{и} \quad \hat{J}_n^{(3)} = -\frac{\sigma_3}{\sigma_1} \hat{J}_n^{(1)} + b_{31},$$

причем⁴⁴

$$J^{(2)} = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} J^{(1)} + b_{21} \quad \text{и} \quad J^{(3)} = -\frac{\sigma_3}{\sigma_1} J^{(1)} + b_{31}.$$

Отсюда сразу же следует, что

$$|\hat{J}_n^{(2)} - J^{(2)}| = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} |\hat{J}_n^{(1)} - J^{(1)}| \quad \text{и} \quad |\hat{J}_n^{(3)} - J^{(3)}| = \frac{\sigma_3}{\sigma_1} |\hat{J}_n^{(1)} - J^{(1)}|.$$

Поскольку $\sigma_2/\sigma_1 \leq 1$ и $\sigma_3/\sigma_1 \leq 1$, то из неравенства $|\hat{J}_n^{(1)} - J^{(1)}| < \varepsilon$ будут следовать аналогичные неравенства для $J^{(2)}$ и $J^{(3)}$ и поэтому

$$\mathbf{P} \left(|\hat{J}_n^{(1)} - J^{(1)}| < \varepsilon, |\hat{J}_n^{(2)} - J^{(2)}| < \varepsilon, |\hat{J}_n^{(3)} - J^{(3)}| < \varepsilon \right) = \mathbf{P} \left(|\hat{J}_n^{(1)} - J^{(1)}| < \varepsilon \right).$$

Таким образом, обеспечив заданные надежность и точность интегралу с наибольшей дисперсией, мы обеспечили не меньшую точность (с той же надежностью) и двум другим интегралам. Конечно, в случае, когда коэффициенты корреляции близки к ± 1 , этот эффект тоже будет наблюдаться, но только приближенно.

Такого рода прием часто используется, если целью оценивания является не один интеграл, а целая функция $G(\theta) = \nu_\theta(D)$, где $\theta \in \Theta$ — некоторое параметрическое множество. Если, например, Θ является отрезком прямой, а $G(\theta)$ монотонна на этом отрезке, то при больших положительных корреляциях случайных величин $m_{\theta_1}(\eta)$ и $m_{\theta_2}(\eta)$ ⁴⁵ (случайная) функция $\hat{J}_n^{(\theta)}$ также⁴⁶ окажется монотонной даже при относительно небольших n .

Замечание 7. Поскольку ковариационная матрица Σ в правой части (1.2.10) легко оценивается через выборочные дисперсии и ковариации, то всегда можно прикинуть, действительно ли коэффициенты корреляции между $m_i(\eta)$ и $m_j(\eta)$ близки по модулю к единице.

⁴⁴Почему?

⁴⁵Для любых $\theta_1, \theta_2 \in \Theta$.

⁴⁶С большой вероятностью.

1.3 Уменьшение трудоемкости в методе Монте-Карло

Рассмотрим стандартную Монте-Карловскую схему вычисления значения заряда, то есть измеримое пространство $(D, \mathcal{A})$, конечный заряд ν со значением $J = \nu(D)$, вероятностное пространство $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ и случайную величину η со значениями в $(D, \mathcal{A})$, имеющую распределение $\mathcal{P}$.

Как обычно, предполагается, что существует производная Радона-Никодима $m = d\nu/d\mathcal{P}$, такая что $0 < \sigma^2 = Dm(\eta) < \infty$. Тогда, как обсуждалось в разделе 1.2.2, трудоемкостью метода Монте-Карло при вычислении величины $J = Em(\eta)$ естественно называть число $C = (t_\eta + t_m)\sigma^2$, где t_η — среднее время моделирования случайной величины η , а t_m — среднее время вычисления функции m в точке η .

Существует несколько (в основном взятых из практики) методов уменьшения этой трудоемкости.

1.3.1 Выделение главной части интеграла

Рассмотрим, кроме заряда ν еще один конечный заряд ν_1 , определенный на $(D, \mathcal{A})$. Будем считать, что существует производная Радона-Никодима $m_1 = d\nu_1/d\mathcal{P}$, также удовлетворяющая условию $\sigma_1^2 = Dm_1(\eta) < \infty$. Кроме того, предполагается, что величина $J_1 = \nu_1(D) = Em_1(\eta)$ известна.⁴⁷ Тогда, кроме оценки $\xi = m(\eta)$ с трудоемкостью $C = (t_\eta + t_m)\sigma^2$ у нас возникает еще одна несмещенная оценка величины J , имеющая вид⁴⁸

$$\xi_1 = J_1 + (m - m_1)(\eta) \quad (1.3.1)$$

с трудоемкостью $C_1 = (t_\eta + t_{m-m_1})D\xi_1$.

В случае, когда $J = \int_D f d\mu$, $J_1 = \int_D f_1 d\mu$ и $d\mathcal{P} = p d\mu$ (и когда выполнены все условия типа существования производных Радона-Никодима, обсуждавшиеся в разделе (1.2.1)), оценка ξ_1 будет выглядеть как

$$\xi_1 = J_1 + \frac{(f - f_1)(\eta)}{p(\eta)}. \quad (1.3.2)$$

Попробуем выяснить, при каких условиях новая трудоемкость будет меньше старой.⁴⁹ Поскольку $D\xi_1 = \sigma^2 + \sigma_1^2 - 2\rho\sigma\sigma_1$, где $\rho = \rho(m(\eta), m_1(\eta))$, то $C_1 < C$, если

$$(t_\eta + t_{m-m_1})(\sigma^2 + \sigma_1^2 - 2\rho\sigma\sigma_1) < (t_\eta + t_m)\sigma^2,$$

что эквивалентно неравенству

$$\rho > \frac{1}{2} \left(\frac{t_{m-m_1} - t_m}{t_\eta + t_{m-m_1}} \frac{\sigma}{\sigma_1} + \frac{\sigma_1}{\sigma} \right). \quad (1.3.3)$$

Попробуем на качественном уровне выяснить, при каких условиях будет выполняться неравенство (1.3.3).

1. Прежде всего, для этого желательно,⁵⁰ чтобы коэффициент корреляции ρ был побольше. Если функции m и m_1 в целом ведут себя одинаково,⁵¹ то это обеспечивает положительность ρ . Для оценки (1.3.2) это будет означать, что функции f и f_1 должны в целом вести себя похоже.

⁴⁷То есть может быть вычислена аналитически или каким-то несложным численным методом.

⁴⁸Подчеркнем, что в выражении для этой оценки написано $(m - m_1)(\eta)$, а не $m(\eta) - m_1(\eta)$. Это существенно, так как нам нужно вычислить функцию $m - m_1$ в точке η , а не разность $m(\eta) - m_1(\eta)$.

⁴⁹Конечно, ответ (с точки зрения практики) может быть дан только на качественном уровне.

⁵⁰То есть мы высказываем «благие пожелания» или, другими словами, описываем интерпретируемые достаточные условия для выполнения неравенства (1.3.3).

⁵¹То есть в «целом» — где одна принимает большие значения, там и другая.

2. Для того, чтобы правая часть (1.3.3) была поменьше, можно задать условие $t_{m-m_1} \leq t_m$. Оно будет реализовываться, если функция m_1 «вбирает» в себя сложную для вычислений часть t или наоборот, если m_1 проста для вычислений (тогда $t_{m-m_1} \approx t_m$).
3. Если оба эти условия имеют место, то для выполнения (1.3.3) достаточно, чтобы $\rho > \sigma_1/2\sigma$. Следовательно, нас устроило бы соотношение $\sigma_1^2 \ll \sigma^2$.

Если у нас нет возможности проследить за временными частями трудоемкостей (это не всегда возможно в теоретических — даже таких простых — рассуждениях), то вместо уменьшения трудоемкости говорят о уменьшении дисперсии. В данном случае $D\xi_1 < D\xi$ тогда и только тогда, когда $\rho > \sigma_1/2\sigma$. Тем самым мы пришли к предыдущему анализу с дополнительным предположением $t_{m-m_1} = t_m$.

Для оценки (1.3.2) в случае работы с дисперсиями можно провести более грубые, но зато более наглядные соображения. Действительно, тогда

$$D\xi_1 = \int_D \frac{(f - f_1)^2}{p^2} dP - (J - J_1)^2 \leq \int_D \frac{(f - f_1)^2}{p^2} dP = \int_D \frac{(f - f_1)^2}{p} d\mu,$$

и дисперсия $D\xi_1$ будет небольшой, если функция $f_1/\sqrt{p}$ близка к $f/\sqrt{p}$.⁵²

Пример 2. Приведем пример выделения главной части интеграла для простейшего интеграла $J = \int_0^1 e^x dx$.⁵³

В рамках общей теории это означает, что $D = [0, 1]$, $\mathcal{A} = \mathcal{B}_{[0,1]}$ и $\nu(A) = \int_A e^x dx$ для любого $A \in \mathcal{B}_{[0,1]}$. В качестве η возьмем случайную величину, равномерно распределенную на отрезке $[0, 1]$.

Тогда, конечно, все общие условия для вычисления интеграла J выполнены, $m(x) = d\nu/dP_\eta(x) = e^x$ и $\sigma^2 = Dm(\eta) = \int_0^1 e^{2x} dx - J^2 = (e^2 - 1)/2 - (e - 1)^2 \approx 0.2420$.

Далее, в качестве заряда ν_1 выберем заряд $\nu_1(A) = \int_A (1 + x) dx$ (конечно, это соответствует грубой аппроксимации $e^x \approx 1 + x$ при $x \in [0, 1]$). Тогда $m_1(x) = 1 + x$ и $(m - m_1)(\eta) = e^\eta - \eta - 1$ с дисперсией

$$D(m - m_1)(\eta) = D(e^\eta - \eta) = \int_0^1 (e^x - x)^2 dx - (e - 1 - 0.5)^2 \approx 0.0437.$$

Поскольку здесь $t_m \approx t_{m-m_1}$ (основное время уходит на вычисление экспоненты), то выигрыш в трудоемкости примерно равен $0.2420/0.0437 \approx 5.5$.

1.3.2 Интегрирование по части области

Будем теперь считать, что аналитическому вычислению поддается число $J_1 = \nu(D_1)$, где $D_1 \subset \mathcal{A}$. Тем самым остается оценить величину $J - J_1 = \nu(D')$, где $D' = D \setminus D_1$. Вопрос состоит в том, как это сделать таким образом, чтобы трудоемкость новой оценки была меньше, чем основной $\xi = m(\eta)$. Посмотрим, какие для этого существуют варианты.

Первый способ: главная части интеграла. Прежде всего, если ввести заряд $\nu_1(A) = \nu(A \cap D_1)$ для любого $A \in \mathcal{A}$, то, как нетрудно видеть,⁵⁴ окажется, что

$$m_1(x) = \frac{d\nu_1}{dP}(x) = \begin{cases} m(x) & \text{при } x \in D_1, \\ 0 & \text{при } x \in D'. \end{cases}$$

Поэтому мы можем применять все построения предыдущего раздела, то есть оценку (1.3.1). В данной ситуации она выглядит как

$$\xi_1 = J_1 + \begin{cases} 0 & \text{при } \eta \in D_1, \\ m(\eta) & \text{при } \eta \in D', \end{cases}$$

⁵²Конечно, нужно еще учитывать, что интеграл берется по мере μ .

⁵³Пример заимствован из книги [5].

⁵⁴Действительно?

причем

$$\sigma_1^2 = D\xi_1 = \int_{D'} m^2 d\mathcal{P} - \left(\int_{D'} m d\mathcal{P} \right)^2.$$

Обсудим условия, при которых будет выполняться неравенство $\sigma_1^2 < \sigma^2$.⁵⁵ Поскольку

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \int_D m^2 d\mathcal{P} - \left(\int_D m d\mathcal{P} \right)^2 = \int_{D_1} m^2 d\mathcal{P} + \int_{D'} m^2 d\mathcal{P} - \left(\int_{D_1} m d\mathcal{P} + \int_{D'} m d\mathcal{P} \right)^2 = \\ &= \int_{D'} m^2 d\mathcal{P} - \left(\int_{D'} m d\mathcal{P} \right)^2 + \int_{D_1} m^2 d\mathcal{P} - \left(\int_{D_1} m d\mathcal{P} \right)^2 - 2 \int_{D_1} m d\mathcal{P} \int_{D'} m d\mathcal{P} = \\ &= \sigma_1^2 + \Theta^2 - 2J_1(J - J_1), \end{aligned}$$

а $\Theta^2 \geq 0$,⁵⁶ то неравенство $J_1(J - J_1) \leq 0$ является достаточным для того, чтобы дисперсия новой оценки была не больше дисперсии старой. Если же $J_1(J - J_1) > 0$, то такой же эффект будет иметь место при условии, что функция $|m|$ сильно меняется в области D_1 , а вероятность $P(\eta \in D_1)$ достаточно большая.

Второй способ: моделирование сужения $\mathcal{P}$ на D_1 . Будем теперь строить новую несмещенную оценку J по-другому. Обозначим $p = \mathcal{P}(D')$ и будем считать, что $0 < p < 1$. Рассмотрим последовательность случайных величин $\eta_1, \dots, \eta_n, \dots$ такую, что эти величины независимы и каждая из них имеет распределение $\mathcal{P}$. Пусть $\tau = \min\{n \geq 1 : \eta_n \in D'\}$. Тогда, как известно, $P(\tau = n) = (1-p)^n p$ при $n \geq 1$ и η_τ имеет распределение $\mathcal{P}/p$, сосредоточенное в D' .⁵⁷

Предложение 4. Положим $\xi_1 = J_1 + pm(\eta_\tau)$. Тогда $E\xi_1 = J$ и

$$D\xi_1 = p^2 D\xi_\tau \leq p D\xi. \quad (1.3.4)$$

Доказательство. Несмещенность оценки ξ_1 очевидна.⁵⁸ Докажем неравенство (1.3.4). Действительно,

$$\begin{aligned} p D\xi - p^2 D\xi_\tau &= p \int_D m^2 d\mathcal{P} - p \left(\int_D m d\mathcal{P} \right)^2 - p^2 \int_{D'} m^2 d(\mathcal{P}/p) + p^2 \left(\int_{D'} m d(\mathcal{P}/p) \right)^2 = \\ &= p \int_D m^2 d\mathcal{P} - pJ^2 + p^2 \int_{D'} m^2 d(\mathcal{P}/p) + (J - J_1)^2. \end{aligned}$$

Далее,

$$p \int_D m^2 d\mathcal{P} - p^2 \int_{D'} m^2 d(\mathcal{P}/p) = p \int_{D_1} m^2 d\mathcal{P} = p(1-p) \int_{D_1} m^2 d(\mathcal{P}/(1-p))$$

и поэтому, обозначив

$$\Delta^2 = \int_{D_1} m^2 d(\mathcal{P}/(1-p)) - \left(\int_{D_1} m d(\mathcal{P}/(1-p)) \right)^2$$

и заметив, что $\Delta^2 \geq 0$,⁵⁹ получим, что

$$\begin{aligned} p D\xi - p^2 D\xi_\tau &= p(1-p)\Delta^2 + \frac{p}{1-p} J_1^2 - pJ^2 + (J - J_1)^2 = p(1-p)\Delta^2 + (1-p)J^2 - 2JJ_1 + \frac{1}{1-p} J_1^2 = \\ &= p(1-p)\Delta^2 + \left(\sqrt{1-p}J - J_1/\sqrt{1-p} \right)^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Утверждение доказано. □

⁵⁵То есть будем считать, что $t_{m-m_1} \approx t_m$.

⁵⁶Почему?

⁵⁷А почему?

⁵⁸Правда?

⁵⁹Почему?

Займемся теперь сравнением трудоемкости оценки ξ_1 с трудоемкостью стандартной оценки ξ . У последней, как обычно, трудоемкость определяется как $(t_\eta + t_m)\sigma^2$, где $\sigma^2 = D\xi$.

Для получения новой оценки нам нужно τ раз промоделировать случайные величины η_i (и каждый раз проверить, попадают ли они в область D_1) и, кроме этого, сосчитать функцию m в точке η_τ , которая лежит в D_1 . Поскольку $E\tau = 1/p$, то трудоемкость новой оценки имеет вид

$$\left(\frac{1}{p}(t_\eta + t_D) + t_{m_\tau}\right) D\xi_1 \leq \left(\frac{1}{p}(t_\eta + t_D) + t_{m_\tau}\right) p\sigma^2 = ((t_\eta + t_D) + pt_{m_\tau})\sigma^2,$$

где t_D — это среднее время проверки, попала ли случайная величина η в область D_1 , а t_{m_τ} — среднее время вычисления функции m в точке η_τ , принадлежащей D_1 .

Таким образом, новая оценка оказывается заведомо⁶⁰ лучше старой, если $t_D + pt_{m_\tau} \leq t_m$, то есть при условии

$$t_D \leq t_m - pt_{m_\tau}.$$

Это условие, конечно, поддается качественной интерпретации. Прежде всего, область D_1 ⁶¹ должна быть простой, тогда величина t_D будет маленькой. Затем нам хочется, чтобы число p было поменьше. Поскольку $p = 1 - P(\eta \in D_1)$, то это означает, что множество D_1 должно быть «большим». Наконец, было бы лучше, чтобы сужение функции m на множество D_1 было проще для вычислений, чем вся функция m целиком.

1.3.3 Симметризация оценок

Рассмотрим отображение $T : (D, \mathcal{A}) \mapsto (D, \mathcal{A})$ и предположим, что распределение $\mathcal{P}$ случайной величины η инвариантно относительно отображения T . Это означает, что для любого $A \in \mathcal{A}$

$$\mathcal{P}(T^{-1}A) = \mathcal{P}(x : Tx \in A) = \mathcal{P}(A).$$

Иначе говоря, пусть $P(T\eta \in A) = P(\eta \in A)$.

Возьмем теперь некоторое целое $N \geq 1$ и введем случайную величину

$$\xi^{(N)} = \frac{m(\eta) + m(T\eta) \dots + m(T^{N-1}\eta)}{N}. \quad (1.3.5)$$

Предложение 5. Случайная величина $\xi^{(N)}$ является несмещенной оценкой J , причем $D\xi^{(N)} \leq Dm(\eta)$.

Доказательство. Так как $\mathcal{L}(T\eta) = \mathcal{L}(\eta)$, то $\mathcal{L}(T^k\eta) = \mathcal{L}(\eta)$ для любого $k \geq 1$ и поэтому $Em(T^k\eta) = Em(\eta) = J$. Отсюда сразу же следует несмещенность оценки (1.3.5). Что касается дисперсии, то, поскольку

$$2Em(T^k\eta)m(T^\ell\eta) \leq Em^2(T^k\eta) + Em^2(T^\ell\eta) = 2Em^2(\eta),$$

то

$$E\left(\sum_{k=1}^N Em(T^k\eta)\right)^2 = \sum_{k=1}^N Em^2(T^k\eta) + 2\sum_{k<\ell} Em(T^k\eta)m(T^\ell\eta) \leq NEm^2(\eta) + 2C_n^2 Em^2(\eta) = N^2 Em^2(\eta),$$

откуда⁶² немедленно следует требуемое. □

⁶⁰То есть «с запасом», с учетом неравенства (1.3.4).

⁶¹Или D' , это зависит от того, как проводится проверка принадлежности $\eta \in D_1$.

⁶²учитывая несмещенность оценки $\xi^{(N)}$

Займемся теперь трудоемкостью оценки $\xi^{(N)}$. Чтобы ее получить, требуется один раз промоделировать случайную величину η , $N - 1$ раз осуществить преобразование T и N раз вычислить функцию m в точке, имеющей распределение $\mathcal{P}$. Поэтому трудоемкость оценки $\xi^{(N)}$ будет выглядеть как

$$C_N = (t_\eta + (N - 1)t_T + Nt_m)D\xi^{(N)},$$

где t_T означает (среднее) время, необходимое для вычисления преобразования T . Видно, что, хотя дисперсия новой оценки меньше, чем основной $\xi = m(\eta)$, время на ее получение будет больше.⁶³

Изучим эту ситуацию более подробно при $N = 2$. В этом случае⁶⁴

$$D\xi^{(2)} = \frac{1}{4} (2\sigma^2 + 2\text{Cov}(m(\eta), m(T\eta))) = \frac{\sigma^2 + \rho\sigma^2}{2},$$

где ρ — коэффициент корреляции между $m(\eta)$ и $m(T\eta)$. Поэтому трудоемкость новой оценки будет меньше, чем основной, если

$$(t_\eta + t_T + 2t_m)(1 + \rho)\sigma^2 < 2(t_\eta + t_m)\sigma^2,$$

что переписывается как

$$\rho < \frac{t_\eta - t_T}{t_\eta + t_T + 2t_m}. \quad (1.3.6)$$

Такое неравенство будет выполнено, если, например, $\rho < 0$, а $t_\eta > t_T$. Отрицательность коэффициента корреляции обеспечивается «противоположным» поведением функций m и $m \circ T$: если, скажем, значение $m(x)$ в какой-то точке $x \in D$ будет маленьким, то число $m(Tx)$ должно быть большим.⁶⁵

Неравенство же $t_\eta > t_T$ выглядит совершенно естественно, так как в обеих оценках случайная величина η моделируется только один раз, а вычисление преобразования T осуществляется только в новой (в общем случае — $N - 1$ раз). Поэтому цена этого преобразования должна быть меньше, чем цена моделирования.⁶⁶

Замечание 8. Приведенный анализ проясняет, почему мы ограничиваемся лишь случаем $N = 2$. Уже при $N = 3$ нам пришлось бы учитывать два коэффициента корреляции⁶⁷ — между $m(\eta)$ и $m(T\eta)$, а также между $m(\eta)$ и $m(T^2\eta)$. Формальное неравенство типа неравенства (1.3.6), конечно, все равно бы выписалось, но его интерпретация была бы гораздо более громоздкой. При $N > 3$ все усложняется еще больше.

Пример 3. Рассмотрим простейший пример (см. [5]). Пусть $D = [0, 1]$, $\mathcal{A}$ — борелевская σ -алгебра подмножеств D и $\mu = \text{mes}_1$ — мера Лебега, определенная на $\mathcal{A}$. Задача состоит в вычислении интеграла $J = \int_0^1 f(x)dx$, где $\int_0^1 f^2(x)dx < \infty$.

В качестве η мы берем случайную величину α , равномерно распределенную на отрезке $[0, 1]$. Тогда $m(\eta) = f(\alpha)$ и все нужные условия для применения нашей теории выполняются. Зададим преобразование T равенством $Tx = 1 - x$. Такое преобразование, очевидно, сохраняет меру Лебега на отрезке $[0, 1]$ и поэтому оценка $\xi^{(2)}$ будет выглядеть как

$$\xi^{(2)} = (f(\alpha) + f(1 - \alpha))/2.$$

⁶³Новая оценка совпадает со старой при $N = 1$.

⁶⁴Снова обозначаем $\sigma^2 = Dm(\eta)$

⁶⁵И наоборот — если $m(x)$ большое, то $m(Tx)$ маленькое. Конечно, имеется в виду, что все это с учетом знака.

⁶⁶Если $t_\eta > t_T$, то, для того, чтобы правая часть (1.3.6) была побольше, можно еще потребовать, чтобы число t_m было маленьким. Конечно, это тоже совершенно естественное требование.

⁶⁷Кстати, а почему именно два?

Поскольку преобразование $x \mapsto 1 - x$ «стоит» меньше, чем обращение к генератору псевдослучайных чисел для получения α , то правая часть неравенства (1.3.6) будет положительна. Для того, чтобы левая часть была отрицательна, достаточно потребовать, чтобы функция f была монотонной.

А теперь вопрос: если мы определим T как $Tx = \{2x\}$, то для каких функций f коэффициент корреляции ρ будет отрицательным?

1.3.4 Понижение порядка интегрирования

В этом разделе мы будем заниматься только уменьшением дисперсии.⁶⁸ В самом общем виде прием, называемый «понижение порядка интегрирования», выглядит следующим образом. Прежде всего, нам будет удобно писать $\mathcal{P}_\eta$ вместо $\mathcal{P}$.

Пусть у нас (кроме стандартной общей конструкции) есть еще отображение $\zeta : (\Omega, \mathcal{F}) \mapsto (G, \mathcal{G})$, где $(G, \mathcal{G})$ — некоторое измеримое пространство. Поскольку $Em^2(\eta) < \infty$, то, как известно, случайная величина $\xi_1 = E(m(\eta) | \zeta)$ имеет такое же математическое ожидание, что и исходная $\xi = m(\eta)$, но меньшую⁶⁹ дисперсию.

Если у условного распределения $P(\eta \in A | \zeta = t)$ существует регулярный вариант $Q(A; t)$,⁷⁰ то

$$s(t) \stackrel{\text{def}}{=} E(m(\eta) | \zeta = t) = \int_D m(x)Q(dx; t)$$

и

$$J = E(E(m(\eta) | \zeta)) = \int_G E(m(\eta) | \zeta = t) \mathcal{P}_\zeta(dt) = \int_G \left(\int_D m(x)Q(dx; t) \right) \mathcal{P}_\zeta(dt), \quad (1.3.7)$$

где $\mathcal{P}_\zeta$ — распределение случайной величины ζ . Тем самым

$$J = \int_G s(t) \mathcal{P}_\zeta(dt) \quad (1.3.8)$$

и поэтому, используя оценку $\xi_1 = s(\zeta)$, соответствующую «одномерному» интегралу (1.3.8), мы получаем меньшую дисперсию, чем у оценки $\xi = m(\eta)$, которая соответствует «двойному» интегралу в правой части (1.3.7).

Таким образом, чтобы построить оценку с меньшей дисперсией, чем у стандартной оценки $\xi = m(\eta)$, нам нужно промоделировать случайную величину ζ и сосчитать функцию s в точке ζ .⁷¹

Это — самая общая схема, перейдем к описанию наиболее употребительной ее реализации. Для этого предположим, что $D = D_1 \times D_2$ и $\mathcal{D} = \mathcal{A}_1 \times \mathcal{A}_2$, где $(D_1, \mathcal{A}_1)$ и $(D_2, \mathcal{A}_2)$ — некоторые измеримые пространства. Как обычно, нас будет интересовать величина конечного заряда ν , определенного на $(D, \mathcal{A})$.

Далее, пусть η_1 и η_2 — случайные величины с совместным распределением $\mathcal{P} = \mathcal{P}_{\eta_1, \eta_2}$, принимающие значения в D_1 и D_2 соответственно. Как всегда, предполагается существование производной Радона-Никодима

$$m(t, x) = \frac{d\nu}{d\mathcal{P}}(t, x),$$

удовлетворяющей условию $Em^2(\eta_1, \eta_2) < \infty$.

⁶⁸Дальше будет видно, почему.

⁶⁹формально — не бóльшую.

⁷⁰Это заведомо так, если (D, dist) — полное сепарабельное метрическое пространство, а $\mathcal{A}$ — соответствующая борелевская σ -алгебра.

⁷¹Отметим, что при независимости ζ и η все вырождается, так как тогда $s(t) \equiv J$, так что эти случайные величины должны быть зависимыми. А при $\zeta = \eta$ оказывается, что $\xi_1 = \xi$, что тоже не интересно. Так что выбор ζ не так уж произволен.

Обозначим теперь $Q(dx; t)$ регулярный вариант условного распределение η_2 при условии $\eta_1 = t$ ⁷² и положим

$$s(t) = \int_{D_2} m(t, x) Q(dx; t).$$

Тогда⁷³

$$J = \int_{D_1} \left(\int_{D_2} m(t, x) Q(dx; t) \right) \mathcal{P}_{\eta_1}(dt) = \int_{D_1} s(t) \mathcal{P}_{\eta_1}(dt)$$

и вместо стандартной оценки $\xi = m(\eta_1, \eta_2)$ мы можем рассматривать новую оценку $\xi_1 = s(\eta_1)$. Так как $s(\eta_1) = E(m(\eta_1, \eta_2) | \eta_1)$,⁷⁴ то $D\xi_1 \leq D\xi$.

Переведем теперь проведенные построения на языке интегралов. Будем считать, что

$$\nu(B) = \int_B f(t, x) \mu_1(dt) \mu_2(dx),$$

где $B \in \mathcal{A}_1 \times \mathcal{A}_2$, а μ_1 и μ_2 — некоторые меры, определенные на $\mathcal{A}_1$ и $\mathcal{A}_2$ соответственно. Далее, пусть совместное распределение $\mathcal{P}$ случайных величин η_1 и η_2 имеет плотность распределения $p(t, x)$ относительно $\mu_1 \otimes \mu_2$, причем существует производная Радона-Никодима⁷⁵

$$m(t, x) = \frac{d\nu}{d\mathcal{P}}(t, x) = \begin{cases} \frac{f(t, x)}{p(t, x)} & \text{при } p(t, x) \neq 0, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Как всегда, предполагается, что $Em^2(\eta_1, \eta_2) < \infty$.

