Vyzkoušejte metodu Monte Carlo

Ľubomíra Dvořáková*

Abstrakt

Stochastická metoda Monte Carlo (tedy kombinující pravděpodobnost a statistiku) nachází uplatnění v mnoha oblastech: jaderná a částicová fyzika [4], termodynamika a statistická fyzika [5], předpověď počasí, počítačová grafika, filmové efekty, finanční matematika. My si vysvětlíme podstatu metody a ukážeme některé její aplikace, přičemž si vystačíme se znalostmi středoškolské matematiky obohacenými o pojmy náhodná veličina, střední hodnota a rozptyl.

1 Historie

Popis historie metody čerpáme z [3].

Metoda Monte Carlo byla formulována ve 40. letech 20. století a svého využití se dočkala ještě v průběhu druhé světové války. Jejím zakladatelem byli S. Ulam a J. von Neumann, kteří v té době pracovali v americké Národní laboratoři Los Alamos, kde zkoumali chování neutronů, především je zajímalo, jaké množství neutronů projde různými materiály (např. nádrží vody). Přes velké množství informací nebylo možné tento problém vyřešit teoreticky ani prakticky. K výsledku dopomohla až metoda Monte Carlo, kdy se autoři nechali inspirovat hazardní hrou ruleta (odtud také název Monte Carlo). Bylo jim známo, že k pohlcení neutronu jiným atomem dojde v přibližně jednom případu ze sta. Každé roztočení rulety by simulovalo pohyb neutronu. Pokud by se zastavila na dílku, který znázorňuje pohlcení neutronu, neutron by cestu neprošel. To by se opakovalo vždy tak dlouho, dokud by neutron nebyl pohlcen, nebo dokud by úspěšně neprošel celou cestu.

Ač je tento příklad velmi zjednodušený, podstatu metody Monte Carlo vystihuje. Simulace by byla pochopitelně velmi časově náročná, pokud by se skutečně pokaždé točilo ruletou. Autoři ale pracovali v době, kdy vývoj výpočetní techniky byl již v plném proudu, a proto pro tyto simulace mohli používat na dnešní dobu jednoduché počítače, které dobu simulace výrazně zkrátily.

*Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, email: lubomira.dvorakova@fjfi.cvut.cz

2 Nutné znalosti z pravděpodobnosti a statistiky

U čtenáře předpokládáme znalosti pravděpodobnosti a statistiky na středoškolské úrovni (jak jsou obsaženy například v učebnici [1]). Vybudujeme nyní mírnou nadstavbu nad středoškolskými znalostmi. Nechť Ω značí množinu všech možných výsledků náhodného pokusu. **Náhodná veličina** je funkce $X : \Omega \to \mathbb{R}$, jejíž hodnota je jednoznačně určena výsledkem náhodného pokusu. Označme možné hodnoty X jako $x_1, x_2, \ldots, x_k$. **Pravděpodobnostní funkce náhodné veličiny** X je funkce p, která je definována jako $p(x_i) = P(\{\omega \in \Omega | X(\omega) = x_i\})$ [1]. Jde tedy o pravděpodobnost náhodného jevu, že náhodná veličina nabývá hodnoty x_i. **Střední hodnota náhodné veličiny** X se vypočítá jako

$$E(X) = \sum_{i=1}^{k} x_i p(x_i).$$

Zhruba řečeno, střední hodnota náhodné veličiny udává, jaký asi bude průměr získaných hodnot náhodné veličiny při mnoha opakováních náhodného pokusu.

Pro spolehlivý popis náhodné veličiny potřebujeme znát nejenom střední hodnotu, kolem které se jednotlivé hodnoty soustřeďují, ale také vědět, jak daleko se od tohoto středu rozptylují. **Rozptyl** $D(X)$ je definován jako střední hodnota kvadrátů odchylek od střední hodnoty.

$$D(X) = \sum_{i=1}^{k} (x_i - E(X))^2 p(x_i) = \sum_{i=1}^{k} x_i^2 p(x_i) - E(X)^2.$$

Realizujeme-li N-krát náhodný pokus a označíme-li $X_1, X_2, \ldots, X_N$ realizované hodnoty náhodné veličiny X (hodnoty se mohou opakovat), pak **výběrový (aritmetický) průměr**

$$\overline{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} X_i$$

dobře aproximuje střední hodnotu $E(X)$ pro N dostatečně velké. Dobrým odhadem rozptylu je pak **výběrový rozptyl**

$$s_X^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (X_i - \overline{X})^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} X_i^2 - \overline{X}^2.$$

3 Princip metody Monte Carlo

Hledáme-li hodnotu nějaké veličiny, pak nastávají následující možnosti.

