сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P5-81-383

Б.Ф.Костин, Д.А.Мжавия

МОНТЕ-КАРЛО:
РОЗЫГРЫШ ПО СМЕСИ МЕТОДОВ

1981

Прямой путь получить оценку кратного интеграла

$$\Gamma = \int f(x)\, dx \qquad /1/$$

методом Монте-Карло* состоит в том, чтобы подставить в /1/ тождество

$$\forall x : w(x)\, \rho(x) = 1 . \qquad /2/$$

Если нормированная согласно

$$\int \rho(x)\, dx = 1 \qquad /3/$$

положительная функция $\rho(x)$ интерпретируется как плотность вероятности случайной переменной x, подстановка дает

$$\Gamma = < f(x)\, w(x) > [\, x; \rho(x)] . \qquad /4/$$

/мы применяем обозначение $<...>[x;\rho(x)]$ для математического ожидания функции, стоящей в угольных скобках/. Оценка после этого получается, здесь и ниже, обычной заменой математического ожидания эмпирическим средним по выборке. Если N - объем выборки, дисперсия оценки

$$D\hat{\Gamma} = \frac{1}{N}(< f^2 w^2 > [x;\rho] - \Gamma^2) . \qquad /5/$$

Задавая конкретную функцию $\rho(x)$, необходимо одновременно указать алгоритм розыгрыша переменной x в соответствии с плотностью вероятности $\rho(x)$.

В дальнейшем мы принимаем, что даны ν функций $\rho_\alpha(x)$, $\alpha = 1,\dots,\nu$, обеспечивая тем самым ν различных оценок интеграла. Мы покажем, что, вообще говоря, можно понизить дисперсию оценки, если использовать "розыгрыш по смеси методов" вместо того, чтобы просто выбрать наилучшую из оценок.

Можно ожидать значительного выигрыша, если смешиваемые "парциальные" методы розыгрыша реализуют "существенную выборку" по отношению к различным сингулярностям или пикам интегрируемой функции.

Розыгрыш по смеси методов может быть полезен также и в случае, когда, как это часто бывает, хотят получить способ расчета более или менее широкого класса родственных интегралов.

---

* Общая ссылка: /1,2,3,4/.

Пусть положительные числа p_α удовлетворяют условию

$$\sum_\alpha p_\alpha = 1. \qquad /6/$$

Разделим объем интегрирования V на ν подобъемов v_α:

$$V = \bigcup_\alpha v_\alpha, \quad v_\alpha \cap v_\beta = 0 \quad (\alpha \neq \beta). \qquad /7/$$

Если v_α заданы характеристическими функциями

$$\eta_\alpha(x) = \begin{cases} 1, & x \in v_\alpha, \\ 0, & x \notin v_\alpha, \end{cases} \qquad /8/$$

то /7/ эквивалентно тождеству

$$\forall x: \sum_\alpha \eta_\alpha = 1. \qquad /9/$$

Тождество /ср. с /2//

$$\forall x: \sum_\alpha p_\alpha^{-1} w_\alpha \eta_\alpha \cdot p_\alpha \rho_\alpha = 1 \qquad /10/$$

дает первый из двух предлагаемых нами методов смешивания оценок:

$$\Gamma = \langle f(x)\, p_\alpha^{-1} w_\alpha(x) \eta_\alpha(x) \rangle [\alpha, x; p_\alpha \rho_\alpha(x)]. \qquad /11/$$

Получено выражение для Γ в виде математического ожидания функции составной случайной переменной (α, x), распределенной с плотностью $p_\alpha \rho_\alpha(x)$. Чтобы разыграть (α, x), можно сначала разыграть α согласно распределению p_α, затем x - согласно распределению $\rho_\alpha(x)$. Для дисперсии оценки имеем:

$$D\hat{\Gamma} = \frac{1}{N}\{\langle f^2 p_\alpha^{-2} w_\alpha^2 \eta_\alpha \rangle [\alpha, x; p_\alpha \rho_\alpha] - \Gamma^2\}. \qquad /12/$$

Смысл /11/ состоит в том, что парциальный метод α применяется с вероятностью p_α, причем вклад в оценку дает лишь в том случае, если точка x, разыгранная с плотностью вероятности $\rho_\alpha(x)$, принадлежит подобъему v_α.

Фиксировав p_α, найдем разбиение /7/, приводящее к наименьшей дисперсии. Выделим бесконечно малый объем δv, задав его характеристической функцией $\delta\eta(x)$, как в /8/. Рассмотрим теперь вариацию величин η_α и $D\hat{\Gamma}$ за счет изменения применяющегося в δv способа розыгрыша с β на γ. Очевидно,

$$\delta\eta_\alpha = \delta\eta(-\delta_{\beta\alpha} + \delta_{\gamma\alpha}) \qquad /13/$$

и

$$\delta N D\hat{\Gamma} = \delta v \cdot f^2 \cdot (-w_\beta p_\beta^{-1} + w_\gamma p_\gamma^{-1}). \qquad /14/$$

Из требования

$$\delta D\hat{\Gamma} \geq 0 \qquad /15/$$

немедленно вытекает прямое правило:

$$\eta_\alpha(x) = 1, \text{ если } \quad p_\alpha^{-1} w_\alpha(x) < \min_{\beta \neq \alpha} p_\beta^{-1} w_\beta(x). \qquad /16/$$

