ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаборатория теоретической физики

Р - 296

Ю.Н. Благовещенский

О ВЫЧИСЛЕНИИ ПОВТОРНЫХ ИНТЕГРАЛОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Дубна, 1959 год

Р - 296

Ю.Н. Благовещенский

О ВЫЧИСЛЕНИИ ПОВТОРНЫХ ИНТЕГРАЛОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

А н н о т а ц и я

В работе показывается, что метод, предложенный автором совместно с Г.И.Копыловым в работе /6/ для расчета повторных интегралов большой кратности, практически выгоднее других методов "Монте-Карло" для широкого класса функций.

Метод Монте-Карло или метод "Importance of sampling" /см. [5] / для вычисления интеграла

$$\mathcal{J} = \int_A f(x)\,dx\,, \qquad /1/$$

где $f(x)$ - неотрицательная функция точек $x=(x_1,x_2,\dots,x_n)$ в области A n-мерного пространства, как известно, состоит в следующем /см. 1, стр. 155/: производим выборку $x^{(1)}, x^{(2)},\dots,x^{(N)}$ из области A с плотностью распределения вероятностей $p(x)$ и вычисляем величину $\mathcal{J}_N$ по формуле:

$$\mathcal{J}_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \xi\left(x^{(i)}\right) \quad \text{где} \quad \xi(x) = \frac{f(x)}{p(x)}\,. \qquad /2/$$

Так как $M\xi(x) = \int_A \xi(x)p(x)\,dx = \int_A f(x)\,dx = \mathcal{J}$, то по неравенству Чебышева вероятность отклонения $\mathcal{J}_N$ от $\mathcal{J}$ на величину, не превосходящую ε, определяется из соотношения[1/]:

$$P\left\{|\mathcal{J}_N - \mathcal{J}| \le \varepsilon\right\} \ge 1 - \frac{\mathcal{D}\xi(x)}{N\varepsilon^2}\,. \qquad /3/$$

С точки зрения счета здесь две возможности: а/ выбирать $p(x)$ так, чтобы $\mathcal{D}\xi(x)$ была возможно меньшей; б/ выбирать $p(x)$ так, чтобы с наименьшей затратой времени получать точки $x^{(1)}, x^{(2)},\dots,x^{(k)},\dots$ из области A с плотностью распределения вероятностей $p(x)$. Обычно исследовалась первая возможность /см. [1] , [2] , [3] и др./. По поводу второй возможности в общем случае ничего сказать нельзя / в нескольких заметках изучалось лишь $p(x) = Const$; см., например, [4] /. Однако можно дать вполне определенный рецепт в том частном случае интеграла /1/, когда область A задается неравенствами:

$$\varphi_k^-(x) \le x_k \le \varphi_k^+(x)\,, \quad \text{причем} \quad \varphi_1^\pm(x) = \varphi_1^\pm = Const\,;\ \varphi_k^\pm(x) = \varphi_k^\pm(x_1,\dots,x_{k-1})\,;\ k=2,\dots,n\,. \qquad /4/$$

1/ $M\xi(x)$ и $\mathcal{D}\xi(x)$ - математическое ожидание и дисперсия соответственно случайной величины $\xi(x)$.

Такие интегралы часто появляются в математике, физике и других разделах науки /см. [6] /.

Не уменьшая общности в /5/ можно считать, что

$$\varphi_\kappa^+(x) \equiv \varphi_\kappa(x); \quad \varphi_\kappa^-(x) \equiv 0; \quad \max_{x\in A} \varphi_\kappa(x) = 1 \quad \text{для} \quad \kappa = 1,2,\ldots, n;$$

$$\text{и} \quad \max_{x\in A} f(x) = m = 1$$

Если взять $\rho(x) = \frac{1}{\prod_1^n \varphi_\kappa(x)}$, то $\int_A \rho(x)dx = 1$; $\rho(x) \geqslant 0$ и, следовательно, $\rho(x)$ - плотность распределения вероятностей в области A. Получение выборки $x^{(1)}, x^{(2)},\ldots, x^{(N)}$ из области A происходит таким образом: точка $x^{(\kappa)} = (x_1^{(\kappa)},\ldots, x_n^{(\kappa)})$ выбирается так, что $x_1^{(\kappa)}$ распределено равномерно на отрезке $[0,1]$; $x_2^{(\kappa)}$ - на отрезке $[0, \varphi_1(x_1^{(\kappa)})]$;...; $x_n^{(\kappa)}$ - на отрезке $[0, \varphi_{n-1}(x_1^{(\kappa)}, x_2^{(\kappa)},\ldots, x_{n-1}^{(\kappa)})]$. Легко проверить, что $x^{(1)}, x^{(2)},\ldots,$ $x^{(N)}$ - выборка из точек, распределенных с заданной плотностью $\rho(x) = \frac{1}{\prod_1^n \varphi_\kappa(x)}$ в области A.

