

Модификации геометрических программных модулей, связанные с построением моделируемых вероятностных плотностей*

М. В. БЕССМЕЛЬЦЕВ, А. В. ВОЙТИШЕК

Институт вычислительной математики и математической геофизики,

Новосибирск, Россия

e-mail: vav@osmf.ssc.ru

Представлен программный модуль *AITricks GeomRandom*, позволяющий получать выборочные значения случайных векторов, распределенных согласно заданной плотности в геометрически сложных областях. Приведены полезные для пользователей модуля методики по конструированию вероятностных плотностей, допускающих эффективную численную реализацию выборочных значений. Рассмотрены численные схемы, связанные с применением полиномиальных и кусочно-полиномиальных приближений вероятностных плотностей (сопряженные с использованием метода дискретной суперпозиции при реализации выборочных значений). В качестве примера применения предлагаемых технологий рассмотрен итерационный дискретно-стохастический алгоритм построения адаптивных сеток.

Ключевые слова: численное моделирование случайных величин и векторов, технологии конструирования моделируемых плотностей, моделируемые приближения плотностей, итерационный дискретно-стохастический алгоритм построения адаптивных сеток.

Введение

В настоящее время широкое применение находят алгоритмы и пакеты программ, в которых реализуются множества точек, распределенных в сложных областях согласно заданной плотности распределения. К таким задачам относятся визуализация объектов на ЭВМ, построение адаптивных сеток и др. В данной работе предложен программный модуль *AITricks GeomRandom* (см. [1] и раздел 9), в котором использован ряд принципиальных положений по оптимизации соответствующих алгоритмов численного моделирования. В частности, существенным является то обстоятельство, что при применении кусочно-полиномиальных (чаще всего кусочно-постоянных) аппроксимаций функции плотности возможна реализация эффективных модификаций соответствующего метода суперпозиции (квантильного метода, метода Уолкера и др. — см., например, [2], а также раздел 6 настоящей работы).

Во многих ситуациях для более “быстрого” получения выборочных значений случайно распределенных точек вместо приближения плотности целесообразно выбирать *моделируемые вероятностные распределения*, допускающие построение эффективных

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 10-01-00040 и 09-01-00035).

алгоритмов численного моделирования (эта возможность также предусмотрена в программном модуле *AITricks GeomRandom*). В разделах 1–4 работы представлены соответствующие технологии “искусственного” конструирования вероятностных распределений, допускающих эффективное моделирование методами: обратной функции распределения, моделирования двумерного случайного вектора с зависимыми компонентами, интегральной и дискретной суперпозиции, исключения (соответствующие алгоритмы описаны, например, в [2]). Это является основой создания “банка” моделируемых вероятностных распределений с целью использования его при построении эффективных алгоритмов численного статистического моделирования.

Далее (в разделах 5–7) сделан обзор подходов, реализованных, в том числе, в программном модуле *AITricks GeomRandom* и связанных с приближением (как правило, полиномиальным или кусочно-полиномиальным) вероятностных плотностей, сопряженных с применением соответствующего метода дискретной суперпозиции при реализации выборочных значений. Подробно рассмотрены практически важные случаи кусочно-постоянного приближения плотности и моделирования равномерного распределения в сложных областях и на сложных поверхностях.

В качестве примера применения представленных технологий в разделе 8 рассмотрен итерационный дискретно-стохастический алгоритм построения адаптивных сеток [3]. Наконец, в заключение сформулированы основные результаты работы.

1. Технология вложенных замен

Стандартный алгоритм численной реализации выборочного значения ξ_0 непрерывной случайной величины ξ , распределенной на интервале (a, b) согласно непрерывной, монотонно возрастающей на (a, b) функции распределения $F(x)$ (*метод обратной функции распределения* — см., например, [2]), основан на соотношении

$$\xi_0 = F^{-1}(\alpha_0), \quad (1)$$

где α_0 — “стандартное случайное число” (т. е. выборочное значение случайной величины α , равномерно распределенной на интервале $(0, 1)$). На ЭВМ выборочные значения α_i случайной величины α реализуются с помощью соответствующих генераторов (подпрограмм) типа *RAND* или *RANDOM*.

При использовании алгоритма (1) возникает “программистская” проблема выражения обратной функции $F^{-1}(x)$ в элементарных функциях. С учетом того что эта проблема рассматривается для практически важных случаев абсолютно непрерывных распределений, описываемых кусочно-непрерывными плотностями распределения $f(u)$ случайных величин ξ (см., например, [2]), встает вопрос о разрешимости уравнения

$$\int_a^{\xi_0} f(u) du = \alpha_0 \quad (2)$$

относительно верхнего предела интеграла в элементарных функциях. Здесь могут возникнуть трудности, связанные со взятием интеграла в левой части, а также с аналитическим разрешением уравнения (2) (когда первообразная интеграла из левой части (2) выражается в виде композиции элементарных функций). В случае существования

относительно простого для программирования выражения для решения уравнения (2) вида (1)

$$\xi_0 = \psi(\alpha_0) \tag{3}$$

плотность $f(u)$ и сама формула (3) называются *элементарными* [2]. В связи с тем, что элементарные плотности нужны как в других общих алгоритмах численной реализации случайных величин и векторов (имеются в виду методы суперпозиции, исключения и специальные методы), так и в многочисленных приложениях метода Монте-Карло (см., например, [2], а также разделы 2–4), возникает проблема расширения спектра таких плотностей. Практически неограниченные возможности конструирования элементарных плотностей дает следующая *технология “вложенных замен”*.

Технология 1 [2]. Пусть $f_\eta(v)$ — плотность случайной величины η , имеющей элементарное распределение в интервале (c, d) , т. е. из соотношения типа (2)

$$\int_c^{\eta_0} f_\eta(v) dv = \alpha_0$$

для соответствующего выборочного значения η_0 случайной величины η можно получить формулу типа (3): $\eta_0 = \psi_\eta(\alpha_0)$, где $\psi_\eta(w)$ — простая композиция элементарных функций. Рассмотрим взаимно-однозначное преобразование, задаваемое монотонно возрастающей дифференцируемой функцией $\varphi(x)$, переводящей интервал (a, b) в интервал (c, d) ; в частности $\varphi(a) = c$, $\varphi(b) = d$. Полагаем также, что функцию $\varphi(x)$ и обратную к ней функцию $\varphi^{-1}(y)$ можно представить в виде простой композиции элементарных функций. Пусть случайная величина ξ имеет плотность распределения

$$f(u) = f_\eta(\varphi(u)) \varphi'(u), \quad u \in (a, b). \tag{4}$$

При сделанных предположениях можно утверждать, что $f(u)$ является плотностью элементарного распределения, т. е. уравнение (2) разрешимо относительно ξ_0 в элементарных функциях и справедлива формула $\xi_0 = \varphi^{-1}(\psi_\eta(\alpha_0))$.

Действительно, записывая уравнение (2) для плотности (4), имеем

$$\int_a^{\xi_0} f_\eta(\varphi(u)) \varphi'(u) du = \alpha_0, \quad \text{или} \quad \int_{\varphi(a)}^{\varphi(\xi_0)} f_\eta(v) dv = \alpha_0,$$

$$\text{или} \quad \varphi(\xi_0) = \psi_\eta(\alpha_0), \quad \text{или} \quad \xi_0 = \varphi^{-1}(\psi_\eta(\alpha_0)). \tag{5}$$

Название *технология вложенных замен* для технологии 1 связано с тем, что полученную плотность (4) можно взять в качестве исходной плотности $f_\eta(v)$ и осуществить еще одно взаимно-однозначное преобразование типа $\varphi(u)$. С помощью таких вложенных замен можно получать неограниченное количество новых плотностей элементарных распределений.

