Madala hälbivusega jadad ja integraalide arvutamine

Raul Kangro
Tartu Ülikool

1. Sissejuhatus

Integraalide arvutamine on tähtsal kohal paljudes matemaatika rakendustes, kuna integraalsel kujul esituvad mitmed füüsikalised suurused, samuti ka juhuslike suuruste keskväärtused. Kuigi integraale õnnestub täpselt arvutada suhteliselt harva, on palju erinevaid meetodeid nende ligikaudseks leidmiseks. Sageli aga on praktilistes rakendustes (näiteks finantsmatemaatikas) vaja arvutada suurest arvust muutujatest sõltuvate funktsioonide integraale ning sel juhul standardsed meedodid pahatihti ei tööta või on liiga aeglased. Käesolevas artiklis tuleb juttu ühest suhteliselt uuest lähenemisest, mis võimaldab ka viimasel juhul enamasti saada mõistliku täpsusega tulemusi aktsepteeritava tööajaga.

2. Motivatsioon ja eesmärgid

Vaatleme integraalide

$$I = \int_D f(x)\,dx,$$

kus $D = [0,\,1]^d$, $d \geqslant 1$, arvutamise mõningaid meetodeid. Alustame juhust $d = 1$, s.t. integraalidest üle ühiklõigu.

1. **Ristkülikvalem.** Jaotame lõigu $[0,\,1]$ n osalõiguks, arvutame funktsiooni väärtused nende osalõikude keskpunktides, korrutame osalõigu pikkusega ja summeerime. Nii saame integraali väärtuseks
$$I \approx I_n = \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i)}{n},$$

Eesti Matemaatika Selts Aastaraamat 2006

kus $x_i = \frac{2i-1}{2n}$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Selle valemi kohta on teada, et ta on ruutkoonduvusega:

$$|I - I_n| \leq \frac{c}{n^2},$$

kus c sõltub ainult funktsioonist f; viga on võimalik arvutuste käigus hinnata Runge võttega:

$$I - I_{3n} \approx \frac{I_n - I_{3n}}{8}.$$

2. **Monte-Carlo meetod.** Kasutades teadmist, et lõigul [0, 1] ühtlase jaotusega juhusliku suuruse korral avaldub keskväärtus $\mathrm{E}[f(X)]$ vaadeldava integraaliga ning et suurte arvude seaduse kohaselt saab keskväärtust leida kui sõltumatute katsete aritmeetilise keskmise piirväärtust katsete arvu kasvades, saame vaadeldava integraali ligikaudse väärtuse leida nii, et genereerime n ühtlase jaotusega juhuslikku arvu $X_1, X_2, \ldots, X_n$ ning leiame

$$I \approx I_n = \frac{\sum_{i=1}^{n} f(X_i)}{n}.$$

Erinevalt ristkülikvalemist on suuruse I_n viga Monte-Carlo meetodi korral juhuslik; fikseeritud n korral võime arvutusi korrates saada iga kord erineva tulemuse. Seetõttu on ka veahinnang tõenäosuslik: tõenäosusega p on n katse korral tulemuse viga hinnatav järgmiselt:

$$|I - I_n| \leq \frac{\sigma}{\sqrt{n}\sqrt{1-p}},$$

kus σ on juhusliku suuruse $f(X)$ dispersioon, mida saab hinnata arvutatud funktsiooni väärtuste $f(X_i)$ abil.

Kui võrrelda neid kahte meetodit, siis ristkülikvalemi eeliseks on tema suurem koonduvuskiirus: näiteks funktsiooni $f(x) = \cos(x)$ puhul annab ristkülikvalemi kasutamine juba $n = 6$ korral (ja ka suuremate n väärtuste korral) tulemuse veaga, mis on väiksem kui $0,001$, kuid Monte-Carlo meetodi abil tuleb selleks, et saada sama täpsus keskmiselt 19 juhul 20-st kasutada rohkem kui 74000 genereerimist. Samuti võib ristkülikvalemi eeliseks lugeda veahinnangu mittejuhuslikkust. Monte-Carlo meetodi eeliseks võib aga lugeda seda, et juba leitud tulemust on lihtne täpsustada, selleks tuleb ainult juhusliku suuruse X väärtusi juurde genereerida, kusjuures arvutused võib peatada suvalisel momendil (näiteks kui enam pole aega oodata) ning kõiki arvutatud funktsiooni väärtusi saab kasutada integraali ligikaudse väärtuse leidmiseks. Ristkülikvalemi puhul on tulemuse täpsustamine nii, et varemtehtud töö raisku ei läheks, tunduvalt keerulisem, kuna selleks tuleb suurendada n väärtust kolm korda ning arvutusi ei tohi peatada enne, kui funktsiooni väärtus on kõigis lisandunud punktides välja arvutatud ja kokku summeeritud. Kokkuvõtvalt võib aga öelda, et ühemõõtmeliste integraalide korral ei suuda Monte-Carlo meetod ristkülikvalemiga konkureerida.

