УДК 517.5

В. Ф. Бабенко (Днепропетров. ун-т)

ОБ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИБЛИЖЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО*

We solve the problem of optimization of Monte Carlo methods for approximate integration over an arbitrary absolutely continuous measure. We propose a convenient model of Monte Carlo methods which uses the notion of transitional probability.

Розв'язана задача оптимізації методів Монте-Карло наближеного інтегрування за довільною абсолютно неперервною мірою. Запропонована зручна для досліджень такого типу модель методів Монте-Карло, в якій використовується поняття перехідної ймовірності.

Вопросы приближенного вычисления интегралов с помощью случайных квадратурных формул (методов Монте-Карло) изучались многими авторами в связи с их важностью для математики и ее приложений. Изложение многих полученных в этом направлении результатов можно найти в монографии [1].

Изучение аппроксимативных возможностей случайных квадратурных формул, учитывающих гладкость функций из рассматриваемого класса, восходит к статье Н. С. Бахвалова [2]. Однако с точки зрения аппроксимации (см., например, [3]) важна не только оптимальная скорость сходимости, но и точные константы, которых в теории методов Монте-Карло очень мало. Одни из первых примеров точного решения задач оптимизации методов Монте-Карло даны Э. Новаком [4] и П. Матэ [5, 6].

Результаты данной статьи связаны с результатами [5].

Пусть μ — некоторая мера на отрезке $[0, 1]$, абсолютно непрерывная относительно меры Лебега. Положим

$$I_\mu(x) = \int_0^1 x(t)\mu(dt), \qquad \mu \in AC. \tag{1}$$

Будем изучать задачу оптимизации приближенного вычисления интегралов от функций $f \in B_p(0, 1)$, где $B_p(0, 1)$ — единичный шар пространства $L_p[0, 1]$, с помощью случайных квадратурных формул (методов Монте-Карло).

В [5] задача оптимизации случайных квадратурных формул была решена в случае, когда $\mu = dx$ — мера Лебега на $[0, 1]$ и $p = \infty$. В работах [7 – 9] эта задача независимо и разными методами была решена для случая, когда μ — произвольная мера на $[0, 1]$, абсолютно непрерывная относительно меры Лебега. (В упомянутых работах то обстоятельство, что рассматривается интегрирование по $[0, 1]$, несущественно, и аналогичные результаты справедливы, например, для интегралов по s-мерному кубу $[0, 1]^s$.)

В данной статье изложены результаты, анонсированные в [7, 8]. Отметим,

*Выполнена при финансовой поддержке Международного научного фонда и Государственного комитета Украины по вопросам науки и технологий.

что использованная нами модель методов Монте-Карло, основанная на понятии переходной вероятности, позволяет дать весьма простое решение задачи оптимизации методов Монте-Карло приближенного вычисления интегралов, а также является естественной и удобной во многих других отношениях. Для того чтобы не загромождать изложение несущественными деталями, ограничимся одномерным случаем, т. е. интегрированием по $[0, 1]$. При этом, кроме задачи оптимизации приближенного интегрирования, рассмотрим задачу оптимизации восстановления более общих функционалов.

Для точных формулировок нам понадобятся некоторые определения и результаты [10, с. 180 – 190].

Пусть $(\Omega_1, \mathcal{A}_1)$ и $(\Omega_2, \mathcal{A}_2)$ — измеримые пространства. Переходной вероятностью называется функция $\lambda: \Omega_1 \times \mathcal{A}_2 \to [0, 1]$ такая, что:

1) для любого $\omega_1 \in \Omega_1$ функция $\lambda(\omega_1, \cdot)$ является вероятностью на $(\Omega_2, \mathcal{A}_2)$;

2) для любого $A_2 \in \mathcal{A}_2$ функция $\lambda(\cdot, A_2)$ является измеримой функцией на $(\Omega_1, \mathcal{A}_1)$.

Следующее утверждение известно как обобщенная теорема Фубини.