При этих условиях распределение $\mathcal{P}_{\eta_1}$ имеет плотность $p_1(t) = \int_{D_2} p(t, x) \mu_2(dx)$ относительно меры μ_1 ,⁷⁶ а условное распределение $Q(dx; t)$ имеет плотность⁷⁷

$$q(x | t) = \begin{cases} \frac{p(t, x)}{p_1(t)} & \text{при } p_1(t) \neq 0, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

относительно μ_2 . Поэтому при $p_1(t) \neq 0$ ⁷⁸

$$\begin{aligned} s(t) &= \int_{D_2} m(t, x) Q(dx; t) = \int_{D_2} \frac{m(t, x) p(t, x)}{p_1(t)} \mu_2(dx) = \frac{1}{p_1(t)} \int_{D_2} \mathbb{I}_{\{p(t, x) \neq 0\}}(x, t) m(t, x) p(t, x) \mu_2(dx) = \\ &= \frac{1}{p_1(t)} \int_{D_2} \mathbb{I}_{\{p(t, x) \neq 0\}}(x, t) \frac{f(t, x)}{p(t, x)} p(t, x) \mu_2(dx) = \frac{1}{p_1(t)} \int_{D_2} \mathbb{I}_{\{p(t, x) \neq 0\}}(x, t) f(t, x) \mu_2(dx) = \\ &= \frac{1}{p_1(t)} \int_{D_2} \mathbb{I}_{\{p(t, x) \neq 0\}}(x, t) f(t, x) \mu_2(dx) + \frac{1}{p_1(t)} \int_{D_2} \mathbb{I}_{\{p(t, x) = 0\}}(x, t) f(t, x) \mu_2(dx) = \int_{D_2} \frac{f(t, x)}{p_1(t)} \mu_2(dx). \end{aligned}$$

⁷²Таким образом, мы выбираем $\zeta = \eta_1$ и немного отходим от общей схемы, описанной выше — формально мы должны были бы рассматривать условное распределение $\mathcal{L}(\eta_1, \eta_2)$ при условии $\eta_1 = t$. Нетрудно видеть, что эти варианты на самом деле приводят к одному и тому же.

⁷³На какие свойства условных математических ожиданий здесь нужно сослаться?

⁷⁴Действительно?

⁷⁵см. Предложение 2 раздела 1.1.

⁷⁶Почему именно такую?

⁷⁷Снова — почему?

⁷⁸ $s(t) = 0$ при $p_1(t) = 0$. Кроме того, здесь предполагается, что $p(t, x) = 0$ только при тех (t, x) , для которых $f(t, x) = 0$.

Таким образом, вместо вычисления «двумерного» интеграла

$$J = \int_{D_1 \times D_2} f(t, x) \mu_1(dt) \mu_2(dx) = \int_{D_1 \times D_2} m(t, x) \mathcal{P}(dtdx)$$

с помощью оценки $m(\eta_1, \eta_2)$, мы можем⁷⁹ аналитически вычислить функцию

$$s(t) = \int_{D_2} \frac{f(t, x)}{p_1(t)} \mu_2(dx) \quad (1.3.9)$$

и, используя представление J в виде «одномерного» интеграла

$$J = \int_{D_1} s(t) \mathcal{P}_{\eta_1}(dt),$$

получить оценку $\xi_1 = s(\eta_1)$ с меньшей дисперсией, чем у оценки $m(\eta_1, \eta_2)$. Конечно, сложность вычисления функции (1.3.9) в точке η_1 в общем виде предсказать трудно.⁸⁰ Поэтому анализ качества новой оценки приходится останавливать на уровне дисперсий.

1.3.5 Метод расщепления

Как и в предыдущем разделе, предположим, что $D = D_1 \times D_2$ и $\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 \times \mathcal{A}_2$, где $(D_1, \mathcal{A}_1)$ и $(D_2, \mathcal{A}_2)$ — некоторые измеримые пространства. Кроме того, пусть ν конечный заряд, определенный на $(D, \mathcal{A})$.

Рассмотрим η_1 и η_2 — случайные величины с совместным распределением $\mathcal{P} = \mathcal{P}_{\eta_1, \eta_2}$, принимающие значения в D_1 и D_2 соответственно. Как всегда, предполагается существование производной Радона-Никодима

$$m(t, x) = \frac{d\nu}{d\mathcal{P}}(t, x),$$

удовлетворяющая условию $Em^2(\eta_1, \eta_2) < \infty$.

Снова будем считать, что существует регулярный вариант $Q(dx; t)$ условного распределения η_2 при условии $\eta_1 = t$, при этом предполагается, что моделирование вектора (η_1, η_2) происходит следующим образом: сначала моделируется η_1 (время на ее моделирование обозначается T_1), а затем, если получилась реализация t случайной величины η_1 , то происходит моделирование распределения $Q(dx; t)$, в результате чего и получается случайная величина η_2 .⁸¹

Если обозначить $T_2(t)$ (среднее) время моделирования $Q(dx; t)$, то время, потраченное на моделирование η_2 будет выражаться как $T_2 = ET_2(\eta_1)$ и тем самым общее время моделирования пары (η_1, η_2) выражается как $T_1 + T_2$, а сложность оценивания J с помощью оценки $m(\eta_1, \eta_2)$ — как $(T_1 + T_2 + t_m)Dm(\eta_1, \eta_2)$.

Построим теперь новую оценку. А именно, зафиксируем некоторое $N \geq 1$ и рассмотрим, кроме случайной величины η_1 , случайные величины $\eta_2^{(1)}, \dots, \eta_2^{(N)}$, которые являются условно независимыми при условии η_1 , причем условное распределение $\mathcal{L}(\eta_2^{(k)} | \eta_1 = t)$ есть $Q(\cdot; t)$ при любом k .⁸²

Такая конструкция выглядит очень просто на языке моделирования. Сначала моделируется случайная величина η_1 , полученную ее реализацию обозначим t . А после этого N раз (независимо) моделируется распределение $Q(\cdot; t)$.

⁷⁹Если получится.

⁸⁰Кроме того, есть вопросы и по поводу моделирования случайной величины η_1 . Моделируем ли мы ее как первую координату вектора $\eta = (\eta_1, \eta_2)$ (тогда сложность моделирования η_1 совпадает со сложностью моделирования η) или как-нибудь иначе?

⁸¹А почему эта процедура корректна?

⁸²Отсюда сразу же следует, что $\mathcal{L}(\eta_2^{(k)}) = \mathcal{L}(\eta_2)$. Почему?

В результате мы получим новую оценку

$$\xi^{(N)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N m(\eta_1, \eta_2^{(k)}). \quad (1.3.10)$$

Поскольку совместное распределение $\eta_1, \eta_2^{(k)}$ равно $\mathcal{P}$ для любого k , то $E\xi^{(N)} = J$. Что касается дисперсии этой оценки, то здесь можно сослаться на [6, Предложение 2.8 раздела 2.6]. Согласно этому предложению, если ввести обозначения⁸³

$$ED = E(D(m(\eta_1, \eta_2)) | \eta_1) \quad \text{и} \quad DE = D(E(m(\eta_1, \eta_2)) | \eta_1),$$

то

$$D\xi^{(N)} = \frac{ED}{N} + DE.$$

Следовательно, трудоемкость оценки (1.3.10) будет выглядеть как

$$C_N = (T_1 + N(T_2 + t_m)) \left(\frac{ED}{N} + DE \right). \quad (1.3.11)$$

Таким образом, дисперсия оценки (1.3.10) убывает с ростом N , в то время как время на ее получение растет. Нетрудно прикинуть, какому значению N соответствует минимальное значение C_N .

Действительно, рассмотрим функцию $G(z) = (A + Bz)(C/z + D)$, где $A, B, C, D > 0$ и $z > 0$. Поскольку $G'(z) = BD - AC/z^2$, то минимум функции G достигается при $z_{opt} = \sqrt{AC/BD}$ и при этом

$$\min_z G(z) = G(z_{opt}) = \left(A + B\sqrt{AC/BD} \right) \left(C\sqrt{BD/AC} + D \right) = AD \left(1 + \sqrt{\frac{BC}{AD}} \right)^2.$$

Возвращаясь с сложности (1.3.11) и обозначая для краткости $T = T_2 + t_m$ мы видим, что оптимальное N будет иметь вид

$$N_{opt} \approx \sqrt{\frac{T_1 ED}{T DE}}, \quad (1.3.12)$$

а сама минимальная трудоемкость будет выглядеть как

$$C_{opt} \approx T_1 DE \left(1 + \sqrt{\frac{T ED}{T_1 DE}} \right)^2. \quad (1.3.13)$$

Формула (1.3.12) в общем случае, конечно, не дает никакого представления о хорошем выборе числа N для оценки (1.3.10), так как параметры T, T_1, ED и DE заранее не известны.⁸⁴

Приведем пример, показывающий, в каких ситуациях может быть применен описанный прием (см. [8]).

Этот пример восходит к задаче защиты ядерных реакторов, где ядерное топливо должно быть хорошо изолировано от окружающей среды. Характеристикой такой изоляции служит вероятность p вылета частиц (например, нейтронов или гамма-квантов) за пределы защитных средств реактора. Эта вероятность, конечно, должна быть очень маленькой, а конфигурация защиты может быть достаточно сложной и неоднородной. При проектировании реактора требуется рассчитать вероятность p . Часто это делается на компьютере методом Монте-Карло.

В приведенном примере отрезок AB имитирует однородный слой защиты реактора, причем для простоты предполагается, что частицы вылетают только в одном (горизонтальном) направлении.

⁸³Напомним, что условная дисперсия $D(\beta_1 | \beta_2)$ определяется как $D(\beta_1 | \beta_2) = E(\beta_1^2 | \beta_2) - (E(\beta_1 | \beta_2))^2$.

⁸⁴Хотя можно попробовать оценить эти параметры при предварительном моделировании.

Пример 4. Пусть некоторая частица летит по прямой от точки A до точки B . В каждой точке отрезка AB у частицы есть шанс «поглотиться», а общая вероятность долететь от A до B равна p , где p — маленькое число. На середине отрезка AB находится точка C , причем считается, что вероятность долететь от A до C равна $\sqrt{p}$ (и от C до B — тоже $\sqrt{p}$).

Мы не знаем число p , и моделируем пролет частицы от A до B , контролируя ее появление в точке C . Обозначим

$$\eta_1 = \begin{cases} 1 & \text{если частица долетела от } A \text{ до } C \\ 0 & \text{иначе} \end{cases}$$

и

$$\eta_2 = \begin{cases} 1 & \text{если } \eta_1 = 1 \text{ и частица долетела от } C \text{ до } B, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases} \quad (1.3.14)$$

Таким образом, наша основная оценка имеет вид

$$\xi = \eta_1 \eta_2 = \begin{cases} 1 & \text{если частица долетела от } A \text{ до } C, \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1.3.15)$$

ее математическое ожидание равно $J = p$ и дисперсия равна $D\xi = p(1-p) \approx p$ при маленьких p . Поскольку дисперсия (опять же при маленьких p) основной оценки (1.3.15) очень мала, то, казалось бы, она должна обладать хорошими свойствами. Это, однако, совсем не так.⁸⁵

Согласно формуле (1.2.9) раздела 1.2.2, для того, чтобы достичь точности ε с надежностью $1 - \gamma$, нужно получить примерно

$$n = \frac{p(1-p)x_\gamma^2}{\varepsilon^2} \approx \frac{px_\gamma^2}{\varepsilon^2} \quad (1.3.16)$$

реализаций случайной величины (1.3.15). Будем считать, что величина x_γ принимает стандартные значения (то есть $x_\gamma \approx 2$ или 3). А вот какие естественные значения принимает точность ε ?

Пусть $p \approx 10^{-k}$. Тогда заданная точность вычислений должна быть такой, чтобы в результате получить хотя бы один верный десятичный знак вероятности p , то есть максимальное значение точности должно быть $\varepsilon \approx 5 \cdot 10^{-k-1}$. Тогда (при $x_\gamma = 3$) вместо (1.3.16) мы получим

$$n \approx \frac{9 \cdot 10^{-k}}{25 \cdot 10^{-2k-2}} = 36 \cdot 10^k,$$

то есть при $k = 4$ нам понадобится минимум 360 тысяч моделирований, а при $k = 6$ — порядка 36 миллионов.⁸⁶

Идея применения метода расщепления в этой ситуации выглядит следующим образом. Частица, долетевшая до точки C «расщепляется» на N аналогичных частиц, продолжающих свой движение дальше, но каждой из них приписывается вес $1/N$.⁸⁷ С формальной точки зрения мы вместо одной случайной величины (1.3.14) рассматриваем N ее копий $\eta_2^{(k)}$, и строим оценку

$$\xi^{(N)} = \eta_1 \frac{\eta_2^{(1)} + \dots + \eta_2^{(N)}}{N}, \quad (1.3.17)$$

⁸⁵Это легко понять, если представить себе моделирование испытаний Бернулли с очень маленькой величиной успеха p . Если, скажем, $p = 10^{-4}$, то на десять тысяч испытаний в среднем придется лишь один успех. Понятно, что нужно сделать очень много испытаний для того, чтобы оценить p с разумной точностью.

⁸⁶При реальных расчетах $p \approx 10^{-4}$ может оказаться довольно большим числом. Вообще задача моделирования для оценивания маленьких вероятностей — это особая наука, про нее можно прочитать, например, в сборнике [7].

⁸⁷Эта процедура и дала названию описываемого метода — «метод расщепления».

где случайные величины $\eta_2^{(k)}$ условно независимы при условии η_1 и имеют то же самое условное распределение (опять же при условии η_1), что и случайная величина η_2 . Конечно, оценка (1.3.17) является частным случаем оценки (1.3.10) с $m(\eta_1, \eta_2) = \eta_1 \eta_2$.

Можно попытаться объяснить «на пальцах», почему оценка (1.3.17) имеет меньшую дисперсию, чем стандартная $\xi = \eta_1 \eta_2$. Оценка ξ принимает только два значения — 0 и 1, причем, так как ее среднее мало, то разброс оценки около него относительно велик.⁸⁸ Оценка же $\xi^{(N)}$ принимает всевозможные значения вида K/N , где $0 \leq K \leq N$, то есть она является «размазанной» в том же диапазоне $[0, 1]$ (и имеет такое же среднее).

Сосчитаем теперь характеристики оценки (1.3.17), входящие в выражение для ее трудоемкости. Прежде всего, по построению $P(\eta_1 = 1) = \sqrt{p}$. Затем,

$$P(\eta_2 = 1 | \eta_1) = \begin{cases} \sqrt{p} & \text{при } \eta_1 = 1, \\ 0 & \text{при } \eta_1 = 0 \end{cases} \quad \text{и} \quad P(\eta_2 = 0 | \xi_1) = \begin{cases} 1 - \sqrt{p} & \text{при } \eta_1 = 1, \\ 1 & \text{при } \eta_1 = 0. \end{cases}$$

Поэтому

$$E(\eta_1 \eta_2 | \eta_1) = \eta_1 E(\eta_2 | \eta_1) = \begin{cases} \sqrt{p} & \text{при } \eta_1 = 1 \\ 0 & \text{при } \eta_1 = 0 \end{cases} = \sqrt{p} \begin{cases} 1 & \text{при } \eta_1 = 1, \\ 0 & \text{при } \eta_1 = 0. \end{cases}$$

Следовательно,

$$DE = D(E(\eta_1 \eta_2 | \eta_1)) = p(\sqrt{p} - p) = p^{3/2} - p^2.$$

Далее, поскольку $\eta_1^2 \eta_2^2 = \eta_1 \eta_2$, то

$$\begin{aligned} D(\eta_1 \eta_2 | \eta_1) &= E(\eta_1^2 \eta_2^2 | \eta_1) - (E(\eta_1 \eta_2 | \eta_1))^2 = E(\eta_1 \eta_2 | \eta_1) - (E(\eta_1 \eta_2 | \eta_1))^2 = \\ &= (\sqrt{p} - p) \begin{cases} 1 & \text{при } \eta_1 = 1, \\ 0 & \text{при } \eta_1 = 0, \end{cases} \end{aligned}$$

и поэтому

$$ED = E(D(\eta_1 \eta_2 | \eta_1)) = p - p^{3/2}.$$

Тем самым дисперсия оценки (1.3.17) имеет вид

$$D\xi_N = \frac{p - p^{3/2}}{N} + p^{3/2} - p^2.$$

Займемся теперь временной частью трудоемкости (1.3.11) для оценки (1.3.17). Будем считать, что среднее время T_1 моделирования пролета частицы от A до C (с возможным поглощением) равно единице.⁸⁹ Тогда время $T_2(\eta_1)$ моделирования полета частицы от C до B при фиксированном значении η_1 будет равно⁹⁰

$$T_2(\eta_1) = \begin{cases} 1 & \text{при } \eta_1 = 1, \\ 0 & \text{при } \eta_1 = 0, \end{cases}$$

и поэтому $T_2 = ET_2(\eta_1) = \sqrt{p}$. Что же касается t_m (среднего времени вычисления функции m в точке (η_1, η_2)), то в этой задаче такой характеристикой можно пренебречь.

⁸⁸Так как $1 \gg p$.

⁸⁹В какой-то временной шкале.

⁹⁰Если частица долетела до C , то снова единица, если нет — то ничего моделировать не нужно.

Таким образом согласно формулам (1.3.12) и (1.3.13) в нашем случае

$$N_{opt} \approx \sqrt{\frac{T_1 \text{ ED}}{T_2 \text{ DE}}} = \sqrt{\frac{p - p^{3/2}}{\sqrt{p}(p^{3/2} - p^2)}} = 1/\sqrt{p}$$

и

$$C_{opt} \approx T_1 \text{ DE} \left(1 + \sqrt{\frac{T_2 \text{ ED}}{T_1 \text{ DE}}} \right)^2 = (p^{3/2} - p^2) \left(1 + \sqrt{\frac{\sqrt{p} (p - p^{3/2})}{p^{3/2} - p^2}} \right)^2 = 4(p^{3/2} - p^2) \approx 4p^{3/2},$$

в то время как для стандартной оценки с $N = 1$ трудоемкость равна, согласно формуле (1.3.11),

$$C_1 = (1 + \sqrt{p})(p - p^2) \approx p,$$

то есть при маленьких p использование оптимального расщепления дает выигрыш в трудоемкости (по сравнению со стандартной оценкой) примерно в $0.25/\sqrt{p}$ раз. Например, при $p = 10^{-4}$ частицу следует расщеплять на 100 частей, что приведет к выигрышу в 25 раз, а при $p = 10^{-6}$ нужно выбрать $N = 1000$ с выигрышем в 250 раз. С практической точки зрения, если мы имеем представление о величине p , мы получаем информацию о нужной нам величине N .

Замечание 9. 1. Можно показать, что расположение точки C на середине отрезка AB (так, что вероятность долететь от A до C и от C до B одинакова) является оптимальной в смысле значения минимальной трудоемкости C_{opt} .

2. Приведенный пример показывает суть применения метода расщепления. Дело в том, что часть отрезка AB , близкая к точке B , имеет особую ценность: если частица уже долетела до этой окрестности, то она с большой вероятностью достигнет точки B . Поэтому эту область нужно «прощупывать» более тщательно. Для этого и делается расщепление. Можно усилить его эффект, разбивая отрезок AB не на 2, а на m частей, и устраивая $m - 1$ расщеплений в узлах этого разбиения.

1.3.6 Расслоенная выборка

Рассмотрим разбиение множества D на попарно непересекающиеся подмножества $D_1, \dots, D_k$. Тогда интересующее нас значение заряда $J = \nu(D)$ можно представить в виде

$$\nu(D) = \int_D m d\mathcal{P} = \sum_{i=1}^k \int_{D_i} m d\mathcal{P} = \sum_{i=1}^k p_i \int_{D_i} m d\mathcal{Q}_i,$$

где $p_i = \mathcal{P}(\eta \in D_i)$ и распределение $\mathcal{Q}$, сосредоточенное в D_i имеет вид $\mathcal{Q}_i = \mathcal{P}/p_i$.

В качестве основной оценки⁹¹ мы будем рассматривать оценку

$$\hat{J}_n = \frac{m(\eta_1) + \dots + m(\eta_n)}{n}, \quad (1.3.18)$$

где, как обычно, считается, что случайные величины η_j независимы и имеют распределение $\mathcal{P}$ каждая.

Приведем теперь альтернативную оценку.⁹² Она строится таким образом. Прежде всего, число n представляется в виде суммы k целых положительных чисел: $n = n_1 + \dots + n_k$. Далее, вместо того,

⁹¹В отличие от всех предыдущих методов

⁹²Обычно говорят, что она получена методом расщепления, в англоязычной литературе этот метод известен как «stratification method».

чтобы моделировать n раз случайные величины η_j , мы при $1 \leq i \leq k$ моделируем n_i независимых случайных величин η_{ij} ($1 \leq j \leq n_i$), каждая из которых имеет распределение Q_i и полагаем⁹³

$$\hat{J}_n^* = \sum_{i=1}^k p_i \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} m(\eta_{ij}). \quad (1.3.19)$$

Докажем сначала, что оценка (1.3.19) будет несмещенной для J . Действительно,

$$E\hat{J}_n^* = \sum_{i=1}^k p_i \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} Em(\eta_{ij}) = \sum_{i=1}^k p_i \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \int_{D_i} m dP / p_i = \sum_{i=1}^k \int_{D_i} m dP = J.$$

Выясним теперь, при каких условиях дисперсия оценки (1.3.19) будет меньше, чем у основной оценки (1.3.18). Нам будет удобно сравнивать $nD\hat{J}_n^* = Dm(\eta)$ с $nD\hat{J}_n^*$.

Обозначив $q_i = n_i/n$, получим, что

$$\begin{aligned} nD\hat{J}_n^* &= n \sum_{i=1}^k p_i \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} Dm(\eta_{ij}) = n \sum_{i=1}^k \frac{p_i^2}{n_i} \left(\int_{D_i} m^2 dP / p_i - \left(\int_{D_i} m dP / p_i \right)^2 \right) = \\ &= \sum_{i=1}^k \frac{p_i}{q_i} \int_{D_i} m^2 dP - \sum_{i=1}^k \frac{1}{q_i} \left(\int_{D_i} m dP \right)^2. \end{aligned}$$

Далее, по неравенству Коши

$$\begin{aligned} J^2 &= (Em(\eta))^2 = \left(\sum_{i=1}^k \int_{D_i} m dP \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^k \sqrt{q_i} \int_{D_i} m dP / \sqrt{q_i} \right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^k q_i \right) \sum_{i=1}^k \left(\int_{D_i} m dP / \sqrt{q_i} \right)^2 = \\ &= \sum_{i=1}^k \frac{1}{q_i} \left(\int_{D_i} m dP \right)^2, \end{aligned}$$

и поэтому для выполнения неравенства $D\hat{J}_n^* \leq D\hat{J}_n$ достаточно выполнения

$$Em^2(\eta) = \int_D m^2 dP = \sum_{i=1}^k \int_{D_i} m^2 dP \leq \sum_{i=1}^k \frac{p_i}{q_i} \int_{D_i} m^2 dP,$$

что эквивалентно

$$\sum_{i=1}^k \left(\frac{p_i}{q_i} - 1 \right) \int_{D_i} m^2 dP \leq 0. \quad (1.3.20)$$

Прежде всего заметим, что при $p_i = q_i$ левая часть (1.3.20) превращается в ноль. Поэтому выбор $n_i = p_i n$ (число точек, «бросаемых» в D_i пропорционально вероятности попадания туда случайной величины η)⁹⁴ уже обеспечивает неравенство $D\hat{J}_n^* \leq D\hat{J}_n$.

Но можно посмотреть на это дело в более общем виде. Пусть разбиение D на D_i (и, следовательно, вероятности p_i) зафиксировано. Поскольку (кроме уже разобранных случая $p_i = q_i$) некоторые слагаемые в левой части (1.3.20) должны быть отрицательны, а другие положительны,⁹⁵ то можно на качественном уровне понять, какие n_i нужно выбирать в оценке $\hat{J}_n^*$.

⁹³Тем самым предполагается, что вероятности p_i нам известны.

⁹⁴Поскольку неравенство (1.3.20) является достаточным «с запасом», то с практической точки зрения нам достаточно выполнения $n_i \approx p_i n$.

⁹⁵Если, например, $p_{i_0} < q_{i_0}$ и $p_i \leq q_i$ при $i \neq i_0$, то $\sum_i p_i < \sum_i q_i = 1$.

А именно, для тех D_i , для которых интегралы $\int_{D_i} m^2 d\mathcal{P}$ большие, нужно выбирать большие n_i , чтобы дробь $q_i = n_i/n$ была больше p_i . Для тех же D_i , где эти интегралы маленькие, можно брать относительно небольшие n_i .

Ситуация с трудоемкостью оценки $\hat{J}_n^*$ более хитрая. Все зависит от того, каким образом будут моделироваться случайные величины с распределением $\mathcal{Q}_i$. Конечно, моделировать эти распределения методом отбора из $\mathcal{P}$ неприемлемо.⁹⁶ В некоторых случаях естественно считать время t_i , потраченное на моделирование $\mathcal{Q}_i$, таким же как время на моделирование $\mathcal{P}$.⁹⁷ Если при этом функция m примерно одинакова (в смысле затрат на ее вычисление о точке) во всем D , то тогда сравнение трудоемкостей оценок $\hat{J}_n^*$ и $\hat{J}$ сводится в сравнению дисперсий.⁹⁸

1.3.7 Метод существенной выборки

В предыдущих разделах мы разбирались в том, как (опираясь на «основную» оценку $m(\eta)$) построить альтернативную оценку величины J имеющую меньшую дисперсию, чем $\sigma^2 = \text{D}m(\eta)$.⁹⁹

При этом все наши действия сводились либо к некоторым предварительным детерминированным операциям (вычисление главной части, интегрирование по части области, понижение порядка интегрирования, использование преобразования, сохраняющего меру), либо к операциям, так или иначе уменьшающим случайность (расслоенная выборка, где случайное число точек, попавших в D_i , заменяется детерминированным, и и расщепление, где случайность уменьшается за счет специального «прощупывания» важной для нас области).

Теперь мы обсудим вопрос о выборе η для основной оценки: при каком распределении $\mathcal{P} = \mathcal{L}(\eta)$ дисперсия этой оценки будет минимальной. Ответ на этот вопрос дает следующее простое предложение.

Предложение 6. 1. Для любого распределения $\mathcal{P}$, обеспечивающего существование производной Радона-Никодима $m = d\nu/d\mathcal{P}$ с $\int_D m^2 d\mathcal{P} < \infty$, выполнено неравенство

$$\text{D}m(\eta) \geq \bar{J}^2 - J^2, \quad (1.3.21)$$

где $\mathcal{L}(\eta) = \mathcal{P}$ и $\bar{J} = |\nu|(D)$.

2. Равенство в неравенстве (1.3.21) достигается тогда и только тогда, когда $\mathcal{P} = |\nu|/\bar{J}$.

Доказательство. 1. Действительно, так как $|m| = d|\nu|/d\mathcal{P}$, то

$$\int_D m^2 d\mathcal{P} = \int_D |m|^2 d\mathcal{P} = \int_D \left(\frac{d|\nu|}{d\mathcal{P}} \right)^2 d\mathcal{P} \geq \left(\int_D \frac{d|\nu|}{d\mathcal{P}} d\mathcal{P} \right)^2 = \bar{J}^2,$$

откуда и следует (1.3.21).

2. Для доказательства второго пункта заметим, что неравенство (1.3.21) превращается в равенство тогда и только тогда,¹⁰⁰ когда $\mathcal{P}$ -почти всюду $d|\nu|/d\mathcal{P} = \bar{J}$. Иначе говоря, $\text{D}m(\eta) = \bar{J}^2 - J^2$ только при условии, что $|\nu|(A) = \bar{J}\mathcal{P}(A)$ для любого $A \in \mathcal{D}$. Доказательство закончено. $\square$

Замечание 10. 1. Посмотрим, как этот результат выглядит для «настоящего» интеграла $J = \int_D f d\mu$. Первый пункт Предложения 6 утверждает, что как бы мы не выбирали распределение $\mathcal{P}$

⁹⁶А почему?