Пример 1. В методах численного статистического моделирования широкое применение находит формула

$$\eta_0 = -\frac{\ln \alpha_0}{\lambda}, \tag{6}$$

соответствующая экспоненциальному распределению с плотностью

$$f_\eta(v) = \lambda e^{-\lambda v}, \quad v > 0, \quad \lambda > 0. \tag{7}$$

На основе формулы (6) формируются и реализуются пуассоновские потоки, используемые в теории массового обслуживания, в простейших моделях теории переноса излучения, при моделировании случайных полей и т. д. (см., например, [2]).

Рассмотрим также случайную величину ξ , имеющую плотность распределения

$$f(u) = \exp u \times \exp(-\exp u), \quad -\infty < u < +\infty. \quad (8)$$

Это плотность *экстремального (точнее, минимального) распределения* (см., например, [4]), описывающая одно из трех возможных асимптотических распределений линейных комбинаций вида $a_n \min\{\eta^{(1)}, \dots, \eta^{(n)}\} + b_n$ при $a_n \neq 0$, $n \rightarrow \infty$; здесь a_n, b_n — числовые последовательности, а $\{\eta^{(i)}\}$ — независимые одинаково распределенные случайные величины. Применение распределения (8) связано с множественными сравнениями в сложных процедурах принятия решений (таких, в частности, как ранжирование средних).

Функция (8) может быть получена из плотности (7) согласно технологии 1 с преобразованием $\varphi(x) = \exp x$, переводящим интервал $(a, b) = (-\infty, +\infty)$ в интервал $(c, d) = (0, +\infty)$. Согласно соотношению (5) моделирующая формула для распределения (8) имеет вид $\xi_0 = \ln(-\ln \alpha_0)$.

Приведенный пример показывает, что применение технологии 1 позволяет получать плотности распределения и соответствующие моделирующие формулы для различных разделов теории вероятностей и связанных с ними приложений.

2. Технология взвешенного параметра

Во многих приложениях численного статистического моделирования (чаще всего при реализации траекторий цепи Маркова, а также при использовании метода двойной рандомизации, см., например, [2]) требуется конструировать “моделируемые” плотности распределения $f(u, v)$ двумерных случайных векторов (ξ, η) с зависимыми компонентами. Справедливы два представления (см., например, [2])

$$f(u, v) = f_\xi(u)f_\eta(v|u), \quad f_\xi(u) = \int f(u, v) dv, \quad f_\eta(v|u) = \frac{f(u, v)}{f_\xi(u)}, \quad (9)$$

$$f(u, v) = f_\eta(v)f_\xi(u|v), \quad f_\eta(v) = \int f(u, v) du, \quad f_\xi(u|v) = \frac{f(u, v)}{f_\eta(v)}. \quad (10)$$

Представлению (9) соответствует следующий алгоритм численного моделирования вектора (ξ, η) : сначала реализуется выборочное значение ξ_0 согласно плотности $f_\xi(u)$, затем моделируется выборочное значение η_0 согласно плотности $f(\xi_0, v)/f_\xi(\xi_0)$. Аналогично для представления (10) — сначала реализуется выборочное значение η_0 согласно плотности $f_\eta(v)$, далее моделируется выборочное значение ξ_0 согласно плотности $f(u, \eta_0)/f_\eta(\eta_0)$. Сформулированные алгоритмы могут быть далеко не равнозначными с точки зрения их эффективной реализации на ЭВМ.

Пример 2. Пусть требуется построить эффективный алгоритм моделирования двумерного случайного вектора (ξ, η) с плотностью распределения

$$f(u, v) = \frac{1}{2} v e^{-uv}, \quad u > 0, \quad 0 < v < 2.$$

Рассмотрим представление (10)

$$f_{\eta}(v) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} v e^{-uv} du = \frac{1}{2}, \quad 0 < v < 2; \quad f_{\xi}(u|v) = \frac{f(u, v)}{f_{\eta}(v)} = v e^{-vu}, \quad u > 0.$$

Плотность $f_{\eta}(v)$ является плотностью равномерного распределения на интервале $(0, 2)$; соответствующая моделирующая формула $\eta_0 = 2\alpha_1$. Функция $f_{\xi}(u|\eta_0)$ является плотностью экспоненциального распределения с параметром $\lambda = \eta_0$ (см. соотношение (7)), и, следовательно, $\xi = -(\ln \alpha_2)/\eta_0$ (см. формулу (6)). Теперь рассмотрим представление (9). Интегрируя по частям, имеем

$$f_{\xi}(u) = \int_0^2 \frac{1}{2} v e^{-uv} dv = \frac{1 - (2u + 1)e^{-2u}}{2u^2}, \quad u > 0.$$

Полученная функция, очевидно, не является элементарной плотностью распределения, и поэтому для этого примера представление (9) является заведомо худшим (с точки зрения реализации на ЭВМ) по сравнению с представлением (10).

Примеры плотностей, для которых по крайней мере одно из разложений (9) или (10) соответствует эффективному алгоритму численной реализации выборочных значений (ξ_0, η_0) , дает следующая технология “взвешенного параметра”.

Технология 2. Рассмотрим элементарную плотность распределения $f_{\xi}(u; \lambda)$, $u \in (a, b)$, зависящую от параметра λ , допустимые значения которого принадлежат интервалу (C, D) . Элементарность распределения означает существование простой (элементарной) формулы $\xi_0 = \psi_{\xi}(\alpha_1; \lambda)$ для получения выборочного значения случайной величины ξ . Рассмотрим также еще одну элементарную плотность $f_{\eta}(v)$ случайной величины η , принимающей значения в интервале $(c, d) \subseteq (C, D)$; при этом имеется соответствующая элементарная моделирующая формула $\eta_0 = \psi_{\eta}(\alpha_2)$. Теперь поставим задачу построения эффективного алгоритма реализации выборочных значений (ξ_0, η_0) двумерного случайного вектора (ξ, η) , принимающего значения в прямоугольнике $G = \{(u, v) : a < u < b; c < v < d\}$ и имеющего плотность распределения

$$f(u, v) = f_{\eta}(v) \times f_{\xi}(u; v), \quad (u, v) \in G. \quad (11)$$

Это результат формального умножения плотностей $f_{\eta}(v)$ и $f_{\xi}(u; v)$ (здесь происходит подстановка переменной v вместо параметра λ). В представлении (10) для плотности (11) имеем $f_{\xi}(u|v) = f_{\xi}(u; v)$. Для этого представления получаем эффективный алгоритм

$$\eta_0 = \psi_{\eta}(\alpha_1), \quad \xi_0 = \psi_{\xi}(\alpha_2; \eta_0). \quad (12)$$

Для представления (9) плотности (11) эффективных формул типа (12) построить, как правило, не удается.

В частности, пример 2 описывает ситуацию, в которой применена технология 2. В качестве исходной плотности с параметром использована функция (7) (здесь $(C, D) = (0, +\infty)$) и на подмножестве $(c, d) = (0, 2) \subset (C, D)$ выбрана плотность равномерного распределения.