Integreerimispiirkonna dimensiooni d kasvades aga muutub pilt varsti teiseks. Ei ole kuigi raske veenduda, et ristkülikvalemi analoog (kus me jaotame piirkonna $n = k^d$ d-mõõtmeliseks kuubiks ja leiame keskmise funktsiooni väärtustest nende kuubikeste keskpunktides) koondub d-mõõtmelise integraali korral kiirusega $\frac{c}{n^{2/d}}$, mis juba $d = 5$ korral on aeglasem, kui Monte-Carlo meetodi koonduvuskiirus $\frac{c}{\sqrt{n}}$. Seega muutub mitmemõõtmeliste integraalide korral Monte-Carlo meetod arvestatavaks konkurendiks klassikalistele integraalide arvutamise numbrilistele meetoditele, samuti muutub suurema dimensiooni korral olulisemaks võimalus arvutusi peatada siis, kui see meile vajalikuks osutub. Samas aga jäävad probleemideks suhteliselt aeglane koonduvuskiirus ning tulemuse juhuslikkus.

Siit tekibki küsimus, et kas ei ole võimalik konstrueerida integraalide ligikaudse arvutamise meetodit, mis koonduks kiiremini kui Monte-Carlo meetod suvalise dimensiooni d korral, oleks mittejuhuslik ning võimaldaks arvutusi peatada suvalisel momendil. Osutub, et see on võimalik, kuid sellise meetodi konstrueerimisel tuleb kasutada spetsiaalselt valitud punkte x_i, kus funktsiooni väärtusi välja arvutada. Siin tulevadki mängu nn. madala hälbivusega jadad.

3. Madala hälbivusega jadad ja integraalide arvutamine

On arusaadav, et integraali heaks lähendamiseks peavad punktid, kus funktsiooni väärtused leitakse, paiknema integreerimispiirkonnas mingis mõttes ühtlaselt. Kui me tahame, et integraal oleks hästi lähendatud suvalise arvu punktide korral, peaks ühtlase paigutuse tingimus olema täidetud jada $x_1, x_2, \ldots, x_n$ jaoks iga n korral. Siin tekib aga küsimus, kuidas punktide paigutuse ühtlust mõõta. Osutub, et selleks sobib hälbivuse mõiste.

Definitsioon 1. *Olgu P mingi lõplik hulk punkte piirkonnas $[0,1]^d$ ning olgu $\mathcal{H}$ hulga $[0,1]^d$ mingi Lebesgue'i mõttes mõõtuvate alamhulkade kollektsioon. Punktihulga P hälbivuseks $\mathcal{H}$ suhtes nimetatakse suurust*

$$\sup_{H \in \mathcal{H}} \left| \frac{|H \cap P|}{|P|} - \mu(H) \right|,$$

kus $|A|$ tähistab hulga A elementide arvu ning μH on hulga H Lebesgue'i mõõt (pindala $d = 2$ korral, ruumala $d = 3$ korral jne.). Kui $\mathcal{H}$ koosneb risttahukatest kujul $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \cdots \times [a_d, b_d]$, kus $0 \leq a_i < b_i \leq 1$, siis hälbivust $\mathcal{H}$ suhtes nimetatakse lihtsalt hälbivuseks ning tähistatakse kujul $D(P)$. Kui $\mathcal{H}$ koosneb hulkadest kujul $[0, b_1] \times [0, b_2] \times \cdots \times [0, b_d]$, siis hälbivust $\mathcal{H}$ suhtes nimetatakse $*$-hälbivuseks (tärn-hälbivus) ja tähistatakse kujul $D^*(P)$.

