УДК 519.6 Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2023. Т. 10 (68). Вып. 2
MSC 65C05

Стохастические вычислительные методы и планирование эксперимента

С. М. Ермаков, В. Б. Мелас

Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Для цитирования: *Ермаков С. М., Мелас В. Б.* Стохастические вычислительные методы и планирование эксперимента // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2023. Т. 10 (68). Вып. 2. С. 187–199.
https://doi.org/10.21638/spbu01.2023.201

Работа содержит краткий обзор важнейших результатов, полученных сотрудниками кафедры статистического моделирования. Результаты включают математическое обоснование компьютерной имитации случайности, стохастических методов решения уравнений, стохастической оптимизации, исследование стохастической устойчивости и параллелизма алгоритмов метода Монте-Карло. В области планирования эксперимента особое внимание уделено регрессионному эксперименту при нелинейной параметризации. В список литературы в основном включены монографии, написанные сотрудниками кафедры. Исключение составляют некоторые статьи с результатами, в них не вошедшими.

Ключевые слова: стохастика, Монте-Карло, оптимизация, параллелизм, планирование эксперимента, регрессия, нелинейная параметризация.

1. Стохастические вычислительные методы (СВМ). В 1949 г. Н. Метрополисом и С. Уламом [1] была опубликована работа, в которой предлагался новый вычислительный метод (Монте-Карло), основанный на моделировании случайных величин и процессов с помощью ЭВМ. Вскоре после этого метод был использован для решения большого количества задач из области атомной физики, массового обслуживания, теории надежности и др. Появилось много его модификаций, о которых мы будем дальше говорить как о СВМ. Общим их отличием от классических методов вычислительной математики является то, что после вычислений указывается интервал, которому с заданной вероятностью принадлежит результат, а не детерминированная оценка погрешности.

После первых, весьма успешных, применений метода стало ясно, что его дальнейшее развитие требует серьезных теоретических исследований. Появились новые задачи, которые без таких исследований не могли быть решены.

С 1970 г. по настоящее время на кафедре статистического моделирования был получен ряд основополагающих результатов по строгому обоснованию и развитию СВМ. В Советском Союзе работы по применению и исследованию метода Монте-Карло велись в ряде исследовательских организаций, занятых применением атомной энергии в военных и мирных целях. С. М. Ермаков во время работы в Физико-энергетическом институте получил большой опыт решения задач защиты от излучения методом Монте-Карло, а затем, перейдя на работу в Ленинградский университет, где он возглавил кафедру статистического моделирования, получил ряд теоретических результатов, отраженных в монографии [2]. Эти результаты, наряду с результатами других авторов, были удостоены Государственной премии СССР за 1979 г. (руководитель работы академик Г. И. Марчук). Монография [2] выдержала два издания, широко использовалась при чтении курсов в различных вузах и была переведена на многие иностранные языки. На ее основе были созданы два учебника (совместно с Г. А. Михайловым) [3].

В Советском Союзе и РФ наибольшее число прикладных задач методом Монте-Карло было решено в Новосибирске в коллективе, возглавляемом Г. А. Михайловым. На кафедре статистического моделирования в большей мере велись теоретические исследования. В данной статье приводится краткий обзор фундаментальных результатов, полученных сотрудниками, а также аспирантами и докторантами кафедры.

1.1. Арифметическое моделирование случайности. В первых опытах по применению метода Монте-Карло использовались случайные числа, получаемые с помощью различных физических устройств типа рулетки. Этот способ имел ряд недостатков. Хотелось иметь детерминированный алгоритм, с помощью которого можно было бы получать независимые реализации случайных величин, равномерно распределенных на промежутке $[0,1]$. А. Н. Колмогоровым и его учениками [4] было показано, что такой алгоритм должен иметь бесконечную сложность. Следовало сузить задачу и искать алгоритмы, вычисляющие числа, обладающие не всеми свойствами случайных. Для решения подавляющего множества прикладных задач можно требовать выполнения закона больших чисел и центральной предельной теоремы. На помощь пришли теоретико-числовые результаты Г. Вейля [4] относительно равномерно распределенных в теоретико-числовом смысле последовательностей. В теории чисел числовая последовательность α_n, $n = 1, 2, \ldots$, называется равномерно распределенной, если для любой интегрируемой по Риману функции $f(x)$ выполняется равенство

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} f(\alpha_j) = \int_0^1 f(x)\,dx.$$

Таким свойством обладает последовательность дробных долей $\{nx\}$, где x — любое иррациональное число. Но для выполнения аналога закона больших чисел нужно, чтобы для любого натурального s выполнялось равенство

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} f(\alpha_j, \ldots, \alpha_{j+s}) = \int_{D_s} f(X)\,dX,$$

где D_s — единичный s-мерный гиперкуб (вполне равномерная распределенность). В [1] было показано, что для мультипликативного датчика псевдослучайных чисел, имеющего вид

$$\alpha_{n+1} = \{M\alpha_n\}, \quad \alpha_0 = \frac{x_0}{p}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{1}$$