⁹⁷Например, пусть D — некоторый d -мерный прямоугольный параллелепипед, разбитый на аналогичные параллелепипеды D_i . Если при этом $\mathcal{P}$ — равномерное распределение в D , то $\mathcal{Q}_i$ является равномерным распределением в D_i и моделируются все они одинаково просто. Но это — скорее исключение, чем правило.

⁹⁸Проверьте!

⁹⁹А если удастся, и меньшую трудоемкость.

¹⁰⁰А почему?

с $\nu \prec \mathcal{P}$, дисперсия получившейся оценки не может быть меньше величины

$$\bar{J}^2 - J^2 = \left(\int_D |f| d\mu \right)^2 - \left(\int_D f d\mu \right)^2.$$

Согласно второму пункту доставляющее минимальную дисперсию распределение $\mathcal{P}_{opt}$ имеет вид

$$\mathcal{P}_{opt}(A) = \frac{1}{\bar{J}} \int_A |f| d\mu, \quad (1.3.22)$$

то есть имеет плотность $p_{opt} = |f|/\bar{J}$ относительно меры μ .

2. Разберемся теперь, какой вид будет иметь при этом функция m . Согласно Замечанию 2 раздела 1.1,

$$\frac{d\nu}{d|\nu|}(x) = \begin{cases} +1 & \text{при } x \in G, \\ -1 & \text{при } x \notin G, \end{cases}$$

где (см. Теорему 1 раздела 1.1) множество $G \in \mathcal{A}$ такое, что $\nu(A) \geq 0$ для любого измеримого $A \subset G$ и $\nu(B) \leq 0$ для любого измеримого $B \subset G^c$.

Следовательно,

$$m(x) = \frac{d\nu}{d\mathcal{P}_{opt}}(x) = \bar{J} \frac{d\nu}{d|\nu|}(x) = \begin{cases} \bar{J} & \text{при } x \in G, \\ -\bar{J} & \text{при } x \notin G, \end{cases} \quad (1.3.23)$$

то есть оценка $\xi_{opt} = m(\eta)$ принимает всего два значения $\pm \bar{J}$ с вероятностями $p = |\nu|(G)/\bar{J}$ и $1 - p = |\nu|(G^c)/\bar{J}$ соответственно.

В случае, когда $\nu(A) = \int_A f d\mu$, в качестве G можно выбрать множество $G = \{x : f(x) \geq 0\}$, и тогда окажется, что таблица распределения ξ_{opt} имеет вид

$$\left(\begin{array}{cc} \bar{J} & -\bar{J} \\ \frac{\int_{\{x:f(x)>0\}} |f| d\mu}{\bar{J}} & \frac{\int_{\{x:f(x)<0\}} |f| d\mu}{\bar{J}} \end{array} \right),$$

где $\bar{J} = \int_D |f| d\mu$.

Обсудим возможность использования этих оптимальных оценок при моделировании. В принципе, существуют способы моделирование распределения $\mathcal{P}_{opt}$, не требующие знания $\bar{J}$ (например, можно пытаться моделировать распределение (1.3.22) методом отбора¹⁰¹). А вот для вычисления функции (1.3.23) знание $\bar{J}$ является обязательным.

Это требование выглядит странным. Действительно, с какой стати, не зная значения интеграла $J = \int_D f d\mu$, мы знаем $\bar{J} = \int_D |f| d\mu$?¹⁰²

Особенно забавно выглядит ситуация, когда ν является положительной мерой. Тогда $\bar{J} = J$, $G = \emptyset$, функция (1.3.23) тождественно равна J и дисперсия оценки $m(\eta)$ равна нулю! Конечно, если я знаю искомую величину J , то я могу построить ее оценку, имеющую нулевую дисперсию.

Таким образом, сама по себе оптимальная (в смысле минимальной дисперсии) оценка выглядит с практической точки зрения достаточно бессмысленной. Чтобы сделать этот результат осмысленным, нужно доказать некоторое утверждение непрерывности: если распределение близко к оптимальному, то и дисперсия оценки близка к минимальной.

Таких утверждений (с формальной точки зрения) может быть много, докажем один из простейших возможных вариантов.

¹⁰¹ Действительно?

¹⁰² Такое, конечно, бывает, но в виде исключения. Один из подобных примеров встретится нам дальше.

Предложение 7. Пусть есть последовательность распределений $\mathcal{P}_n$ такая, что $\nu \prec \mathcal{P}_n$ с $m_n = d\nu/d\mathcal{P}_n$. Если $|\nu|$ -почти всюду $|m_n| \rightarrow \bar{J}$ и $|m_n| \leq h$ с $\int_D h d|\nu| < \infty$ то

$$\int_D m_n^2 d\mathcal{P}_n \rightarrow \bar{J}^2$$

при $n \rightarrow \infty$.

Доказательство. По теореме Лебега о мажорируемой сходимости

$$\int_D m_n^2 d\mathcal{P}_n = \int_D \frac{d|\nu|}{d\mathcal{P}_n} \frac{d|\nu|}{d\mathcal{P}_n} d\mathcal{P}_n = \int_D |m_n| d|\nu| \rightarrow \int_D \bar{J} d|\nu| = \bar{J}^2.$$

Утверждение доказано. $\square$

Замечание 11. 1. Если ввести случайную величину η_n с распределением $\mathcal{P}_n$, то в условиях Предложения 7 окажется, что $Dm_n(\eta_n) \rightarrow \bar{J}^2 - J^2$.

2. Конечно, утверждение Предложения 7 можно уточнять. Действительно, если для некоторого распределения $\mathcal{P}$ с $m = d\nu/d\mathcal{P}$ выполнено неравенство

$$\sup_D ||m|(x) - \bar{J}| \leq \varepsilon, \quad (1.3.24)$$

то окажется, что

$$\left| \int_D m^2 d\mathcal{P} - \bar{J}^2 \right| = \left| \int_D (m^2 - \bar{J}^2) d\mathcal{P} \right| \leq \int_D (|m| + \bar{J}) ||m| - \bar{J}| d\mathcal{P} \leq 2\varepsilon \bar{J}.$$

Такого рода уточнения более удобны для интерпретации,¹⁰³ но, конечно, проверять (и обеспечивать) неравенства типа (1.3.24) весьма затруднительно.

3. Если $m = d|\nu|/d\mathcal{P} \approx \bar{J}$, то можно условно считать, что $\mathcal{P} \approx |\nu|/\bar{J}$.¹⁰⁴ Отсюда и вытекают практические рекомендации: нужно стараться выбирать распределение $\mathcal{P}$ примерно пропорциональным $|\nu|$, тогда и дисперсия полученной оценки будет (относительно) небольшой.

В случае, когда $\nu(A) = \int_A f d\mu$, эти рекомендации обретают более конкретный характер: распределение $\mathcal{P}$ должно иметь плотность p (относительно меры μ), примерно пропорциональную $|f|$. Иначе говоря, области, где функция $|f|$ велика, должны «прощупываться» более тщательно, чем те области, где $|f|$ мала. Этот качественный анализ в точности соответствует соображениям, описанным в начале раздела.

¹⁰³Так как никакой последовательности распределений $\mathcal{P}_n$ на практике не существует.

¹⁰⁴Из того, что $|\nu| \prec \mathcal{P}$ совсем не следует, что $\mathcal{P} \prec |\nu|$, так что все зависит от того, как мы понимаем знак «приблизительно равно». Если же выполнено (1.3.24) с достаточно малым ε , то как легко видеть (действительно?),

$$\frac{1}{\bar{J} + \varepsilon} |\nu|(A) \leq \mathcal{P}(A) \leq \frac{1}{\bar{J} - \varepsilon} |\nu|(A)$$

и выражение $\mathcal{P} \approx |\nu|/\bar{J}$ обретает точный смысл.

2 Решение линейных уравнений методом Монте-Карло

2.1 Линейные алгебраические уравнения

2.1.1 Условия мажорируемой сходимости

Вычисление суммы ряда. Начнем со следующей вспомогательной задачи. Пусть у нас есть сходящийся ряд с суммой J :

$$J = a_1 + \dots + a_n + \dots \quad (2.1.1)$$

причем

$$\bar{J} = |a_1| + \dots + |a_n| + \dots < \infty,$$

то есть ряд (2.1.1) сходится абсолютно.

Сведем задачу вычисления суммы ряда J к задаче вычисления некоторого заряда. А именно, положим $D = \{1, 2, \dots\}$, определим в качестве $\mathcal{A}$ σ -алгебру всех подмножеств D и положим для любого $A \subset D$

$$\nu(A) = \sum_{i \in A} a_i.$$

Этот заряд будет конечным, причем¹⁰⁵ $|\nu|(A) = \sum_{i \in A} |a_i|$, так что $|\nu|(D) = \bar{J}$.

Рассмотрим теперь распределение $\mathcal{P}$, заданное на $(D, \mathcal{A})$ таблицей

$$\mathcal{P} : \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n & \dots \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n & \dots \end{pmatrix}.$$

Введя в $(D, \mathcal{A})$ считающую меру λ (то есть такую меру, что $\lambda(\{i\}) = 1$ для любого i) и функцию $f : D \mapsto \mathbb{R}$ с $f(i) = a_i$, получим, что¹⁰⁶

$$\nu(A) = \int_A f d\lambda \quad \text{и} \quad |\nu|(A) = \int_A |f| d\lambda.$$

Аналогично, введя функцию $p : D \mapsto \mathbb{R}$ с $p(i) = p_i$, придем к равенству

$$\mathcal{P}(A) = \int_A p d\lambda.$$

Согласно Предложению 2, $\nu \prec \mathcal{P}$ тогда и только тогда, когда $\lambda(\{i : f(i) \neq 0 \text{ и } p(i) = 0\}) = 0$. Так как $\lambda(A) = 0$ только для $A = \emptyset$, то это условие упрощается: для того, чтобы $\nu \prec \mathcal{P}$,¹⁰⁷ необходимо и достаточно, чтобы $p_i \neq 0$ следовало из $a_i \neq 0$. При этом (1.1.2) превращается в

$$m(i) = \frac{d\nu}{d\mathcal{P}}(i) = \begin{cases} a_i/p_i & \text{при } p_i > 0, \\ 0 & \text{при } p_i = 0, \end{cases}$$

и, следовательно, при $\mathcal{L}(\eta) = \mathcal{P}$ несмещенная оценка величины J будет равна $m(\eta) = a_\eta/p_\eta$. Дисперсия этой оценки будет равна¹⁰⁸

$$Dm(\eta) = \mathbb{E} \left(\frac{a_\eta}{p_\eta} \right)^2 - J^2 = \sum_{i \geq 1} \frac{a_i^2}{p_i} - J^2, \quad (2.1.2)$$

¹⁰⁵ Действительно?

¹⁰⁶ Проверьте!

¹⁰⁷ Другими словами, чтобы распределение $\mathcal{P}$ было согласовано с рядом (2.1.1).

¹⁰⁸ Здесь для краткости мы полагаем $a_i/p_i = 0$ при $p_i = 0$ (или, что то же самое, при $a_i = 0$).

а минимальная дисперсия равна, как всегда, $\bar{J}^2 - J^2$ и достигается на распределении¹⁰⁹

$$\mathcal{P}_{opt} = |\nu|/\bar{J} : \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n & \dots \\ |a_1|/\bar{J} & |a_2|/\bar{J} & \dots & |a_n|/\bar{J} & \dots \end{pmatrix}. \quad (2.1.3)$$

Замечание 12. 1. Для нахождения суммы сходящегося ряда вычислительными методами условие абсолютной сходимости этого ряда выглядит достаточно ограничительным и не слишком естественным. У нас, однако, оно появляется совершенно автоматически.¹¹⁰ У нас такое условие появится не раз, и будет называться условием мажорируемой сходимости.

2. Пусть $K = \{k_1, \dots, k_n, \dots\}$ — некоторое подмножество натурального ряда, причем $k_i < k_{i+1}$. Обозначим

$$a_i = 2^{-i} \cdot \begin{cases} -1 & \text{при } i \in K, \\ +1 & \text{иначе,} \end{cases}$$

Ряд с членами a_i , конечно, сходится абсолютно, причем для него $\bar{J} = 1$. Поэтому для него оптимальное распределение (2.1.3) — это просто геометрическое распределение с параметром $1/2$, а функция m имеет вид $m(i) = (-1)^{k_i}$.

Это, конечно, является (обещанным) примером вычисления интеграла методом Монте-Карло с минимальной дисперсией.

Линейные алгебраические уравнения. Теперь перейдем к системе линейных алгебраических уравнений, записанных в виде

$$X = \mathbb{A}X + B, \quad (2.1.4)$$

где $\mathbb{A} = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^d$, $B = (b_1, \dots, b_d)^T$ и $X = (x_1, \dots, x_d)^T$. Мы будем предполагать,¹¹¹ что метод последовательных приближений

$$X_{n+1} = \mathbb{A}X_n + B, \quad X_0 = B \quad (2.1.5)$$

сходится к некоторому решению X системы (2.1.4). Ясно, что

$$X_n = B + \mathbb{A}B + \dots + \mathbb{A}^n B.$$

Отсюда легко получается,¹¹² что j -я координата $x_j^{(n)}$ вектора X_n имеет вид

$$x_j^{(n)} = b_j + \sum_{k=1}^n \sum_{(i_1, \dots, i_k)} a_{ji_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k},$$

где $i_1, \dots, i_k$ — всевозможные наборы чисел с $1 \leq i_m \leq d$.

Тем самым наше предположение о сходимости $X_n \rightarrow X$ оказывается эквивалентной предположению о сходимости рядов

$$x_j = b_j + \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k^{(j)} \quad \text{с} \quad \gamma_k^{(j)} = \sum_{(i_1, \dots, i_k)} a_{ji_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k} \quad \text{и} \quad \gamma_0^{(j)} = b_j. \quad (2.1.6)$$

¹⁰⁹ А при каких (необходимых и достаточных) условиях минимальная дисперсия равна нулю?

¹¹⁰ Это условие аналогично суммируемости подинтегральной функции при вычислении интеграла, в такой постановке ничего удивительного в условии нет.

¹¹¹ Это «предварительное» предположение; если спектральный радиус матрицы $\mathbb{A}$ меньше 1, то оно заведомо выполнено при любом B .

¹¹² Проверьте это.

Иначе говоря, при $n \rightarrow \infty$

$$x_j^{(n)} \rightarrow x_j = b_j + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(i_1, \dots, i_k)} a_{ji_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k}. \quad (2.1.7)$$

Если непосредственно применять к этому ряду результаты предыдущего раздела, то нам нужно потребовать, чтобы $\sum_{k=0}^{\infty} |\gamma_k^{(j)}| < \infty$ и, моделируя подходящее¹¹³ дискретное распределение $\mathcal{P}_j$ с $\mathcal{P}(\{k\}) = p_{kj}$, использовать в качестве оценки $m_j(\eta) = \gamma_{\eta}^{(j)} / p_{\eta}$, где $\mathcal{L}(\eta) = \mathcal{P}_j$.

Само вычисление величин $\gamma_k^{(j)}$, однако, может быть весьма затруднительным, и поэтому мы пойдем другим путем.

Вместо абсолютной сходимости рядов (2.1.6) мы будем требовать, что были конечными суммы

$$\bar{x}_j = |b_j| + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(i_1, \dots, i_k)} |a_{ji_1}| |a_{i_1 i_2}| \dots |a_{i_{k-1} i_k}| |b_{i_k}| < \infty. \quad (2.1.8)$$

Это требование,¹¹⁴ конечно, сильнее, чем требование абсолютной сходимости ряда (2.1.6). Оно может быть выражено в матричной форме. Действительно, введем матрицу $\bar{\mathbb{A}}$ с элементами $|a_{ij}|$ и вектор $\bar{B}$ с координатами $|b_i|$ и рассмотрим систему

$$\bar{X} = \bar{\mathbb{A}} \bar{X} + \bar{B}. \quad (2.1.9)$$

Тогда требование конечности сумм (2.1.8) эквивалентно требованию существования конечного предела итераций¹¹⁵

$$\bar{X}_{n+1} = \bar{\mathbb{A}} \bar{X}_n + \bar{B}, \quad \bar{X}_0 = \bar{B}, \quad (2.1.10)$$

причем $\lim_n \bar{X}_n = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_d)^T$.

Подведем итог этим рассуждениям. Условия конечности сумм (2.1.8) (или, что тоже самое, требованию существования конечного предела итераций (2.1.10)) мы будем называть *условиями мажорируемой сходимости* и будем всегда считать их выполненными в дальнейшем.

2.1.2 Выбор распределения и оценка «по поглощению»

Ограничимся пока оцениванием только одной координаты искомого вектора X . Не умаляя общности, будем считать, что эта координата — первая. Тогда окажется, что нам нужно построить оценку величины¹¹⁶

$$J = x_1 = c_1 + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(i_1 \dots i_k)} c_{1i_1 \dots i_k}, \quad (2.1.11)$$

¹¹³то есть согласованное с рядом (2.1.6)

¹¹⁴На языке перестановки членов $a_{ji_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k}$ в сумме (2.1.7) новое требование означает, что эти члены можно переставлять как угодно (в том числе при разных k), в то время как условие абсолютной сходимости ряда $\sum_k \gamma_k^{(j)}$ подразумевает, что перестановки возможны только с сгруппированными (в $\gamma_k^{(j)}$) членами.

¹¹⁵Конечно, оно (вообще говоря) гораздо сильнее (и не очень естественно с точки зрения «детерминированных» вычислительных методов), чем условие сходимости итераций (2.1.5). Естественным достаточным условием здесь является неравенство $\rho(\bar{\mathbb{A}}) < 1$, где ρ обозначает спектральный радиус оператора. Конечно, (приведите пример!) это условие более обременительно, чем уже обсуждавшееся $\rho(\mathbb{A}) < 1$.

¹¹⁶Единица введена в обозначение $c_{1i_1 \dots i_k}$ чтобы подчеркнуть наш интерес именно к первой координате вектора X . Формально удобно считать, что $c_{1i_1 \dots i_k} = c_1$ при $k = 0$. Если мы хотим оценивать x_j , то вместо (2.1.12) будем иметь

$$c_{ji_1 \dots i_k} = a_{ji_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k}$$

с $c_j = b_j$ при $k = 0$.

где $c_1 = b_1$ и

$$c_{1i_1 \dots i_k} = a_{1i_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k}. \quad (2.1.12)$$

При этом согласно условию мажорируемой сходимости

$$\bar{J} = \bar{x}_1 = |c_1| + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(1i_1 \dots i_k)} |c_{1i_1 \dots i_k}| < \infty.$$

В принципе, ясно,¹¹⁷ как искать методом Монте-Карло оценку J : для этого нужно выбрать распределение $\mathcal{P}$ с таблицей

$$\mathcal{P}: \quad \begin{pmatrix} 1i_1 \dots i_k \\ p_{1i_1 \dots i_k} \end{pmatrix}, \quad 1 \leq i_j \leq d, \quad k \geq 0,$$

согласованное с рядом (2.1.11), а потом, моделируя случайный вектор вида $(1, \eta_1, \dots, \eta_\tau)$ с $\tau \geq 0$ и $1 \leq \eta_i \leq d$, имеющий распределение $\mathcal{P}$, использовать случайную величину¹¹⁸

$$\xi = \frac{c_{1\eta_1 \dots \eta_\tau}}{p_{1\eta_1 \dots \eta_\tau}}$$

в качестве несмещенной оценки J .

Возникает, однако вопрос: как разумным образом выбирать такое распределение $\mathcal{P}$ и как его (не слишком сложно) моделировать, учитывая специфическую форму (2.1.12) чисел $c_{1i_1 \dots i_k}$?

Так что не будем пока думать о дисперсиях и трудоемкостях, а займемся просто удобствами моделирования.

Для лучшего понимания сути дела сначала рассмотрим конечную сумму¹¹⁹

$$\sum_{(1i_1 \dots i_k)} a_{1i_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k}. \quad (2.1.13)$$

Для построения оценки этой суммы будем действовать следующим образом. Рассмотрим однородную марковскую цепь $\eta_0, \eta_1, \dots, \eta_k$ с фазовым пространством $\{1, 2, \dots, d\}$, начальным распределением $\pi = (1, 0, \dots, 0)$ и переходной матрицей

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} p_{11} & \dots & p_{1j} & \dots & p_{1d} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{i1} & \dots & p_{ij} & \dots & p_{id} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{d1} & \dots & p_{dj} & \dots & p_{dd} \end{pmatrix}. \quad (2.1.14)$$

Тогда

$$P(\eta_0 = 1, \eta_1 = i_1, \dots, \eta_k = i_k) = p_{1i_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{k-1} i_k}, \quad (2.1.15)$$

что в точности соответствует структуре слагаемых в сумме (2.1.13). Более того, согласованность распределения $\mathcal{P}$, определяемого равенствами (2.1.15), с суммой (2.1.13) описывается очень просто:¹²⁰ для тех пар (i, j) , для которых $a_{ij} \neq 0$ должно выполняться неравенство $p_{ij} \neq 0$.

¹¹⁷Для доказательства нужно взять считающую меру, принимающую единичные значения на одноточечных множествах вида $\{(1i_1 \dots i_k)\}$ и повторить рассуждения, проведенные для ряда (2.1.1).

¹¹⁸Обратите внимание: здесь τ — случайная величина!

¹¹⁹Поскольку сумма конечна, условие мажорируемой сходимости выполнено автоматически.

¹²⁰Проверьте!

Тем самым несмещенная оценка суммы (2.1.13) выглядит следующим образом:

$$\xi = \frac{a_{1\eta_1} a_{\eta_1\eta_2} \dots a_{\eta_{k-1}\eta_k}}{p_{1\eta_1} p_{\eta_1\eta_2} \dots p_{\eta_{k-1}\eta_k}} b_{\eta_k}.$$

Поскольку при моделировании перехода $\eta_m \rightarrow \eta_{m+1}$ в марковской цепи нам нужно знать лишь значение $i = \eta_m$ (при этом будет использоваться i -я строка переходной матрицы $\mathbb{P}$), то и с построением оценки ξ принципиальных проблем нет: при переходе $\eta_m \rightarrow \eta_{m+1}$ оценка просто домножается на $a_{\eta_m\eta_{m+1}}/p_{\eta_m\eta_{m+1}}$ (а при $m = k - 1$ — еще и на b_{η_k}).¹²¹

Вернемся теперь к абсолютно сходящемуся ряду (2.1.11), который отличается от (2.1.13) суммированием по $k \geq 0$. Конечно, первая идея, которая здесь возникает — это, промоделировав некоторую случайную величину θ , принимающую целые неотрицательные значения, считать ее реализацию за значение k и потом уже (независимым образом) использовать описанную выше конструкцию.¹²²

Мы пойдем, однако, несколько другим путем, заметив, что случайная величина θ и марковская цепь η_i не обязаны быть независимыми.

А именно, вместо марковской цепи с фазовым пространством $\{1, \dots, d\}$ и переходной матрицей (2.1.14) рассмотрим однородную марковскую цепь η_j , $j \geq 0$ с фазовым пространством $D = \{1, 2, \dots, d, d+1\}$, начальным распределением, сосредоточенным в единице и переходной матрицей¹²³

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} p_{11} & \dots & p_{1j} & \dots & p_{1d} & g_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ p_{i1} & \dots & p_{ij} & \dots & p_{id} & g_i \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ p_{d1} & \dots & p_{dj} & \dots & p_{dd} & g_d \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1.16)$$

Естественно,

$$\sum_{j=1}^d p_{ij} + g_i = 1.$$

Ясно, что если марковская цепь попала в состояние $d+1$, то она из него уже не выйдет.¹²⁴ Обозначим теперь

$$\tau + 1 = \min\{n : \eta_n = d + 1\}$$

и будем предполагать, что $P(\tau < \infty) = 1$. Марковская цепь, удовлетворяющая этому условию, будет называться *поглощающей*. Траектория рассматриваемой поглощающей марковской цепи с вероятностью 1 имеет вид

$$\eta_0 = 1, \eta_1, \dots, \eta_\tau, d + 1, d + 1, \dots,$$

поэтому ее можно условно записывать как $\eta_0 = 1, \eta_1, \dots, \eta_\tau$.¹²⁵

¹²¹Приведите формальный алгоритм построения этой оценки.

¹²²А как будет выглядеть в этом случае оценка?

¹²³Ввиду особых свойств состояния $d + 1$ мы вместо $p_{i,d+1}$ пишем g_i .

¹²⁴В терминологии марковских цепей такие состояния называются поглощающими, а вероятности g_i — вероятностями поглощения из состояния i .

¹²⁵Если $\tau = 0$, то в такой записи вся траектория сводится к $\eta_0 = 1$.

Можно привести простое достаточное условие выполнения равенства $P(\tau < \infty) = 1$. Действительно, пусть $g = \min_i g_i > 0$. Тогда на каждом шаге (до попадания в состояние $d+1$) марковской цепи происходит испытание Бернулли с вероятностью «успеха» (то есть попадания в $d+1$) g_i . Поскольку в испытаниях Бернулли с постоянной вероятностью успеха g успех рано или поздно произойдет, а $g_i \geq g > 0$, то марковская цепь обязательно попадет в поглощающее состояние $d+1$.¹²⁶

Далее, $P(\eta_0 = 1, \tau = 0) = P(\tau = 0) = g_1$, а при $n \geq 1$ и $i_1, \dots, i_n \in \{1, \dots, d\}$

$$\begin{aligned} P(\eta_0 = 1, \eta_1 = i_1, \dots, \eta_n = i_n, \tau = n) &= P(\eta_0 = 1, \eta_1 = i_1, \dots, \eta_n = i_n, \eta_{n+1} = d+1) = \\ &= p_{1i_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{n-1} i_n} g_{i_n}, \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

причем

$$\begin{aligned} g_1 + \sum_{n \geq 1} \sum_{(1, i_1, \dots, i_n)} p_{1i_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{n-1} i_n} g_{i_n} &= P(\tau = 0) + \sum_{n \geq 1} \sum_{(1, i_1, \dots, i_n)} P(\eta_0 = 1, \eta_1 = i_1, \dots, \eta_n = i_n, \tau = n) = \\ &= P(\tau = 0) + \sum_{n \geq 1} P(\tau = n) = 1. \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

Таким образом, благодаря условию $P(\tau < \infty) = 1$ мы получили дискретное распределение $\mathcal{P}$, сосредоточенное на множестве $D = \{(1, i_1, \dots, i_n), n \geq 0\}$ и такое, что¹²⁷

$$\mathcal{P}(\{(1)\}) = g_1 \quad \text{и} \quad \mathcal{P}(\{(1, i_1, \dots, i_n)\}) = p_{1i_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{n-1} i_n} g_{i_n}. \quad (2.1.19)$$

Сравнивая это распределение с нужной нам суммой (2.1.11), (2.1.12), мы видим, что для построения несмещенной оценки величины $J = x_1$ нам осталось наложить условия согласованности распределения $\mathcal{P}$ с рядом (2.1.11). Эти условия, как нетрудно видеть,¹²⁸ сводятся к тому, что p_{ij} не должно равняться нулю при $a_{ij} \neq 0$ и $g_i \neq 0$ при $b_i \neq 0$.¹²⁹

Тем самым, учитывая равенство (2.1.17), мы доказали следующую теорему.¹³⁰

Теорема 2. Пусть для системы (2.1.5) выполнены условия мажорируемой сходимости (2.1.8). Рассмотрим однородную марковскую цепь $\eta_0, \eta_1, \dots$ с фазовым пространством $\{1, \dots, d+1\}$, начальным распределением, сосредоточенным в точке $1 \leq j \leq d$ и переходной матрицей (2.1.16). Если эта матрица согласована с рядом (2.1.11), (2.1.12) и является поглощающей, то случайная величина¹³¹

$$\xi_j = \frac{a_{j\eta_1} a_{\eta_1 \eta_2} \dots a_{\eta_{\tau-1} \eta_\tau} b_{\eta_\tau}}{p_{j\eta_1} p_{\eta_1 \eta_2} \dots p_{\eta_{\tau-1} \eta_\tau} g_{\eta_\tau}} \quad (2.1.20)$$

является несмещенной оценкой j -й координаты x_j вектора X , причем величина $E|\xi_j|$ конечна и равна (2.1.8).

Доказательство. Хотя доказательство Теоремы 2 на самом деле уже проведено¹³² (оно следует из общих принципов вычисления интегралов методом Монте-Карло применительно к абсолютно сходящимся рядам), мы проведем его «в явном виде» еще раз.

¹²⁶Конечно, такое рассуждение не является абсолютно строгим, к тому же условие $g > 0$ является лишь достаточным. Необходимое и достаточное условие выполнения равенства $P(\tau < \infty) = 1$ будет выведено позже. А пока придумайте пример, когда это равенство выполнено, но $g = 0$.