Definitsioonist järeldub, et iga lõpliku punktihulga P korral kehtib võrratus $D^*(P) \leq D(P)$. Veidi raskem on veenduda selles, et tegelikult kehtib ka võrratus $D(P) \leq 2^d D^*(P)$, mistõttu on $*$-hälbivus ja tavaline hälbivus ekvivalentsed suurused. Lihtne on näha ka seda, et $D(P) \geqslant \frac{1}{|P|}$ (selleks piisab väikeste, ühte punkti sisaldavate ruudukeste vaatlemisest). Huvitavaks probleemiks on aga selliste punktijadade konstrueerimine, mille korral esimesest n elemendist koosnevate punktihulkade hälbivus läheks n kasvades nulli võimalikult kiiresti.

On teada mitmeid mooduseid jadade konstrueerimiseks d-mõõtmelises ühikkuubis, mille korral kehtivad võrratused

$$D(\{x_1, \dots, x_n\}) \leq \frac{c(\ln n)^{d-1}}{n}.$$

Üldtunnustatud (kuid seni tõestamata) hüpoteesiks on, et kiiremat nullikoondumist ei ole võimalik saavutada, mistõttu selliseid jadasid nimetatakse *madala hälbivusega jadadeks.*

Integraalide arvutamise seisukohalt muudab madala hälbivusega jadad väga huvipakkuvaks järgnev Koskma-Hlawka võrratuse nime all tuntav tulemus.

Teoreem 1. *Suvalise teatud tehnilisi eeldusi (lõpliku Hardy-Krause variatsiooni olemasolu) rahuldava funktsiooni f korral kehtib võrratus*

$$\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i) - \int_{[0,\,1]^d} f(u)du\right| \leq c_f D^*(\{x_1, \dots, x_n\}),$$

kus konstant c_f sõltub ainult funktsiooni f omadustest.

Siit on näha, et madala hälbivusega jada kasutamise korral võime integraali arvutada samuti nagu Monte-Carlo simulatsiooni kasutades: arvutame funktsiooni väärtused mingis arvus punktides ning integraali lähendiks on nende väärtuste keskmine, kusjuures madala hälbivusega jadade korral on koonduvuskiirus suurem (viga käitub peaaegu nagu $\frac{c}{n}$ Monte-Carlo $\frac{c}{\sqrt{n}}$ asemel). Seetõttu on madala hälbivusega jada kasutamine mitmekordsete integraalide arvutamisel Monte-Carlo meetodile vägagi arvestatavaks konkurendiks. Ainukeseks seni ületamata puuduseks on see, et siiani ei ole leitud efektiivset moodust tegeliku vea hindamiseks arvutuste käigus (vastava konstandi väljaarvutamine on enamasti vähemalt sama keerukas ülesanne, kui integraali väärtuse leidmine).

Vaatleme ühte küllaltki lihtsat moodust madala hälbivusega jadade konstrueerimiseks. Selleks tähistame naturaalarvu k baasil b esituse i-ndat numbrit kujul $\alpha_b(i,k)$, s.t. $0 \leq \alpha_b(i,k) < b$ ning

$$k = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_b(i,k) b^i,$$

kusjuures $\alpha_b(i,k) = 0$, kui $i > \log_b(k)$. Naturaalarvude esituse kaudu b-ndsüsteemis saame defineerida kujutuse naturaalarvude hulgast lõiku $[0,\ 1]$ kujul

$$\psi_b(k) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\alpha_b(i,k)}{b^{i+1}}, \ k \in I\!N.$$

Näiteks $b = 2$ korral saame

$$\psi_2(0) = 0, \ \psi_2(1) = \frac{1}{2}, \ \psi_2(2) = \frac{1}{4}, \ \psi_2(3) = \frac{3}{4}, \ \psi_2(4) = \frac{1}{8},$$
$$\psi_2(5) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8} = \frac{5}{8} \quad \text{jne.}$$