где M, P и x_0 — натуральные числа, $M<P$, $\{\alpha\}$ обозначает дробную долю числа α, а x_0 удовлетворяет некоторым дополнительным условиям, при $M \to \infty$ величины асимптотически вполне равномерно распределены и также асимптотически выполняется простейший вариант центральной предельной теоремы. Это является строгим обоснованием одной из разновидностей метода Монте-Карло. Ряд интересных свойств датчиков относительно выбора оптимальных мультипликаторов

и представления их результатов в системах счисления с плавающей запятой был указан В. В. Некруткиным [5, 6]. Отметим, что случай вещественного α_0 был ранее исследован Ж. Н. Франклиным [7].

1.2. Вычисление интегралов по траекториям марковских процессов. Исследования в этой области применительно к задачам переноса излучения были начаты Н. Н. Ченцовым в Москве (ИПМ), затем проводились Г. А. Михайловым и его учениками в Новосибирске. Независимо ряд результатов был получен за рубежом (как обычно, без ссылок на российские источники). Результаты сотрудников кафедры были получены в тесном контакте с российскими исследователями. Интегральное уравнение теории переноса излучения рассматривалось с общих позиций как уравнение вида

$$\varphi(x) = \int k(x,y)\varphi(y)\mu(dy) + f(x), \tag{2}$$

где μ — вероятностная мера, и равенство (2) имеет место на ее носителе. Это позволило с единой точки зрения рассматривать уравнения 2-го рода Фредгольма и системы линейных алгебраических уравнений (в том числе бесконечного порядка). Далее марковский случайный процесс переноса излучения сопоставляется с уравнением (2), и мы приходим к алгоритму метода Монте-Карло, позволяющему оценивать функционалы от решения (2) этого уравнения как математические ожидания функционалов на траекториях процессов. В свою очередь, эти математические ожидания являются интегралами по траекториям марковского процесса, что позволяет использовать различные методы повышения эффективности метода Монте-Карло для вычисления интегралов. В результате общие подходы к вычислению интегралов и решению линейных уравнений вида (2), развитые на кафедре, позволили указать ряд приемов, повышающих качество алгоритмов. Это относится, в частности, к известной задаче оценки малых вероятностей [5, 8].

Отдельно можно упомянуть теорию кубатурных формул со случайными узлами, целиком созданную сотрудниками кафедры и ее аспирантами. Она способна серьезно уменьшить трудоемкость решения отдельных задач методом Монте-Карло и устанавливает связи с рядами Фурье по ортонормированным в пространстве $\mathbf{L}^2(\mu)$ системам функций, для которых формулы точны [2].

В случае дискретной меры μ, сосредоточенной в n точках, уравнение (2) сводится к системе линейных алгебраических уравнений. В этом случае удается сравнить асимптотическую по n трудоемкость метода простых итераций и простейшего метода Монте-Карло. Вычисление m-той итерации X_m, системы $X = AX + F$ требует $O(n^2)$ операций. Оценка простейшим методом Монте-Карло скалярного произведения (H, X_m), где H — заданный вектор, требует $O(Nm\log n)$ операций, т. е. для оценки X_m нужно $O(Nmn\log n)$ операций, но здесь имеется случайная с дисперсией $\varepsilon = 1/N$ ошибка. Если N фиксировано и таково, что систематическая ошибка δ имеет порядок ε, то при достаточно большом n использование метода Монте-Карло может быть выгоднее итерационных методов. Следует также учесть простоту и естественный параллелизм метода, который эффективен именно для решения задач большой размерности [4].

1.3. Уравнения в частных производных. Начально-краевая задача для линейных уравнений в частных производных 2-го порядка параболического и эллиптического типов может быть сведена к интегральным уравнениям 2-го рода. Затем эти уравнения можно решать методом Монте-Карло. Однако функция Грина, с помощью которой осуществляется такое сведение, имеет простой вид для ограниченного числа областей. Самый простой случай — это s-мерная сфера. В этом случае можно строить алгоритм нахождения решения в заданной точке области с помощью случайных блужданий по поверхностям сфер, так что центр каждой последующей сферы находится на поверхности предыдущей. Блуждание должно оканчиваться на границе, но вероятность выхода на границу у сферического процесса нулевая. По этой причине граничные условия «размазываются» (ε-слой), что приводит к смещению оценок.

Для получения несмещенных оценок используются функции Грина для других областей. Ряд результатов в этом направлении получен получен в работе [8]. Общие методы понижения дисперсии для этого класса задач указаны С. М. Ермаковым и А. С. Сипиным [8].