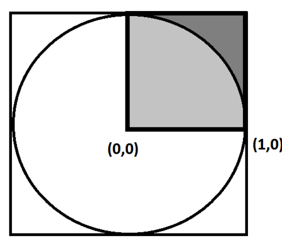
- V nemnoha případech známe explicitní předpis pro zkoumanou veličinu.

[1] Používá se zkrácený zápis $P(X = x_i)$

- V některých případech známe algoritmus, který v konečně mnoha krocích s dostatečnou přesností vypočte hodnotu dané veličiny.
- Ve většině případů neznáme ani vzorec ani algoritmus. Pak je prostor pro metodu Monte Carlo, kdy vytváříme náhodné pokusy tak, aby se jejich výsledky s uspokojivou pravděpodobností blížily hledané hodnotě. Často lze hodnotu veličiny považovat za pravděpodobnost jistého náhodného jevu nebo obecněji za střední hodnotu $E(X)$ nějaké náhodné veličiny X. Jestliže vypočteme N nezávislých realizací $X_1, X_2, \ldots, X_N$ náhodné veličiny X, můžeme odhadnout $E(X)$ pomocí aritmetického průměru $\overline{X}$. Chyba $|E(X) - \overline{X}|$ je úměrná číslu $\frac{s_X}{\sqrt{N}}$ (jde ovšem o pravděpodobnostní odhad chyby). [2]

4 Výpočet Ludolfova čísla π

Určení čísla π metodou Monte Carlo je vhodná motivační úloha. Představme si, že máme čtverec o straně délky 2 se středem $(0,0)$, do něhož je vepsán kruh o poloměru 1. Pro jednoduchost se omezíme na první kvadrant, viz obr. 1. Zvolme



Obrázek 1: Ilustrace odhadu čísla π.

ve čtverci náhodné body, jejichž rozdělení na ploše čtverce je rovnoměrné. [3] Pak pravděpodobnost P, že takto náhodně zvolený bod padne do čtvrtkruhu je rovna podle geometrické definice pravděpodobnosti $P = \frac{S_{\text{čtvrtkruh}}}{S_{\text{malý čtverec}}} = \frac{\pi}{4}$. Při odhadu P budeme postupovat následujícím způsobem. Generujeme $2N$ náhodných čísel $X_1, \ldots, X_N, Y_1, \ldots, Y_N$ s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle 0, 1)$. [4] Dvojice (X_i, Y_i) pak představují souřadnice náhodných bodů ve čtverci.

[2] Tento odhad se získá využitím tzv. Čebyševovy nerovnosti. Pokud zvolíme dostatečně malé α a položíme $\varepsilon = \sqrt{\frac{D(X)}{N\alpha}}$, pak dostaneme odhad $P(|E(X) - \overline{X}| \leq \varepsilon) \geq 1 - \alpha$. Při fixovaném α tedy s pravděpodobností $1 - \alpha$ klesá chyba úměrně $\sqrt{\frac{D(X)}{N}}$. A jelikož odhadem $D(X)$ je s_X^2, dostáváme, že chyba $|E(X) - \overline{X}|$ je úměrná číslu $\frac{s_X}{\sqrt{N}}$ pro dostatečně velké N.

[3] Tento pojem je intuitivní, necháme ho tedy bez přesné definice, která by překračovala rámec středoškolského studia.

[4] Úspěch řešení může záviset na volbě generátoru pseudonáhodných čísel (při počítačových simulacích nepracujeme se skutečně náhodnými čísly získanými z fyzikálních procesů, ale s

Pomocí podmínky $X_i^2 + Y_i^2 < 1$ zjistíme, kolik bodů leží ve čtvrtkruhu. Jejich počet označme N'. Relativní četnost $\frac{N'}{N}$ pak bude odhadem P a **pro číslo** π **dostáváme odhad** $\pi \doteq 4\frac{N'}{N}$ **pro dostatečně velké** N.