¹²⁷Действительно?

¹²⁸Проверьте!

¹²⁹Проверьте, что эти условия не зависят от того, какую именно координату вектора X мы хотим оценивать.

¹³⁰В ее формулировке первая координата искомого вектора без ущерба для строгости рассуждений заменена на произвольную.

¹³¹Имеется в виду, что $\xi_j = b_j/g_j$ при $\tau = 0$.

¹³²Убедитесь в этом!

Начнем с доказательства того, что $E|\xi_j| < \infty$. Действительно, $E|\xi_j| = \sum_{n \geq 0} E(|\xi_j|, \tau = n)$, причем¹³³

$$E(|\xi_j|, \tau = 0) = E(|b_j|/g_j, \eta_1 = d+1) = \frac{|b_j|}{g_j} g_j = |b_j|$$

и при $n > 0$

$$\begin{aligned} E(|\xi_j|, \tau = n) &= E\left(\frac{|a_{j\eta_1}| |a_{\eta_1\eta_2}| \dots |a_{\eta_{\tau-1}\eta_\tau}| |b_{\eta_\tau}|}{p_{j\eta_1} p_{\eta_1\eta_2} \dots p_{\eta_{\tau-1}\eta_\tau} g_{\eta_\tau}}, \tau = n\right) = \\ &= \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} \frac{|a_{ji_1}| |a_{i_1i_2}| \dots |a_{i_{n-1}i_n}| |b_{i_n}|}{p_{ji_1} p_{i_1i_2} \dots p_{i_{n-1}i_n} g_{i_n}} p_{ji_1} p_{i_1i_2} \dots p_{i_{n-1}i_n} g_{i_n} = \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} |a_{ji_1}| |a_{i_1i_2}| \dots |a_{i_{n-1}i_n}| |b_{i_n}|. \end{aligned}$$

Следовательно (см. (2.1.8)),

$$E|\xi_j| = |b_j| + \sum_{n \geq 1} \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} |a_{ji_1}| |a_{i_1i_2}| \dots |a_{i_{n-1}i_n}| |b_{i_n}| = \bar{x}_j < \infty.$$

Теперь, когда суммируемость случайной величины доказана, можно повторить все эти действия, только без модулей.¹³⁴

$$\begin{aligned} E\xi_j &= \sum_{n \geq 0} E(\xi_j, \tau = n) = E(\xi_j, \tau = 0) + \sum_{n \geq 1} E\left(\frac{a_{j\eta_1} a_{\eta_1\eta_2} \dots a_{\eta_{\tau-1}\eta_\tau} b_{\eta_\tau}}{p_{j\eta_1} p_{\eta_1\eta_2} \dots p_{\eta_{\tau-1}\eta_\tau} g_{\eta_\tau}}, \tau = n\right) = \\ &= \frac{b_j}{g_j} g_j + \sum_{n \geq 1} \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} \frac{a_{ji_1} a_{i_1i_2} \dots a_{i_{n-1}i_n} b_{i_n}}{p_{ji_1} p_{i_1i_2} \dots p_{i_{n-1}i_n} g_{i_n}} p_{ji_1} p_{i_1i_2} \dots p_{i_{n-1}i_n} g_{i_n} = \\ &= b_j + \sum_{n \geq 1} \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} a_{ji_1} a_{i_1i_2} \dots a_{i_{n-1}i_n} b_{i_n} = x_j. \end{aligned}$$

На этом доказательство и заканчивается.¹³⁵

□

Оценка (2.1.20) обычно называется *оценкой «по поглощению»*.¹³⁶

2.1.3 Дисперсия оценки «по поглощению»

Займемся теперь дисперсией оценки ξ_j . Наряду с системой (2.1.5) введем систему

$$Y = \mathbb{A}_p Y + B_g, \quad (2.1.21)$$

где $\mathbb{A}_p$ — это $d \times d$ -матрица с элементами a_{ij}^2/p_{ij} и B_g — d -мерный вектор с координатами b_i^2/g_i .¹³⁷ Для системы (2.1.21) рассмотрим метод последовательных приближений

$$Y_{n+1} = \mathbb{A}_p Y_n + B_g, \quad Y_0 = B_g.$$

Поскольку

$$Y_n = B_g + \sum_{k=1}^n \mathbb{A}_p^k B_g,$$

¹³³Здесь подразумевается, что $|b_i|/g_i = 0$ при $g_j = 0$ (в этом случае $b_i = 0$) и аналогично $a_{km}/p_{km} = 0$ при $p_{km} = 0$ (тогда $a_{km} = 0$).

¹³⁴А почему?

¹³⁵Приведите формальный алгоритм получения оценки (2.1.20).

¹³⁶Термин, конечно, несколько жаргонный, пришедший из практики.

¹³⁷Как и раньше, $a_{ij}^2/p_{ij} = 0$ при $p_{ij} = 0$ и $b_i^2/g_i = 0$ при $g_i = 0$.

а все координаты векторов $A_p^k B_g$ неотрицательны, то

$$Y_n \uparrow Y = B_g + \sum_{k=1}^{\infty} A_p^k B_g, \quad (2.1.22)$$

где координаты предельного вектора Y либо конечны и неотрицательны, либо принимают значение $+\infty$. Назовем этот вектор Y *итерационным решением* уравнения (2.1.21).

Теорема 3. Дисперсия случайной величины ξ_j равна $y_j - x_j^2$, где y_j — j -я координата итерационного решения системы (2.1.21).

Доказательство. Поскольку $E\xi_j = x_j$, то нам достаточно рассматривать $E\xi_j^2$. Точно так же¹³⁸ как в (2.1.7), y_j имеет вид

$$y_j = \frac{b_j^2}{g_j} + \sum_{n \geq 1} \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} \frac{a_{ji_1}^2}{p_{ji_1}} \frac{a_{i_1 i_2}^2}{p_{i_1 i_2}} \dots \frac{a_{i_{n-1} i_n}^2}{p_{i_{n-1} i_n}} \frac{b_{i_n}^2}{g_{i_n}}. \quad (2.1.23)$$

С другой стороны, аналогично (2.1.2) получается, что $E\xi_j^2$ равно правой части (2.1.23).

Снова убедимся в этом непосредственно.¹³⁹ Действительно,

$$\begin{aligned} E \left(\frac{a_{j\eta_1} a_{\eta_1 \eta_2} \dots a_{\eta_{\tau-1} \eta_{\tau}} b_{\eta_{\tau}}}{p_{j\eta_1} p_{\eta_1 \eta_2} \dots p_{\eta_{\tau-1} \eta_{\tau}} g_{\eta_{\tau}}} \right)^2 &= \frac{b_j^2}{g_j^2} g_j + \sum_{n \geq 1} \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} \frac{a_{ji_1}^2 a_{i_1 i_2}^2 \dots a_{i_{n-1} i_n}^2 b_{i_n}^2}{p_{ji_1}^2 p_{i_1 i_2}^2 \dots p_{i_{n-1} i_n}^2 g_{i_n}^2} p_{ji_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{n-1} i_n} g_{i_n} = \\ &= \frac{b_j^2}{g_j} + \sum_{n \geq 1} \sum_{(j, i_1, \dots, i_n)} \frac{a_{ji_1}^2 a_{i_1 i_2}^2 \dots a_{i_{n-1} i_n}^2 b_{i_n}^2}{p_{ji_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{n-1} i_n} g_{i_n}} = y_j. \end{aligned}$$

Утверждение доказано. $\square$

Замечание 13. Теорема 2.1.3 интересна тем, что условия конечности дисперсии выражаются в тех же терминах, что и условия, накладываемые на саму задачу. А именно, если для несмещенности оценок ξ_j нам понадобилось (достаточное) условие $\rho(\bar{A}) < 1$, то для конечности дисперсии точно такое же значение имеет неравенство $\rho(A_p) < 1$.

С другой стороны, иногда конечность дисперсии ξ_j можно проверить и непосредственно. Например, если $|a_{k\ell}| \leq p_{k\ell}$, при всех k, ℓ , то случайная величина ξ_j будет ограниченной. Поэтому она является суммируемой и обладает конечной дисперсией.

2.1.4 Задача о минимальной дисперсии

Оценка по поглощению, как уже говорилось, строилась из соображений удобства моделирования. Более того, на самом деле мы не знаем пока, для любой ли системы (2.1.4), удовлетворяющей условию мажорируемой сходимости, существует оценка по поглощению с конечной дисперсией. На самом же деле несмещенных оценок, как уже говорилось в начале раздела 2.1.2, гораздо больше и, возможно, с точки зрения дисперсии¹⁴⁰ среди них есть гораздо лучшие, чем оценки по поглощению.

А именно, для построения несмещенных оценок x_j мы в принципе можем использовать любое распределение $\mathcal{P}$ с таблицей распределения

$$\mathcal{P} : \left(\begin{matrix} (j, i_1, \dots, i_{k-1}, i_k) \\ p_{ji_1 \dots i_k} \end{matrix} \right), \quad k \geq 0, \quad (2.1.24)$$

¹³⁸Рассматриваются такие же итерации, только с другой матрицей и другим свободным членом.

¹³⁹Это делается точно так же, как при доказательстве несмещенности ξ_j . Только проверять суммируемость здесь не нужно. А нельзя ли без «непосредственно»?

¹⁴⁰а не удобства моделирования

сосредоточенное на множестве $\{j, i_1, \dots, i_k\}$ с $k \geq 0$ и $1 \leq i_m \leq d$ и согласованное с рядом (2.1.7). Марковские распределения вида (2.1.19), конечно, не исчерпывают это множество.

Тем не менее, как оказывается, минимальная дисперсия оценок, доставляемая всевозможными распределениями (2.1.24), достигается именно на марковском распределении.

Теорема 4. Пусть все числа $\bar{x}_j$, определяемые равенствами (2.1.8), не равны нулю. Рассмотрим марковскую цепь $\eta_0 = j, \eta_1, \dots, \eta_n, \dots$ с переходной матрицей

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} p_{11}^* & \cdots & p_{1\ell}^* & \cdots & p_{1d}^* & g_1^* \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ p_{k1}^* & \cdots & p_{k\ell}^* & \cdots & p_{kd}^* & g_k^* \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ p_{d1}^* & \cdots & p_{d\ell}^* & \cdots & p_{dd}^* & g_d^* \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1.25)$$

где

$$p_{k\ell}^* = \frac{|a_{k\ell}|\bar{x}_\ell}{\bar{x}_k} \quad \text{и} \quad g_k^* = \frac{|b_k|}{\bar{x}_k}. \quad (2.1.26)$$

Тогда эта марковская цепь является поглощающей и согласованной с рядом (2.1.7). Более того, дисперсия оценки по поглощению, построенная по этой марковской цепи, является минимальной среди всех оценок метода Монте-Карло, построенных исходя из всевозможных распределений (2.1.24), согласованных с (2.1.7).

Доказательство. Прежде всего убедимся, что матрица P , задаваемая равенством (2.1.25), действительно является переходной. Действительно, вектор $\bar{X}$ является решением системы (2.1.9) и поэтому его координаты удовлетворяют уравнениям

$$\bar{x}_k = \sum_{\ell=1}^d |a_{k\ell}|\bar{x}_\ell + |b_k|.$$

Поделив обе части этого равенства на $\bar{x}_k$, мы как раз и получим, что $1 = \sum_{\ell=1}^d p_{k\ell} + g_k$.

Найдем теперь распределение $\mathcal{P}_{\text{opt}}$, на котором достигается минимальная дисперсия Монте-Карловской оценки величины x_j . Согласно Теореме 6 (ее результат для абсолютно сходящегося ряда имеет вид (2.1.3)), это дискретное распределение приписывает вектору $(j, i_1, \dots, i_k)$ вероятность

$$p_{ji_1 \dots i_k}^{(\text{opt})} = \frac{|a_{ji_1}| \cdots |a_{i_{k-1}i_k}| |b_{ik}|}{\bar{x}_j} = \left(\prod_{m=1}^k \frac{|a_{i_{m-1}i_m}|\bar{x}_{i_m}}{\bar{x}_{i_{m-1}}} \right) \frac{|b_{ik}|}{\bar{x}_{i_k}} = \left(\prod_{m=1}^k p_{i_{m-1}i_m}^* \right) g_{ik}^*, \quad (2.1.27)$$

что в точности соответствует (2.1.17) с заменой начального состояния (1) на (j) и введением обозначения $i_0 = j$.¹⁴¹

Согласованность введенного распределения с рядом (2.1.7) следует из общих свойств оптимальных распределений.¹⁴² Что касается того, факта, что рассмотренная марковская цепь является поглощающей, то это тоже очевидно. Действительно, так как $\mathcal{P}_{\text{opt}}$ является распределением, то

$$1 = p_j^{(\text{opt})} + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(j, i_1, \dots, i_k)} p_{ji_1 \dots i_k}^{(\text{opt})} = g_j^* + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(j, i_1, \dots, i_k)} \left(\prod_{m=1}^k p_{i_{m-1}i_m}^* \right) g_{ik}^*,$$

что (см. (2.1.18)) и означает, что марковская цепь поглощающая. $\square$

¹⁴¹При $k = 0$ получается $p_j^{(\text{opt})} = g_j^*$.

¹⁴²А из каких? Впрочем, это видно и непосредственно. А как?

Замечание 14. 1. Таким образом, оценки по поглощению не только удобны для моделирования, но и содержат оценку с минимальной дисперсией. Эта дисперсия, как следует из общей теории, равна $\bar{x}_j^2 - x_j^2$.¹⁴³

2. Можно заметить, что переходная матрица оптимальной марковской цепи не зависит от того, какую именно координату искомого вектора X мы оцениваем. Номер этой координаты влияет только на начальное распределение марковской цепи.

2.1.5 Оценивание скалярного произведения (H, X)

Задача оценивания лишь одной координаты итерационного решения X системы (2.1.4) не выглядит естественно. Тем не менее все предыдущие рассуждения почти без изменений переносятся на более понятную задачу оценивания скалярного произведения

$$J = (H, X) = \sum_{j=1}^d h_j x_j, \quad (2.1.28)$$

где $H = (h_1, \dots, h_d)^T$ — некоторый вектор, а x_j — сумма абсолютно сходящегося ряда (2.1.7).¹⁴⁴

Нетрудно видеть, что при этом

$$J = \sum_{i_0=1}^d h_{i_0} b_{i_0} + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(i_0, i_1, \dots, i_k)} h_{i_0} a_{i_0 i_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{k-1} i_k} b_{i_k}, \quad (2.1.29)$$

а

$$\bar{J} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i_0=1}^d |h_{i_0}| |b_{i_0}| + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{(i_0, i_1, \dots, i_k)} |h_{i_0}| |a_{i_0 i_1}| |a_{i_1 i_2}| \dots |a_{i_{k-1} i_k}| |b_{i_k}| < \infty. \quad (2.1.30)$$

Сформулируем соответствующее утверждение.

Теорема 5. 1. Пусть система (2.1.4) удовлетворяет условию мажорируемой сходимости. Пусть, кроме того, $H = (h_1, \dots, h_d)^T \in \mathbb{R}^d$. Рассмотрим марковскую цепь $\{\eta_i, i \geq 0\}$ с фазовым пространством $\{1, \dots, d, d+1\}$, начальным распределением $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_d, 0)$ и переходной матрицей (2.1.16).

Если эта марковская цепь является поглощающей и удовлетворяет условиям: $\pi_i \neq 0$ при $h_i \neq 0$, $p_{ij} \neq 0$ при $a_{ij} \neq 0$ и $g_i \neq 0$ при $b_i \neq 0$, то случайная величина¹⁴⁵

$$\xi = \frac{h_{\eta_0} a_{\eta_0 \eta_1} \dots a_{\eta_{\tau-1} \eta_{\tau}} b_{\eta_{\tau}}}{\pi_{\eta_0} p_{\eta_0 \eta_1} \dots p_{\eta_{\tau-1} \eta_{\tau}} g_{\eta_{\tau}}} \quad (2.1.31)$$

является несмещенной оценкой величины $J = (H, X)$. При этом

$$E\xi^2 = \sum_{j=1}^d h_j^2 y_j / \pi_j, \quad (2.1.32)$$

где y_j — j -я координата вектора Y , определенного в (2.1.22).

2. Предположим дополнительно, что $\bar{x}_j > 0$ при всех j , где числа $\bar{x}_j$ определены в (2.1.8). Тогда среди всех оценок величины J , определяемых распределениями вида

$$\mathcal{P}: \quad \left(\begin{matrix} (i_0, i_1, \dots, i_{k-1}, i_k) \\ p_{i_0 i_1 \dots i_k} \end{matrix} \right), \quad k \geq 0,$$

¹⁴³При каких условиях на систему и марковскую цепь эта дисперсия обращается в ноль? А как выглядит сама оценка, имеющая минимальную дисперсию?

¹⁴⁴То есть условие мажорируемой сходимости по-прежнему предполагается выполненным.

¹⁴⁵Здесь снова $\tau + 1 = \min(n : \xi_n = d + 1)$. Оценка (2.1.31) по-прежнему называется оценкой по поглощению.

согласованными с рядом (2.1.29), оценка по поглощению (2.1.31) имеет минимальную дисперсию $\bar{J}^2 - J^2$ при выборе марковской цепи с начальным распределением

$$\pi^* = (\pi_1^*, \dots, \pi_d^*, 0) = \left(\frac{|h_1| \bar{x}_1}{\bar{J}}, \dots, \frac{|h_d| \bar{x}_d}{\bar{J}}, 0 \right)$$

и переходной матрицей (2.1.25), (2.1.26).

Доказательство. Поскольку доказательства этих утверждений полностью аналогично доказательству теорем 2, 3 и 4, мы приводим лишь краткое изложение соответствующих рассуждений.

1. Повторяя вычисления Теоремы 2, получим, что

$$E(|\xi|, \tau = n) = \sum_{(i_0, i_1, \dots, i_n)} |h_{i_0}| |a_{i_0 i_1}| |a_{i_1 i_2}| \dots |a_{i_{n-1} i_n}| |b_{i_n}|$$

и

$$E(\xi, \tau = n) = \sum_{(i_0, i_1, \dots, i_n)} h_{i_0} a_{i_0 i_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{n-1} i_n} b_{i_n}.$$

Отсюда и из сходимости суммы (2.1.30) сразу же следует суммируемость случайной величины ξ , а также равенство

$$E\xi = \sum_{n \geq 0} \sum_{(i_0, i_1, \dots, i_n)} h_{i_0} a_{i_0 i_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{n-1} i_n} b_{i_n} = (H, X).$$

Тем самым несмещенность оценки (2.1.31) доказана.

Для доказательства соотношения (2.1.32) достаточно убедиться в том, что

$$E(\xi^2, \tau = n) = \sum_{(i_0, i_1, \dots, i_n)} \frac{h_{i_0}^2}{\pi_{i_0}} \frac{a_{i_0 i_1}^2}{p_{j i_1}} \frac{a_{i_1 i_2}^2}{p_{i_1 i_2}} \dots \frac{a_{i_{n-1} i_n}^2}{p_{i_{n-1} i_n}} \frac{b_{i_n}^2}{g_{i_n}} = \sum_{j=1}^d \frac{h_j^2}{\pi_j} \sum_{(i_1, \dots, i_n)} \frac{a_{j i_1}^2}{p_{j i_1}} \frac{a_{i_1 i_2}^2}{p_{i_1 i_2}} \dots \frac{a_{i_{n-1} i_n}^2}{p_{i_{n-1} i_n}} \frac{b_{i_n}^2}{g_{i_n}}$$

и воспользоваться равенствами (2.1.23).

2. Наконец, используя представление

$$\begin{aligned} p_{i_0 i_1 \dots i_k}^{(\text{opt})} &= \frac{|h_{i_0}| |a_{i_0 i_1}| \dots |a_{i_{k-1} i_k}| |b_{i_k}|}{\bar{J}} = \\ &= \frac{|h_{i_0}| \bar{x}_{i_0}}{\bar{J}} \left(\prod_{m=1}^k \frac{|a_{i_{m-1} i_m}| \bar{x}_{i_m}}{\bar{x}_{i_{m-1}}} \right) \frac{|b_{i_k}|}{\bar{x}_{i_k}} = \pi_{i_0}^* \left(\prod_{m=1}^k p_{i_{m-1} i_m}^* \right) g_{i_k}^* \end{aligned}$$

вместо (2.1.27) и повторяя рассуждения Теоремы 4, приходим к доказательству второго утверждения теоремы. $\square$

Замечание 15. 1. В принципе можно брать начальное распределение π равным $(\pi_1, \dots, \pi_d, \pi_{d+1})$, где $\pi_{d+1} \neq 0$, а $\pi_k \neq 0$ при $h_k \neq 0$ и $1 \leq k \leq d$. Тогда вместо (2.1.31) мы можем использовать оценку¹⁴⁶

$$\xi = \begin{cases} \frac{h_{\eta_0} a_{\eta_0 \eta_1} \dots a_{\eta_{\tau-1} \eta_\tau} b_{\eta_\tau}}{\pi_{\eta_0} p_{\eta_0 \eta_1} \dots p_{\eta_{\tau-1} \eta_\tau} g_{\eta_\tau}} & \text{при } \tau \geq 0, \\ 0 & \text{при } \tau = -1. \end{cases}$$

¹⁴⁶ Докажите, что она является несмещенной и найдите ее дисперсию.

Хотя такая конструкция выглядит не очень естественно,¹⁴⁷ она бывает полезной, если выбор начального распределения от нас мало зависит.

2. Рассмотрим наряду с системой (2.1.4) систему

$$Z = \mathbb{A}^T Z + H. \quad (2.1.33)$$

Тогда

$$(H, X) = \sum_{n \geq 0} \sum_{(i_0, i_1, \dots, i_n)} h_{i_0} a_{i_0 i_1} a_{i_1 i_2} \dots a_{i_{n-1} i_n} b_{i_n} = \sum_{n \geq 0} \sum_{(j_0, j_1, \dots, j_n)} b_{j_0} a_{j_1 j_0} \dots a_{j_n j_{n-1}} h_{j_n} = (B, Z),$$

где Z определяется предельным значением итераций¹⁴⁸ $Z_{n+1} = \mathbb{A}^T Z_n + H$, $Z_0 = H$.

Таким образом, на траекториях одной и той же марковской цепи мы можем получать оценки линейных функционалов как для «прямой» (2.1.4) так и для «сопряженной» (2.1.33) систем линейных уравнений.

3. Можно заметить, что предположение о конечной размерности матрицы является несущественным, если ряд (2.1.30) (с заменой суммирования $1 \leq i_k \leq d$ на $1 \leq i_k \leq +\infty$) имеет конечную сумму. В этом смысле мы выходим за рамки обычных вычислительных методов для конечных систем линейных алгебраических уравнений. Проведите сами соответствующие построения и доказательства.

4. Кратко обсудим, как на одной траектории марковской цепи можно получить несмещенные оценки всех координат вектора X . Выберем вектора

$$H_k = (h_1^{(k)}, \dots, h_d^{(k)})^T, \quad k = 1, \dots, d$$

так, чтобы матрица $\mathbb{H}$ со столбцами $H_1, \dots, H_d$ была обратима и обозначим $\mathbb{G} = \mathbb{H}^T$. Кроме того, возьмем начальное распределение $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_d, 0)$ такое, что $\pi_j \neq 0$ при $\min_k |h_j^{(k)}| \neq 0$.¹⁴⁹

Далее, введем вектор $\bar{\zeta} = (\zeta^{(1)}, \dots, \zeta^{(d)})^T$ с координатами

$$\zeta^{(k)} = \frac{h_{\eta_0}^{(k)} a_{\eta_0 \eta_1} \dots a_{\eta_{\tau-1} \eta_\tau} b_{\eta_\tau}}{\pi_{\eta_0} p_{\eta_0 \eta_1} \dots p_{\eta_{\tau-1} \eta_\tau} g_{\eta_\tau}},$$

так что

$$\mathbb{E} \bar{\zeta} = (H_1^T X, \dots, H_d^T X)^T = \mathbb{H}^T X.$$

Тогда, очевидно, $\mathbb{E} \mathbb{G}^{-1} \bar{\zeta} = X$ и, следовательно, случайный вектор $\bar{\xi} = \mathbb{G}^{-1} \bar{\zeta}$ является несмещенной оценкой вектора X , построенной на одной и той же траектории выбранной марковской цепи.

Вопрос об оптимальном (в смысле дисперсий и трудоемкости) одновременном оценивании всех координат вектора X сложен просто потому, что формально сводится к решению нескольких оптимизационных задач сразу.¹⁵⁰ Решение таких задач не является однозначным и поэтому здесь не рассматривается. Можно, однако, заметить, что в вычислительном плане удобно выбрать в качестве $\mathbb{H}$ ортонормированную¹⁵¹ матрицу, поскольку в этом случае $\mathbb{G}^{-1} = \mathbb{H}$.

¹⁴⁷ и, кроме того, ее дисперсия больше, чем, например, дисперсия оценки (2.1.31) с начальным распределением $\pi = (\pi_1/(1 - \pi_{d+1}), \dots, \pi_d/(1 - \pi_{d+1}), 0)$ — докажите!

¹⁴⁸ А почему они сходятся? И почему для системы (2.1.33) выполняются условия мажорируемой сходимости?

¹⁴⁹ Поскольку вектора H_k зависят от нашего выбора, этого достичь несложно: достаточно взять все $h_j^{(k)} \neq 0$ и все $\pi_j \neq 0$.

¹⁵⁰ А каких?

¹⁵¹ Но не любую! Почему выбор единичной матрицы в качестве H в этой задаче окажется, скорее всего, плохим?

2.1.6 Примеры

Пример 5. Рассмотрим совершенно не интересный в практическом плане (зато позволяющий все выписать явно) случай $d = 1$, а именно, решим методом Монте-Карло уравнение

$$x = ax + b, \quad (2.1.34)$$

считая для определенности, что $a, b \neq 0$. Решение этого уравнения существует (и единственно) при условии $a \neq 1$ и имеет вид $x = b/(1 - a)$. Если рассматривать итерационное решение уравнения (2.1.34), то есть заниматься вопросом сходимости итераций

$$x_{n+1} = ax_n + b, \quad x_0 = b,$$

то, как нетрудно видеть, условием сходимости x_n к решению уравнения (2.1.34) окажется $|a| < 1$. Это же условие необходимо и достаточно для сходимости итераций

$$\bar{x}_{n+1} = |a|\bar{x}_n + |b|, \quad \bar{x}_0 = |b|.$$

Естественно, при этом $\bar{x}_n \rightarrow \bar{x} = |b|/(1 - |a|)$. Таким образом в этом вырожденном случае условие мажорируемой сходимости выглядит как $|a| < 1$.

Построим теперь оценку по поглощению решения x уравнения (2.1.34). Для этого нужно ввести множество $D = \{1, 2\}$ и рассмотреть однородную марковскую цепь $\eta_0, \dots, \eta_n, \dots$ с начальным распределением, сосредоточенным в точке 1 и переходной матрицей

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} p & 1-p \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Условие $0 < p < 1$ обеспечивает, как нетрудно видеть,¹⁵² как согласованность этой марковской цепи с уравнением (2.1.34), так и то, что она является поглощающей. Тем самым оценка «по поглощению» (2.1.20) в данном случае имеет вид

$$\xi = \left(\frac{a}{p}\right)^\tau \frac{b}{1-p}. \quad (2.1.35)$$

Поскольку τ имеет геометрическое распределение с параметром $1 - p$,¹⁵³ то моделирование этой случайной величины ξ принципиальных сложностей не представляет.

Изучим теперь дисперсию оценки (2.1.35). Согласно Теореме 3 величина $y = E\xi^2$ является итерационным решением уравнения

$$y = a_p y + b_g, \quad y_0 = b_g,$$

где $a_p = a^2/p$ и $b_g = b^2/(1 - p)$. Отсюда сразу же следует,¹⁵⁴ что необходимым и достаточным условием конечности дисперсии случайной величины ξ является неравенство $p > \sqrt{|a|}$. При этом

$$y = \frac{b^2/(1-p)}{1 - a^2/p} = b^2 \frac{p}{1-p} \frac{1}{p - a^2},$$

а сама дисперсия имеет вид

$$D\xi = b^2 \left(\frac{p}{1-p} \frac{1}{p - a^2} - \frac{1}{(1-a)^2} \right).$$

¹⁵² Действительно?

¹⁵³ Почему?

¹⁵⁴ Действительно?