1.4. Параллелизм и стохастическая устойчивость. Существование интеграла $\int f(x)\mu\,(dx)$ предполагает также существование интеграла $\bar{J} = \int |f|\mu\,(dx)$ (мажорантное условие). В этом случае в соответствии с СВМ интеграл J оценивается с помощью среднего $S_N[f] = \frac{1}{N}\sum\limits_{j=1}^{N} f(z_j)$, где z_j — независимые реализации случайной величины, распределенной в соответствии с мерой μ, или реализация соответствующего случайного процесса. Алгоритм вычисления $S_N[f]$ обладает очевидным свойством параллелизма. Однако для многих задач мажорантное условие не выполняется, но возможно представление решения в виде обобщенного интеграла $\int \mu_1(dX)(\int \mu_2(dY)f(X,Y))$, где существуют интегралы $F_2(x) = \int |f(X,Y)|\mu_2(dY)$ при каждом X из носителя меры μ_1 и интеграл $\int |F(X,Y)|\mu_1\,(dX)$. В этом случае необходимо сначала с нужной точностью оценить $F_2(x)$ при большом (нужном) числе значений X, запомнить их и затем оценивать интеграл в целом. Если эта точность недостаточна, то возможно явление стохастической неустойчивости. Здесь нарушается естественный параллелизм алгоритма. В частности, для линейных уравнений в частных производных гиперболического типа удается получить лишь представление в виде обобщенного интеграла. Возникающие здесь проблемы параллелизма и стохастической устойчивости были впервые исследованы С. М. Ермаковым и выпускником кафедры В. Вагнером (ФРГ) [9–11]. Далее аспиранты кафедры получили ряд конкретных результатов, связывающих точность оценки $F_2(x)$ с длиной участков между последовательным запоминанием результатов. Полученные результаты чрезвычайно важны при создании новых алгоритмов СВМ для вычислений на современных многопроцессорных компьютерах. Решение гиперболических уравнений в частных производных не удается представить в виде интеграла по траекториям как в п. 1.3, но представление в виде обобщенного интеграла было получено.

1.5. Уравнения с полиномиальной нелинейностью. Финансовая математика. Приоритетный характер имеют также результаты относительно связи уравнений с полиномиальной нелинейностью с ветвящимися марковскими процессами. Эти результаты позволили распространить ряд теорем, доказанных для линейных уравнений, на полиномиальный случай. Были указаны новые алгоритмы решения нелинейного уравнения Больцмана, что позволило исследовать область малых вероятностей в задачах течения разреженного газа. В работах [12–14] был рассмотрен ряд алгоритмов, использующих процессы с обратным временем (столкновительные). Новые результаты относительно использования ветвящихся процессов с обратным временем были получены в недавней работе С. М. Ермакова и Т. О. Суровикиной [15]. В общем случае для нелинейных уравнений может применяться метод последовательной линеаризации, но можно также в определенных случаях приближенно заменять их полиномиальным уравнением. На этом пути были получены новые методы решения больших систем обыкновенных дифференциальных уравнений и стохастических дифференциальных уравнений финансовой математики [16, 17]. Это позволило эффективно решать трудные задачи финансовой математики (американские опционы). Для американских опционов Ю. Н. Каштановым и его учениками доказана состоятельность стохастического метода сеток и разработаны методы понижения дисперсии оценок [18].

1.6. Экстремальные задачи. Существует много вариантов стохастических методов оптимизации. Наиболее известными являются генетические алгоритмы и метод имитации отжига. Генетические алгоритмы основаны на эмпирических соображениях естественного отбора. Метод имитации отжига также возник из эмпирических соображений, но имеет строгое математическое обоснование. Эти и другие СВМ-методы для задач оптимизации без ограничений отличаются эффективностью в задачах со многими переменными, малой гладкостью целевой функции и другими ограничениями, которые свойственны детерминированным методам градиентного типа. Для генетических алгоритмов на кафедре были предложены и изучались разновидности, использующие анализ матрицы ковариаций пробных векторов В случае имитации отжига использовался строгий математический подход, основанный на том факте, что пределом $f^n(X)/\int_D f^n(X)\mu(dX)$ при $n \to \infty$ является δ-мера, сосредоточенная в точке глобального максимума $f(X)$, принадлежащей носителю меры μ. Методы были опробованы при решении сложных задач нахождения точных D-оптимальных планов регрессионного эксперимента и параметров регрессионных задач большой размерности. Был исследован случай, когда имеется много (может быть бесконечно много) равных значений экстремума. На базе этих результатов предложены новые оптимизационные алгоритмы. Поскольку для задачи решения систем уравнений может быть указана эквивалентная экстремальная задача, то СВМ оптимизации можно применять к решению систем для отделения их корней и в случае их плохой обусловленности [19].

1.7. Квазислучайные числа. Квазислучайные числа были предложены Дж. Холтоном и И. М. Соболем для вычисления интегралов по многомерному гиперкубу. Они обладают улучшенными свойствами равномерной распределенности по сравнению со случайными числами. Асимптотика погрешности при вычислении интеграла по s-мерному гиперкубу есть $O\left((\ln N)^s/N\right)$, но, как было показано в работе [20], она реально наступает при $s \geqslant 8$ для столь больших N, что их нельзя реализовать на современных компьютерах.