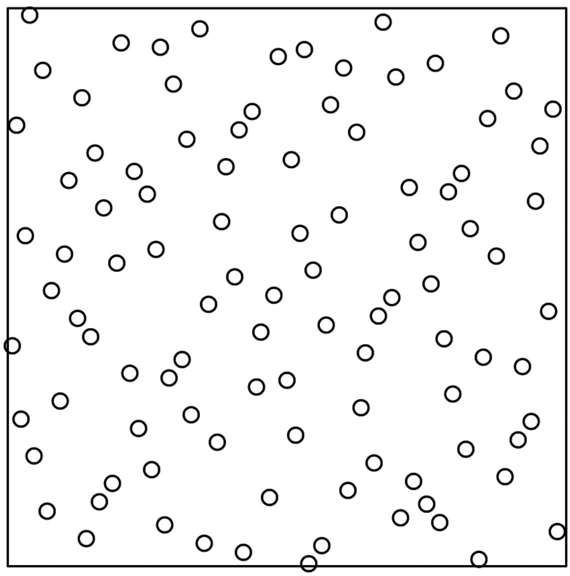
Osutub, et kui fikseerida d erinevat algarvu (või üldisemalt, d ühistegurita arvu) ning defineerida d-mõõtmeliste punktide jada

$$x_k = (\psi_{b_1}(k), \ldots, \psi_{b_d}(k)), k \in I\!N,$$

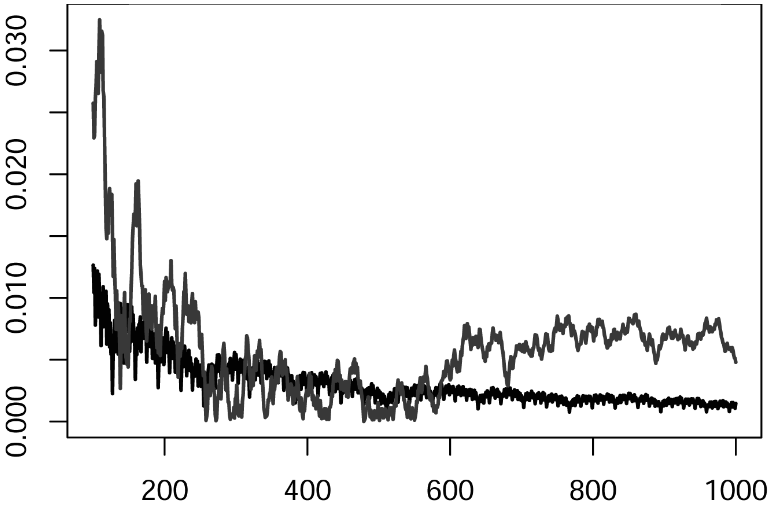
siis saadud nn. Haltoni jada on madala hälbivusega. Näiteks $b_1 = 2, b_2 = 3$ korral saame nii punktid

$$(0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{2}{3}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{9}\right), \left(\frac{5}{8}, \frac{4}{9}\right) \quad \text{jne.}$$

Esimese saja punkti paiknemist võib näha jooniselt 1. Kahjuks suure dimensiooni d korral ei ole Haltoni punktid väga heade omadustega, mistõttu praktilistes rakendustes kasutatakse tunduvalt keerulisemalt defineeritud, kuid paremate omadustega madala hälbivusega jadasid.



Joonis 1: Esimesed sada Haltoni punkti juhul $b_1 = 2$, $b_2 = 3$.



Joonis 2: Integraali lähisväärtuse viga Monte-Carlo meetodi (hall joon) ja kvaasi-Monte-Carlo meetodi (must joon) korral

Lõpetuseks toome ka ühe numbrilise eksperimendi tulemused. Nimelt vaatleme integraali

$$\int_0^1 \int_0^1 x \cdot \sin(x+y)\, dx\, dy$$

ligikaudset leidmist Monte-Carlo meetodil ning eelpool defineeritud Haltoni punkte kasutava nn. kvaasi-Monte-Carlo meetodil, võrreldes saadud tulemuste erinevusi täpsest väärtusest $n = 100, 101, \ldots, 1000$ korral. Nagu joonisel 2 näha, on Monte-Carlo viga tunduvalt hüppelisem ning kahaneb aeglasemalt kui Haltoni punktide kasutamisel saadud tulemuse viga.