Время $T_1^{(N)}$, потребное для вычисления $\mathcal{J}_N$, очевидно, складывается из $T = \sum_1^n T_i$, где T_i - время, необходимое для вычисления $\varphi_i(x)$; из $n\tau$, где τ - время получения равномерно распределенной на отрезке $[a, b]$ точки и из t -времени, необходимого на вычисление $\xi(x) = f(x)\cdot\prod_1^n \varphi_i(x)$. Откуда, используя формулу /4.4/ на стр.156 из [1], получаем, что для вычисления $\mathcal{J}_N$ с вероятностью 0,99 отклоняющегося от $\mathcal{J}$ не более, чем на ε необходимо время:

$$T_1^{(N)} = N(T + n\tau + t) = \frac{4,5}{\varepsilon^2}(T + n\tau + t). \qquad /5/$$

Оценим теперь $T_2^{(N')}$ - время, потребное для вычисления $\mathcal{J}_{N'}$ с теми же достоверностью и точностью, но с использованием плотности $\rho(x)$ "близкой" к $\frac{f(x)}{\mathcal{J}}$ /точный смысл этому будет дан ниже/. Для широкого класса функций $f(x)$ можно показать, что $T_2^{(N')} > T_1^{(N)}$ для интегралов достаточно большой кратности. Основная трудность, которая возникает при использовании данной $\rho(x)$ - это получение выборки. В работах [2], [3] предлагается способ получения неравномерных выборок для одномерного случая. Обобщение этого способа на случай n измерений практически невозможно, так как уже для $n = 5 \div 7$ требуется машинная память порядка $10^5 \div 10^7$ чисел. Поэтому для получения неравномерных выборок пользуются следующим приемом /см[3]/: выбирают $x^{(\kappa)} = (x_1^{(\kappa)},\ldots, x_n^{(\kappa)})$ равномерно из описанного около A прямоугольника E и η равномерно на $[0,1]$ и оставляют лишь те $x^{(\kappa)}$, которые принадлежат A и для которых выполнено неравенство: $\eta \leq f(x^{(\kappa)})$. Таким образом, если $\gamma_n = \frac{V(E)}{\mathcal{J}} \geqslant \frac{V(E)}{V(A)}$, то для получения N' точек надо сделать, очевидно, $\gamma_n N'$ "бросаний" в прямоугольник E. Величина $V(G)$ обозначает объем области G. Пусть $\rho(x)$ "близка" к $\frac{f(x)}{J}$, то есть $\rho(x)=\frac{h(x)}{J}$, где $J=\int_A h(x)dx$, $h(x)=f(x)-\varepsilon(x)$ и $\max_{x\in A}|\varepsilon(x)|=\varepsilon_0$. Из формулы /4.4/ /см. [1] / следует, что число точек, необходимых для расчета при такой определяется из неравенства:

$$N' \geqslant \frac{4{,}5\,\varepsilon_0^2}{\varepsilon^2}$$

При больших n /порядка 5, 6 и более/ обычно ε_0 выбирается не менее 0,2, так как для вычисления $\xi(x)=\frac{f(x)}{\rho(x)}$ требуется знать J, на подсчет которого затрачивается время, в большинстве случаев пропорциональное величине ε_0^{-n}. Учитывая это имеем: $N' \geqslant \frac{0{,}18}{\varepsilon^2}$ и среднее необходимое числа "бросаемых" в E точек $\bar N$ находится из неравенства:

$$\bar N \geqslant \frac{\gamma_n \cdot 0{,}18}{\varepsilon^2} \geqslant \frac{V(E)\cdot 0{,}18}{\varepsilon^2\cdot V(A)}$$

Теперь по соображениям, аналогичным при рассмотрении $T_1^{(N)}$, легко получить, что

$$T_2^{(N')} \geqslant \frac{V(E)\cdot 0{,}18}{V(A)\cdot\varepsilon^2}\left[\tau n+T+t'\right], \quad t'\cong t, \qquad /6/$$

где T и τ те же, что и в /5/. Зная кроме того, что $V(E)/V(A)$ практически для всех не прямоугольных областей быстро растет с ростом n /например, для n -мерного шара/, соотношение $T_2^{(N')} > T_1^{(N)}$ становится очевидным. Сравнение расчета с $\rho(x)=\frac{1}{\prod_1^n \varphi_i(x)}$ с расчетом, когда $\rho(x)=Const$ приведено в работе [6], где и был впервые автором совместно с Г.И.Копыловым предложен описанный для областей вида /4/ способ.

Работа поступила в издательский отдел 28 января 1959 года.

Литература

[1] - Д.Кертисс. Методы "Монте-Карло" для итерации линейных операторов, УМН, т.XII, вып.5, 1957.

[2] - Статья I.W.Butler в книге: "Simposium on Monte-Karlo Methods",New York

[3] - Статья H.Kahn в книге /смотри [2] / стр.146-191.

[4] - И.М.Соболь, Многомерные интегралы и метод Монте-Карло, ДАН, т.114, № 4, стр.706, 1957 г.

[5] - W.E. Deming, Some Theory of Sampling, New York,1950.

[6] - Ю.Н.Благовещенский и Г.И.Копылов. Вычисление статистических весов методом Монте-Карло, г.Дубна, ОИЯИ, р-213, 1958 г.