Минимальная дисперсия, согласно Теореме 4, достигается при $p = |a|$ и равна¹⁵⁵

$$D_{\text{opt}}(\xi) = \frac{b^2}{(1 - |a|)^2} - \frac{b^2}{(1 - a)^2}.$$

При этом сама оценка «по поглощению» приобретает вид

$$\xi = (\text{sign } a)^r \frac{b}{1 - |a|}.$$

Как и следует из общей теории, $D_{\text{opt}}(\xi) = 0$ при $a > 0$.

Пример 6. Рассмотрим теперь еще один простой пример. Пусть

$$A = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 \\ 1/3 & 1/4 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

и наша задача состоит в том, чтобы оценить $J = x_1 + x_2$, где x_1, x_2 — координаты вектора $X \in \mathbb{R}^2$, являющегося решением системы

$$X = AX + B. \quad (2.1.36)$$

Поскольку элементы матрицы A положительны, а ее спектральный радиус меньше 1,¹⁵⁶ то условия мажорируемой сходимости, очевидно, выполнены.¹⁵⁷

Займемся теперь заданием подходящей марковской цепи. Не будем гнаться за оптимальностью и посмотрим, какая марковская цепь нам заведомо подойдет для построения оценки по поглощению.

Ясно, что наиболее простой вид эта оценка принимает для марковской цепи с переходной матрицей

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 & 1/3 \\ 1/3 & 1/4 & 5/12 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

так как все отношения a_{ij}/p_{ij} в этом случае равны 1. Что касается начального распределения, то для простоты положим $\pi = (1/2, 1/2, 0)$.

Такой выбор, конечно, обеспечивает нам как согласованность марковской цепи с уравнением (2.1.36), так и то, что эта марковская цепь является поглощающей. Тем самым мы получаем, что оценка по поглощению оказывается равной¹⁵⁸

$$\xi = \begin{cases} 6 & \text{при } \eta_\tau = 1, \\ -24/5 & \text{при } \eta_\tau = 2. \end{cases}$$

Дисперсия этой оценки, очевидно, конечна.

¹⁵⁵Проверьте! А почему знак b на это свойство не влияет?

¹⁵⁶Так как спектральный радиус любой матрицы не превосходит максимума из сумм модулей элементов ее строк.

¹⁵⁷А заодно видно, что система (2.1.36) имеет единственное решение, получаемое итерациями (2.1.5).

¹⁵⁸Действительно?

2.2 Линейные интегральные уравнения

При решении линейных алгебраических уравнений методом Монте-Карло естественной вероятностной техникой оказались однородные марковские цепи с дискретным пространством состояний (иначе говоря — дискретным фазовым пространством). Поэтому не удивительно, что при переходе к линейным интегральным уравнениям мы снова будем дело с марковскими цепями, но их фазовые пространства будут уже достаточно произвольными.

Здесь будут изложены только те свойства этих общих марковских цепей, которые понадобятся для специфических целей метода Монте-Карло.

2.2.1 Леммы о марковских цепях и минимальных решениях

Марковские цепи. Пусть $(D, \mathcal{A})$ — измеримое пространство и π — вероятностная мера, определенная на σ -алгебре $\mathcal{A}$. Кроме того, пусть $Q : D \times \mathcal{A} \mapsto \mathbb{R}$ такое отображение, что

1. при любом $x \in D$ функция $Q(x, \cdot)$ является распределением, определенным на σ -алгебре $\mathcal{A}$,
2. при любом $A \in \mathcal{A}$ функция $Q(\cdot, A)$ является $\mathcal{A}$ -измеримой.

В этом случае функцию Q будем называть *переходной функцией*.

Определение 2.1. Последовательность случайных величин $\xi_0, \dots, \xi_n, \dots$, определенных на вероятностном пространстве $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ и принимающих значения в $(D, \mathcal{A})$ называется *однородной марковской цепью с фазовым пространством $(D, \mathcal{A})$, начальным распределением π и переходной функцией Q* , если

1. $\mathcal{L}(\xi_0) = \pi$;
2. P-п.в. для любого $n \geq 0$

$$\mathcal{L}(\xi_{n+1} | \xi_0, \dots, \xi_n) = \mathcal{L}(\xi_{n+1} | \xi_n); \quad (2.2.1)$$

3. существуют регулярные варианты условных распределений $\mathcal{L}(\xi_{n+1} \in \cdot | \xi_n = x)$, причем эти регулярные варианты не зависят от n и равны $Q(x, \cdot)$.

Конечно, это определение просто обобщает стандартное понятие ОМЦ с конечным или счетным числом состояний: первый пункт определения не требует комментариев, второй означает, что последовательность $\{\xi_n\}_{n \geq 0}$ обладает марковским свойством, а третий — одновременно — говорит, что эта последовательность является однородной и вводит аналог ее переходной матрицы — функцию $Q(x, dy)$.

Ясно,¹⁵⁹ что из пунктов 2 и 3 Определения 2.1 следует, что равенства

$$P(\xi_{n+1} \in A | \xi_0 = x_0, \dots, \xi_n = x_n) = Q(x_n, A), \quad (2.2.2)$$

выполняются $\mathcal{P}_{\xi_0, \dots, \xi_n}$ -п.в. для любых $n \geq 0$ и $A \in \mathcal{A}$.

Лемма 2. Пусть Q — некоторая переходная функция. Тогда

1. если при фиксированном $n \geq 0$ равенства (2.2.2) выполняются $\mathcal{P}_{\xi_0, \dots, \xi_n}$ -п.в. для любого $A \in \mathcal{A}$, то

$$E(f(\xi_{n+1}) | \xi_0 = x_0, \dots, \xi_n = x_n) = \int_D f(y) Q(x_n, dy)$$

$\mathcal{P}_{\xi_0, \dots, \xi_n}$ -п.в. для любой ограниченной $\mathcal{A}$ -измеримой функции f ;

2. если для любого $n \geq 0$, $\mathcal{P}_{\xi_0, \dots, \xi_n}$ -почти всех $(x_0, \dots, x_n)$ и любых $A \in \mathcal{A}$ имеют место равенства (2.2.2), то последовательность $\{\xi_n\}_{n \geq 0}$ является однородной марковской с переходной функцией Q .

¹⁵⁹ Действительно?

Доказательство. Первое утверждение леммы доказывается стандартным образом из свойств условных математических ожиданий. Второе непосредственно следует из [6, Лемма 2.2]. $\square$

Прежде чем сформулировать следующее утверждения, введем новое обозначение. Пусть $(G, \mathcal{G})$ — некоторое измеримое пространство, S_1, S_2 — две¹⁶⁰ переходные функции и P — некоторое распределение. Под распределением, определенным в $(G^3, \mathcal{G}^3)$ и обозначаемым

$$\mathcal{R}(dx_0 dx_1 dx_2) = P(dx_0)S_1(x_0, dx_1)S_2(x_1, dx_2)$$

будем понимать следующий объект. Для каждой ограниченной $\mathcal{G}^3$ -измеримой функции f положим последовательно

$$f_1(x, y) = \int_D f(x, y, z)S_2(y, dz), \quad f_2(x) = \int_D f_1(x, y)S_1(x, dy) \quad \text{и} \quad I(f) = \int_D f_2(x)P(dx).$$

Легко показать,¹⁶¹ что выбор $f = \mathbb{I}_B$, где B пробегает всю σ -алгебру $\mathcal{G}^3$, задает некоторое распределение на $\mathcal{G}^3$, которое и обозначается $\mathcal{R}$. Тем самым

$$\int_{D^3} f(x_0, x_1, x_2)\mathcal{R}(dx_0 dx_1 dx_2) = I(f).$$

В частности, при $A_1, A_2, A_3 \in \mathcal{G}$

$$\mathcal{R}(A_1 \times A_2 \times A_3) = \int_{A_1} P(dx_0) \int_{A_2} S_1(x_0, dx_1) \int_{A_3} S_2(x_1, dx_2).$$

Лемма 3. Пусть последовательность $\xi_0, \dots, \xi_n, \dots$ является однородной марковской цепью с фазовым пространством $(D, \mathcal{A})$, начальным распределением π и переходной функцией Q . Тогда при $n \geq 0$ совместное распределение случайных величин $\xi_0, \dots, \xi_n$ имеет вид

$$\pi(dx_0)Q(x_0, dx_1) \dots Q(x_{n-1}, dx_n).$$

Доказательство. Нам достаточно доказать, что для любого $n \geq 0$ и любой $\mathcal{A}^{n+1}$ -измеримой ограниченной функции f имеет место равенство

$$\mathbb{E}f(\xi_0, \dots, \xi_n) = \int_D \pi(dx_0) \int_D Q(x_0, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) f(x_0, \dots, x_n). \quad (2.2.3)$$

Докажем этот факт индукцией по n . При $n = 0$ равенство (2.2.3) превращается в очевидное

$$\mathbb{E}f(\xi_0) = \int_D \pi(dx_0)f(x_0).$$

Осуществим теперь индуктивный переход от n к $n + 1$. Для этого рассмотрим $\mathcal{A}^{n+2}$ -измеримую ограниченную функцию f и введем обозначение

$$g(x_0, \dots, x_n) = \int_D f(x_0, \dots, x_n, x_{n+1}) Q(x_n, dx_{n+1}). \quad (2.2.4)$$

Тогда по свойствам¹⁶² УМО

$$\begin{aligned} \mathbb{E}f(\xi_0, \dots, \xi_{n+1}) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}f(\xi_0, \dots, \xi_{n+1}) | \xi_0, \dots, \xi_n) = \\ &= \int_{D^{n+1}} \mathcal{P}_{\xi_0 \dots \xi_n}(dx_0 \dots dx_n) \mathbb{E}(f(x_0, \dots, x_n, \xi_{n+1}) | \xi_0 = x_0, \dots, \xi_n = x_n) \end{aligned}$$

¹⁶⁰Аналогичным образом можно рассматривать любое количество переходных функций.

¹⁶¹Проверьте!

¹⁶²Каким?

Далее (см. Лемму 2), при фиксированных $x_0, \dots, x_n$

$$\mathbb{E}(f(x_0, \dots, x_n, \xi_{n+1}) | \xi_0 = x_0, \dots, \xi_n = x_n) = \int_D f(x_0, \dots, x_n, x_{n+1}) Q(x_n, dx_{n+1}) = g(x_0, \dots, x_n).$$

Поэтому (учитывая индуктивное предположение)

$$\begin{aligned} \mathbb{E}f(\xi_0, \dots, \xi_{n+1}) &= \int_{D^{n+1}} \mathcal{P}_{\xi_0 \dots \xi_n}(dx_0 \dots dx_n) g(x_0, \dots, x_n) = \\ &= \mathbb{E}g(\xi_0, \dots, \xi_n) = \int_D \pi(dx_0) \int_D Q(x_0, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) g(x_0, \dots, x_n). \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

Подставляя в правую часть (2.2.5) выражение (2.2.4) для g , получим требуемое. $\square$

Замечание 16. Используя теорему Колмогорова о конечномерных распределениях, можно доказать,¹⁶³ что для всякого сепарабельного метрического пространства¹⁶⁴ (D, ρ) с борелевской σ -алгеброй $\mathcal{A}$, любого распределения π и любой переходной функции Q существует вероятностное пространство $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ и последовательность случайных величин $\{\xi_i\}_{i \geq 0}$, определенных на этом вероятностном пространстве и принимающих значения в $(D, \mathcal{A})$, которая является ОМЦ с начальным распределением π и переходной функцией Q .

Более того, конструкция Колмогорова (и Ионеску-Тулча) позволяет на одном и том же вероятностном пространстве и с одними и теми же случайными величинами $\{\xi_i\}_{i \geq 0}$ рассматривать одновременно сколько угодно марковских цепей с различными начальными распределениями и переходными функциями.¹⁶⁵ Этот прием будет использован в разделе про поглощающие марковские цепи.

Минимальные решения уравнений. Прежде чем перейти к дальнейшим свойствам марковских цепей, докажем одно утверждение о минимальном решении уравнений.

Рассмотрим измеримое пространство $(D, \mathcal{A})$ и множество $\mathbb{S}^+ = \mathbb{S}^+(D)$ заданных на нем измеримых функций $\varphi : D \mapsto [0, +\infty]$.¹⁶⁶ Поскольку точка $+\infty$ включена в множество возможных значений функций из $\mathbb{S}^+$, то, например, функция, заданная на D и тождественно равная бесконечности, принадлежит $\mathbb{S}^+$.

Ясно, что $\sum_i \varphi_i \in \mathbb{S}^+$, если только все φ_i сами принадлежат $\mathbb{S}^+$. Кроме того, $a\varphi \in \mathbb{S}^+$ при $\varphi \in \mathbb{S}^+$ и неотрицательной постоянной a .

Теперь рассмотрим оператор $\mathbb{L} : \mathbb{S}^+ \mapsto \mathbb{S}^+$, и потребуем, чтобы он обладал следующими свойствами:

1. $\mathbb{L}\mathbf{0} = \mathbf{0}$, где $\mathbf{0}$ обозначает функцию, тождественно равную нулю;
2. если $\varphi_i \in \mathbb{S}^+$ при всех i , то

$$\mathbb{L}\left(\sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{L}\varphi_i.$$

Отсюда легко вывести,¹⁶⁷ что $\mathbb{L}(\sum_{i=1}^n \varphi_i) = \sum_{i=1}^n \mathbb{L}\varphi_i$ (конечная аддитивность) и что $\mathbb{L}\varphi_1 \geq \mathbb{L}\varphi_2$ при $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathbb{S}^+$ и $\varphi_1 \geq \varphi_2$ (монотонность, оба неравенства понимаются поточечно).

¹⁶³Попробуйте!

¹⁶⁴На самом деле по теореме Ионеску-Тулча (см. [11, с. 228]) здесь можно обойтись без всяких топологических требований.

¹⁶⁵И не только их.

¹⁶⁶Множество $[0, +\infty]$ снабжено естественной σ -алгеброй: измеримыми объявляются все борелевские подмножества полупрямой $[0, \infty)$ и одноточечное множество $\{+\infty\}$, а потом строится минимальная σ -алгебра, содержащая все эти множества. Как, кстати, выглядит эта получившаяся σ -алгебра?

¹⁶⁷Убедитесь!

Простейшим примером оператора $\mathbb{L}$ является обычный интеграл по мере с положительным ядром g :

$$\mathbb{L}\varphi(x) = \int_D g(x, y)\varphi(y)\mu(dy),$$

в дальнейшем нам понадобится чуть более сложная конструкция.

Лемма 4. Рассмотрим уравнение

$$\varphi = \mathbb{L}\varphi + f, \quad f \in \mathbb{S}^+ \quad (2.2.6)$$

и при $n \geq 0$ функции

$$\varphi_n = \sum_{k=0}^n \mathbb{L}^k f.$$

Тогда

1. Функции φ_n удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$\varphi_{n+1} = \mathbb{L}\varphi_n + f \quad \text{с } \varphi_0 = f, \quad (2.2.7)$$

2. $\varphi_n \leq \varphi_{n+1} \uparrow \varphi^*$, причем $\varphi^* \in \mathbb{S}^+$,

3. φ^* является поточечно минимальным в $\mathbb{S}^+$ решением уравнения (2.2.6).

Доказательство. Первое утверждение проверяется непосредственно. Поточечная монотонность φ_n по параметру n следует из того, что $\varphi_{n+1} = \varphi_n + \mathbb{L}^{n+1}f$. Поэтому существует предел

$$\varphi^* = \lim_n \varphi_n = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{L}^k f,$$

который принадлежит $\mathbb{S}^+$ по уже упомянутым свойствам этого пространства.

Далее, тот факт, что φ^* является решением уравнения (2.2.6), следует из равенства

$$\mathbb{L}\varphi^* = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{L}^k f = \varphi^* - f.$$

Осталось доказать, что φ^* — минимальное решение (2.2.6). Пусть φ — некоторое решение (2.2.6), принадлежащее $\mathbb{S}^+$. Тогда имеет место цепочка неравенств¹⁶⁸

$$\begin{aligned} \varphi &= \mathbb{L}\varphi + f \geq f = \varphi_0, \\ \varphi &= \mathbb{L}^2\varphi + \mathbb{L}f + f \geq \mathbb{L}f + f = \varphi_1, \\ &\dots \\ \varphi &= \mathbb{L}^{n+1}\varphi + \sum_{k=0}^n \mathbb{L}^k f \geq \sum_{k=0}^n \mathbb{L}^k f = \varphi_n, \\ &\dots \end{aligned}$$

Тем самым $\varphi \geq \varphi_n$ для любого n и, следовательно, $\varphi \geq \lim_n \varphi_n = \varphi^*$. □

Замечание 17. Тем самым доказано, что минимальное решение уравнения (2.2.6) является итерационным, то есть пределом итераций (2.2.7). При этом φ^* не обязано принимать только конечные значения, в принципе, возможен вариант $\varphi^* \equiv +\infty$. Тогда конечных (неотрицательных) решений уравнение (2.2.6) просто не имеет.

¹⁶⁸Эта цепочка получается рекуррентно: если в правую часть n -го равенства подставить вместо φ ее выражение из правой части первого равенства, то получится $n+1$ -е.

Поглощающие марковские цепи. Рассмотрим измеримое пространство $(D, \mathcal{A})$ и точку $\Delta \notin D$. Положив $D' = D \cup \{\Delta\}$ и $\mathcal{A}' = \sigma(\mathcal{A}, \{\Delta\})$, получим измеримое пространство $(D', \mathcal{A}')$. Заметим, что в σ -алгебру $\mathcal{A}'$ входят σ -алгебра $\mathcal{A}$ и множества вида $A \cup \{\Delta\}$, где $A \in \mathcal{A}$, других подмножеств D' σ -алгебра $\mathcal{A}'$ не содержит.¹⁶⁹

Пусть теперь $\xi_0, \dots, \xi_n, \dots$ — ОМЦ с фазовым пространством $(D', \mathcal{A}')$, начальным распределением π' и переходной функцией Q' . При этом будем считать, что $Q'(\Delta, \{\Delta\}) = 1$. Это условие означает, что если марковская цепь попала в точку Δ , то она из нее уже не выйдет. Поэтому Δ называется *поглощающим состоянием* марковской цепи.

Обозначим

$$\tau + 1 = \min(n : \xi_n = \Delta).$$

Тогда (бесконечная) траектория марковской цепи приобретает вид

$$\xi_0, \dots, \xi_\tau, \Delta, \Delta, \dots,$$

где $\xi_i \in D$ при $i \leq \tau$. Конечно, возможны случаи $\tau = \infty$ (тогда поглощения вообще не происходит) и $\tau = -1$ — тогда марковская цепь с самого начала пребывает в поглощающем состоянии. Если $P(\tau < \infty) = 1$, то марковская цепь будет называться *поглощающей*. В дальнейшем мы обычно будем считать, что $\pi'(D) = 1$, или, что то же самое, $P(\tau \geq 0) = 1$.

Кроме того, введем следующие обозначения.

1. При $A \in \mathcal{A}$ вместо $\pi'(A)$ мы будем писать $\pi(A)$. Иначе говоря, сужение π' на $\mathcal{A}$ обозначается π .
2. Если $x \in D$, то $g(x) \stackrel{\text{def}}{=} Q'(x, \{\Delta\})$. Смысл числа $g(x)$ понятен — это вероятность попасть из «живой» точки $x \in D$ в поглощающее состояние за один шаг марковской цепи.
3. Если $x \in D$ и $A \in \mathcal{A}$, то вместо $Q'(x, A)$ мы будем писать $Q(x, A)$.

Замечание 18. Тем самым пара π, Q , где $\pi(D) \leq 1$ и $Q(x, D) \leq 1$ определяет всевозможные конечномерные распределения (не обязательно поглощающей) ОМЦ с фазовым пространством $(D', \mathcal{A}')$ и вероятностью поглощения $g(x) = P(x, \{\Delta\}) = 1 - Q(x, D)$, $(x \in D)$.

Лемма 5. Пусть $n \geq 0$ и f — ограниченная $\mathcal{A}^{n+1}$ -измеримая функция. Тогда

$$E(f(\xi_0, \dots, \xi_\tau), \tau = n) = \int_D \pi(dx_0) \int_D Q(x_0, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) f(x_0, \dots, x_n) g(x_n). \quad (2.2.8)$$

Доказательство. Прежде всего заметим, что на множестве $\tau = n$ случайные величины $\xi_0, \dots, \xi_\tau$ принимают значения в D и $E(f(\xi_0, \dots, \xi_\tau), \tau = n) = E(f(\xi_0, \dots, \xi_n), \tau = n)$. Кроме того, при $n = 0$ равенство (2.2.8) приобретает вид

$$E(f(\xi_0), \tau = 0) = \int_D \pi(dx_0) f(x_0) g(x_0).$$

Далее, $\{\tau = n\} = \{\xi_0 \in D, \dots, \xi_n \in D, \xi_{n+1} = \Delta\}$, и поэтому

$$E(f(\xi_0, \dots, \xi_n), \tau = n) = E h(\xi_0, \dots, \xi_n, \xi_{n+1}),$$

где

$$h(x_0, \dots, x_n, x_{n+1}) = f(x_0, \dots, x_n) \left(\prod_{i=0}^n \mathbb{I}_D(x_i) \right) \mathbb{I}_\Delta(x_{n+1}), \quad x_i \in D'. \quad (2.2.9)$$

¹⁶⁹ А почему?

Теперь, используя равенства (2.2.3), (2.2.9) и введенные обозначения π, Q, g , видим, что

$$\begin{aligned} Eh(\xi_0, \dots, \xi_{n+1}) &= \int_{D'} \pi'(dx_0) \int_{D'} Q'(x_0, dx_1) \dots \int_{D'} Q'(x_{n-1}, dx_n) Q'(x_n, dx_{n+1}) h(x_0, \dots, x_n, x_{n+1}) = \\ &= \int_D \pi'(dx_0) \int_D Q'(x_0, dx_1) \dots \int_D Q'(x_{n-1}, dx_n) Q'(x_n, \Delta) f(x_0, \dots, x_n) = \\ &= \int_D \pi(dx_0) \int_D Q(x_0, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) g(x_n) f(x_0, \dots, x_n). \end{aligned}$$

Утверждение доказано. $\square$

Теперь, воспользовавшись Замечанием 16, рассмотрим последовательность случайных величин $\{\xi_i\}_{i \geq 0}$, являющейся однородными марковскими цепями с фазовым пространством $(D', \mathcal{A}')$, переходной функцией Q' и всевозможными начальными распределениями.

Пусть B — некоторое событие, порожденное последовательность $\{\xi_i\}_{i \geq 0}$.¹⁷⁰ Если начальное распределение марковской цепи $\{\xi_i\}_{i \geq 0}$ сосредоточено¹⁷¹ в точке $x \in D'$, то соответствующая вероятность события B будет обозначаться $P_x(B)$. Если же начальное распределение изменить на π , то получится¹⁷²

$$P(B) = P_\pi(B) = \int_{D'} P_x(B) \pi(dx). \quad (2.2.10)$$

Таким образом, для вычисления какой-то вероятности, связанной с марковской цепью, имеющей начальное распределение π и переходной функцией Q , нам достаточно рассмотреть всевозможные фиксированные начальные положения этой марковской цепи, а потом проинтегрировать результат по нужному нам начальному распределению.

Такое же обозначение (то есть E_x) вводится для математических ожиданий, для него тоже имеют место формулы, аналогичные (2.2.10).¹⁷³

Эти соображения будут применяться к изучению вопроса о том, является ли марковская цепь с фазовым пространством $(D', \mathcal{A}')$, поглощающим состоянием Δ , начальным распределением $\pi' = \pi$, сосредоточенным в D и переходной функцией Q' , поглощающей.

Для $x \in D$ положим $\alpha(x) = P_x(\tau < \infty)$ (при $x = \Delta$ эта вероятность, очевидно, всегда равна 1).

Лемма 6. Функция $\alpha(x), x \in D$ является поточечно минимальным неотрицательным решением уравнения

$$\alpha(x) = \int_D Q(x, dy) \alpha(y) + g(x). \quad (2.2.11)$$

Доказательство. Для доказательства будем рассматривать уравнение (2.2.11) как уравнение в пространстве $\mathbb{S}^+(D)$, где интегральный оператор в правой части (2.2.11) играет роль оператора $\mathbb{L}$ раздела о минимальных решениях.¹⁷⁴ Следовательно, минимальное решение α_* уравнения (2.2.11) является итерационным: $\alpha^* = \lim_n \alpha_n$, где

$$\alpha_n(x) = \int_D Q(x, dy) \alpha_{n-1}(y) + g(x), \quad \alpha_0(x) = g(x).$$

¹⁷⁰С формальной точки зрения это означает, что B принадлежит σ -алгебре $\sigma((\xi_0, \dots, \xi_n), n \geq 0)$.

¹⁷¹Опять же с формальной точки зрения для этого необходимо, чтобы все одноточечные множества были $\mathcal{A}'$ -измеримы. Если σ -алгебра является борелевской и порождена метрикой, то это всегда так.

¹⁷²Это, конечно, всего-навсего «формула полной вероятности».

¹⁷³А какие именно?

¹⁷⁴Убедитесь, что это можно сделать.

Легко доказать по индукции,¹⁷⁵ что

$$\alpha_n(x) = g(x) + \sum_{i=1}^n \int_D Q(x, dx_1) \int_D Q(x_1, dx_2) \dots \int_D Q(x_{i-1}, dx_i) g(x_i)$$

и, следовательно, минимальное решение уравнения (2.2.11) имеет вид

$$\alpha^*(x) = g(x) + \sum_{i=1}^{\infty} \int_D Q(x, dx_1) \int_D Q(x_1, dx_2) \dots \int_D Q(x_{i-1}, dx_i) g(x_i). \quad (2.2.12)$$

Теперь, положив $f \equiv 1$ в равенстве (2.2.8) и заметив, что в нашем случае начальное распределение представляет собой дельта-меру $\delta_x(dx_0)$, получим, что

$$P_x(\tau = n) = \int_D \delta_x(dx_0) \int_D Q(x_0, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) g(x_n) = \int_D Q(x, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) g(x_n).$$

Тем самым¹⁷⁶

$$P_x(\tau < \infty) = \sum_{n=0}^{\infty} P_x(\tau = n) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_D Q(x, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) g(x_n) \quad (2.2.13)$$

что и требовалось доказать. $\square$

Лемма 7. Пусть $\alpha(x) = P_x(\tau < \infty) = 1$. При $x \in D$ обозначим $M(x) = E_x(\tau + 1)$. Тогда функция $M(x)$ является минимальным неотрицательным решением уравнения

$$M(x) = \int_D Q(x, dy) M(y) + 1. \quad (2.2.14)$$

Доказательство. Точно также как в Лемме 2.2.14, минимальное решение M^* уравнения (2.2.14) является итерационным, причем на этот раз

$$M^*(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_D Q(x, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n).$$

Далее, так как $\tau \geq 0$, то

$$E_x(\tau) = \sum_{n \geq 0} n P(\tau = n) = \sum_{n \geq 1} n P(\tau = n) = \sum_{n \geq 1} P_x(\tau \geq n),$$

а

$$P_x(\tau \geq n) = P_x(\xi_0 \in D, \dots, \xi_n \in D) = \int_D Q(x, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n).$$

Утверждение доказано. $\square$

Замечание 19. 1. Как уже было сказано, если рассматривать ОМЦ с начальным распределением $\pi' = \pi$, сосредоточенным в D , то

$$P(\tau < \infty) = P_{\pi}(\tau < \infty) = \int_D \alpha^*(x) \pi(dx),$$

¹⁷⁵Проверьте!

¹⁷⁶так как $P_x(\tau = 0) = g(x)$.

где α^* — минимальное неотрицательное решение уравнения (2.2.11). Аналогичным образом, если $P(\tau < \infty) = 1$, то¹⁷⁷

$$E\tau = \int_D M^*(x)\pi(dx),$$

где M^* — минимальное решение уравнения (2.2.14).

2. Нетрудно видеть,¹⁷⁸ что тождественная единица является решением уравнения (2.2.11). Отсюда сразу же следует, что если уравнение (2.2.11) имеет единственное неотрицательное (и ограниченное) решение, то $P_x(\tau < \infty) = 1$ при любом $x \in D$, и, следовательно, марковская цепь является поглощающей для любого начального распределения, сосредоточенного в D .