Теорема 1. *Пусть P_1 — вероятность на $(\Omega_1, \mathcal{A}_1)$ и P_2^1 — переходная вероятность на $(\Omega_1, \mathcal{A}_2)$. Тогда существует единственная вероятность P на $(\Omega_1 \times \Omega_2, \mathcal{A}_1 \times \mathcal{A}_2)$ такая, что для любых $A_1 \in \mathcal{A}_1$, $A_2 \in \mathcal{A}_2$*

$$P(A_1 \times A_2) = \int\limits_{A_1} P_2^1(\omega_1, A_2)\, P(d\omega_1).$$

Измеримая функция f на $(\Omega_1 \times \Omega_2, \mathcal{A}_1 \times \mathcal{A}_2)$ интегрируема относительно вероятности P тогда и только тогда, когда для почти всех $\omega_1 \in \Omega_1$

$$\int |f(\omega_1, \omega_2)| P_2^1(\omega_1, d\omega_2) < \infty,$$

$$\int \Big[\int |f(\omega_1, \omega_2)| P_2^1(\omega_1, d\omega_2) \Big] P_1(d\omega_1) < \infty.$$

При этом

$$\int f\, dP = \int \Big[\int |f(\omega_1, \omega_2)| P_2^1(\omega_1, d\omega_2) \Big] P_1(d\omega_1) < \infty.$$

Для приближенного вычисления интегралов вида (1) будем использовать функционалы вида

$$q(x) = q(x; t, c) = \sum_{i=1}^{n} c_i f(t_i), \tag{2}$$

где $t = (t_1, t_2, \ldots, t_n) \in [0, 1]^n$, $c = (c_1, c_2, \ldots, c_n) \in \mathbb{R}^n$.

Методом Монте-Карло (случайной квадратурной формулой) будем называть пару (P_1, P_2^1), где P_1 — вероятность на $[0, 1]^n$, которая порождает распределение узлов квадратурной формулы, а P_2^1 — переходная вероятность на $[0, 1]^n \times \mathcal{B}^n$ ($\mathcal{B}^n$ — σ-поле борелевских подмножеств $\mathbb{R}^n$), которая порождает распределение коэффициентов, или, что эквивалентно, методом Монте-Карло будем называть вероятность $\mathcal{P}_n$ на множестве функционалов вида (2) (точнее на множестве $\Omega = [0, 1]^n \times \mathbb{R}^n$), которая порождается вероятностями P_1 и P_2^1, и в этом смысле будем писать $\mathcal{P}_n = (P_1, P_2^1)$.

Среди всех методов Монте-Карло выделим классы MC_{ind}, MC_{ac} и MC_{acd} Методы класса MC_{ind} характеризуются тем, что все узлы $t_1, \dots, t_n$ и коэффициенты $c_1, \dots, c_n$ выбираются независимо (каждый в соответствии со своим распределением вероятностей). Методы класса MC_{ac} — это методы, у которых вероятность P_1 абсолютно непрерывна относительно меры Лебега. Наконец, методы класса MC_{acd} — это такие методы, у которых $P_1 = \alpha P_1' + \beta P_1''$, где вероятность P_1' абсолютно непрерывна относительно меры Лебега, P_1'' — атомическая вероятность, $\alpha, \beta \geq 0$, $\alpha + \beta = 1$.

Погрешность данного метода $\mathcal{P}_n$ на множестве B_p определим следующим образом. Пусть для всех $x \in B_p$

$$R(x, \mu, \mathcal{P}_n) := \left(\int\limits_{\Omega} \left| I_\mu(x) - \sum_{i=1}^{n} c_i \, x(t_i) \right|^2 d\mathcal{P}_n \right)^{1/2}$$

и

$$R(B_p, \mu, \mathcal{P}_n) := \sup \{ R(x, \mu, \mathcal{P}_n) : x \in B_p \}.$$

Для заданного множества MC методов Монте-Карло положим

$$R_n(B_p, \mu, MC) := \inf \{ R(B_p, \mu, \mathcal{P}_n) : \mathcal{P}_n \in MC \}. \tag{3}$$

Задача состоит в том, чтобы найти $R_n(B_p, \mu, MC)$ и вероятность $\mathcal{P}_n^* \in MC$, реализующую инфимум в правой части (3).

Теорема 2. *Пусть* $MC = MC_{ind}$, *или* $MC = MC_{ac}$, *или* $MC = MC_{acd}$. *Тогда для любого* $2 \leq p \leq \infty$

$$R_n(B_p, \mu, MC) = \frac{1}{1 + \sqrt{n}}. \tag{4}$$

При этом оптимальный метод Монте-Карло определяется следующим образом:

$$q^*(x) = c_n^* \sum_{i=1}^{n} x(t_k^*),$$

где $c_n^* = 1 / (1 + \sqrt{n})$, *а* t_k^*, $k = 1, 2, \dots, n$, — *независимые случайные величины с распределением* μ.

Доказательство. Неравенство

$$R_n(B_p, \mu, MC) \leq \frac{1}{1 + \sqrt{n}}$$

несложно, его доказательство можно провести методом из [5] и поэтому мы его опускаем.