Ряд результатов по оценке погрешности квазислучайных методов был получен сотрудниками кафедры. При этом использовались результаты теории кубатурных формул со случайными узлами. Также были указаны приемы понижения дисперсии с использованием квазислучайных чисел при решении различных задач методом Монте-Карло [20, 21].

2. Теория оптимального планирования эксперимента. Часто моделирование случайных процессов с помощью методов Монте-Карло может заменить реальный эксперимент при изучении представляющей интерес проблемы. При этом материальные затраты бывают, как правило, во много раз меньше. Дополнительный выигрыш можно получить за счет грамотного планирования вычислений, и здесь возможно использование методов, применяемых при планировании реальных экспериментов. В монографии [22] был развит единый подход к планированию реальных и имитационных экспериментов.

Что касается собственно планирования регрессионного эксперимента, то кроме упомянутых в разделе 1.5 стохастических методов оптимизации для нахождения D-оптимальных планов В. Б. Меласом и П. Л. Шпилевым развивались методы построения оптимальных планов для нелинейных по параметрам моделей. Полученные результаты имеют важное прикладное значение, и на них мы далее остановимся подробно. Исследования на кафедре в области математической теории планирования эксперимента проводились в основном для нелинейных по параметрам регрессионных моделей. Был разработан функциональный подход к построению и исследованию оптимальных планов эксперимента, который также может быть применен для решения экстремальных задач общего вида, а также построены и исследованы оптимальные планы эксперимента для нелинейных моделей гиперэкспоненциального и дробно-рационального вида, которые имеют широкий спектр практических приложений.

Этот подход и сопутствующие результаты были опубликованы в ряде статей в широко известных математических журналах и собраны в монографии [23]. Новые результаты, относящиеся к исследованию классических линейных моделей, можно найти в работе [24]. В явном виде найдены L-оптимальные планы для тригонометрических моделей без свободного члена. Идея функционального подхода для изучения оптимальных планов заключается в изучении элементов (точек и весов) локально оптимальных планов как неявно заданных вектор-функций параметров, нелинейным образом входящих в рассматриваемую модель. Эти вектор-функции неявно заданы условиями оптимальности.

2.1. Нелинейные по параметрам регрессионные модели. Рассмотрим уравнение регрессии:

$$y_i = \eta(x_i, \theta) + \varepsilon_i, i = 1, \ldots, N, \tag{3}$$

где

- $y_1, \ldots, y_N \in \mathbb{R}$ — результаты наблюдений;
- $x_1, \ldots, x_N \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^k$ — условия проведения эксперимента (могут повторяться);
- $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_m)^T \in \Theta \subset \mathbf{R}^m$ — вектор неизвестных параметров;
- $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_N$ — случайные ошибки, такие, что $\mathbf{E}\varepsilon = 0, \mathbf{E}\varepsilon^2 = \sigma^2$.

Регрессионная модель называется нелинейной, если она не может быть представлена в виде

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 f_1(x) + \cdots + \theta_m f_m(x).$$

В теории оптимального планирования эксперимента, в развитие которой большой вклад внесли российские ученые, принято рассматривать так называемые приближенные планы — дискретные вероятностные меры вида $\xi = (x_1, \ldots, x_n; \omega_1, \ldots, \omega_n)$, включающие точки наблюдений (условия проведения экспериментов) и весовые коэффициенты, определяющие долю от общего числа наблюдений, проводимых при заданных условиях. В простейшем случае x_i — вещественные числа. Для нелинейных по параметрам моделей информационной матрицей называется матрица, обратная к асимптотической ковариационной матрице оценок параметров по методу наименьших квадратов. Эта матрица зависит от плана эксперимента и истинных значений оцениваемых параметров, которые заменяются на начальные приближения. Планы, максимизирующие некоторый функционал (например, определитель) от информационной матрицы при заданных начальных приближениях параметров, называются локально-оптимальными.

Одной из важнеших задач теории планирования эксперимента для нелинейных моделей является построение локально-оптимальных планов эксперимента и исследование их зависимости от значений параметров.

2.2. Функциональный подход. Заметим, что во многих случаях локально-оптимальные планы с использованием определителя информационной матрицы (будем называть их локально D-оптимальными) сосредоточены в минимально возможном числе различных точек, равном числу параметров модели, а весовые коэффициенты одинаковы. В этом случае применение функционального подхода можно кратко описать следующим образом.

Пусть τ — совокупность точек локально D-оптимального плана для некоторой нелинейной модели, z — совокупность нелинейных параметров. Для исследования поведения оптимальных планов можно использовать теорему о неявной функции. Пусть $g(\tau, z)$ — вектор производных определителя информационной матрицы по точкам плана. Можно проверить, что для актуальных нелинейных моделей функция $g(\tau, z)$ непрерывно дифференцируема в некоторой окрестности точки (τ^0, z^0) и выполнено условие:

$$g(\tau_0, z_0) = 0,\ \det J \neq 0,$$

где

$$J(\tau, z) = \left(\frac{\partial}{\partial \tau_i} g_j(\tau, z)\right)_{i,j=1}^{m}.$$

Тогда в некоторой окрестности g задает неявную функцию, т. е. существует единственная непрерывная функция $\tau = \tau(z)$ такая, что $g(\tau, z) = 0$ при $\tau = \tau(z)$.