Что бы понять, какие существуют естественные достаточные условия для того, чтобы марковская цепь была поглощающей, рассмотрим банахово пространство $\mathbf{B} = \mathbf{B}(D)$ ограниченных измеримых функций с нормой $\|f\| = \sup_{x \in D} |f(x)|$ и заметим, что оператор $\mathbb{Q}$, определенный равенством

$$\mathbb{Q}f(x) = \int_D Q(x, dy)f(y),$$

действует из $\mathbf{B}$ в $\mathbf{B}$. Следовательно, достаточным условием единственности решения уравнения (2.2.11) является условие $\|\mathbb{Q}\| < 1$, где

$$\|\mathbb{Q}\| = \sup_{\|f\|=1} \sup_{x \in D} \left| \int_D Q(x, dy)f(y) \right|, \quad f \in \mathbf{B}. \quad (2.2.15)$$

Легко показать,¹⁷⁹ что супремум в правой части (2.2.15) достигается при $f \equiv 1$, и поэтому

$$\|\mathbb{Q}\| = \sup_{x \in D} Q(x, D) = \sup_{x \in D} (1 - g(x)) = 1 - \inf_{x \in D} g(x).$$

Следовательно, если $g(x) > \varepsilon > 0$, то марковская цепь является поглощающей. В этих же условиях $E\tau < \infty$.

Конечно, условие $g(x) > \varepsilon > 0$ является лишь достаточным.¹⁸⁰

Известно, что уравнение (2.2.11) имеет единственное решение, если $\|\mathbb{Q}^k\| < 1$ при некотором $k \geq 1$. Как (в терминах Q и g) будет выглядеть достаточное условие того, что $P_x(\tau < \infty) = 1$ при любом $x \in D$, если $\|\mathbb{Q}^2\| < 1$ (и, например, $\|\mathbb{Q}\| = 1$)?

¹⁷⁷Если $P(\tau < \infty) < 1$, то $E\tau = \infty$.

¹⁷⁸Так как $Q(x, D) = 1 - g(x)$.

¹⁷⁹Действительно?

¹⁸⁰Приведите соответствующий пример.

2.2.2 Интегральные уравнения и условие мажорируемой сходимости

Естественно ожидать, что решение линейных интегральных уравнений методом Монте-Карло использует те же идеи, которые применялись при решении систем линейных алгебраических уравнений. Поэтому не удивительно, что здесь тоже встретятся 3 условия: условие «мажорируемой сходимости» для решаемого уравнения, условие «поглощения» для используемой марковской цепи и условие «согласованности» между уравнением и марковской цепью.

Начнем с первого условия.

Основные объекты и обозначения. Пусть $(D, \mathcal{A})$ — некоторое измеримое пространство. Введем следующие объекты.

1. Рассмотрим меры μ^+ и μ^- , определенные на $\mathcal{A}$, причем будем считать, что эти меры имеют дизъюнктные носители, и положим $|\mu| = \mu^+ + \mu^-$.
2. Введем пространство $\mathbb{L}_{|\mu|}^1 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{L}^1(d|\mu|)$ функций, определенных на D , измеримых относительно $\mathcal{A}$ и суммируемых на D с мерой $|\mu|$.
3. Для любой функции $h \in \mathbb{L}_{|\mu|}^1$ положим $\int_D h d\mu = \int_D h d\mu^+ - \int_D h d\mu^-$.
4. На множестве $D \times \mathcal{A}$ рассмотрим функции $K^+ : D \times \mathcal{A} \mapsto [0 + \infty]$ и $K^- : D \times \mathcal{A} \mapsto [0 + \infty]$ такие, что
 - для любого $A \in \mathcal{A}$ функции $K^\pm(\cdot, A)$ являются $\mathcal{A}$ -измеримыми,¹⁸¹
 - при любом $x \in D$ функции $K^\pm(x, \cdot) : \mathcal{A} \mapsto [0 + \infty]$ являются мерами.
 - для любого x носители мер $K^\pm(x, \cdot)$ являются дизъюнктными.
5. Положим $|K|(x, dy) = K^+(x, dy) + K^-(x, dy)$. Конечно, $|K|$ обладает теми же свойствами, что и $K^\pm$.
6. Будем считать, что интегральные операторы

$$\mathbb{K}^\pm h(x) = \int_D K^\pm(x, dy) h(y)$$

действуют из $\mathbb{L}_{|\mu|}^1$ в $\mathbb{L}_{|\mu|}^1$.

7. Тогда, очевидно, этим же свойством обладают операторы $\overline{\mathbb{K}}$ и $\mathbb{K}$, определяемые равенствами

$$\overline{\mathbb{K}} h(x) = \int_D |K|(x, dy) h(y) = \int_D K^+(x, dy) h(y) + \int_D K^-(x, dy) h(y)$$

и

$$\mathbb{K} h(x) = \int_D K^+(x, dy) h(y) - \int_D K^-(x, dy) h(y),$$

где $h \in \mathbb{L}_{|\mu|}^1$.

Последний оператор мы будем записывать как¹⁸²

$$\mathbb{K} h(x) = \int_D K(x, dy) h(y).$$

¹⁸¹То, что $K^\pm(x, A)$ может равняться $+\infty$, не должно нас смущать: просто полный прообраз точки $+\infty$ тоже объявляется $\mathcal{A}$ -измеримым.

¹⁸²Вообще говоря, некорректно рассматривать “заряд” $K(x, dy)$ как единый объект, так как положительная и отрицательная части этого заряда могут быть бесконечными. Тем не менее интеграл от этого “заряда” от функции $h \in \mathbb{L}^1(d|\mu|)$ является конечным. Отсюда и некоторая хитрости в определении оператора $\mathbb{K}$.

8. Наконец, пусть $f \in \mathbb{L}_{|\mu|}^1$.

Лемма 8. Для любых $x \in D$ и $h \in \mathbb{L}_{|\mu|}^1$

$$|\mathbb{K}^n h(x)| \leq \bar{\mathbb{K}}^n |h|(x).$$

Доказательство. Действительно,

$$\begin{aligned} |\mathbb{K}h(x)| &= \left| \int_D \left(K^+(x, dy)(h^+(y) - h^-(y)) - K^-(x, dy)(h^+(y) - h^-(y)) \right) \right| \leq \\ &\leq \int_D \left(K^+(x, dy)(h^+(y) + h^-(y)) + K^-(x, dy)(h^+(y) + h^-(y)) \right) = \\ &= \int_D \left(K^+(x, dy)|h|(y) + K^-(x, dy)|h|(y) \right) = \int_D |K|(x, dy)|h|(y) = \bar{\mathbb{K}}|h|(x). \end{aligned}$$

Далее, $|\mathbb{K}^n h(x)| = |\mathbb{K}(\mathbb{K}^{n-1}h)(x)| \leq \bar{\mathbb{K}}|\mathbb{K}^{n-1}h(x)|$, что и заканчивает доказательство. $\square$

Условие мажорируемой сходимости. Мы будем рассматривать одновременно два интегральных уравнения:

$$\varphi = \mathbb{K}\varphi + f, \quad \text{то есть} \quad \varphi(x) = \int_D K(x, dy)\varphi(y) + f(x) \quad (2.2.16)$$

и

$$\bar{\varphi} = \bar{\mathbb{K}}\bar{\varphi} + |f|, \quad \text{то есть} \quad \bar{\varphi}(x) = \int_D |K|(x, dy)\bar{\varphi}(y) + |f|(x). \quad (2.2.17)$$

Оба уравнения трактуются как уравнения в $\mathbb{L}_{|\mu|}^1$. Уравнение (2.2.17) обычно называют *мажорирующим*.

Нашей целью является оценка методом Монте-Карло интеграла $J = \int_D \varphi d\mu$, где φ — решение уравнения (2.2.16). Естественно, что для корректности такой постановки задачи требуются дополнительные условия, обеспечивающие существование этого решения. Кроме того, как мы уже убедились при рассмотрении линейных алгебраических уравнений, метод Монте-Карло налагает свои достаточно сильные ограничения на саму задачу.

Все эти ограничения сводятся к *условию мажорируемой сходимости*, которое накладывается на мажорирующее уравнение (2.2.17). Это условие состоит в том, что метод последовательных приближений

$$\bar{\varphi}_n = \bar{\mathbb{K}}\bar{\varphi}_{n-1} + |f|, \quad \bar{\varphi}_0 = |f| \quad (2.2.18)$$

сходится к некоторой функции $\bar{\varphi}$, принадлежащей $\mathbb{L}_{|\mu|}^1$. Обсудим это условие подробнее.

Лемма 9. 1. Итерации (2.2.18) корректно определены, причем $\bar{\varphi}_n \in \mathbb{L}_{|\mu|}^1$.

2. Имеют место равенства

$$\bar{\varphi}_n = |f| + \sum_{i=1}^n \bar{\mathbb{K}}^i |f|, \quad (2.2.19)$$

которое в развернутой форме имеет вид

$$\bar{\varphi}_n(x) = |f|(x) + \sum_{i=1}^n \int_D |K|(x, dx_1) \int_D |K|(x_1, dx_2) \dots \int_D |K|(x_{i-1}, dx_i) |f|(x_i). \quad (2.2.20)$$

3. Условие мажорируемой сходимости эквивалентно тому, что

$$\bar{J} \stackrel{\text{def}}{=} \int_D |f|(x_0) |\mu|(dx_0) + \sum_{i=1}^{\infty} \int_D |\mu|(dx_0) \int_D |K|(x_0, dx_1) \dots \int_D |K|(x_{n-1}, dx_i) |f|(x_n) < \infty, \quad (2.2.21)$$

при этом функция

$$\bar{\varphi}(x) = |f|(x) + \sum_{i=1}^{\infty} \int_D |K|(x, dx_1) \int_D |K|(x_1, dx_2) \dots \int_D |K|(x_{i-1}, dx_i) |f|(x_i) \quad (2.2.22)$$

является решением уравнения (2.2.17) (и автоматически принадлежит $\mathbb{L}_{|\mu|}^1$), а $\bar{J} = \int_D \bar{\varphi} d|\mu|$.

Доказательство. 1. Утверждение следует из того, что $\bar{\mathbb{K}} : \mathbb{L}_{|\mu|}^1 \mapsto \mathbb{L}_{|\mu|}^1$ и $|f| \in \mathbb{L}_{|\mu|}^1$.

2. Равенство (2.2.19) доказывается простой индукцией. Для доказательства (2.2.20) достаточно убедиться в том, что

$$\bar{\mathbb{K}}^n |f|(x) = \int_D |K|(x, dx_1) \int_D |K|(x_1, dx_2) \dots \int_D |K|(x_{n-1}, dx_n) |f|(x_n).$$

Поскольку

$$\bar{\mathbb{K}}^n |f|(x) = \int_D |K|(x, dx_1) \bar{\mathbb{K}}^{n-1} |f|(x_1),$$

то все снова сводится к простой индукции.

3. Из Леммы 4 следует, что $\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{\varphi}_n$ является поточечно минимальным неотрицательным решением уравнения (2.2.17) в классе всех измеримых неотрицательных функций, возможно, принимающих бесконечные значения.¹⁸³ Равенство (2.2.20) показывает, что этот предел равен функции $\bar{\varphi}$, которая определяется равенством (2.2.22). Согласно условию мажорируемой сходимости $\bar{\varphi} \in \mathbb{L}_{|\mu|}^1$. Почленно интегрируя¹⁸⁴ правую часть (2.2.22) по мере $|\mu|$, приходим к равенству (2.2.21). $\square$

Следующее утверждение показывает, что аналогичные свойства имеет и уравнение (2.2.16).

Предложение 8. Пусть выполнены условия мажорируемой сходимости. Тогда ряд

$$\varphi \stackrel{\text{def}}{=} f + \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{K}^i f \quad (2.2.23)$$

сходится в $\mathbb{L}_{|\mu|}^1$. При этом

$$J \stackrel{\text{def}}{=} \int_D \varphi d\mu = \int_D f(x_0) \mu(dx_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_D \mu(dx_0) \int_D K(x_0, dx_1) \dots \int_D K(x_{n-1}, dx_n) f(x_n) \quad (2.2.24)$$

и $|J| \leq \bar{J}$.

Доказательство. Первое утверждение следует из того, что при $n \rightarrow \infty$

$$\int_D \left| \sum_{i \geq n} \mathbb{K}^i f \right| d|\mu| \leq \sum_{i \geq n} \int_D |\mathbb{K}^i f| d|\mu| \leq \sum_{i \geq n} \int_D \bar{\mathbb{K}}^i |f| d|\mu| \rightarrow 0$$

ввиду Леммы 8 и условия мажорируемой сходимости в форме неравенства (2.2.21). После этого второе утверждение становится очевидным. $\square$

¹⁸³Проверьте это.

¹⁸⁴А это можно?

2.2.3 Оценка «по поглощению» и ее свойства

Теперь приступим к Монте-Карловскому решению уравнения

$$\varphi(x) = \int_D K(x, dy)\varphi(y) + f(x). \quad (2.2.25)$$

Будем считать, что для него выполнено условие мажорируемой сходимости (2.2.21), то есть

$$\bar{J} \stackrel{\text{def}}{=} \int_D |f|(x_0)|\mu|(dx_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_D |\mu|(dx_0) \int_D |K|(x_0, dx_1) \dots \int_D |K|(x_{n-1}, dx_n) |f|(x_n) < \infty,$$

которое обеспечивает сходимость ряда

$$J \stackrel{\text{def}}{=} \int_D \varphi d\mu = \int_D f(x_0)\mu(dx_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_D \mu(dx_0) \int_D K(x_0, dx_1) \dots \int_D K(x_{n-1}, dx_n) f(x_n).$$

Наша цель — построить несмещенную оценку величины J и исследовать свойства этой оценки.

Для этого, как в разделе (2.2.1), рассмотрим ОМЦ $\xi_0, \dots, \xi_n, \dots$ с фазовым пространством $(D', \mathcal{A}')$ с $D' = D \cup \{\Delta\}$, поглощающим состоянием Δ , начальным распределением π , сосредоточенным в D , вероятностью поглощения $g(x)$ ($x \in D$) и сужением $Q(x, A)$ ($x \in D$, $A \in \mathcal{A}$) переходной функции марковской цепи на измеримое пространство $(D, \mathcal{A})$, так что $Q(x, D) = 1 - g(x)$ при $x \in D$.

Эта марковская цепь предполагается поглощающей, то есть считается, что выполнено условие $P(\tau < \infty) = 1$, где $\tau + 1 = \min\{n : \xi_n = \Delta\}$.

Наконец, налагается условия *согласованности* между уравнением (2.2.25) и описанной марковской цепью. Эти условия состоят в том, что

1. существует производная Р-Н $\mu_\pi = d\mu/d\pi$. Согласно общим свойствам зарядов, $|\mu_\pi| = d|\mu|/d\pi$. Последнее выражение обозначается как $|\mu|_\pi$.

2. при всех $x \in D$ существуют производные Р-Н $K_Q^\pm(x, y) = dK^\pm(x, dy)/dQ(x, dy)$.

Отсюда сразу же будет следовать, что $d|K|(x, dy)/dQ(x, dy) = K_Q^+(x, y) + K_Q^-(x, y)$.

Разность $K_Q^+(x, y) - K_Q^-(x, y)$ будем обозначать $K_Q(x, y)$. Ввиду того, что носители мер $K^\pm(x, dy)$ не пересекаются, $|K_Q(x, y)| = |K_Q|(x, y)$.

3. если $f(x) \neq 0$, то $g(x) \neq 0$. Как обычно, положим

$$f_g(x) = \begin{cases} f(x)/g(x) & \text{при } g(x) \neq 0, \\ 0 & \text{при } g(x) = 0. \end{cases}$$

Снова $|f_g(x)| = |f|_g$.

Несмещенность.

Теорема 6. Пусть для уравнения (2.2.25) выполнено условие мажорируемой сходимости, марковская цепь $\xi_0, \dots, \xi_n, \dots$ является поглощающей и выполняются условия согласованности между уравнением и марковской цепью.

Введем случайную величину

$$\eta = \mu_\pi(\xi_0)K_Q(\xi_0, \xi_1) \dots K_Q(\xi_{\tau-1}, \xi_\tau)f_g(\xi_\tau). \quad (2.2.26)$$

Тогда $E|\eta| = \bar{J}$ и $E\eta = J$.

Доказательство. Рассмотрим

$$E|\eta| = \sum_{n \geq 0} E(|\eta|, \tau = n) = \sum_{n \geq 0} E(|\mu_\pi(\xi_0)K_Q(\xi_0, \xi_1) \dots K_Q(\xi_{n-1}, \xi_n)f_g(\xi_n)|, \tau = n).$$

Согласно Лемме 5

$$\begin{aligned} & E(|\mu_\pi(\xi_0)K_Q(\xi_0, \xi_1) \dots K_Q(\xi_{n-1}, \xi_n)f_g(\xi_n)|, \tau = n) = \\ & = \int_{D^n} |\mu_\pi(x_0)| |K_Q(x_0, x_1)| \dots |K_Q(x_{n-1}, x_n)| |f_g(x_n)| \pi(dx_0)Q(x_0, dx_1) \dots Q(x_{n-1}, dx_n)g(x_n) = \\ & = \int_D |\mu_\pi(x_0)| \pi(dx_0) \int_D |K_Q(x_0, x_1)| Q(x_0, dx_1) \dots \int_D |K_Q(x_{n-1}, x_n)| Q(x_{n-1}, dx_n) |f_g(x_n)| g(x_n) = \\ & = \int_D |\mu|_\pi(x_0) \pi(dx_0) \int_D |K|_Q(x_0, x_1) Q(x_0, dx_1) \dots \int_D |K|_Q(x_{n-1}, x_n) Q(x_{n-1}, dx_n) |f|_g(x_n) g(x_n). \end{aligned}$$

По свойствам производных Радона-Никодима последнее выражение имеет вид

$$\int_D |\mu|(dx_0) \int_D |K|(x_0, x_1) \dots \int_D |K|(x_{n-1}, x_n) |f|(x_n).$$

Таким образом, $E|\eta| = \bar{J} < \infty$ и случайная величина η имеет конечное математическое ожидание. Теперь, повторяя предыдущие рассуждения, получаем, что

$$\begin{aligned} E(\eta, \tau = n) & = \int_D \mu_\pi(x_0) \pi(dx_0) \int_D K_Q(x_0, x_1) Q(x_0, dx_1) \dots \int_D K_Q(x_{n-1}, x_n) Q(x_{n-1}, dx_n) f_g(x_n) g(x_n) = \\ & = \int_D \mu(dx_0) \int_D K(x_0, x_1) \dots \int_D K(x_{n-1}, x_n) f(x_n) \end{aligned}$$

и $E\eta = J$. □

Замечание 20. 1. Оценка (2.2.26) называется *оценкой по-поглощению*.

2. Если условия поглощающей марковской цепи и согласованности выполнены, то условие мажорируемой сходимости является необходимым и достаточным для несмещенности оценки η .

3. Остановимся на одном из вариантов алгоритмической схемы получения оценки «по поглощению».¹⁸⁵ Пусть S — произвольное распределение, определенное на измеримом пространстве $(D, \mathcal{A})$. Положим

$$R(x, dy) = \begin{cases} \frac{Q(x, dy)}{1 - g(x)} & \text{при } g(x) < 1, \\ S(dy) & \text{иначе.} \end{cases}$$

Ясно, что $R(x, \cdot)$ является вероятностной мерой при любом $x \in D$.

Алгоритмическая схема моделирования оценки «по поглощению»

Входные данные: функции μ_π , K_Q , f_g .

Результат: η .

1. (Вклад начального распределения) $x \leftarrow \pi(\cdot)$; $\eta \leftarrow \mu_\pi(x)$; Get(α);

2. (Вклад переходов) While $\alpha > g(x)$ do

• $y \leftarrow R(x, \cdot)$; $\eta \leftarrow \eta * K_Q(x, y)$; $x \leftarrow y$; Get(α);

3. (Вклад поглощения) $\eta \leftarrow \eta * f_g(x)$; STOP.

¹⁸⁵Убедитесь, что приведенный ниже алгоритм корректен.

Дисперсия. Займемся теперь дисперсией оценки по-поглощению.

Теорема 7. Имеет место равенство

$$\mathbb{E}\eta^2 = \int_D \psi(x) \mu_\pi^2(x) \pi(dx), \quad (2.2.27)$$

где ψ — поточечно минимальное неотрицательное решение уравнения

$$\psi(x) = \int_D K_Q^2(x, y) Q(x, dy) \psi(y) + f_g^2(x) g(x). \quad (2.2.28)$$

Доказательство. Повторяя схему вычислений, уже проведенных для $\mathbb{E}|\eta|$, получим, что

$$\mathbb{E}\eta^2 = \sum_{n \geq 0} \int_D \mu_\pi^2(x_0) \pi(dx_0) \int_D N(x_0, dx_1) \dots \int_D N(x_{n-1}, x_n) f_g^2(x_n) g(x_n),$$

где

$$N(x_{i-1}, dx_i) = K_Q^2(x_{i-1}, x_i) Q(x_{i-1}, dx_i).$$

Согласно Лемме 4 минимальное неотрицательное решение уравнения (2.2.28) является итерационным и поэтому имеет вид

$$\psi(x) = \sum_{n \geq 0} \int_D K_Q^2(x, x_1) Q(x, dx_1) \dots \int_D K_Q^2(x_{n-1}, x_n) Q(x_{n-1}, dx_n) f_g^2(x_n) g(x_n),$$

что и заканчивает доказательство. $\square$

Замечание 21. Таким образом, вопрос о конечности дисперсии оценки по-поглощению сводится к изучению свойств интегрального оператора $\mathbb{N}$ с ядром $N(x, dy)$, меры $\lambda = \mu_\pi^2 d\pi$ и функции $h = f_g^2 g$. Если $h \in \mathbb{L}_\lambda^1$, $\mathbb{N} : \mathbb{L}_\lambda^1 \mapsto \mathbb{L}_\lambda^1$ и норма¹⁸⁶ оператора $\mathbb{N}$ меньше единицы, то дисперсия η конечна.

Ясно, что можно придумать и другие (более простые) условия конечности дисперсии η . Например, для этого достаточно, чтобы η была ограничена.

Минимальная дисперсия. Представим задачу вычисления интеграла $J = \int_D \varphi d\mu$ от итерационного решения φ уравнения (2.2.25) в виде задачи вычисления величины специальным образом построенного заряда.

Для этого

1. положим $G = \cup_{n \geq 0} D^{n+1}$;
2. снабдим G σ -алгеброй $\mathcal{G} = \sigma(\mathcal{A}^{n+1}, n \geq 0)$. Ясно, что любое множество A , принадлежащее $\mathcal{G}$, является (дизъюнктым) объединением множеств $B_{n+1} \in \mathcal{A}^{n+1}$.
3. определим на $(G, \mathcal{G})$ заряд M равенством

$$M|_{\mathcal{A}^{n+1}}(dx_0 \dots dx_n) = M_{n+1}(dx_0 \dots dx_n) = \mu(dx_0) K(x_0, dx_1) \dots K(x_{n-1}, dx_n) f(x_n).$$

Поскольку

$$|M_{n+1}|(D^{n+1}) = \int_D |\mu|(dx_0) \int_D |K|(x_0, dx_1) \dots \int_D |K|(x_{n-1}, dx_n) |f|(x_n),$$

¹⁸⁶а в общем случае — спектральный радиус

то

$$|M|(G) = \sum_{n \geq 0} |M_{n+1}|(D^{n+1}) = \bar{J} < \infty,$$

и, следовательно, заряд M является конечным, причем

$$M(G) = \sum_{n \geq 0} M_{n+1}(D^{n+1}) = \sum_{n \geq 0} \int_D \mu(dx_0) \int_D K(x_0, dx_1) \dots \int_D K(x_{n-1}, dx_n) f(x_n) = J.$$

Тем самым для вычисления методом Монте-Карло $J = \int_D \varphi d\mu$ мы можем пользоваться стандартной техникой, развитой в разделах 1.2 и 1.3. В частности, согласно Предложению 6 раздела 1.3.7 о минимальной дисперсии оценки при вычислении конечного заряда, эта дисперсия достигается на распределении $\mathcal{P} = \mathcal{P}^{(\text{opt})} = |M|/\bar{J}$, то есть при $n \geq 0$

$$\mathcal{P}|_{\mathcal{A}^{n+1}}(dx_0 \dots dx_n) = \frac{|\mu|(dx_0) |K|(x_0, dx_1) \dots |K|(x_{n-1}, dx_n) |f|(x_n)}{\bar{J}}.$$

Теорема 8. Предположим, что итерационное решение $\bar{\varphi}^{187}$ мажорирующего уравнения (2.2.17) является строго положительным при любом $x \in D$.

Положим

$$\pi(dx) = \frac{\bar{\varphi}(x) |\mu|(dx)}{\bar{J}}, \quad Q(x, dy) = \frac{|K|(x, dy) \bar{\varphi}(y)}{\bar{\varphi}(x)} \quad \text{и} \quad g(x) = \frac{|f|(x)}{\bar{\varphi}(x)}. \quad (2.2.29)$$

Тогда

1.

$$\pi(D) = 1 \quad \text{и} \quad Q(x, D) = 1 - g(x).$$

2. Пара (π, Q) определяет поглощающую ОМЦ $(\xi_0, \dots, \xi_n, \dots)$ с фазовым пространством $(D', \mathcal{A}')$.

3. Марковская цепь $(\xi_0, \dots, \xi_n, \dots)$ является согласованной с уравнением (2.2.25).

4. Распределение $\mathcal{L}((\xi_0, \dots, \xi_\tau))$ совпадает с $\mathcal{P} = \mathcal{P}^{(\text{opt})}$.

Доказательство. 1. Поскольку $\bar{J} = \int \bar{\varphi}(x) |\mu|(dx)$, то $\pi(D) = 1$. Далее, так как

$$\bar{\varphi}(x) = \int_D |K|(x, dy) \bar{\varphi}(y) + |f|(x),$$

а $\bar{\varphi}(x) > 0$, то

$$1 = \frac{\int_D |K|(x, dy) \bar{\varphi}(y)}{\bar{\varphi}(x)} + \frac{|f|(x)}{\bar{\varphi}(x)} = Q(x, D) + g(x).$$

2. Согласно Замечанию 18 пара (π, Q) определяет ОМЦ $(\xi_0, \dots, \xi_n, \dots)$ с фазовым пространством $(D', \mathcal{A}')$. Осталось доказать, что эта марковская цепь является поглощающей.

Действительно, согласно равенству (2.2.29) и Замечанию 18

$$\begin{aligned} P(\tau < \infty) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_D \pi(dx_0) \int_D Q(x_0, dx_1) \dots \int_D Q(x_{n-1}, dx_n) g(x_n) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_D \frac{\bar{\varphi}(x_0) |\mu|(dx_0)}{\bar{J}} \int_D \frac{|K|(x_0, dx_1) \bar{\varphi}(x_1)}{\bar{\varphi}(x_0)} \dots \int_D \frac{|K|(x_{n-1}, dx_n) \bar{\varphi}(x_n)}{\bar{\varphi}(x_{n-1})} \frac{|f|(x_n)}{\bar{\varphi}(x_n)} = \\ &= \frac{1}{\bar{J}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_D |\mu|(dx_0) \int_D |K|(x_0, dx_1) \dots |K|(x_{n-1}, dx_n) |f|(x_n) = 1. \end{aligned}$$

¹⁸⁷ явный вид $\bar{\varphi}$ представлен в (2.2.22).

3. Ясно, что

$$\frac{d\mu}{d\pi}(x) = \frac{\bar{J}}{\bar{\varphi}(x)} \frac{d\mu}{d|\mu|}(x), \quad \frac{K(x, dy)}{Q(x, dy)} = \frac{\bar{\varphi}(y)}{\bar{\varphi}(x)} \frac{K(x, dy)}{|K|(x, dy)}.$$

Что касается согласованности f и g , то при данных условиях их носители совпадают.

4. Так как

$$\begin{aligned} \mathcal{P}|_{\mathcal{A}^{n+1}}(dx_0 \dots dx_n) &= \frac{|\mu|(dx_0)|K|(x_0, dx_1) \dots |K|(x_{n-1}, dx_n)|f|(x_n)}{\bar{J}} = \\ &= \frac{\bar{\varphi}(x_0)}{\bar{J}} \frac{|\mu|(dx_0)}{\bar{\varphi}(x_0)} \frac{|K|(x_0, dx_1)\bar{\varphi}(x_1)}{\bar{\varphi}(x_0)} \dots \frac{|K|(x_{n-1}, dx_n)\bar{\varphi}(x_n)}{\bar{\varphi}(x_{n-1})} \frac{|f|(x_n)}{\bar{\varphi}(x_n)} = \\ &= \pi(dx_0)Q(x_0, dx_1) \dots Q(x_{n-1}, dx_n)g(x_n), \end{aligned}$$

то утверждение доказано. $\square$

Замечание 22. 1. Условие положительности функции $\bar{\varphi}$ является чисто техническим. Если $\bar{\varphi}(x^*) = 0$, то, так как

$$\bar{\varphi}(x^*) = \int_D |K|(x^*, dy)\bar{\varphi}(y) + |f|(x^*),$$

то $f(x^*) = 0$ и мера $|K|(x^*, \cdot)$ сосредоточена на том множестве, где $\bar{\varphi}(y) = 0$. Поэтому в точке x^* можно положить $g(x^*) = 0$ и считать $Q(x^*, dy)$ произвольным распределением.