3. Технология формирования смеси

Частным случаем применения метода двойной рандомизации (или метода интегральной суперпозиции), в котором при моделировании случайной величины ξ вводятся вспомогательная случайная величина η и плотность

$$f(u) = \int f_{\eta}(v) f_{\xi}(u|v) dv, \quad (13)$$

причем соответствующее разложение (10) дает эффективный алгоритм реализации пары (ξ_0, η_0) (см., например, [2]), является случай, когда вспомогательная величина η берется дискретной и целочисленной с распределением $\mathbf{P}(\eta = i) = p_i$, $i = 1, 2, \dots$. Здесь плотность (13) имеет вид

$$f(u) = \sum_i p_i f_i(u), \quad \text{где } f_i(u) = f_{\xi}(u|\eta = i), \quad (14)$$

а моделирующий алгоритм (*метод дискретной суперпозиции* — см., например, [2]) состоит в выборе номера $\eta_0 = t$ согласно стандартному методу реализации дискретной случайной величины или какой-либо его модификации (см. [2] и раздел 6 данной статьи) с последующим моделированием значения ξ_0 согласно плотности $f_m(u)$. Достаточно большой спектр примеров эффективного применения метода дискретной суперпозиции можно получить для небольшого количества M номеров i , $i = 1, \dots, M$ (в частности, для $M = 2$). Сформулируем соответствующую *технология “формирования смеси”*.

Технология 3. Возьмем две плотности элементарных распределений $f_1(u)$ и $f_2(u)$, определенные на интервале (a, b) и такие, что линейная комбинация с положительными коэффициентами

$$f(u) = p_1 f_1(u) + p_2 f_2(u), \quad u \in (a, b), \quad p_1 > 0, \quad p_2 > 0, \quad p_1 + p_2 = 1 \quad (15)$$

не является плотностью элементарного распределения. Такие плотности $f_1(u)$ и $f_2(u)$ можно получить, в частности, с помощью разнородных замен в технологии 1. Для выборочных значений $\xi_0^{(i)}$, реализуемых согласно плотностям $f_i(u)$, выписываются моделирующие формулы $\xi_0^{(i)} = \psi_i(\alpha_0)$, $i = 1, 2$. Для плотности (15) можно построить экономичный алгоритм дискретной суперпозиции: если $\alpha_1 < p_1$, то значение η_0 вспомогательной целочисленной случайной величины η равно единице и выборочное значение ξ_0 случайной величины ξ реализуется по формуле $\xi_0 = \psi_1(\alpha_2)$, иначе $\xi_0 = \psi_2(\alpha_2)$.

Пример 3 [2]. Пусть требуется построить алгоритм моделирования случайной величины ξ , имеющей плотность распределения

$$f(u) = \frac{3}{8}(1 + u^2), \quad -1 < u < 1. \quad (16)$$

Соотношение (16) представляет так называемый *закон Релея молекулярного рассеяния фотонов в атмосфере*, используемый в теории переноса излучения. Функция (16) не

является плотностью элементарного распределения, так как уравнение $\int_{-1}^{\xi_0} f(u) du = \alpha_0$

сводится к соотношению $\xi_0^3 + 3\xi_0 - 8\alpha_0 - 4 = 0$, не позволяющему получить элементарную формулу моделирования случайной величины ξ . Плотность (16) представима в виде смеси (15):

$$f(u) = \frac{3}{4} \times \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \times \frac{3}{2} u^2, \quad -1 < u < 1,$$

т. е. $p_1 = 3/4$, $f_1(u) = 1/2$, $p_2 = 1/4$; $f_2(u) = 3u^2/2$. Функция $f_1(u)$ является плотностью равномерного распределения на интервале $(-1, 1)$, а функция $f_2(u)$ — элементарной (степенной). Алгоритм дискретной суперпозиции здесь выглядит следующим образом: если $\alpha_1 < 3/4$, то $\xi_0 = 2\alpha_2 - 1$, иначе $\xi_0 = \sqrt[3]{2\alpha_2 - 1}$.

Обобщение технологии 3 может быть связано с увеличением числа слагаемых M в сумме (15) (вплоть до рассмотрения функциональных рядов), а также с переходом к моделированию многомерных случайных величин (случайных векторов) ξ .

4. Технология “порчи” моделируемой плотности

К дальнейшему расширению спектра вероятностных распределений, допускающих эффективное численное моделирование выборочных значений, ведет применение специальных вариантов мажорантного метода исключения, суть которого состоит в следующем [2]. Пусть требуется численно получать выборочные значения ξ_j случайного вектора (случайной величины) ξ , распределенного в области $U \in R^d$ согласно плотности $f(\mathbf{u})$, которая пропорциональна заданной неотрицательной функции $g(\mathbf{u})$, т. е.

$$f(\mathbf{u}) = \frac{g(\mathbf{u})}{G}, \quad G = \int_U g(\mathbf{u}) d\mathbf{u}. \quad (17)$$

Предполагается, что ни один из известных стандартных и специальных методов не дает эффективного алгоритма реализации значений ξ_j . Рассматривается мажоранта $g^{(1)}(\mathbf{u})$ функции $g(\mathbf{u})$ такая, что $g(\mathbf{u}) \leq g^{(1)}(\mathbf{u})$ при $\mathbf{u} \in U$. Первое требование к мажоранте $g^{(1)}(\mathbf{u})$ таково, что для плотности

$$f^{(1)}(\mathbf{u}) = \frac{g^{(1)}(\mathbf{u})}{G^{(1)}}, \quad G^{(1)} = \int_U g^{(1)}(\mathbf{u}) d\mathbf{u}, \quad (18)$$

имеется эффективный алгоритм (формула) вида $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$ для реализации выборочного значения $\xi_0^{(1)}$ случайного вектора $\xi^{(1)}$ (здесь $\bar{\alpha}_1$ — соответствующий набор стандартных случайных чисел).

Алгоритм мажорантного метода исключения состоит в том, что реализуется выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ согласно плотности (18), а также значение $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)})$. Несложно показать (см., например, [2]), что пара $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в “подграфике” $G^{(1)} = \{\mathbf{u} \in U, 0 < v < g^{(1)}(\mathbf{u})\}$ функции $g^{(1)}(\mathbf{u})$. Если

$$\eta_0 < g(\xi_0^{(1)}), \quad (19)$$

то реализованная точка попадает в “подграфик” $G = \{\mathbf{u} \in U, 0 < v < g(\mathbf{u})\}$ функции $g(\mathbf{u})$. Так как в этом случае пара $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в области G ,

то в качестве искомого выборочного значения ξ_0 вектора ξ принимаем $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$. Если неравенство (19) не выполнено, снова разыгрываем пару $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$, проверяем неравенство (19) и т. д. Несложно показать (см., например, [2]), что реализованная таким образом точка ξ_0 распределена согласно плотности (17).

Среднее время реализации выборочного значения ξ_0 пропорционально математическому ожиданию количества реализуемых пар $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$, которое равно $s = \bar{G}_1/\bar{G}$ (см., например, [2]). Близость величины s к единице характеризует эффективность метода исключения.

Примеры эффективного применения метода исключения можно построить с помощью следующей технологии “порчи” моделируемой плотности.