Более того, если g — вещественно-аналитическая, то и $\tau(z)$ также будет вещественно-аналитической функцией.

Отметим, что коэффициенты в разложении Тейлора функции $\tau(z)$ в окрестности точки z_0 можно находить рекуррентным образом.

В. Б. Меласом найдены удобные для исследования и вычислений на компьютерах общие рекуррентные формулы, которые в случае одного нелинейно входящего в модель параметра имеют следующий вид (общий вид можно найти в монографии [23]).

Пусть $k = 1$. Пусть

$$\tau(z) = \tau_{(0)} + \sum_{i=1}^{\infty} \tau_{(i)} z^i.$$

Положим $\tau_{(0)} = \tau_0$. Обозначим $\tau_{<n>}(z) = \tau_{(0)} + \sum_{i=1}^{n} \tau_{(i)} z^i$, $J_{(0)} = J(\tau_0, z_0)$.

Теорема 1 (Рекуррентные формулы для коэффициентов Тейлора).

$$\tau_{(n)} = -\frac{1}{n!} J_{(0)}^{-1} \frac{\partial g}{\partial z^n} \big(\tau_{<n-1>}(z), z\big)\Big|_{z=z_0}, n = 1, 2, \ldots .$$

Заметим, что подход требует предварительного нахождения оптимальных планов при специальном выборе параметров. В общем случае такие планы могут быть найдены численными методами. Для гиперэкспоненциальных и дробно-рациональных моделей эта задача решена аналитически.

2.3. Гиперэкспоненциальные модели. Гиперэкспоненциальными регрессионными моделями будем называть нелинейные по параметрам регрессионные модели с функцией регрессии вида

$$\eta(x,\theta)=\sum_{i=1}^{k}a_i e^{-\lambda_i x}, x\in[0,\infty),\ \lambda_i>0, i=1,\ldots,k,$$

где k — фиксированное натуральное число. Такие модели часто возникают на практике, так как суммы экспонент образуют важный класс решений систем дифференциальных уравнений. Для этой модели нами подробно изучены локально D-оптимальные планы. Нетрудно проверить, что локально D-оптимальные планы зависят только от нелинейно входящих параметров $\lambda_i>0, i=1,\ldots,k$. Пусть $x\in[0,d]$, где d — заданное положительное число. Для $k=1$ локально D-оптимальный план единственен и имеет вид

$$\xi=(0,\frac{1}{\lambda_1};\frac{1}{2},\frac{1}{2}),$$

если d не меньше, чем $1/\lambda_1$. При $d<1/\lambda_1$ вторая точка плана совпадает с d. Но уже при $k=2$ найти оптимальный план в явном виде не представляется возможным, но удалось доказать, что существует единственный локально D-оптимальный план и он имеет четыре опорные точки, одна из которых совпадает с левой границей промежутка планирования, т. е. равна 0, а вес всех точек одинаков. В общем случае аналитически удается доказать, что аналогичный результат имеет место в классе планов с числом точек, равным числу параметров. Кроме того, установлено, что точки локально D-оптимальных планов есть невозрастающие функции нелинейно входящих параметров. Также доказано, что матрица Якоби из теоремы о неявной функции, используемая при изучении планов с минимально возможным числом точек в рамках функционального подхода, является невырожденной и выполнены все условия из теоремы о неявной функции. Численно построены локально D-оптимальные планы для $k=2,3,4$. Проверена их оптимальность с помощью теоремы эквивалентности [23, гл. 6].

2.4. Дробно-рациональные модели. Изучены локально D-оптимальные планы для дробно-рациональных моделей вида

$$\eta(x,\theta)=\sum_{i=1}^{k}\frac{\theta_{2i-1}}{x+\theta_{2i}}, x\in[c,d].$$

Для $k=1,2$ оптимальные планы найдены в явном виде, причем для $k=2$ (модель с четырьмя параметрами, два из которых входят в модель нелинейным образом) решение является технически сложным и основано на построении вспомогательного дифференциального уравнения. Для произвольного k локально D-оптимальные планы построены аналитически для специальных наборов параметров и доказана невырожденность матрицы Якоби [23, гл. 5], что позволяет использовать основную схему функционального подхода, описанную в разделе 2.1.