Оценку снизу проведем в случае $MC = MC_{ac}$. Для любого $\mathcal{P}_n \in MC_{ac}$ будем иметь

$$R_n(B_p, \mu, \mathcal{P}_n)^2 \geq R_n(B_\infty, \mu, \mathcal{P}_n)^2 \geq \max \{ R(1, \mu, \mathcal{P}_n)^2, R_n(\varphi_m, \mu, \mathcal{P}_n)^2 \},$$

где $\varphi_m(u) := \operatorname{sgn} \sin 2\pi m u$. Далее имеем

$$R(1, \mu, \mathcal{P}_n)^2 = \int\limits_{\Omega} \left(1 - \sum_{i=1}^{n} c_i\right)^2 d\mathcal{P}_n \geq \left(1 - \sum_{i=1}^{n} \int\limits_{\Omega} c_i \, d\mathcal{P}_n\right)^2 =$$

$$= 1 - 2\sum_{i=1}^{n} D_i + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \neq i} D_i D_j + \sum_{i=1}^{n} D_i^2.$$

Здесь $D_i := \int_{\Omega} c_i \, d\mathcal{P}_n$. Теперь для любого $m \in \mathbb{N}$

$$R(\varphi_m, \mu, \mathcal{P}_n)^2 = I_\mu(\varphi_m) - 2I_\mu(\varphi_m) \sum_{i=1}^{n} \int\limits_{\Omega} c_i \varphi_m(t_i) d\mathcal{P}_n +$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \neq i} \int\limits_{[0,1]^n} \varphi_m(t_i) \varphi_m(t_j) dP_2^1 \int\limits_{\mathbb{R}} c_i c_j \, dP_2^1 \, dP_1 + \sum_{i=1}^{n} \int\limits_{\Omega} c_i^2 \, d\mathcal{P}_n.$$

Так как $P_1 \in AC$ и (см. теорему 1) функции

$$G_{i,j}(t) = \int\limits_{R^n} c_i c_j \, dP_2^1$$

интегрируемы, получаем

$$I_{m,i,j} := \int\limits_{[0,1]} \varphi_m(t_i) \varphi_m(t_j) \int\limits_{R^n} c_i c_j \, dP_2^1 \, dP_1 =$$

$$= \int\limits_{[0,1]^2} \varphi_m(t_i) \varphi_m(t_j) g_{i,j}(t_i, t_j) dt_i \, dt_j,$$

где функции $g_{i,j}$ интегрируемы по Лебегу на $[0, 1]^2$. Учитывая, что $\varphi_m \perp \perp \mathfrak{T}_{2m-1}$ (здесь $\mathfrak{T}_{2m-1}$ — множество 1-периодических тригонометрических полиномов от одного переменного порядка не выше $m-1$) и, следовательно, $\varphi_m(t_1)\varphi_m(t_2) \perp \mathfrak{T}_{2m-1, 2m-1}$ ($\mathfrak{T}_{2m-1, 2m-1}$ — множество 1-периодических по каждой переменной тригонометрических полиномов от двух переменных порядка не выше $m-1$ по каждой переменной), видим, что $I_\mu(\varphi_m) \to 0$, $I_{m,i,j} \to \to 0$ при $m \to \infty$.

Возвращаясь к оценке $R(\varphi_m, \mu; \mathcal{P}_n)$ и устремляя $m \to \infty$, получаем

$$R(\varphi_m, \mu; \mathcal{P}_n)^2 \to \sum_{i=1}^{n} \int\limits_{\Omega} c_i^2 \, d\mathcal{P}_n \geq \sum_{i=1}^{n} D_i^2.$$

Таким образом,

$$R(B_p, \mu; \mathcal{P}_n)^2 \geq \max \left\{ 1 - 2\sum_{i=1}^{n} D_i + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \neq i} D_i D_j + \sum_{i=1}^{n} D_i^2, \sum_{i=1}^{n} D_i^2 \right\},$$

и для завершения доказательства осталось воспользоваться следующим числовым неравенством:

$$\max \left\{ 1 - 2\sum_{i=1}^{n} D_i + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \neq i} D_i D_j + \sum_{i=1}^{n} D_i^2, \sum_{i=1}^{n} D_i^2 \right\} \geq \left(\frac{1}{1 + \sqrt{n}} \right)^2.$$

Для полноты изложения приведем простое доказательство последнего неравенства. Применяя неравенство между средним арифметическим и средним квадратическим, получаем

$$\max\left\{1 - 2\sum_{i=1}^{n} D_i + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j\neq i} D_i D_j + \sum_{i=1}^{n} D_i^2, \sum_{i=1}^{n} D_i^2\right\} \geq$$

$$\geq \max\left\{\left(1 - \sum_{i=1}^{n} D_i\right)^2, \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} D_i\right)^2\right\} \geq \min_{t\in\mathbb{R}} \max\left\{(1-t)^2, \frac{1}{n}t^2\right\} = \left(\frac{1}{1+\sqrt{n}}\right)^2$$

и требуемое неравенство доказано.