Технология 4. Конструируем сначала плотность $f^{(1)}(\mathbf{u})$ ($\mathbf{u} \in U \subseteq R^d$) вектора $\xi^{(1)}$, для которого существует эффективный алгоритм (формула) численной реализации $\xi_0^{(1)} = \psi^{(1)}(\bar{\alpha}_1)$ (этот алгоритм используется затем в первом пункте алгоритма метода исключения). Для построения функции $f^{(1)}(\mathbf{u})$ можно использовать весь арсенал конструирования моделируемых плотностей (в частности, технологии 1–3). Далее преобразуем плотность $f^{(1)}(\mathbf{u})$ таким образом, чтобы она трансформировалась в функцию $g(\mathbf{u})$, пропорциональную “немоделируемой” плотности $f(\mathbf{u})$ (по сути мы “портим” моделируемую плотность $f^{(1)}(\mathbf{u})$). Одним из простейших преобразований является умножение плотности $f^{(1)}(\mathbf{u})$ на мало меняющуюся функцию $Y(\mathbf{u})$:

$$g(\mathbf{u}) = f^{(1)}(\mathbf{u})Y(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u} \in U; \quad \text{где } 0 < A \leq Y(\mathbf{u}) \leq B \quad (20)$$

и $(B - A)$ — близкая к нулю положительная величина. В качестве мажоранты тогда можно взять $g^{(1)}(\mathbf{u}) = B f^{(1)}(\mathbf{u})$. Плотность, пропорциональная этой функции, очевидно, равна $f^{(1)}(\mathbf{u})$. Интегрируя неотрицательные функции $g^{(1)}(\mathbf{u})$ и $g(\mathbf{u})$ по области U с учетом соотношения $A f^{(1)}(\mathbf{u}) = A g^{(1)}(\mathbf{u})/B \leq g(\mathbf{u})$, получаем $A \bar{G}^{(1)}/B \leq \bar{G}$, и тогда $s \leq B/A$, т. е. при $A \approx B$ величина s невелика (близка к единице) и соответствующий алгоритм метода исключения может считаться эффективным (экономичным).

Для удобства выкладок в равенстве (20) вместо плотности $f^{(1)}(\mathbf{u})$ можно рассматривать пропорциональную ей функцию $\tilde{g}^{(1)}(\mathbf{u})$ (опуская, к примеру, нормирующую константу).

Пример 4. Пусть требуется построить алгоритм моделирования случайной величины ξ , имеющей плотность распределения $f(u)$, пропорциональную функции

$$g(u) = \left(2 + \frac{\arcsin u}{5\pi}\right) u^3, \quad 0 < u < 1.$$

Несложно убедиться в том, что плотность $f(u)$ не является элементарной. Заметим, что $g(u) = Y(u) \times \tilde{g}^{(1)}(u)$, где $\tilde{g}^{(1)}(u) = u^3$ и $Y(u) = 2 + (\arcsin u)/(5\pi)$, причем в силу монотонности функции $\arcsin u$ на интервале $(0, 1)$ выполнено неравенство $2 < Y(u) < 2.1$. Тогда $g(u) < g^{(1)}(u) = 2.1 u^3$. Плотность, пропорциональная мажоранте $g^{(1)}(u)$, равна $f^{(1)}(u) = 4u^3$, $0 < u < 1$; соответствующая моделирующая формула $\xi_0^{(1)} = \sqrt[4]{\alpha_0}$ [2]. Алгоритм метода исключения содержит следующие пункты.

1. Реализуются выборочное значение $\xi_0^{(1)}$ по формуле $\xi_0^{(1)} = \sqrt[4]{\alpha_1}$, а также величина $\eta_0 = \alpha_2 g^{(1)}(\xi_0^{(1)}) = 2.1 \alpha_2 (\xi_0^{(1)})^3$. Точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ равномерно распределена в “подграфике” мажоранты $g^{(1)}(u)$.

2. Проверяется неравенство $\eta_0 < g(\xi_0^{(1)})$ или

$$10.5 \pi \alpha_2 < 10\pi + \arcsin \sqrt[4]{\alpha_1}. \quad (21)$$

Если это неравенство выполнено, то точка $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ принадлежит “подграфику” функции $g(u)$ и является равномерно распределенной в данном множестве. Тогда в качестве выборочного значения ξ_0 случайной величины ξ берется $\xi_0 = \xi_0^{(1)}$. Если же неравенство (21) не выполнено, то повторяется п. 1, и т. д.

Трудоемкость s (среднее число попыток розыгрыша пар $(\xi_0^{(1)}, \eta_0)$ до выполнения неравенства (21)) оценивается сверху величиной $s < 2.1/2 = 1.05$.

5. Использование приближения плотности и метода суперпозиции

Описанные в предыдущих разделах технологии связаны с применением “теоретически точных” численных методов моделирования выборочных значений случайных величин и векторов. Практическая реализация этих методов на ЭВМ может быть сопряжена с погрешностями (как правило, незначительными), связанными с применением датчиков псевдослучайных чисел и с машинными ошибками [2].

Как указывалось выше, в прикладных задачах часто приходится иметь дело с ситуацией, когда моделируемое распределение случайного вектора ξ в области $G \subset R^d$ задается “извне” (здесь прежде всего следует упомянуть различные вариации метода выборки по важности — см., например, [2]). При этом можно, в том числе, выбрать распределение, близкое к требуемому, из “банка” плотностей, созданного согласно технологиям 1–4.

Однако в ряде приложений (в том числе в представленном в разделе 8 дискретно-стохастическом алгоритме построения адаптивных сеток) более универсальным видится следующий подход. Вместо вектора ξ будем моделировать вектор $\tilde{\xi}$, плотность распределения которого $\tilde{f}(\mathbf{x})$ пропорциональна некоторому (как правило, полиномиальному или кусочно-полиномиальному) приближению функции $f(\mathbf{x})$ вида

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = C L_M f(\mathbf{x}) = C \sum_{i=1}^M w_i(\mathbf{f}) \chi_i(\mathbf{x}), \quad C = 1/c, \quad c = \int_G L_M f(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (22)$$

Аппроксимация $L_M f(\mathbf{x})$ из формулы (22) строится на сетке $X^{(M)} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$. Базисные полиномиальные функции $\Xi^{(M)} = \{\chi_1(\mathbf{x}), \dots, \chi_M(\mathbf{x})\}$ и коэффициенты $W^{(M)} = \{w_1(\mathbf{f}), \dots, w_M(\mathbf{f})\}$ определенным образом связаны с узлами сетки $X^{(M)}$. В частности, коэффициенты $W^{(M)}$ являются, как правило, комбинациями значений $\mathbf{f} = (f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_M))$; чаще всего

$$w_i(\mathbf{f}) = f(\mathbf{x}_i), \quad i = 1, \dots, M. \quad (23)$$

С позиций теории приближения функций (см., например, [5]) функция $L_M f(\mathbf{x})$ должна обладать хорошими *аппроксимационными свойствами*, т. е. величина $\rho_B(f, L_M f)$ должна быть мала; здесь $\rho_B(g_1, g_2) = \|g_1 - g_2\|_B$ — расстояние в соответствующем нормированном функциональном пространстве $B(G)$. Достаточно хорошо развита L_1 -теория приближения плотностей [6], в которой рассматриваются также вопросы приближения

вида (\tilde{f}, h) линейных функционалов $(f, h) = \int_G f(\mathbf{x})h(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{E}h(\boldsymbol{\xi})$. Однако в целом

ряде приложений численного статистического моделирования требуется рассматривать более сильные (по сравнению с ρ_{L_1}) метрики пространств $C^p(G)$ и $W_2^p(G)$ (см., например, [2, 7]).