"Парциальные вероятности" p_α находятся из уравнения

$$\frac{\partial}{\partial p_\alpha}(N D\hat{\Gamma} + \lambda(\sum_\beta p_\beta - 1)) = 0, \qquad /17/$$

где λ - множитель Лагранжа. Для фиксированных η_α /17/ ведет к условию

$$\lambda p_\alpha^2 = \langle f^2 \delta_{\alpha\beta} p_\beta^{-1} w_\beta^2 \eta_\beta \rangle [\beta, x; p_\beta \rho_\beta(x)]. \qquad /18/$$

Это уравнение на p_α мы решали итеративно. Новые p_α вычислялись согласно /18/, где для выражения в правой части равенства бралась оценка, полученная на предыдущей итерации. Общий множитель λ легко найти из условия нормировки /6/.

Мы лишь кратко упомянем второй из предлагаемых способов розыгрыша по смеси методов, основанный на равенстве

$$\Gamma = \langle f(\sum_\alpha p_\alpha w_\alpha^{-1})^{-1} \rangle [x; \sum_\beta p_\beta \rho_\beta(x)]. \qquad /19/$$

Обратимся ко второй нашей теме. Возьмем некоторую оценку и рассмотрим распределение подлежащей усреднению случайной величины X: например, $X = f(x)\, w(x)$ в /4/. Значение X как случайной переменной характеризует скорее моду распределения, нежели его математическое ожидание. Если последние сильно отличаются, по выборке малого объема будет получено, скорее всего, смещенное значение $\hat{\Gamma}$ и слишком низкое значение $D\hat{\Gamma}$, несмотря на то, что, разумеется, в среднем эти оценки не смещены.

Центральная предельная теорема гарантирует совпадение моды и математического ожидания в асимптотическом пределе бесконечно большой выборки. Мы хотим указать практический признак достаточности объема выборки.

Определим нормированную переменную

$$Y = \left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i - \langle X \rangle\right) / \left(\frac{1}{N} DX\right)^{-1/2}. \qquad /20/$$

Согласно соотношению /26.2.47/ в [5] плотность вероятности

$$R(Y) = (2\pi)^{-1/2} \exp\left(-\frac{Y^2}{2}\right)\left[1 + \frac{\gamma_1}{3!\sqrt{N}}(Y^3 - 3Y) + o\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)\right], \qquad /21/$$

где

$$\gamma_1 = \langle (X - \langle X \rangle)^3 \rangle / (DX)^{-3/2} . \qquad /22/$$

Ясно, что если

$$N \lesssim \beta = \gamma_1^2 , \qquad /23/$$

результаты расчетов по методу Монте-Карло сомнительны, поскольку распределение Y сильно отличается от асимптотического гауссова. Можно поэтому рекомендовать в качестве меры предосторожности оценивать вместе с Γ и $D\Gamma$ также и асимметрию β.

Способ розыгрыша по смеси методов /11/ мы испытали на трех родственных задачах. Первой из них была оценка парциальной вероятности R процесса

$$\mu^+ \to e^+ + \nu_e + \overline{\nu_\mu} + e^+ + e^- \qquad /24/$$

/выражение для дифференциальной вероятности, которое мы использовали, равно как и сама R, были получены в [6]/. Две оставшиеся задачи ставились как вычисление вклада в R части фазового объема распада /24/. Именно, во второй задаче требовалось, чтобы полная энергия заряженных частиц превышала 90 МэВ, а в третьей - чтобы эффективная масса любой из (e^+, e^-)-пар превышала 10 МэВ.

Отношение дисперсии оценки /11/ /на последней итерации/ к дисперсии наилучшего парциального метода было найдено для наших трех задач равным 0,3; 0,125 и 1. Лучшим считался парциальный метод a с наибольшим p_a в конечной смеси.

Число смешиваемых методов, ν, было у нас 3x3x3 ввиду того, что дифференциальная вероятность имеет три сингулярности, отвечающие трем пропагаторам, а наши ρ_a были примерно пропорциональны 0,1 или 2 их степеням в любых сочетаниях.

Оказалось, что способ /11/ проявляет тенденцию отвергать большинство парциальных методов, сходясь к смеси со всего 2÷3 /или даже с 1, в третьей задаче/ ненулевыми p_a.

Мы отметили примечательное уменьшение асимметрии до значения $\beta \approx 40$ /задачи 1 и 2/, в то время как типичное значение асимметрии для парциальных методов измерялось в тысячах. Для получения окончательной смеси требовалось 5÷7 итераций.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hammersly J.M., Handscomb D.C. Monte Carlo Methods. Methuen, London; Wiley, New York, 1964.

2. Соболь И.М. Численные методы Монте-Карло. "Наука", М., 1973.
3. James F. CERN, DD/80/6, Geneva, 1980.
4. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. "Наука", М., 1971.
5. Абрамовиц М., Стиган И. /ред./. Справочник по специальным функциям. "Наука", М., 1979.
6. Бардин Д.Ю., Истатков Ц.Г., Мицельмахер Г.В. ОИЯИ, P2-5904, Дубна, 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 июня 1981 года.