2.5. Оптимальные планы для линейных по параметрам моделей. В работах сотрудников и выпускников кафедры получен ряд новых результатов для классических линейных по параметрам моделей. Предложен и исследован новый критерий оптимальности для одновременного решения задач дискриминации моделей и оценки их параметров [25]. Этот критерий является обобщением критериев D-оптимальности и усеченной D-оптимальности. Доказано, что вычисление плана эксперимента, который является оптимальным по этому критерию, может быть сведено к вычислению множества планов, которые оптимальны по более простому взвешенному критерию. Для полиномиальных и тригонометрических моделей без свободного члена в явном виде найдены D-, E- и C-оптимальные планы, и в частности, планы для оценивания производной в заданной точке [26–28]. Работы поддерживались грантами РФФИ (№ 17-01-00161, № 20-01-00096).

3. Подготовка кадров, хоздоговоры. Исследования в областях стохастического моделирования и планирования экспериментов позволили создать на кафедре оригинальные спецкурсы. Кроме специалистов, а позже бакалавров и магистров, в упомянутых областях было подготовлено более 60 кандидатов и 8 докторов наук. Выпускники кафедры успешно работают в вузах и исследовательских организациях России, США, Канады, Англии, Германии, Узбекистана, Казахстана.

За рубежом исследования в области Монте-Карло и квази-Монте-Карло ведутся с 1960 г. Результаты докладываются на проходящих каждые два года конференциях «Метод Монте-Карло и квази-Монте-Карло». В 2012 г. С. М. Ермаков был специальным приглашенным докладчиком. Также каждые два года проводятся международные конференции по моделированию, сопредседателями которых были профессора С. М. Ермаков и В. Б. Мелас. Последняя, 9-я Международная конференция по моделированию (Ninth International Workshop on Simulation), была проведена 24–28 июня 2018 г. в Барселоне (Испания).

Кафедрой статистического моделирования была организована серия международных конференций. Первые шесть конференций проводились в Санкт-Петербурге (1994, 1996, 1998, 2001, 2005, 2009) под названием *St Petersburg Workshops on Simulation*. При этом количество зарубежных участников выросло с 14 (на первой конференции) до 150 (на шестой). 7–10 конференции проводились в европейских странах: Италии, Австрии и Испании (Rimini, Italy, 2013, Vienna, Austria, 2015, Barselona, Spain, 2018, Zalcburg, Ausria, 2019) под названием *International Workshops on Simulation and Statistics*. В среднем было 150 зарубежных участников и 50 из России.

Сотрудниками кафедры были выполнены научные разработки в рамках хоздоговоров с другими организациями. Здесь нужно отметить работы В. Н. Солнцева в области геодезии, работы Т. М. Товстик по моделированию случайных полей в метеорологии и случайных процессов в гидродинамике. Интересные результаты были получены при моделировани надежности оборудования искусственного спутника Земли. Ряд прикладных работ по планированию эксперимента был выполнен В. Б. Меласом совместно со специалистами из ФРГ.

Сотрудники кафедры, внесшие вклад в развитие исследований:

Ермаков Сергей Михайлович — профессор, заведующий кафедрой;
Мелас Вячеслав Борисович — профессор;
Каштанов Юрий Николаевич — доцент;
Некруткин Владимир Викторович — доцент;
Товстик Татьяна Михайловна — доцент;
Шпилев Петр Валерьевич — доцент;
Москалева Нина Михайловна — старший преподаватель.

Литература

1. Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method. *J. Amer. Stat. Assoc.* **44** (247), 335–341 (1949).

2. Ермаков С. М. *Метод Монте-Карло и смежные вопросы.* Москва, Наука (1975).

3. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. *Статистическое моделирование.* Москва, Наука (1982).

4. Ермаков С. М. *Метод Монте-Карло в вычислительной математике: вводный курс.* Москва, Бином (2009).

5. Nekrutkin V. V. On the complexity of binary floating point pseudorandom generator. *Monte-Carlo methods and applications* **22** (2), 109–111 (2016).

6. Nekrutkin V. V., Samachova M. Admissidle and asymptotically optimal linear congruential generators. *Monte-Carlo methods and applications* **13** (3), 27–44 (2007).

7. Franclin J. N. Deterministic simulation of random processes. *Math. Comp.* **17**, 28–59 (1963).

8. Ермаков С. М., Сипин А. С. *Метод Монте-Карло и параметрически разделимые алгоритмы.* Санкт-Петербург, Изд-во С.-Петерб. ун-та (2014).

9. Ermakov S. M., Wagner W. Monte-Carlo difference schemes for the wave equations. *Monte-Carlo methods and applications* **8** (1), 1–29 (2002).

10. Вагнер В., Ермаков С. М. Стохастическая устойчивость и параллелизм метода Монте-Карло. *Доклады Академии наук* **379** (4), 439–441 (2001).

11. Ермаков С. М., Беляева А. А. О методе Монте-Карло с запоминанием промежуточных результатов. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **3** (61), вып. 29, 5–8 (1996). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2016.405

12. Ермаков С. М., Расулов А. С., Бакаев М. Т., Веселовская А. З. *Избранные алгоритмы метода Монте-Карло.* Ташкент, Университет (1992).