В нашем случае приближение $L_M f(\mathbf{x})$ должно обладать свойством *моделируемости* [2, 7], что означает наличие эффективного алгоритма численного моделирования вектора $\boldsymbol{\xi}$ согласно плотности (22). Поскольку функция $\tilde{f}(\mathbf{x})$ представляет собой линейную комбинацию заданных базисных функций, то это наводит на мысль о применении метода дискретной суперпозиции (см., например, [2], а также раздел 3). Перепишем плотность (22) в виде

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M P_i f_i(\mathbf{x}); \quad f_i(\mathbf{x}) = \frac{\chi_i(\mathbf{x})}{Y_i}, \quad Y_i = \int \chi_i(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad P_i = C w_i(\mathbf{f}) Y_i. \quad (24)$$

Выберем функциональный базис $\Xi^{(M)}$ таким образом, чтобы неотрицательные коэффициенты $W^{(M)}$ обеспечивали малость величины $\rho_B(f, L_M f)$ и для случайных векторов $\boldsymbol{\xi}^{(i)}$, распределенных согласно плотностям $f_i(\mathbf{x})$ из (24), имелись эффективные алгоритмы численного статистического моделирования. В частности, должны быть выполнены соотношения

$$\chi_i(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \text{для } \mathbf{x} \in R^d, \quad (25)$$

$$w_i(\mathbf{f}) \geq 0, \quad i = 1, \dots, M. \quad (26)$$

Тогда по аналогии с алгоритмом из раздела 3 можно выбрать номер m согласно вероятностям $\{P_i\}$ из (24) и реализовать выборочное значение $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_0$ согласно плотности $f_m(\mathbf{x})$.

В работе [7] проведен подробный анализ известных функциональных базисов с точки зрения одновременного наличия у них свойств аппроксимации и моделируемости. Оказалось, что далеко не все “классические” аппроксимационные базисы являются моделируемыми. Так, функции базиса Лагранжа (см., например, [5])

$$\chi_i(x) = \prod_{j=1, j \neq i}^M (x - x_j)/(x_i - x_j), \quad x \in R,$$

являются знакопеременными (т. е. требование (25) не выполнено). Аналогичные недостатки имеют *тригонометрические базисы* [8]. Отметим также, что в ряде прикладных задач кроме аппроксимационных свойств и свойств моделируемости требуется свойство *устойчивости* приближения (22) (см., например, [2, 5]).

В работе [7] показано, что наилучшими (с точки зрения сочетания свойств аппроксимации, моделируемости и устойчивости) являются простейшие конечно-элементные приближения Стренга — Фикса [9, 10]: кусочно-постоянная и мультилинейная аппроксимации. Здесь порядок аппроксимации по шагу h сетки $X^{(M)}$ относительно невелик (для функций из $C^2(G)$ он второй), однако он обеспечивает коэффициенты вида (4), для которых условие (6) заведомо выполнено. Попытка увеличить порядок аппроксимации до четвертого предпринята в работе [11], в которой в качестве базисных функций из $\Xi^{(M)}$ рассмотрены кубические сплайны. Здесь обнаружили существенные трудности при нахождении коэффициентов $W^{(M)}$, обеспечивающих оптимальный порядок аппроксимации и выполнение условия (26).

Так же, как в работе [7], можно отметить, что простейший вариант аппроксимации Стренга — Фикса — кусочно-постоянная аппроксимация — дает наиболее универсальный и относительно просто реализуемый вариант описанного выше алгоритма метода дискретной суперпозиции.

При реализации предлагаемой методологии приближение области G происходит следующим образом. В пространстве R^d рассматривается прямоугольная система координат и в ней — равномерная сетка Z с шагом h , состоящая из узлов $\mathbf{z}_k = (j_k^{(1)}h, \dots, j_k^{(d)}h)$; здесь $j_k^{(d)}$ — целые числа. Выбираются элементарные кубы (“воксели” [3])

$$Q_i = \left(j_i^{(1)}h, (j_i^{(1)} + 1)h \right) \times \dots \times \left(j_i^{(d)}h, (j_i^{(d)} + 1)h \right), \quad i = 1, \dots, M, \quad (27)$$

имеющие непустое пересечение с областью G . В каждом кубе (27) выбирается узел \mathbf{x}_i сетки $X^{(M)}$. Если куб Q_i полностью принадлежит области G , то \mathbf{x}_i — центр этого куба:

$$\mathbf{x}_i = \left((j_i^{(1)} + 1/2)h, \dots, (j_i^{(d)} + 1/2)h \right). \quad (28)$$

Сложнее ситуация при неполной принадлежности множества Q_i области G . Здесь возможны варианты. Если шаг h сетки Z мал, то можно либо продолжить каким-либо образом функцию $f(\mathbf{x})$ на все множество Q_i , либо, наоборот, исключить соответствующий куб из множества (27); в обоих случаях область G заменяется на приближение $\tilde{G} = \cup_{i=1}^M Q_i$, а сетка $X^{(M)}$ формируется из узлов вида (28). Для таких подходов происходит некоторая деформация границы области G (в частности, может нарушиться свойство гладкости этой границы). Если подобное нарушение недопустимо, то следует определить способ выбора узла \mathbf{x}_i внутри куба Q_i .

Далее полагаем

$$L_M f(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x}_i) \quad \text{при } \mathbf{x} \in Q_i, \quad (29)$$

что определяет кусочно-постоянную аппроксимацию (интерполяцию) функции $f(\mathbf{x})$. При этом функции $\chi_i(\mathbf{x})$ из представления (22) тождественно равны единице при $\mathbf{x} \in Q_i$ и нулю иначе. В свою очередь, все плотности $f_i(\mathbf{x})$ из формулы (24) тождественно равны $1/h^d$ при $\mathbf{x} \in Q_i$ и нулю иначе. Это означает, что на втором шаге метода дискретной суперпозиции выборочное значение $\tilde{\xi}_0$ вектора $\tilde{\xi}$ реализуется в соответствующем кубе Q_m согласно равномерной плотности распределения

$$\tilde{\xi}_0 = (j_m^{(1)}h + \alpha_1 h, \dots, j_m^{(d)}h + \alpha_d h). \quad (30)$$

Если выбранный на первом шаге метода суперпозиции куб Q_m является граничным, то при моделировании вектора $\tilde{\xi}$ можно использовать следующий простой факт (см., например, [2]).

Утверждение 1. *Если d -мерная точка α равномерно распределена в области $A_1 \subset R^d$ конечного объема $\bar{A}_1 = \int_{G_1} d\mathbf{x}$, то она также равномерно распределена в произвольной подобласти $A \subseteq A_1$ объема \bar{A} при условии попадания в эту подобласть; при этом $\mathbf{P}(\alpha \in A) = \bar{A}/\bar{A}_1$.*

Для граничного Q_m реализуется выборочное значение вектора $\tilde{\xi}_0$ по формуле (30), и в случае выполнения условия $\tilde{\xi}_0 \in G$ оно принимается, иначе алгоритм метода суперпозиции реализуется заново. При программной реализации алгоритма метода суперпозиции можно не различать граничные и “внутренние” кубы Q_m , а проводить проверку условия $\tilde{\xi}_0 \in G$ для каждого выборочного значения, реализованного по формуле (30) на втором шаге алгоритма.

6. Применение квантильного метода

Для того чтобы приближение (22), (29) обладало хорошими аппроксимационными свойствами, следует выбирать h достаточно малым. При этом параметр M может быть весьма большим. Это ведет к определенным проблемам, связанным с хранением значений (29) в оперативной памяти ЭВМ. Кроме того, возникают трудности реализации номера t в алгоритме метода суперпозиции.

Напомним (см., например, [2]), что стандартным алгоритмом численного моделирования выборочного значения t целочисленной случайной величины η с распределением $\mathbf{P}(\eta = i) = P_i$ (в нашем случае $P_i = Cf(\mathbf{x}_i)h^d$) является следующий.