2. Теорема 8 аналогична Теореме 4, которая относится к решению систем линейных алгебраических уравнений. Как и в том случае, здесь оказывается, что распределение, обеспечивающее минимальную дисперсию, соответствует некоторой поглощающей марковской цепи.

2.2.4 Оценка «по столкновениям». Примеры

Существуют и другие варианты построения несмещенных оценок величины $J = \int_D \varphi d\mu$. Приведем одну из таких оценок, традиционно называемую оценкой «по столкновениям».

Теорема 9. Рассмотрим в условиях Теоремы 6 случайную величину

$$\eta = \sum_{i=0}^{\tau} \mu_{\pi}(\xi_0) K_Q(\xi_0, \xi_1) \dots K_Q(\xi_{i-1}, \xi_i) f(\xi_i). \quad (2.2.30)$$

Тогда $E|\eta| \leq \bar{J} < \infty$ и $E\eta = J$.

Доказательство. Начнем с доказательства того, что случайная величина η суммируема. Действительно, введя для краткости обозначение

$$A_i = \mu_{\pi}(\xi_0) K_Q(\xi_0, \xi_1) \dots K_Q(\xi_{i-1}, \xi_i) f(\xi_i),$$

получим, что

$$\begin{aligned} E|\eta| &= \sum_{n \geq 0} E(|\eta|, \tau = n) = \sum_{n \geq 0} E\left(\left|\sum_{i=0}^n A_i\right|, \tau = n\right) \leq \sum_{n \geq 0} \sum_{i=0}^n E(|A_i|, \tau = n) = \\ &= \sum_{i \geq 0} \sum_{n \geq i} E(|A_i|, \tau = n) = \sum_{i \geq 0} E(|A_i|, \tau \geq i) = \\ &= \sum_{i \geq 0} E\left(|\mu_{\pi}(\xi_0)| |K_Q(\xi_0, \xi_1)| \dots |K_Q(\xi_{i-1}, \xi_i)| |f(\xi_i)|, \xi_0 \in D, \dots, \xi_i \in D\right) = \\ &= \sum_{i \geq 0} \int_D |\mu_{\pi}(x_0)| \pi(dx_0) \int_D |K_Q(x_0, x_1)| Q(x_0, dx_1) \dots |K_Q(x_{i-1}, x_i)| Q(x_{i-1}, dx_i) |f(x_i)| = \\ &= \sum_{i \geq 0} \int_D |\mu|_{\pi}(x_0) \pi(dx_0) \int_D |K|_Q(x_0, x_1) Q(x_0, dx_1) \dots |K|_Q(x_{i-1}, x_i) Q(x_{i-1}, dx_i) |f|(x_i) = \bar{J}. \end{aligned}$$

Так как ряд $\sum_{n \geq 0} \sum_{i=0}^n E(A_i, \tau = n)$ абсолютно сходится, то из приведенной выше цепочки равенств следует, что

$$\sum_{n \geq 0} \sum_{i=0}^n E(A_i, \tau = n) = \sum_{i \geq 0} \sum_{n \geq i} E(A_i, \tau = n),$$

и поэтому

$$\begin{aligned} E\eta &= \sum_{n \geq 0} E(\eta, \tau = n) = \sum_{n \geq 0} E\left(\sum_{i=0}^n A_i, \tau = n\right) = \sum_{n \geq 0} \sum_{i=0}^n E(A_i, \tau = n) = \\ &= \sum_{i \geq 0} \sum_{n \geq i} E(A_i, \tau = n) = \sum_{i \geq 0} E(A_i, \tau \geq i) = \\ &= \sum_{i \geq 0} E\left(\mu_{\pi}(\xi_0) K_Q(\xi_0, \xi_1) \dots K_Q(\xi_{i-1}, \xi_i) f(\xi_i), \xi_0 \in D, \dots, \xi_i \in D\right) = \\ &= \int_D \mu_{\pi}(x_0) \pi(dx_0) \int_D K_Q(x_0, x_1) Q(x_0, dx_1) \dots K_Q(x_{i-1}, x_i) Q(x_{i-1}, dx_i) f(x_i) = J. \end{aligned}$$

Утверждение доказано. □

Замечание 23. 1. Условие $\bar{J} < \infty$, которое является необходимым и достаточным¹⁸⁸ для несмещенности оценки «по поглощению», является лишь достаточным для несмещенности оценки (2.2.30).

2. В отличие от оценки «по поглощению», условие « $g(x) \neq 0$ при $f(x) \neq 0$ » нигде не используется при доказательстве несмещенности оценки «по столкновениям».

3. Легко выписать алгоритмическую схему получения оценки (2.2.30).¹⁸⁹

Замечание 24. 1. В некоторых случаях оказывается, что «естественное» начальное распределение π не полностью сосредоточено на D .¹⁹⁰ В этом случае τ может принимать значение -1 и оценка «по поглощению» примет вид¹⁹¹ (2.2.26) при $\tau \geq 0$ и превратится в ноль при $\tau = -1$.

Аналогичным образом оценка «по столкновениям» будет равна нулю при $\tau = -1$ и останется равной (2.2.30) при $\tau \geq 0$.

2. Конечно, описанное в разделе 2 решение линейных алгебраических уравнений методом Монте-Карло является частным случаем описанных конструкций для линейных интегральных уравнений. Для того, чтобы убедиться в этом, нужно положить $D = \{1, \dots, d\}$ и обозначить $\mu(\{i\}) = h_i$, $f(i) = b_i$, $K(i, \{j\}) = a(i, j)$ и $\varphi(i) = x_i$.

Тогда уравнение (2.2.16) перейдет в (2.1.4), (2.2.17) — в (2.1.9), $J = \int_D \varphi d\mu$ будет выглядеть как (2.1.28), а $\bar{J}$ — как (2.1.30).

Легко проверить, что все условия, необходимые для построения и несмещенности оценок «по поглощению» и «по столкновениям» для линейных алгебраических уравнений являются частными случаями аналогичных условий для интегральных уравнений, как и сами оценки, выражения для их дисперсий и т.д.¹⁹²

Приведем теперь один пример.

Пример 7. Рассмотрим $(D, \mathcal{A}) = (\mathbb{R}, \mathcal{B}_R)$, интегральное уравнение

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(y-x)^2/2} \varphi(y) dy + \sin(x^2) \quad (2.2.31)$$

и поставим задачу вычисления методом Монте-Карло величины $J = \varphi(x_0)$.

Уравнение (2.2.31) имеет стандартный вид (2.2.25) с

$$K(x, dy) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(y-x)^2/2} dy \quad \text{и} \quad f(x) = \sin(x^2),$$

а $J = \int_R \varphi d\mu$ с $\mu = \delta_{x_0}$.

В принципе нужно начинать с проверки условий мажорируемой сходимости. Мы здесь, однако, пойдем другим путем. А именно, формально построим подходящую оценку «по поглощению» и убедимся в том, что она суммируема.

Для этого нужно подобрать начальное распределение π , обеспечивающее существование производной Р-Н $\mu_\pi = d\mu/d\pi$ и такое неотрицательное ядро $Q(x, dy)$, что (i) $Q(x, \mathbb{R}) = 1 - g(x) \leq 1$, (ii) для любого $x \in \mathbb{R}$ существует производная Р-Н $K_Q(x, y) = dK(x, dy)/Q(x, dy)$ и (iii) из условия $g(x) = 0$ следует, что $f(x) = 0$. Кроме того, необходимо, чтобы получившаяся марковская цепь была поглощающей.

Подбирать эти параметры будем из соображений простоты и естественности моделирования. А именно, возьмем $\pi = \mu = \delta_{x_0}$ и $Q = K$, так что $\mu_\pi = 1$, $K_Q(x, y) = 1$, $g(x) = 1/2$ и $f_g(x) = 2 \sin(x^2)$.

¹⁸⁸ при выполнении других двух условий

¹⁸⁹ Сделайте это; для оценки «по поглощению» см. Замечание 20.

¹⁹⁰ Иначе говоря, $0 < P(\xi_0 = \Delta) < 1$, такой пример будет рассмотрен далее.

¹⁹¹ Доказательство несмещенности и вида дисперсии этой оценки совершенно не изменятся, убедитесь в этом. Марковская цепь, доставляющая минимальную дисперсию оценки «по поглощению», тоже не изменится.

¹⁹² Убедитесь в этом.

Так как функция g отделена от нуля, то такая марковская цепь является поглощающей. Тем самым оценка «по поглощению» будет иметь вид $\eta_1 = 2 \sin(\xi_\tau^2)$, а оценка «по столкновениям» —

$$\eta_2 = \sum_{i=0}^{\tau} \sin(\xi_i^2).$$

Конечно, в обоих оценках $\xi_0 = x_0$. Поскольку оценка «по поглощению» является ограниченной (и, следовательно, $E|\eta_1| < \infty$), то для уравнения (2.2.31) автоматически выполнено условие мажорируемой сходимости.

Учитывая алгоритм Замечания 20, обсудим теперь способ построения обеих оценок. Прежде всего заметим, что здесь $R(x, \cdot) = N(x, 1)$, так что моделирование распределения $R(x, \cdot)$ сводится к операции $x + \varepsilon$, где $\varepsilon \in N(0, 1)$.

Далее, поскольку вероятность поглощения $g(x)$ постоянна и равна $1/2$, то τ имеет геометрическое распределение с параметром $1/2$. Более того, условное распределение траектории $(\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_\tau)$ при условии $\tau = n$ совпадает с распределением вектора $(x_0, x_0 + \varepsilon_1, \dots, x_0 + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_n)$, где ε_i — независимые $N(0, 1)$ -распределенные случайные величины.

Поскольку $x_0 + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_n \in N(x_0, n)$, то алгоритм построения монте-карловской оценки «по поглощению» решения $\varphi(x_0)$ уравнения (2.2.31) выглядит очень просто:

Оценка «по поглощению» для решения уравнения (2.2.31)

Входные данные: точка x_0 .

Результат: η .

1. $n \leftarrow \text{Geom}(1/2)$; $\varepsilon \leftarrow N(0, 1)$; $\eta \leftarrow \sin((x_0 + \varepsilon\sqrt{n})^2)$; STOP.

Оценка «по столкновениям» строится алгоритмически немного посложнее.

Оценка «по столкновениям» для решения уравнения (2.2.31)

Входные данные: точка x_0 .

Результат: η .

1. $n \leftarrow \text{Geom}(1/2)$; If $n = 0$ then $\eta = \sin(x_0^2)$; STOP.

2. $i \leftarrow 1$; $t \leftarrow x_0$; While $i \leq n$ do ($\varepsilon \leftarrow N(0, 1)$; $t \leftarrow t + \varepsilon$; $i \leftarrow i + 1$);

3. $\eta \leftarrow \sin(t^2)$; STOP.

Замечание 25. 1. На самом деле простая модификация приведенных выше алгоритмов позволяет строить (зависимые) оценки значений $\varphi(x_i)$ для любого конечного набора $\{x_i\}$.

2. А что изменится, если нужно оценить не значение φ в одной или нескольких точках, а, скажем, интеграл $\int_{-1}^1 \varphi(x) dx$?

2.2.5 Уравнения относительно мер и простейшая задача переноса излучений

Уравнения относительно мер. Снова рассмотрим задачу вычисления интеграла $J = \int_D \varphi d\mu$ от итерационного решения уравнения (2.2.16) предполагая, как и раньше, выполненными условия мажорируемой сходимости (2.2.21). Как уже отмечалось, в этом случае

$$J = \int_D \varphi d\mu = \int_D f(x_0) \mu(dx_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_D \mu(dx_0) \int_D K(x_0, dx_1) \dots \int_D K(x_{n-1}, dx_n) f(x_n). \quad (2.2.32)$$

Дополнительно предположим, что $K(x, \cdot)$ является мерой¹⁹³ при любом $x \in D$ и, кроме того, μ тоже принимает только неотрицательные значения. Таким образом знакопеременной предполагается только функция f .

¹⁹³а не просто зарядом. Иначе итерации (2.2.34) могут оказаться некорректными.

Эти предположения позволяют ввести *уравнение относительно мер* в виде

$$\nu(dy) = \int_D \nu(dx) K(x, dy) + \mu(dy). \quad (2.2.33)$$

Лемма 10. Рассмотрим итерации

$$\nu_{n+1}(dy) = \int_D \nu_n(dx) K(x, dy) + \mu(dy), \quad \nu_0 = \mu. \quad (2.2.34)$$

Тогда при $n \geq 0$

$$\nu_n(dy) = \sum_{i=0}^n \int_D \mu(dy_0) \int_D K(y_0, dy_1) \dots \int_D K(y_{i-2}, dy_{i-1}) K(y_{i-1}, dy). \quad (2.2.35)$$

Доказательство. Доказательство проводится по индукции. При $n = 0$ утверждение очевидно. Рассмотрим теперь меру ν_{m+1} имея в виду, что равенство (2.2.35) для $n = m$ выполнено благодаря индукционному предположению.

Подставляя (2.2.35) в правую часть (2.2.34), получим, что

$$\nu_{m+1}(dy) = \int_D \left(\sum_{i=0}^m \int_D \mu(dy_0) \int_D K(y_0, dy_1) \dots \int_D K(y_{i-1}, dz) \right) K(z, dy) + \mu(dy),$$

что с точностью до обозначений совпадает с требуемым. $\square$

Следствие 1. Из утверждения Леммы 10 сразу же следует, что

$$\int_D |f(y)| \nu_n(dy) = \int_D \bar{\varphi}_n(x) |\mu|(dx) \quad \text{и} \quad \int_D f(y) \nu_n(dy) = \int_D \varphi_n(x) \mu(dx),$$

где $\bar{\varphi}_n$ определено в (2.2.20), а

$$\varphi_n(x) = f(x) + \sum_{i=1}^n \int_D K(x, dx_1) \dots \int_D K(x_{n-1}, dx_n) f(x_n).$$

Согласие условию мажорируемой сходимости,

$$\lim_n \int_D |f(y)| \nu_n(dy) = \int_D \bar{\varphi}(x) |\mu|(dx) = \bar{J} \quad \text{и} \quad \lim_n \int_D f(y) \nu_n(dy) = \int_D \varphi(x) \mu(dx) = J.$$

Поскольку для любого $A \in \mathcal{A}$

$$\nu_n(A) \rightarrow \nu(A) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \int_D \mu(dy_0) \int_D K(y_0, dy_1) \dots \int_D K(y_{n-1}, dy_n) K(y_n, A),$$

а ν является мерой на измеримом пространстве $(D, \mathcal{A})$, то наряду со стандартным представлением $J = \int_D \varphi d\mu$ мы получили, что $J = \int_D f d\nu$, причем $\bar{J} = \int_D |f| d\nu$.

Таким образом, на одних и тех же траекториях марковской цепи мы можем «решать» (с помощью оценок (2.2.26) и (2.2.30)) как уравнение (2.2.16) относительно функций, так и уравнение (2.2.33) относительно мер. Последнее имеет свой смысл, так как многие физические уравнения являются на самом деле уравнениями именно относительно мер.

Приведем один пример такой задачи.

Простейшая задача переноса излучений. Здесь мы остановимся на простейшей (и модельной) задаче «переноса излучений».

Рассмотрим область $D \in \mathbb{R}^3$, являющуюся фазовым пространством движения неких частиц. Эти частицы влетают в D , а потом может осуществиться один из следующих случаев:

- частица вылетает из D , не столкнувшись ни с одной молекулой вещества, заполняющего D , рис. 1 (а), это происходит с вероятностью, меньшей 1.
- частица сталкивается в D с молекулой вещества, при этом возможны 2 исхода: либо частица поглощается при столкновении (и при этом ее история заканчивается — рис. 1 (b), левая траектория), либо она отражается (то есть меняет свою скорость) и продолжает движение (рис. 1 (b), правая траектория и рис. 1 (c)).

История движения частицы заканчивается, если наступает ее (физическое) поглощение или если она вылетает из D .

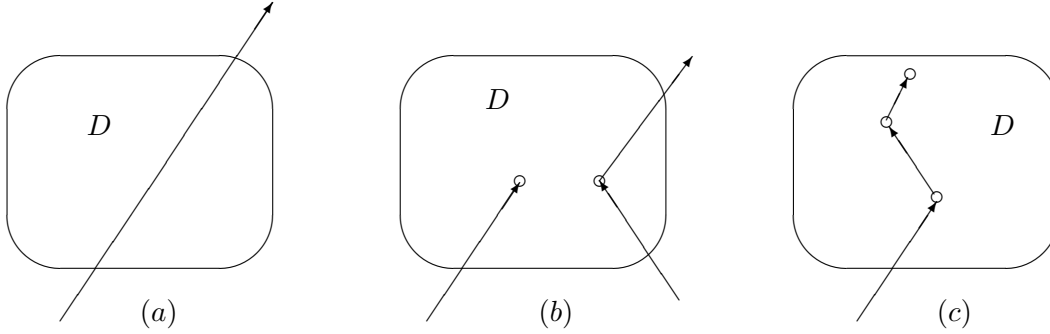


Рис. 1: (а): «пролет», $\tau = -1$, (b): одно столкновение (2 варианта, $\tau = 0$), (с): три столкновения, $\tau = 2$.

Возьмем некоторую точку $\Delta \notin D$ и обозначим координаты столкновения частицы с молекулами вещества $\xi_0, \dots, \xi_n, \dots$ формально полагая, что $\xi_n = \Delta$, если история частицы прервалась до момента времени n включительно. Таким образом, обозначая $\tau + 1 = \min(n : \xi_n = \Delta)$, мы получим, что траектория частицы приобретет вид $(\xi_0, \dots, \xi_\tau, \Delta, \Delta, \dots)$, где $\xi_i \in D$ при $i \leq \tau$, а $\tau \geq -1$.¹⁹⁴

Из физических соображений следует, что последовательность столкновений ξ_i является однородной марковской цепью с фазовым пространством $D' = D \cup \{\Delta\}$, причем точка Δ является поглощающим состоянием. В дальнейшем будем считать, что $P(\tau < \infty) = 1$, то есть что частица испытывает в D лишь конечное (но случайное) число столкновений. Тем самым описанная марковская цепь является поглощающей.

Введем ее характеристики. Начальное распределение $\pi = \mathcal{L}(\xi_0)$ вообще говоря, не сосредоточено в D , $\pi(D) = P(\tau > 0)$. В остальном все стандартно: переходная функция определяется ядром $Q(x, A)$ ($x \in D$, $A \in \mathcal{A}$), а вероятность поглощения¹⁹⁵ за один шаг из точки $x \in D$ обозначается $g(x)$, так что $Q(x, D) = 1 - g(x)$.

Для каждого подмножества $A \in \mathcal{A}$ положим

$$\xi_A = \sum_{i=0}^{\tau} 1_A(\xi_i), \quad (\xi_A = 0 \text{ при } \tau = -1),$$

и $\mu(A) = E\xi_A$. Конечно, ξ_A имеет смысл числа соударений, произошедших в множестве A , а $\mu(A)$ — это среднее число таких соударений. Нетрудно видеть,¹⁹⁶ что μ является мерой, определенной на σ -алгебре $\mathcal{A}$.

¹⁹⁴Случай $\tau = -1$ соответствует рис. 1 (а), то есть $\xi_0 = \Delta$.

¹⁹⁵Здесь, конечно, имеется в виду не физическое поглощение частицы атомом, а переход марковской цепи в поглощающее состояние.

¹⁹⁶Проверьте!

Нас будет интересовать значение интеграла $J = \int_D f d\mu$, причем будет предполагаться, что $f \in L^1(d\mu)$.¹⁹⁷ Интеграл J имеет следующий смысл. Если при столкновении частицы с веществом в точке $x \in D$ «снимается» некоторая характеристика $f(x)$ (например, это может быть температура, выделяемая при столкновении), то J — это среднее значение этой характеристики за время пролета частицы через вещество.

Предложение 9. Мера μ является итерационным решением уравнения

$$\mu(dx) = \int_D Q(y, dx) \mu(dy) + \pi(dx). \quad (2.2.36)$$

Доказательство. Прежде всего, при $A \in \mathcal{A}$

$$\begin{aligned} \mu(A) &= E\xi_A = \sum_{n \geq 0} E(\xi_A, \tau = n) = \sum_{n \geq 0} E\left(\sum_{i=0}^n \mathbf{1}_A(\xi_i), \tau = n\right) = \\ &= \sum_{i \geq 0} \sum_{n \geq i} P(\xi_i \in A, \tau = n) = \sum_{i \geq 0} P(\xi_i \in A, \tau \geq i) = \sum_{i \geq 0} P(\xi_i \in A, \xi_0 \in D, \dots, \xi_{i-1} \in D) = \\ &= \sum_{i \geq 0} \int_D \pi(dx_0) \int_D Q(x_0, dx_1) \dots \int_D Q(x_{i-2}, dx_{i-1}) Q(x_{i-1}, A). \end{aligned} \quad (2.2.37)$$

Кроме того, если рассмотреть итерации

$$\mu_n(dx) = \int_D Q(y, dx) \mu_{n-1}(dy) + \pi(dx), \quad \mu_0 = \pi,$$

то, согласно Лемме 10 и Следствию 1, предел $\mu_n(A)$ при $n \rightarrow \infty$ как раз и будет иметь вид правой части (2.2.37). $\square$

Будем теперь решать уравнение (2.2.36) (точнее — строить несмещенные оценки величины J) методом Монте-Карло.¹⁹⁸ Согласно тому же Следствию 1 эту задачу можно записать в эквивалентном виде — как задачу оценивания величины $J = \int_D \varphi d\pi$, где φ — итерационное решение уравнения

$$\varphi(x) = \int_D Q(x, dy) \varphi(y) + f(x).$$

Поэтому все нужные построения и результаты разделов 2.2.3 и 2.2.4 годятся и для этого случая.

Выберем моделируемую марковскую цепь в точности совпадающей с «физической» марковской цепью ξ_i (предполагая при этом, что $g(x) \neq 0$ при $f(x) \neq 0$). Тогда оценки η_1 «по поглощению» и η_2 «по столкновениям» будут иметь вид

$$\eta_1 = \begin{cases} f(\xi_\tau)/g(\xi_\tau) & \text{при } \tau > -1, \\ 0 & \text{при } \tau = -1 \end{cases} \quad \text{и} \quad \eta_2 = \begin{cases} \sum_{i=0}^{\tau} f(\xi_i) & \text{при } \tau > -1, \\ 0 & \text{при } \tau = -1. \end{cases}$$

Из вида оценок ясно, что оценка «по столкновениям» строго соответствует как своему названию, так и физической сущности задачи (в ней снимается необходимая информация с каждого столкновения и $\eta_2 = \xi_A$ при $f = \mathbf{1}_A$), в то время как оценка «по поглощению» (где информация снимается только в момент обрыва траектории) может оказаться сложно реализуемой, так как требует вычисления вероятности поглощения $g(x)$ в заранее неизвестной точке x .

Такая естественность оценки «по столкновениям» позволяет специалистам, решающим подобные задачи, называть ее *основной*.

¹⁹⁷Если $\mu(D) < \infty$, то для этого достаточно, чтобы функция $|f|$ была ограниченной.

¹⁹⁸Поскольку $\int |f| d\mu < \infty$, то условие мажорируемой сходимости выполнено.

Замечание 26. Заметим, что, согласно разделу 2.2.3, марковская цепь, доставляющая минимальную дисперсию оценке «по поглощению», определяется итерационным решением уравнения

$$\bar{\varphi}(x) = \int_D Q(x, dy) \bar{\varphi}(y) + |f|(x),$$

то есть уравнением относительно функций, в то время как физический смысл имеет уравнение (2.2.33) относительно мер.

2.3 Внутренняя задача Дирихле для оператора Лапласа

2.3.1 Построение оценки

Рассмотрим внутреннюю задачу Дирихле

$$\begin{cases} \Delta u(x) = 0, & x \in D, \\ u|_{\Gamma} = \varphi. \end{cases} \quad (2.3.1)$$

для ограниченной области $D \subset \mathbb{R}^3$ с достаточно гладкой границей Γ ,¹⁹⁹ см. рис. 2.

Условие $u|_{\Gamma} = \varphi$, как всегда, означает, что φ является непрерывной функцией на Γ , а u непрерывна вплоть до Γ .

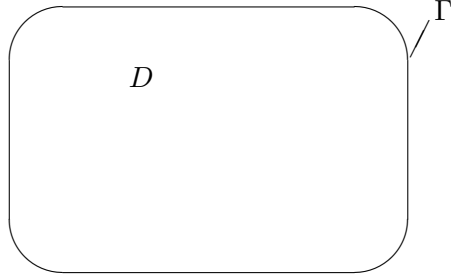


Рис. 2: Область D и граница Γ .

Как хорошо известно, задача (2.3.1) эквивалентна тому, что внутри D функция u является гармонической, а на границе Γ она принимает известное значение φ . Иначе говоря, задача (2.3.1) эквивалентна тому, что для любых $x \in D$ и таких r , что $B_r(x) \stackrel{\text{def}}{=} \{y : \|y - x\| < r\} \subset D$

$$\begin{cases} u(x) = \int_D p_r(x, dy) u(y), & x \in D, \\ u|_{\Gamma} = \varphi, \end{cases} \quad (2.3.2)$$

где $p_r(x, dy)$ — равномерное распределение на сфере $S_r(x)$ радиуса r с центром в x (рис. 3).

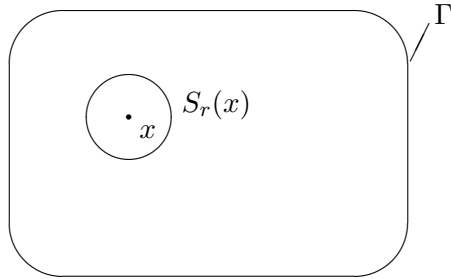


Рис. 3: Точка $x \in D$ и сфера $S_r(x)$.

Уравнения²⁰⁰

$$u(x) = \int_D p_r(x, dy) u(y), \quad x \in D \quad (2.3.3)$$

¹⁹⁹Конечно, все рисунки изображают D как подмножество $\mathbb{R}^2$; конкретизация условия гладкости границы Γ не приводится. На данный момент нам достаточно, чтобы задача (2.3.1) имела единственное решение.

²⁰⁰Забудем на некоторое время об условии $u|_{\Gamma} = \varphi$.

имеют некоторое сходство с линейным интегральным уравнением (2.2.16), которым мы занимались в разделе 2.2, но отличия существенны. Прежде всего, правая часть (2.3.3) зависит от параметра r — радиуса сферы $S_r(x)$. Кроме того, в уравнении (2.3.3) нет свободного члена. Оказывается, от первого отличия можно достаточно легко избавиться.

А именно, как это показано в [9, гл. 2], для регулярной²⁰¹ границы Γ имеет место следующее утверждение.

Предложение 10. Положим $r(x) = \sup \{r : B_r(x) \in D\}$ и $p(x, dy) = p_{r(x)}(x, dy)$. Тогда уравнение

$$\begin{cases} u(x) = \int_D p(x, dy)u(y), & x \in D, \\ u|_{\Gamma} = \varphi, \end{cases}$$

эквивалентно исходному (2.3.1).

Согласно Предложению 10, для гармоничности функции u внутри D достаточно рассматривать не всевозможные допустимые радиусы r , как в (2.3.2), а только один — максимальный (рис. 4).

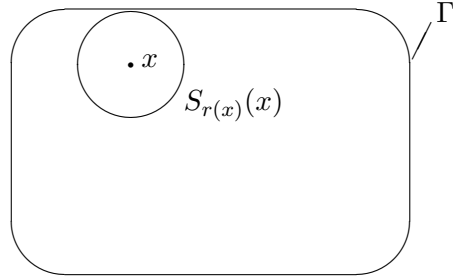


Рис. 4: Точка $x \in D$ и максимальная сфера $S_{r(x)}(x)$.