13. Ермаков С. М., Москалева Н. М. Ветвящиеся процессы и уравнение Больцмана. Вычислительные аспекты. *Вестник Ленинградского университета. Математика. Механика. Астрономия* **3** (15), 38–43 (1987).

14. Ермаков С. М., Некруткин В. В., Сипин А. С. *Случайные процессы для решения задач математической физики.* Москва, Наука (1984).

15. Ермаков С. М., Суровикина Т. О. Обратные итерации при решении интегральных уравнений с полиномиальной нелинейностью. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **9** (67), вып. 1, 23–36 (2022). https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.103

16. Ермаков С. М., Смиловицкий М. Г. О методе Монте-Карло для решения больших систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **8** (66), вып. 1, 37–48 (2021). https://doi.org/10.21638/spbu01.2021.104

17. Ермаков С. М., Товстик Т. М. Метод Монте-Карло для решения систем ОДУ. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **6** (64), вып. 3, 411–421 (2019). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2019.306

18. Ермаков С. М., Каштанов Ю. Н. (ред.) *Методы Монте-Карло в финансовой математике.* Санкт-Петербург, Изд-во С.-Петерб. ун-та (2006).

19. Ермаков С. М., Куликов Д. В., Леора С. Н. К анализу метода имитации отжига в многоэкстремальном случае. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **4** (62), вып. 2, 220–226 (2017). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.205

20. Ermakov S. M., Leora S. N. Decrease of the mean of the quasi-random integration error. *Communications in Statistics: Simulation and Computation* **50**, iss. 11, 3581–3589 (2021).

21. Ермаков С. М., Рукавишникова А. И., Тимофеев К. А. О некоторых стохастических и квазистохастических методах решения уравнений. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **4** (1), 75–83 (2008).

22. Ermakov S. M., Melas V. B. *Design and Analysis simulation Experiments.* Dortrecht; Boston; London, Kluver Academic Publisher (1993).

23. Melas V. B. *Functional Approach to Optimal Experimental Design.* New York, Springer-Verlag (2006).

24. Мелас В. Б., Шпилев П. В. L-оптимальные планы для регрессионной модели Фурье без свободного члена. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **9** (67), вып. 1, 64–75 (2022). https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.107

25. Melas V. B., Guchenko R., Strashko V. Standardized maximin criterion for discrimination and parameter estimation of nested models. *Communications in Statistics-Simulation and a Computation* **51** (8), 4314–4325 (2022).

26. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. V. A note on optimal designs for estimating the slope of a polynomial regression. *Statistics and Probability Letters* **170**, 108992 (2021)

27. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. V. Some explicit solutions of c-optimal design problems for polynomial regression with no intercept. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics* **73** (1), 61–82 (2021).

28. Мелас В. Б., Шпилев П. В. Построение c-оптимальных планов для полиномиальной регрессии без свободного члена. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **7** (65), вып. 2, 331–342 (2020). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2020.215

Статья поступила в редакцию 21 октября 2022 г.;
доработана 14 ноября 2022 г.;
рекомендована к печати 17 ноября 2022 г.

Контактная информация:

Ермаков Сергей Михайлович — д-р физ.-мат. наук, проф.; sergej.ermakov@gmail.com
Мелас Вячеслав Борисович — д-р физ.-мат. наук, проф.; v.melas@spbu.ru

Stochastical computation methods and experimental designing

S. M. Ermakov, V. B. Melas

St. Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St. Petersburg, 199034, Russian Federation

For citation: Ermakov S. M., Melas V. B. Stochastical computation methods and experimental designing. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2023, vol. 10 (68), issue 2, pp. 187–199. https://doi.org/10.21638/spbu01.2023.201 (In Russian)

This paper contains a brief review of the most important results obtained by the staff of the department of statistical modeling. Results include mathematical justification of computer simulation of randomness, stochastic methods of solving equations, stochastic optimization, study of stochastic stability and parallelism of Monte-Carlo algorithms. In the area of experiment planning, special attention is paid to regression experiment under nonlinear parameterization. The list of references mainly includes monographs written by members of the department. The exceptions are some articles with results not included in them.

Keywords: stochastic modeling, Monte-Carlo method, pseudorandom numbers, Markov chains, stochastic optimization, regression experiment, optimal experiment design, regression models nonlinear in parameters, functional approach, hyper exponential models, fractionally rational models, locally optimal experimental designs.

References

1. Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method. *J. Amer. Stat. Assoc.* **44** (247), 335–341 (1949).

2. Ermakov S. M. *Monte-Carlo Method and related topics.* Moscow, Nauka Publ. (1975). (In Russian)

3. Ermakov S. M., Mikhailov G. A. *Stochastic Simulation.* Moscow, Nauka Publ. (1982). (In Russian)

4. Ermakov S. M. *Monte-Carlo in computational mathematic. Introductory course.* Moscow, Binom Publ. (2009). (In Russian)

5. Nekrutkin V. V. On the complexity of binary floating point pseudorandom generator. *Monte-Carlo methods and applications*, **22** (2), 109–111 (2016).