Алгоритм 1. Реализуем значение $B := \alpha_0$ и полагаем $i := 1$. Производим переприсваивание

$$B := B - P_i. \quad (31)$$

Если новое значение B не положительно, то полагаем $t = i$, в противном случае производим переприсваивания $i := i + 1$ и (31) и вновь производим проверку B на положительность и т. д.

Средняя трудоемкость s алгоритма 1 равна $s = a + \left(\sum_{i=1}^M iP_i\right) \times b$; здесь a — затраты на моделирование стандартного случайного числа α_0 , b — затраты на одно сравнение B с нулем. Эта величина растет с увеличением параметра M .

Трудоемкость s можно существенно уменьшить, если применить так называемый *квантильный метод* моделирования дискретных случайных величин (см., например, [2]), который состоит в следующем.

Зададим целое число K и разобьем интервал $(0, 1)$ на K равных частей $[(j-1)/K, j/K)$, $j = 1, \dots, K$. Далее построим массив целых чисел $\{X_j\}_{j=1}^K$ такой, что

$$X_j = \min\{k : R_k = P_1 + P_2 + \dots + P_k \geq (j-1)/K\},$$

называемый *массивом нижних квантилей*. Этот массив задает номер k элемента массива $\{R_i; i = 1, 2, \dots, M\}$, с которого следует начинать поиск “вверх” (т.е. как и в алгоритме 1, вычитать величины R_q , $q = k, k+1, \dots$, из α_0 с помощью переприсваивания (31) до получения первого отрицательного значения) при $(j-1)/K \leq \alpha < j/K$.

Окончательно моделирование дискретной случайной величины выглядит следующим образом.

Алгоритм 2 (квантильный метод).

1. Реализуем выборочное значение α_0 равномерно распределенной в интервале $(0, 1)$ случайной величины α .

2. Вычисляем номер n полуинтервала $[(n-1)/K, n/K)$, в который попадает α_0 , по формуле моделирования равномерного дискретного распределения (см., например, [1]):

$$n = [K\alpha_0] + 1, \quad (32)$$

здесь $[T]$ — целая часть числа T .

3. Реализуем последовательный поиск “снизу вверх” начиная с R_{X_n} .

Алгоритм 2 требует использования дополнительной (по сравнению с алгоритмом 1) оперативной памяти ЭВМ для хранения массивов номеров $\{X_j\}$ и сумм $\{R_{X_j}\}$. Тестовые вычисления показали, что следует выбирать число K квантилей $[(j-1)/K, j/K)$ так,

чтобы выполнялось соотношение $M/K \approx 2$ (при этом трудоемкость s_1 алгоритма 2 с ростом M практически не меняется).

Отметим, что можно построить эффективную реализацию алгоритма 2 и в случае, когда число M относительно мало и $D_0 > r = 1 + 1/\min_{i=1,\dots,M} P_i$ (здесь D_0 — максимально допустимый размер массива в выбранном языке программирования). Тогда можно взять число квантилей как целую часть $K = [r]$; при этом в каждом квантиле $[(j-1)/K, j/K)$ будет не более одного значения R_k и в пункте 3 алгоритма 2 потребуется не более одного вычитания.

Заметим также, что в целом ряде ситуаций целесообразно использовать вместо квантильного метода алгоритм Уолкера или даже бинарный поиск, однако алгоритм 2 является более универсальным и простым для реализации на ЭВМ [2].

7. Случай равномерного распределения

Представленные выше алгоритмы допускают эффективные модификации в случае, когда $f(\mathbf{x}) \equiv 1/\bar{G}$ при $\mathbf{x} \in G$ и $f(\mathbf{x}) \equiv 0$ при $\mathbf{x} \notin G$ (\bar{G} — объем компактной области G), т. е. случайный вектор $\boldsymbol{\xi}$ равномерно распределен в G . Здесь кусочно-постоянное приближение $L_M f(\mathbf{x})$, описанное в разделе 5, дает одинаковые вероятности $P_i = h^d/\bar{G}_1$, $i = 1, \dots, M$ (в этом случае G_1 — область G , дополненная теми частями граничных кубов Q_m , которые не входят в G). Поэтому при выборе номера m в алгоритме метода суперпозиции вместо алгоритма 1 (или его модификации — квантильного алгоритма 2) можно применить простую формулу (типа (32)) моделирования дискретного равномерного распределения (см., например, [2]): $m = [M\alpha_0] + 1$.

Как уже отмечалось, при малом шаге h вспомогательной сетки Z могут возникнуть проблемы с сохранением информации об узлах (28) и значениях (29) в оперативной памяти ЭВМ. Для равномерного распределения можно обходить эту трудность, пользуясь, в частности, тем обстоятельством, что все значения (29) одинаковы. Кроме того, можно использовать утверждение 1, например, из элементарных кубов Q_i из (27) сформировать прямоугольный параллелепипед

$$\Pi = (a^{(1)}, b^{(1)}) \times \dots \times (a^{(d)}, b^{(d)}) \quad (33)$$

максимального объема $\bar{\Pi}$, полностью принадлежащий области G (будем называть такой параллелепипед *вписанным* в область G), и с вероятностью $\bar{\Pi}/\bar{G}$ разыгрывать факт принадлежности выборочного значения $\boldsymbol{\xi}_0$ этому параллелепипеду. Если $\boldsymbol{\xi}_0 \in \Pi$, то реализация его выборочного значения происходит по формулам типа (30):

$$\boldsymbol{\xi}_0 = (a^{(1)} + (b^{(1)} - a^{(1)})\alpha_1, \dots, a^{(d)} + (b^{(d)} - a^{(d)})\alpha_d), \quad (34)$$

иначе в области $G \setminus \Pi$ применяется алгоритм метода суперпозиции.

Можно (а чаще всего нужно) строить “вложенную” процедуру вписывания параллелепипедов максимального объема, для которой очередной параллелепипед строится в множествах типа $G \setminus \Pi$. В пределе получаются конструкции, аналогичные описанным в разделе 5, с той разницей, что только подмножества вида (27) и (33) получаются разной формы и разного объема.

Заметим также, что параллелепипеды (33) малого объема можно использовать вместо кубов (27) в качестве элементов разбиения области (вокселей) с заменой формулы

(30) на соотношение (34) в соответствующем методе суперпозиции; это предусмотрено в программном модуле *AITricks GeomRandom* (см. раздел 9 и сайт [1]).

Кроме того можно пытаться вписывать в область G (и использовать в качестве вокселей) другие стандартные фигуры, для которых имеются формулы реализации равномерно распределенной точки. В частности, в случае использования триангуляции двумерной области (или поверхности) требуется применение эффективного алгоритма моделирования случайного вектора ξ (двумерного или трехмерного), равномерно распределенного в треугольнике с вершинами $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ (см., например, [12]). Имеем $\xi = \mathbf{r}_1 + (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\eta^{(1)} + (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2)\eta^{(2)}$, где вектор $(\eta^{(1)}, \eta^{(2)})$ равномерно распределен в “стандартном” треугольнике $\{(u, v) : 0 < u < 1, 0 < v < u\}$. Для реализации выборочных значений $(\eta_0^{(1)}, \eta_0^{(2)})$ наиболее эффективным является следующий алгоритм: $\eta_0^{(1)} := \alpha_1, \eta_0^{(2)} := \alpha_2$; если $\eta_0^{(1)} < \eta_0^{(2)}$, то $\eta_0^{(1)} := 1 - \eta_0^{(1)}, \eta_0^{(2)} := 1 - \eta_0^{(2)}$ (здесь “:=” — знак переприсваивания). Этот алгоритм является более экономичным, чем формулы $\eta_0^{(1)} := \sqrt{\alpha_1}, \eta_0^{(2)} := \alpha_2 \eta_0^{(1)}$, рекомендованные в [12].