Теперь займемся (формальным) решением проблемы отсутствия свободного члена в уравнении

$$u(x) = \int_D p(x, dy)u(y), \quad x \in D. \quad (2.3.4)$$

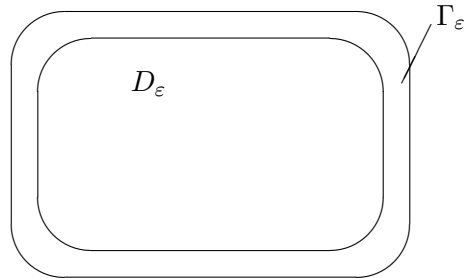


Рис. 5: Множества D_ε и Γ_ε .

Для этого возьмем достаточно малое $\varepsilon > 0$ и положим $\Gamma_\varepsilon = \{x \in D : \rho(x, \Gamma) < \varepsilon\}$, $D_\varepsilon = D \setminus \Gamma_\varepsilon$ (рис. 5).

²⁰¹В нашем понимании — достаточно гладкой, доказательство Предложения 10 использует свойства броуновского движения и поэтому опущено.

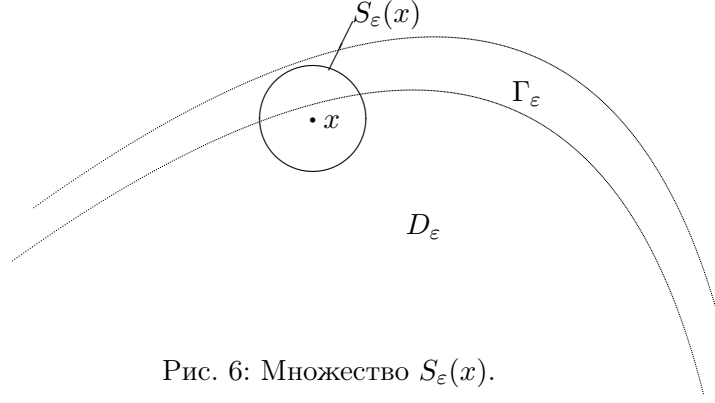


Рис. 6: Множество $S_\varepsilon(x)$.

Кроме того, возьмем $x \in D_\varepsilon$ и представим уравнение (2.3.4) в виде

$$u(x) = \int_{D_\varepsilon} p(x, dy)u(y) + \int_{\Gamma_\varepsilon} p(x, dy)u(y), \quad x \in D_\varepsilon. \quad (2.3.5)$$

Наконец, представим себе, что (ограниченная в D_ε) функция $\int_{\Gamma_\varepsilon} p(x, dy)u(y)$ известна, обозначим ее через $h(x)$ и рассмотрим уравнение

$$v(x) = \int_{D_\varepsilon} p(x, dy)v(y) + h(x), \quad x \in D_\varepsilon. \quad (2.3.6)$$

Это уравнение имеет стандартный вид (2.2.16) и поэтому мы будем решать его методом Монте-Карло раздела 2.2. Для этого рассмотрим уравнение (2.3.6) как уравнение

$$v = P_\varepsilon v + h \quad (2.3.7)$$

в пространстве $\mathbb{B} = \mathbb{B}(D_\varepsilon)$ измеримых ограниченных функций с областью определения D_ε , где $P_\varepsilon \phi(x) = \int_{D_\varepsilon} p(x, dy)\phi(y)$ при $\phi \in \mathbb{B}$ (как уже говорилось, $h \in \mathbb{B}$).

Лемма 11. Существует такая константа $C = C(\varepsilon, D) < 1$, что $\|P_\varepsilon\|_{\mathbb{B}} \leq C$.

Доказательство. Так как $\|\phi\|_{\mathbb{B}} = \sup_{x \in D_\varepsilon} |\phi(x)|$, то, обозначая $\mathbf{1}(x)$ функцию, тождественно равную единице, и пользуясь тем, что ядро $p(x, dy)$ оператора P_ε является положительной мерой, получим, что

$$\begin{aligned} \|P_\varepsilon\|_{\mathbb{B}} &= \sup_{\|\phi\|_{\mathbb{B}} \leq 1} \sup_{x \in D_\varepsilon} |P_\varepsilon \phi(x)| = \sup_{x \in D_\varepsilon} \sup_{\|\phi\|_{\mathbb{B}} \leq 1} |P_\varepsilon \phi(x)| = \sup_{x \in D_\varepsilon} |P_\varepsilon \mathbf{1}(x)| = \\ &= \sup_{x \in D_\varepsilon} \int_{D_\varepsilon} p(x, dy) = \sup_{x \in D_\varepsilon} p(x, D_\varepsilon) = 1 - \inf_{x \in D_\varepsilon} p(x, \Gamma_\varepsilon). \end{aligned}$$

Поэтому нам достаточно доказать, что $g(x) \stackrel{\text{def}}{=} p(x, \Gamma_\varepsilon) > 0$ при $x \in D_\varepsilon$.

Геометрически $g(x)$ представляет собой отношение²⁰² $|S_\varepsilon(x)|/|S(x)|$ площади $|S_\varepsilon(x)|$ поверхности куска $S_\varepsilon(x)$ сферы $S(x) = S_{r(x)}(x)$, лежащей внутри Γ_ε , к площади $|S(x)| = 4\pi r^2(x)$ этой сферы (рис. 7). Поскольку $|S(x)| \leq 4\pi r_0^2$, где r_0 не превосходит половины диаметра ограниченной области D , то осталось оценить сверху величину $|S_\varepsilon(x)|$.

Для этого рассмотрим точку x_0 касания сферы $S(x)$ границы Γ и проведем сферу $S_\varepsilon(x_0)$ радиуса ε с центром в этой точке (рис. 7). Тогда, очевидно, величина $|S_\varepsilon(x)|$ не превосходит $|S_\varepsilon|$, где S_ε — часть сферы $S(x)$, высекаемая сферой $S_\varepsilon(x_0)$.

²⁰²Здесь $|S|$ означает площадь поверхности S .

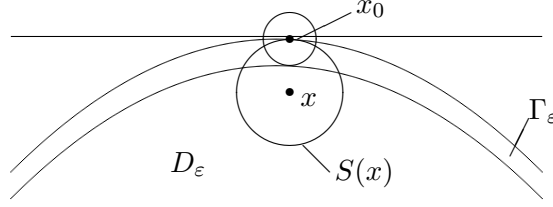


Рис. 7: Конструкция для оценивания $|S_\varepsilon(x)|$.

Осталось только заметить, что, согласно школьной стереометрии, $|S_\varepsilon| = 4\pi\varepsilon^2$ вне зависимости от величины радиуса $r(x)$ сферы $S(x)$.

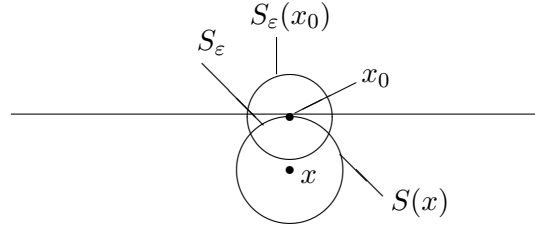


Рис. 8: Сферы $S(x)$, $S_\varepsilon(x_0)$ и поверхность S_ε .

Поэтому $g(x) \geq \varepsilon^2/r_0^2$ и утверждение доказано. $\square$

Следствие 2. Из утверждения Леммы 11 сразу же следует, что для любой ограниченной функции h уравнение (2.3.6) (или, что тоже самое, (2.3.7)) имеет единственное ограниченное решение, представимое в виде $v = \sum_{n \geq 0} P_\varepsilon^n h$. Тем самым уравнение (2.3.6) удовлетворяет условиям мажорируемой сходимости (в терминах уравнения (2.2.16) $K(z, dy) = p(z, dy)$, $\mu(dz) = \delta_x(dz)$ и $f(z) = h(z)$).

Займемся теперь построением несмещенной оценки числа $v(x)$ при фиксированном $x \in D_\varepsilon$. Для этого сначала введем так называемый «процесс блуждания по сферам»,²⁰³ то есть марковскую цепь $\beta_0, \beta_1, \dots$ с фазовым пространством D , начинающуюся в точке $x \in D_\varepsilon$ и имеющую переходную функцию $p(x, dy)$.

Кроме того, положим $\tau + 1 = \min\{n : \beta_n \in \Gamma_\varepsilon\}$.

Марковскую цепь для оценивания $v(x)$ зададим следующим образом:

$$\xi_n = \begin{cases} \beta_n & \text{при } n \leq \tau, \\ \Delta & \text{иначе.} \end{cases}$$

Таким образом, марковская цепь ξ_n совпадает со сферическим процессом β_n до тех пор, пока в первый раз не оказывается, что $\beta_n \in \Gamma_\varepsilon$, затем эта марковская цепь попадает в поглощающее состояние Δ .

Легко видеть, что терминах раздела 2.2.3 $\pi(dz) = \delta_x(dz)$, $Q(z, dy) = p(z, dy)$, а вероятность поглощения за один шаг из точки $z \in D_\varepsilon$ равна $g(x) = p(x, \Gamma_\varepsilon)$.

Поскольку, как уже доказано, функция g отделена от нуля, то $P_x(\tau < \infty) = 1$, то есть марковская цепь ξ_n является поглощающей.

Далее, в нашем случае $K_Q(z, y) = \mu_\pi(z) = 1$, а функция g согласована с h .²⁰⁴ Поэтому мы можем рассматривать оценку «по поглощению», которая имеет вид

$$\eta_1 = h(\xi_\tau)/g(\xi_\tau). \quad (2.3.8)$$

²⁰³По-другому — «сферический процесс».

²⁰⁴Так как g положительна

Как обычно, $E_x \eta_1 = v(x)$, причем $D_x \eta_1 < \infty$, так как g отделена от нуля, а h ограничена.

Тем не менее оценка η_1 является, вообще говоря, плохо реализуемой. Действительно, для ее построения нужно уметь считать функцию g в заранее неизвестной точке ξ_τ , а это может быть сложной задачей²⁰⁵ для непросто устроенной области D . Если же вспомнить о происхождении функции h (исходно $h(x) = \int_{\Gamma_\varepsilon} p(x, dy)u(y)$), то станет ясно, что и с вычислением числителя оценки (2.3.8) будут не меньшие сложности.

Чтобы разобраться в этом, возьмем функцию h в виде

$$h(x) = \int_{\Gamma_\varepsilon} p(x, dy)f(y)$$

и рассмотрим уравнение

$$w(x) = \int_{D_\varepsilon} p(x, dy)w(y) + \int_{\Gamma_\varepsilon} p(x, dy)f(y), \quad x \in D_\varepsilon, \quad (2.3.9)$$

считая, что ограниченная функция f нам известна. Тем самым

$$\eta_1 = \frac{\int_{\Gamma_\varepsilon} p(\xi_\tau, dy)f(y)}{p(\xi_\tau, \Gamma_\varepsilon)} = \int_{\Gamma_\varepsilon} \frac{p(\xi_\tau, dy)}{p(\xi_\tau, \Gamma_\varepsilon)} f(y)$$

Теперь заметим, что вероятностная мера $p(z, dy)/p(z, \Gamma_\varepsilon)$ при $z \in D_\varepsilon$, сосредоточенная в Γ_ε , совпадает с условным распределением $P_x(\beta_{\tau+1} \in dy | \beta_\tau = z)$. Поэтому

$$\eta_1 = E_x(f(\beta_{\tau+1}) | \beta_\tau),$$

Следовательно, если рассмотреть случайную величину $\eta = f(\beta_{\tau+1})$, то окажется,²⁰⁶ что $E_x f(\beta_{\tau+1}) = w(x)$ и $D\eta_1 \leq D\eta < \infty$.

Вернувшись теперь к нужному нам уравнению (2.3.5) (то есть положив $f = u$ в (2.3.9)), мы придем к следующей *теореме о среднем для гармонической функции u* :

Теорема 10. При любом $x \in D_\varepsilon$ и достаточно гладкой границе Γ ограниченного множества D

$$E_x u(\beta_{\tau+1}) = u(x), \quad (2.3.10)$$

где β_n — сферический процесс, начинающийся в точке x , а $\tau + 1 = \min\{n : \beta_n \in \Gamma_\varepsilon\}$.

Тем самым несмещенной оценкой величины $u(x)$ при $x \in D_\varepsilon$ является $u(\beta_{\tau+1})$.

Если бы мы знали значения гармонической функции $u(z)$ при $z \in \Gamma_\varepsilon$, то задачу можно было бы можно считать решенной. Это, конечно, не так, но при малых ε $u(z)$ будет мало отличаться от значения граничной функции φ в соответствующей точке границы. Такое соображение позволяет построить малосмещенную оценку величины $u(x)$.

Для $z \in \Gamma_\varepsilon$ положим $z^* \in \Gamma$ так что $\rho(z, z^*) = \min\{\rho(z, y), y \in \Gamma\}$. В качестве оценки $u(x)$ возьмем $\eta = \varphi^*(\beta_{\tau+1}) = \varphi(\beta_{\tau+1}^*)$. Поскольку u непрерывна вплоть до границы ограниченного множества D , то она является равномерно непрерывной и

$$|E_x \eta - u(x)| = |E_x \varphi(\beta_{\tau+1}^*) - E_x u(\beta_{\tau+1})| = |E_x u(\beta_{\tau+1}^*) - E_x u(\beta_{\tau+1})| \leq \psi_u(\varepsilon),$$

где ψ_u — модуль непрерывности u .

Если же u непрерывно дифференцируема вплоть до границы множества D (это опять же обеспечивается соответствующей гладкостью границы Γ и функции φ), то $\psi_u(\varepsilon) \leq A\varepsilon$ и смещение оценки η имеет вид $O(\varepsilon)$.

Замечание 27. Аналогичные результаты могут быть получены и при $d \neq 3$.

²⁰⁵ Почему?

²⁰⁶ А почему?

2.4 Среднее число шагов сферического процесса

Таким образом, в качестве оценки $u(x)$ у нас выступает случайная величина $\eta = \eta_\varepsilon = \varphi^*(\beta_{\tau+1}) = \varphi(\beta_{\tau+1}^*)$, которая является малосмещенной при малых ε . Кроме того, поскольку функция φ , определенная на границе Γ , ограничена, то дисперсия $D_x \eta_\varepsilon$ тоже ограничена, причем равномерно по ε .

Поскольку нас интересуют малые смещения, то есть малые ε , то естественной характеристикой трудоемкости оценки η_ε оказывается $E_x \tau + 1$, где $\tau + 1 = \tau_\varepsilon + 1$ — первый момент попадания сферического процесса в Γ_ε .

Ясно, что, вообще говоря, $E_x \tau_\varepsilon \rightarrow \infty$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, но от скорости этой сходимости зависит сама применимость рассматриваемого метода Монте-Карло: если $E_x \tau_\varepsilon$ растет слишком быстро при убывании ε , то понадобятся слишком длинные траектории сферического процесса для получения оценки с достаточно малым смещением.

Наша цель — показать, что по крайней мере для выпуклых областей D величина $E_x \tau_\varepsilon$ растет очень медленно, но для этого придется развить специальную теорию.

2.4.1 Лемма Вальда и элементарная теорема восстановления

Лемма 12. (Лемма Вальда.)

Пусть $\xi_1, \dots, \xi_n, \dots$ — одинаково распределенные случайные величины с конечным математическим ожиданием a . Кроме того, пусть τ — целочисленная случайная величина, принимающая значения $n \geq 1$, имеющая конечное математическое ожидание и такая, что для любого $i \geq 1$ событие $\tau \geq i$ и случайная величина ξ_i независимы. Наконец, обозначим $S_n = \xi_1 + \dots + \xi_n$.

Тогда случайная величина S_τ суммируема и $ES_\tau = aE\tau$.

Доказательство. Рассмотрим сначала $E|S_\tau|$, обозначив $b = E|\xi_i|$.

$$\begin{aligned} E|S_\tau| &= \sum_{n \geq 1} E(|S_n|, \tau = n) \leq \sum_{n \geq 1} E\left(\sum_{i=1}^n |\xi_i|, \tau = n\right) = \sum_{n \geq 1} \sum_{i=1}^n E(|\xi_i|, \tau = n) = \\ &= \sum_{i \geq 1} \sum_{n \geq i} E(|\xi_i|, \tau = n) = \sum_{i \geq 1} E(|\xi_i|, \tau \geq i) = \sum_{i \geq 1} E|\xi_i| P(\tau \geq i) = b \sum_{i \geq 1} P(\tau \geq i) = bE\tau. \end{aligned}$$

Теперь, поскольку из приведенной цепочки равенств следует, что $\sum_{n \geq 1} \sum_{i=1}^n |E(\xi_i, \tau = n)| < \infty$, а $ES_\tau = \sum_{n \geq 1} \sum_{i=1}^n E(\xi_i, \tau = n)$, то, повторяя предыдущие рассуждения, получим, что

$$ES_\tau = \sum_{n \geq 1} \sum_{i=1}^n E(\xi_i, \tau = n) = \sum_{i \geq 1} \sum_{n \geq i} E(\xi_i, \tau = n) = aE\tau.$$

Лемма доказана. $\square$

Пусть $\xi_1, \dots, \xi_n, \dots$ — одинаково распределенные независимые случайные величины с положительным математическим ожиданием a и $S_n = \xi_1 + \dots + \xi_n$. Для любого $t > 0$ обозначим $\mu(t) = \min\{n : S_n > t\}$.

Следующее утверждение оставим без доказательства.

Лемма 13. Пусть $t > 0$, тогда $P(\mu(t) < \infty) = 1$ и $E\mu(t) < \infty$.

Замечание 28. Конечно, при доказательстве этих фактов существенную роль играет неравенство $E\xi_i > 0$.²⁰⁷

Предложение 11. (Элементарная теорема восстановления.)

Если $t \rightarrow \infty$, то

$$E\mu(t)/t \rightarrow 1/a. \quad (2.4.1)$$

²⁰⁷ А почему?

Доказательство. Заметим, что событие $\{\mu(t) \geq i\}$ и случайная величина ξ_i независимы. Действительно, $\{\mu(t) \geq i\} = \{S_1 \leq t, \dots, S_{i-1} \leq t\}$, а случайная величина ξ_i не зависит от S_j , $j < i$.

Отсюда по лемме Вальда (см. также Лемму 13) $ES_{\mu(t)} = aE\mu(t)$. Поскольку по определению $\mu(t)$ имеет место неравенство $S_{\mu(t)} > t$, то

$$E\mu(t)/t \geq 1/a. \quad (2.4.2)$$

Для доказательства обратного неравенства²⁰⁸ предположим сначала, что $\xi_i \leq N$ для некоторого $N > 0$. Тогда $S_{\mu(t)} \leq t + N$ и поэтому

$$\frac{E\mu(t)}{t} \leq \left(1 + \frac{N}{t}\right) \frac{1}{a}.$$

Отсюда сразу следует, что

$$\limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{E\mu(t)}{t} \leq \frac{1}{a}, \quad (2.4.3)$$

и для случая $\xi_i \leq N$ утверждение доказано.

Для перехода к общему случаю возьмем $0 < \varepsilon < a$ и выберем $k = k(\varepsilon)$ таким образом, чтобы математическое ожидание случайной величины $\xi_i^{(k)} = \min(k, \xi_i)$ было больше $a - \varepsilon$.

Введя обозначения $S_n^{(k)} = \sum_{i \leq n} \xi_i^{(k)}$ и $\mu_k(t) = \min(n : S_n^{(k)} > t)$, получим, что

$$\limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{E\mu_k(t)}{t} \leq \frac{1}{E\xi_i^{(k)}} \leq \frac{1}{a - \varepsilon}.$$

Заметим теперь, что $\mu(t) \leq \mu_k(t)$,²⁰⁹ откуда сразу следует, что

$$\limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{E\mu(t)}{t} \leq \frac{1}{E\xi_i^{(k)}} \leq \frac{1}{a - \varepsilon},$$

и, ввиду произвольности ε , (2.4.3). Объединяя (2.4.2) с (2.4.3), получаем требуемое. $\square$

2.4.2 Сферический процесс в полупространстве

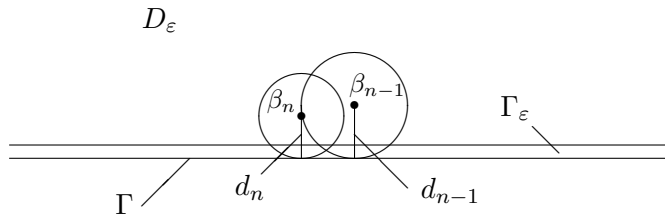


Рис. 9: Сферический процесс в полупространстве.

Рассмотрим сферический процесс $\{\beta_n, n \geq 0\}$ в полупространстве $D = \{(x, y, z) : z > 0\}$ с границей $\Gamma = \{(x, y, z) : z = 0\}$. Будем считать, что $\beta_0 = (x_0, y_0, z_0)$ и займемся средним числом шагов этого процесса до попадания в $\Gamma_\varepsilon = \{(x, y, z) : 0 < z < \varepsilon\}$, где $0 < \varepsilon < z_0$. Точнее, нас будет интересовать величина $E(\tau_\varepsilon + 1)$, где $\tau_\varepsilon + 1 = \min(n \geq 0 : \beta_n \in \Gamma_\varepsilon)$.

²⁰⁸ Оно, конечно, должно быть асимптотическим при $t \rightarrow \infty$

²⁰⁹ А почему?

Предложение 12. Имеет место сходимость

$$\frac{E(\tau_\varepsilon + 1)}{\ln(z_0/\varepsilon)} \rightarrow \frac{1}{1 - \ln 2}$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Доказательство. Если обозначить²¹⁰ $d_n = \rho(\beta_n, \Gamma)$, то, конечно, $\tau_\varepsilon + 1 = \min(n \geq 0 : d_n < \varepsilon)$, см. рис. 9.

Если зафиксировать d_{n-1} , то окажется,²¹¹ что d_n равномерно распределено на отрезке $[0, 2d_{n-1}]$, поэтому

$$d_n \stackrel{\mathcal{L}}{=} d_{n-1} 2\alpha_n \stackrel{\mathcal{L}}{=} z_0 \prod_{i=1}^n 2\alpha_i =: d'_n, \quad d_0 = d'_0 = z_0, \quad (2.4.4)$$

где α_i — независимые случайные величины, имеющие распределение $U(0, 1)$, а равенство $\zeta_1 \stackrel{\mathcal{L}}{=} \zeta_2$ означает, что ζ_1 и ζ_2 одинаково распределены. Поэтому, если положить

$$\tau'_\varepsilon + 1 = \min(n \geq 0 : d'_n < \varepsilon), \quad (2.4.5)$$

то получится, что $E(\tau_\varepsilon + 1) = E(\tau'_\varepsilon + 1)$.

Далее,

$$\{d'_n < \varepsilon\} = \left\{ z_0 \prod_{i=1}^n 2\alpha_i < \varepsilon \right\} = \left\{ \sum_{i=1}^n \ln(2\alpha_i) < \ln(\varepsilon/z_0) \right\} = \left\{ \sum_{i=1}^n -\ln(2\alpha_i) > \ln(z_0/\varepsilon) \right\},$$

и, так как

$$E \ln(\alpha) = \int_0^1 \ln(x) dx = (x \ln(x) - x)|_0^1 = -1,$$

то $E(-\ln(2\alpha)) = 1 - \ln 2 > 0$. Следовательно, по Предложению 11 с $t = \ln(z_0/\varepsilon)$ и $\mu(t) = \tau_\varepsilon + 1$

$$\frac{E(\tau_\varepsilon + 1)}{\ln(z_0/\varepsilon)} \rightarrow \frac{1}{1 - \ln 2}$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$. □

2.4.3 Сферический процесс в выпуклой области

Таким образом, среднее число шагов сферического процесса в полупространстве до достижения Γ_ε растет очень медленно (логарифмически) при $\varepsilon \rightarrow 0$. Покажем, что аналогичный результат имеет место для выпуклых D .

Предложение 13. Пусть, как и раньше, $d_n = \rho(\beta_n, \Gamma)$ и, соответственно, $\tau_\varepsilon + 1 = \min(n \geq 0 : d_n < \varepsilon)$. Если D — выпуклая область, то

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{E(\tau_\varepsilon + 1)}{\ln(d_0/\varepsilon)} \leq \frac{1}{1 - \ln 2}.$$

Доказательство. Обозначим L_{n-1} плоскость, касательную (в общем случае — опорную) плоскость к границе Γ в точке касания сферы S_{n-1} и Γ (см. рис. 10). Пусть, кроме того, $h_n = \rho(\beta_n, L_n)$. Тогда $(h_1, \dots, h_n) \stackrel{\mathcal{L}}{=} (d_0 2\alpha_1, \dots, d_{n-1} 2\alpha_n)$ и, из-за выпуклости D , $d_n \leq h_n$.²¹²

²¹⁰Конечно, d_n — это просто третья координата вектора β_n .

²¹¹А почему?

²¹²Действительно?

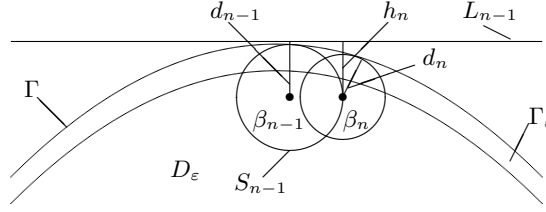


Рис. 10: Сферический процесс в выпуклой области.

Отсюда сразу следует, что при $n \geq 0$

$$\begin{aligned} P(\tau_\varepsilon + 1 > n) &= P(d_1 \geq \varepsilon, d_2 \geq \varepsilon, \dots, d_n \geq \varepsilon) \leq P(h_1 \geq \varepsilon, h_2 \geq \varepsilon, \dots, h_n \geq \varepsilon) = \\ &= P(d_0 2\alpha_1 \geq \varepsilon, d_1 2\alpha_2 \geq \varepsilon, \dots, d_{n-1} 2\alpha_n \geq \varepsilon) \leq P(d_0 2\alpha_1 \geq \varepsilon, h_1 2\alpha_2 \geq \varepsilon, \dots, h_{n-1} 2\alpha_n \geq \varepsilon) \leq \\ &\leq P(A_0 \cap A_1 \cap \dots \cap A_n), \end{aligned}$$

где

$$A_i = \left\{ d_0 \prod_{j=1}^i (2\alpha_j) \geq \varepsilon \right\}.$$

Поэтому

$$E(\tau_\varepsilon + 1) \leq \sum_{n \geq 0} P(A_0 \cap A_1 \cap \dots \cap A_n) = E(\tau'_\varepsilon + 1),$$

где $\tau'_\varepsilon + 1$ определено в (2.4.4), (2.4.5). Ссылка на Предложение 12 заканчивает доказательство. $\square$

Замечание 29. Более изощренные методы позволяют доказать, что предположение о выпуклости D является излишним. Точнее (например, [12]), оказывается, что для любой ограниченной области D с достаточно гладкой границей при достаточно малом ε имеет место неравенство

$$E(\tau_\varepsilon + 1) \leq B_1 \ln(1/\varepsilon) + B_2,$$

где B_1, B_2 — некоторые постоянные.

Список литературы

- [1] П. Халмош. Теория меры. (1953). М., ИЛ.
- [2] А.Н. Ширяев, Вероятность-1, М., Изд-во МЦНМО, 2004.
- [3] Шилов Г.Е., Гуревич Б.Л. Интеграл, мера и производная. Общая теория (1967). М., Наука.
- [4] В.В. Некруткин (2016), Слабая сходимость распределений. Основы теории и некоторые приложения, <http://statmod.ru>.
- [5] И.М. Соболев (1973), Численные методы Монте-Карло, М., Наука.
- [6] В.В. Некруткин (2016), Условные математические ожидания относительно σ -алгебр и отображений, <http://statmod.ru>.
- [7] G. Rubino & B. Tuffin (eds), 2009, Rare event simulation using Monte Carlo methods, Wiley, Chichester.
- [8] Михайлов Г. А., Войтишек А. В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Академия, 2006. 367 с.
- [9] S. Ermakov, V. Nekrutkin and A. Sipin, Random processes for classical equations of mathematical physics. Dordrecht/Boston/London, Kluwer Academic Publishers, 1989. 289 p.
- [10] С.М. Ермаков, А.С. Сипин, Метод Монте-Карло и параметрическая разделимость алгоритмов, СПб, изд. СПбГУ, 2014. 248 с.
- [11] Ж. Невё, Математические основы теории вероятностей, М., Мир, 1969, 310 с. p.228
- [12] Курбанмурадов О.А. Оценка математического ожидания числа шагов ε -сферического процесса // Методы Монте-Карло в вычисл. матем. и матем. физ. Ч. 2. Новосибирск: Наука, 1979. С. 137–144.