Пусть теперь

$$f_g(x) = \int_0^1 x(t)g(t)\,dt,$$

где $g \in L_1[0, 1]$ и, вообще говоря, меняет знак.

Для восстановления $f_g(x)$ для $x \in B_\infty$ воспользуемся методами вида

$$q(x) = q(x; t, c) = \sum_{i=1}^{n} c_i x(t_i).$$

Используем также описанную выше модель методов Монте-Карло вида $\mathcal{P}_n = (P_1, P_2^1)$. Определим погрешность заданного метода Монте-Карло для функционала f_g и оптимальную погрешность для заданного класса методов Монте-Карло аналогично погрешностям восстановления I_μ и обозначим эти погрешности соответственно $R(B_\infty, f_g; \mathcal{P}_n)$ и $R(B_\infty, f_g; MC)$.

Как и выше, мы можем сформулировать задачу оптимального восстановления f_g с помощью заданного класса методов Монте-Карло. Справедлива следующая теорема.

Теорема 3. *Пусть* $MC = MC_{ind}$, *или* $MC = MC_{ac}$, *или* $MC = MC_{acd}$. *Тогда*

$$R(B_\infty, f_g; MC) = \frac{\|g\|_1}{1+\sqrt{n}} \quad \left(= \frac{\|f_g\|}{1+\sqrt{n}} \right).$$

Более того, оптимальный метод в каждом из перечисленных классов может быть выбран в виде

$$q(x) = c_n^* \|g\|_1 \sum_{i=1}^{n} \operatorname{sgn} g(t_i)\, x(t_i),$$

где

$$c_n^* = \frac{1}{1+\sqrt{n}},$$

а t_i, $i = 1, \ldots, n$, — *независимые случайные величины, каждая из которых имеет плотность распределения*

$$p(u) = \frac{|g(u)|}{\|g\|_1}, \qquad u \in [0, 1].$$

Отметим, что коэффициенты и узлы оптимального метода восстановления, в отличие от случая восстановления интегралов, не являются независимыми.

В заключение отметим, что рассматривая задачу оптимального восстановления функционалов вида

$$f(x) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i x(u_i) + \int_0^1 x(t) g(t) dt,$$

где α_i и u_i заданы, нетрудно получить следующую оценку сверху для оптимальной погрешности восстановления:

$$R(B_\infty, f; MC) \le \frac{\|g\|_1}{1+\sqrt{n-k}}.$$

Однако, по-видимому, эта оценка не является точной.

1. *Ермаков С. М.* Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1975. – 472 с.
2. *Бахвалов Н. С.* О приближенном вычислении кратных интегралов // Вестн. Моск. ун-та. – 1959. – № 4. – С. 3–18.
3. *Корнейчук Н. П.* Точные константы в теории приближения. – М.: Наука, 1987. – 424 с.
4. *Novak E.* Optimal linear randomized methods for linear operators in Hilbert spaces // J. Complexity. – 1992. – **8**. – P. 22–36.
5. *Mathe P.* Random approximation of finite sums. – 1992. – 20 p. – (Preprint / Inst. Appl. Anal. and Stochast., № 11).
6. *Mathe P.* A minimax principle for the optimal error of Monte Carlo methods // Constr. Approxim. – 1993. – **9**. – P. 23–29.
7. *Бабенко В. Ф.* Об оптимизации приближенного интегрирования методами Монте-Карло // Теорія наближення та задачі обчислювальної математики: Тез доп. міжнар. конф., присвяченої 75-річчю ДДУ (Дніпропетровськ, 26 – 28 травня 1993 р.). – Дніпропетровськ: Вид-во Дніпропетр. ун-ту, 1993. – С. 11.
8. *Babenko V. F.* On optimization of quadrature formulae // Algorithms and complexity for continuous problems. – Dagstuhl-Seminar-Report; 101; 17.10 – 21.10.94. – P. 3.
9. *Mathe P.* The optimal error of Monte Carlo integration // Ibid. – P. 11.
10. *Партасарати К.* Введение в теорию вероятностей и теорию меры. – М.: Мир, 1983. – 344 с.

Получено 21.11.95