Известны также алгоритмы моделирования случайных точек, равномерно распределенных в других “примитивных” фигурах (круг, сфера, усеченный конус, тор и др.). Так, формулы

$$\xi_0^{(1)} = R\sqrt{\alpha_1} \sin 2\pi\alpha_2, \quad \xi_0^{(2)} = R\sqrt{\alpha_1} \cos 2\pi\alpha_2 \quad (35)$$

дают реализацию вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$, равномерно распределенного в круге радиуса R , а формулы

$$\xi_0^{(1)} = r_\zeta \sin \theta_\zeta \cos \phi_\zeta, \quad \xi_0^{(2)} = r_\zeta \sin \theta_\zeta \sin \phi_\zeta, \quad \xi_0^{(3)} = r_\zeta \cos \theta_\zeta, \quad (36)$$

где $\cos \theta_\zeta = 1 - 2\alpha_1$, $r_\zeta = R(\alpha_2)^{1/3}$, $\phi_\zeta = 2\pi\alpha_3$, дают реализацию вектора $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, равномерно распределенного в шаре радиуса R (см., например, [2]). Следует, однако, отметить, что для фигур H , отличных от параллелепипеда (33), гораздо труднее строить приближения дополнений $G \setminus H$ и реализовывать на них алгоритм метода суперпозиции.

Отметим еще одну возможность моделирования вектора ξ , равномерно распределенного в области G , — *метод исключения* (см., например, [2], а также раздел 4). Здесь для области G строится описанный параллелепипед вида (33) (т.е. в данном случае $G \subset \Pi$) и реализуется случайная точка (34). Если

$$\xi_0 \in G, \quad (37)$$

то соответствующее выборочное значение принимается, иначе снова применяется формула (34) вплоть до того момента, когда будет выполнено соотношение (37). Согласно утверждению 1, реализованное таким образом выборочное значение соответствует равномерному распределению в области G .

Метод исключения будет тем эффективнее, чем раньше (в среднем) будет выполнено соотношение (37). Известно (см., например, [2]), что среднее число обращений к формуле (34) до выполнения (37) равно отношению объемов $\tilde{s} = \bar{\Pi}/\bar{G}$. Таким образом, нужно стараться выбирать описанный параллелепипед Π минимального объема, т.е. добиваться того, чтобы величина \tilde{s} была близка к единице:

$$\tilde{s} = \bar{\Pi}/\bar{G} \gtrsim 1. \quad (38)$$

В большом числе случаев добиться выполнения соотношения (38) не удастся, и поэтому описанные “прямые” методы, связанные с “вокселизацией” и с применением алгоритма метода суперпозиции и его модификаций, оказываются более экономичными (здесь, однако, метод исключения может пригодиться при моделировании точек вблизи границы области — см. раздел 5). Аналогичное замечание можно сделать и для методов исключения, связанных с “погружением” области G в другие стандартные области (например, в окружность или круг с применением формул (35), (36)).

8. Итерационный дискретно-стохастический метод построения адаптивных сеток

Описанные в предыдущих разделах технологии конструирования вероятностных плотностей, допускающих точную или приближенную численную реализацию выборочных значений, находят широкое применение в прикладных задачах.

В качестве примера такого применения рассмотрим проблему построения адаптивных сеток на сложных многомерных компактных областях. Использование адаптивных сеток в задачах численного моделирования позволяет повысить точность приближенного решения задачи без существенного увеличения числа узлов (см., например, [3, 13–17]). “Сгущения” узлов (т.е. их распределение согласно заданной плотности $f(\mathbf{x})$) часто требуются в подобластях, где либо само решение, либо его градиент принимают большие значения. Кроме того, важные приложения адаптивных сеток (такие, как обработка изображений, визуализация данных и т.п.) связаны с учетом сложной геометрии объемных областей и их поверхностей.

Среди всех видов методов построения сеток можно выделить важный класс, в котором адаптивные сетки получаются в результате отображения “вычислительной” области $Q \subset R_Q^k$ на “физическую” область X . Как правило, $k = d$ (для “объемных” сеток) или $k = d - 1$ (для “поверхностных” сеток). К указанному классу относятся метод эквираспределения [16], метод Томпсона [15], эллиптические методы [17] и др. Все они, а также алгебраические методы и метод конформных отображений [13, 14] требуют решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений с частными производными (при этом приходится накладывать довольно жесткие условия гладкости на граничные и начальные условия, а также на способы задания области). Еще один недостаток перечисленных методов связан с трудностями автоматизации и распараллеливания соответствующих численных схем.

Преодолеть указанные недостатки позволяет подход, предложенный в работе [3] и подразумевающий использование стохастических нейросетевых моделей самоорганизации, таких как самоорганизующиеся карты Т. Кохонена (*Self-Organizing Maps — SOM*), растущий нейронный газ (*Growing Neural Gas — GNG*), растущие клеточные структуры (*Growing Cell Structures — GCS*) [18].

Опишем соответствующую постановку задачи. В “физической” области X (или на ее поверхности G_X) требуется построить сетку $X^{(M)} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$, распределение узлов которой соответствует заданной плотности $f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in R_X^d$. Структура этой сетки (порядок и структура расположения узлов) задается “картой” $Q^{(M)} = \{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_M\}$ и системой так называемых нейронов $E^{(M)} = \{e_1, \dots, e_M\}$ (где $e_i = (\mathbf{q}_i, \mathbf{x}_i)$), определяющих соответствие между сетками $X^{(M)}$ и $Q^{(M)}$.

Приближение нейронов осуществляется с помощью процедуры *самообучения*, представляющей собой итерационный процесс, основанный на последовательном форми-

ровании обучающего множества $\Xi^{(T)} = \{\xi_0(1), \dots, \xi_0(T)\}$ в виде выборки из вероятностного распределения случайного вектора ξ , имеющего плотность $f(\mathbf{x})$; здесь T — количество итераций, $\xi_0(t) \in X$ (или $\xi_0(t) \in G_X$; $t = 1, \dots, T$). Кроме того, с помощью специальных коэффициентов обучения $\theta_{\mathbf{q}_i}(t, \mathbf{q}_i) \in [0, 1]$ на каждом шаге итерации устанавливаются латеральные связи между нейронами e_i и e_j . В результате получается последовательность сеток $X^{(M)}(t) = \{\mathbf{x}_1(t), \dots, \mathbf{x}_M(t)\}$; при этом требуется выполнение соотношения

$$X^{(M)} \approx \tilde{X}^{(M)} = \lim_{t \rightarrow \infty} X^{(M)}(t) \approx X^{(M)}(T). \quad (39)$$

Знаки приближенных равенств в (39) означают не только малость расстояний $\rho(\mathbf{x}_i(\infty), \mathbf{x}_i)$, $\rho(\mathbf{x}_i(\infty), \mathbf{x}_i(T))$ и $\rho(\mathbf{x}_i(T), \mathbf{x}_i)$, где

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{(x^{(1)} - y^{(1)})^2 + \dots + (x^{(d)} - y^{(d)})^2}, \quad \mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)}), \quad \mathbf{y} = (y^{(1)}, \dots, y^{(d)}),$$

но и воспроизведение (с хорошей точностью) требуемых свойств сетки $X^{(M)}$ (например, свойств прямоугольности, отсутствия граничного эффекта и др.) при реализации следующего итерационного процесса.