6. Nekrutkin V. V., Samachova M. Admissidle and asymptotically optimal linear congruential generators. *Monte Carlo methods and applications* **13** (3), 27–44 (2007).

7. Franclin J. N. Deterministic simulation of random processes. *Math. Comp.* **17**, 28–59 (1963).

8. Ermakov S. M., Sipin A. S. *Monte-Carlo Method and parametrically separable algorithms.* St Petersburg, St Petersburg University Press (2014). (In Russian)

9. Ermakov S. M., Wagner W. Monte-Carlo difference schemes for the wave equations. *Monte-Carlo methods and applications* **8** (1), 1–29 (2002).

10. Wagner W., Ermakov S. M. Stochastic stability and parallelism of Monte-Carlo Method. *Doklady Akademii Nauk* **379** (4), 439–441 (2001). (In Russian)

11. Ermakov S. M., Belyaeva A. A. About the Monte-Carlo method with intermediate memorization results. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **3** (61), 5–8 (1996). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2016.405

12. Ermakov S. M., Rasulov A. S., Bakoev M. T., Veselovskaya A. Z. *Selected algorithms of the Monte-Carlo method*. Tashkent, University Publ. (1992). (In Russian)

13. Ermakov S. M., Moskaljova N. M. Branching processes and the Bolzmann equation. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **3** (15), 38–43. (1987) (In Russian)

14. Ermakov S. M., Nekrutkin V. V., Sipin A. S. *Random Processes for Classical Equation of Mathematical Phisics*. Moscow, Nauka Publ. (1984). (In Russian)

15. Ermakov S. M., Surovikina T. O. Backward iterations for solving integral equations with polynomial nonlinearity. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, **9** (67), iss. 1, 23–36. (2022). https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.103 [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **55**, iss. 1, 16–26 (2022). https://doi.org/10.1134/S1063454122010046].

16. Ermakov S. M., Smilovitskiy M. G. Monte-Carlo for solving large linear systems ofordinary differential equations. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **8** (66), iss. 1, 37–48 (2021). https://doi.org/10.21638/spbu01.2021.104 (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **54**, iss. 1, 28–38 (2021). https://doi.org/10.1134/S106345412101].

17. Ermakov S. M.,Tovstik T. M. Monte-Carlo method for solution of systems ODE. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **6** (64), iss. 3, 411–421 (2019). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2019.306 (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **52**, iss. 3, 272–280 (2019). https://doi.org/10.1134/S1063454119030087].

18. Ermakov S. M. Kashtanov J. N. (eds) Monte-Carlo method in financional mathematics. St Petersburg, St Petersburg University Press (2006). (In Russian)

19. Kulikov D. V., Leora S. N., Ermakov S. M. Towards the Analysis of the simulated annealing method in the multiextremal case. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **4** (62), iss. 2, 220–226 (2017). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.205 (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **50**, iss. 2, 132–137 (2017)].

20. Ermakov S. M., Leora S. N. Decrease of the mean of the quasi-random integration error. *Communications in Statistics: Simulation and Computation* **50**, iss. 11, 3581–3589 (2021).

21. Ermakov S. M., Rukavichnikova A. I., Timofeev K. A. On some stochastic and quasistochastic methods for equanion solving. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **4** (1), 75–83. (2008). (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **41**, 348–354 (2008). https://doi.org/10.3103/S1063454108040109].

22. Ermakov S. M., Melas V. B. *Design and Analysis simulation Experiments.* Dortrecht; Boston; London, Kluver Academic Publ. (1993).

23. Melas V. B. *Functional Approach to Optimal Experimental Design.* New York, Springer-Verlag (2006).

24. Melas V. B., Shpilev P. V. L-optimal designs for a trigonometric Fourier regression model with no intercept. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics.Astronomy* **9** (67), iss. 1, 64–75 (2022). https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.107 (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **55**, iss. 1, 48–56 (2022). https://doi.org/10.1134/S1063454122010095].

25. Melas V. B., Guchenko R., Strashko V. Standardized maximin criterion for discrimination and parameter estimation of nested models. *Communications in Statistics-Simulation and a Computation* **51** (8), 4314–4325 (2022).

26. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. V. A note on optimal designs for estimating the slope of a polynomial regression. *Statistics & Probability Letters* **170**, 108992 (2021).

27. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. V. Some explicit solutions of c-optimal design problems for polynomial regression with no intercept. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics* **73** (1), 61–82 (2021).

28. Melas V. B., Shpilev P. V. Constructing c-optimal designs for polynomial regression without an intercept. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **7** (65), iss. 2, 331–342 (2020). https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2020.215 (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **53**, iss. 2, 223–231 (2020). https://doi.org/10.1134/S1063454120020120].

Received: October 21, 2022
Revised: November 14, 2022
Accepted: November 17, 2022

Authors' information:

Sergei M. Ermakov — sergej.ermakov@gmail.com
Vyacheslav B. Melas — v.melas@spbu.ru