Алгоритм 3 [3, 18]. 1. Устанавливаются начальные положения узлов сетки $X^{(M)}(0) = \{\mathbf{x}_1(0), \dots, \mathbf{x}_M(0)\}$.

2. На каждой итерации с номером $t = 1, \dots, T$ выполняются следующие действия:

а) выбирается очередной элемент $\xi_0(t)$ выборки $\Xi^{(T)}$;

б) вычисляются расстояния $\rho(\xi_0(t), \mathbf{x}_i(t-1))$ от точки $\xi_0(t)$ до всех узлов $\mathbf{x}_i(t-1)$ и выбирается ближайший к $\xi_0(t)$ узел $\mathbf{x}_m(t-1)$ в соответствии с условием

$$m = \arg \min_{i=1, \dots, M} \rho(\xi_0(t), \mathbf{x}_i(t-1));$$

такой узел $\mathbf{x}_m(t-1)$ называют **победителем**;

в) проводится корректировка положений всех узлов в соответствии с формулой

$$\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{x}_i(t-1) + \theta_{\mathbf{q}_m}(t, \mathbf{q}_i) (\xi_0(t) - \mathbf{x}_i(t-1)) \quad (40)$$

для всех $i = 1, \dots, M$.

На каждой итерации алгоритма 3 узлы сетки сдвигаются к случайной точке $\xi_0(t)$. Поэтому в местах высокой концентрации элементов выборки постепенно скапливаются все больше узлов, за счет чего достигаются сгущения сетки. В работе [3] показано, что при $T \rightarrow \infty$ алгоритм 3 ведет к выполнению аналога принципа эквираспределения, т. е. к получению требуемой плотности сетки, определяемой функцией $f(\mathbf{x})$. Весьма нетривиальной (с точки зрения обоснованного применения алгоритма 3) является проблема выбора коэффициента обучения $\theta_{\mathbf{q}_m}(t, \mathbf{q}_i)$ из формулы (40).

9. Программный модуль *AITricks GeomRandom*

При реализации алгоритма 3 определенную трудность представляет собой пункт 2а, в котором требуется численно моделировать многомерную (чаще всего двумерную или трехмерную) случайную точку (случайный вектор) ξ_0 , распределенную согласно заданной плотности $f(\mathbf{x})$. Здесь наиболее перспективным видится применение технологий приближения плотностей, описанных в разделах 5–7. Соответствующие рекомендации использованы при создании программного модуля *AITricks GeomRandom* [1].

GeomRandom представляет собой кросс-платформенную библиотеку *C++*-классов и шаблонов для моделирования случайных точек внутри и на границе одно-, двух- и трехмерных фигур. Библиотека поддерживает реализацию случайных точек как на фигурах, полученных с помощью булевых операций над примитивными фигурами (куб, параллелепипед, круг, сфера, усеченный конус, тор и др.), так и на сложных объектах, заданных поверхностной триангуляцией. У пользователя имеется возможность загрузить файл с *CAD*-моделью в одном из стандартных форматов, тем самым обеспечивая совместимость с такими распространенными *CAD*-пакетами, как *Autodesk AutoCAD/Inventor* и др. Реализована экономичная версия вокселизации (разбиения области на простые подобласти) с целью применения соответствующего метода суперпозиции. В случае большого количества подобластей разбиения предусмотрено использование квантильного метода (см. раздел 6).

Особо отметим, что описанный программный модуль сначала разрабатывался для преимущественного применения при реализации алгоритма 3 и его модификаций. Следует, однако, подчеркнуть, что этот модуль может быть эффективно использован при решении других задач, связанных с моделированием случайных точек. Здесь в первую очередь следует упомянуть задачи, решаемые методами численного статистического моделирования (см., например, [2]). Полученные с помощью библиотеки *GeomRandom* точки можно либо использовать внутри соответствующей программы, либо экспортировать в один из удобных форматов, в том числе в стандартный формат *PTS*.

Заключение

В работе сформулированы технологии конструирования вероятностных плотностей распределения, допускающих эффективную численную реализацию выборочных значений: технология вложенных замен (для использования метода обратной функции распределения), технология взвешенного параметра (для метода моделирования двумерного случайного вектора с зависимыми компонентами), технология формирования смеси (для метода дискретной суперпозиции), технология “порчи” моделируемого распределения (для мажорантного метода исключения).

Показано, что в ряде практически важных случаев весьма перспективным является применение приближений (в частности, полиномиальных и кусочно-полиномиальных, а конкретнее — кусочно-постоянных) вероятностных плотностей. В качестве примера рассмотрен итерационный дискретно-стохастический метод построения адаптивных сеток. Представлен программный модуль *AITricks GeomRandom*, позволяющий получать выборочные значения случайных векторов, распределенных согласно заданной плотности в геометрически сложных областях.

Список литературы

- [1] <http://aitricks.com/products/geomrandom/>
- [2] Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Изд. центр “Академия”, 2006.
- [3] Нечаева О.И. Нейросетевые модели, алгоритмы и комплекс программ для построения адаптивных сеток. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, НГУ, 2007.
- [4] Дейвид Г. Порядковые статистики. М.: Наука, 1979.

- [5] БАХВАЛОВ Н.С. Численные методы. М.: Наука, 1975.
- [6] ДЕВРОЙ Л., ДЕРФИ Л. Непараметрическое оценивание плотности (L_1). М.: Мир, 1988.
- [7] VOYTIŠNEK A.V., KAVLUKOVA E.G. Using the approximation functional bases in Monte Carlo methods // Rus. J. of Numerical Analysis and Math. Modelling. 2003. Vol. 18, No. 6. P. 521–542.
- [8] БЕРЕЗИН И.С., ЖИДКОВ Н.П. Методы вычислений. М.: Физматгиз, 1962.
- [9] СТРЕНГ Г., ФИКС ДЖ. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1977.
- [10] МАРЧУК Г.И., АГОШКОВ В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981.
- [11] МИЛОСЕРДОВ В.В. Дискретно-стохастические численные алгоритмы со сплайн-восполнениями. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, НГУ, 2006.
- [12] МАХОТКИН О.А. Моделирование точек, равномерно распределенных в многоугольниках // Сиб. журн. вычисл. математики. 2002. Т. 5, № 4. С. 331–350.
- [13] ГОДУНОВ С.К., ПРОКОПОВ Г.П. О расчетах конформных отображений и построении разностных сеток // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 1967. Т. 7. С. 1031–1059.
- [14] GORDON W.J., THIEL L.C. Transfinite mappings and their applications to grid generations // Numerical Grid Generation. Appl. Math. and Comput. 1982. Vol. 2/3. P. 171–192.
- [15] THOMPSON J.F., WARSJI Z.U.A., MASTIN C.W. Numerical Grid Generation: Foundations and Applications. Amsterdam (Netherlands): North-Holland, 1985.
- [16] ХАКИМЗЯНОВ Г.С., ШОКИН Ю.И., БАРАХНИН В.Б., ШОКИНА Н.Ю. Численное моделирование течений жидкости с поверхностными волнами. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001.
- [17] ЛИСЕЙКИН В.Д., ЛЕБЕДЕВ А.С., КИТАЕВА И.А. Универсальный аналитический метод построения разностных сеток. Новосибирск: НГУ, 2004.
- [18] KOHONEN T. Self-Organizing Maps. Springer-Verlag, 2001.

*Поступила в редакцию 13 сентября 2010 г.,
с доработки — 20 апреля 2011 г.*