Pro formulaci pomocí střední hodnoty definujeme náhodnou veličinu Z, která nabývá hodnoty 1, pokud (X, Y) leží ve čtvrtkruhu, kde X, Y jsou náhodné veličiny rovnoměrně rozdělené na intervalu $\langle 0, 1)$, v opačném případě nabývá hodnoty 0. Potom $E(Z) = 1 \cdot P + 0 \cdot (1 - P) = P$. Jejím odhadem je právě relativní četnost $\frac{N'}{N}$ a odhadem rozptylu $D(Z)$ je $s_Z^2 = \frac{N'}{N} - (\frac{N'}{N})^2 \in \langle 0, \frac{1}{4} \rangle$. Jelikož chyba odhadu klesá úměrně $\frac{s_Z}{\sqrt{N}}$, chceme-li odhad pro π s přesností na 5 desetinných míst, musíme provést řádově 10^{10} náhodných výběrů, proto tato metoda není pro praktický výpočet π s velkou přesností použitelná.

V programu Matlab vypadá skript pro odhad čísla π např. takto:

```
======================
cetnost=0; % cetnost vyskytu nahodnych bodu ve ctvrtkruhu
N=10^8 % pocet nahodnych bodu
for i=1:N
Xi=rand;
Yi=rand;
if Xi^2+Yi^2 <1
cetnost=cetnost+1;
end
end
odhadPi=4*cetnost/N
======================
```

Na základě teorie by měl program při tomto počtu náhodných bodů odhadnout π s chybou menší než $\sqrt{\frac{D(Z)}{0{,}01N}} \doteq \frac{10 s_Z}{\sqrt{N}} = 0{,}0016$ s pravděpodobností větší než 99%. To je v dobrém souladu s výsledky programu: při 100 bězích jsme dostali odhady pro π v rozmezí $3{,}1413$ až $3{,}1421$, přičemž skutečná hodnota π je $3{,}14159\ldots$.

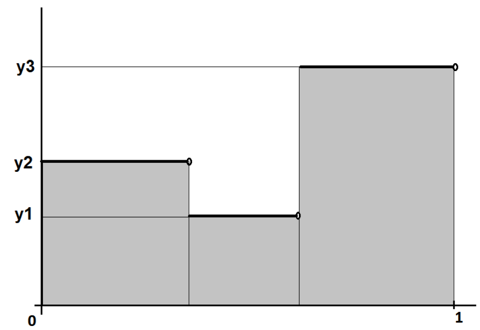
5 Výpočet plochy pod grafem funkce

Mějme nezápornou funkci f na intervalu $\langle a, b \rangle$, která je spojitá nebo má jen konečně mnoho bodů nespojitosti (typu skok). Zajímá nás obsah S plochy pod grafem funkce. Ukážeme dva způsoby výpočtu pomocí metody Monte Carlo [2].

1. Uvažujeme náhodnou veličinu X s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle a, b \rangle$ a náhodnou veličinu Y danou vztahem $Y = f(X)$. Pak pro střední hodnotu veličiny Y platí $E(Y) = \frac{S}{b-a}$. Tomuto vztahu se dá s našimi znalostmi porozumět v případě, kdy f nabývá na $\langle a, b \rangle$ pouze konečně mnoha hodnot $y_1, y_2, \ldots, y_k$. Potom totiž platí $E(Y) = \sum_{i=1}^{k} y_i p(y_i)$. Graf

programy, které na základě nějakých předpisů dávají pseudonáhodná čísla). Uvažování tohoto problému je ale nad rámec našich aktuálních znalostí.

jedné takové funkce je na obr. 2. Věřme, že vztah $E(Y) = \frac{S}{b-a}$ platí i v případě, kdy f nabývá nekonečně mnoha hodnot.



Obrázek 2: Příklad funkce s konečně mnoha skoky a konečným oborem hodnot na intervalu $\langle 0, 1)$.

Z druhé strany střední hodnotu $E(Y)$ náhodné veličiny Y můžeme odhadnout pomocí aritmetického průměru jejích nezávislých N realizací $\overline{Y} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(X_i)$, kde $X_1, X_2, \ldots, X_N$ jsou nezávislé realizace náhodné veličiny X, tj. jsou to náhodná čísla s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle a, b)$. Odhadem rozptylu $D(Y)$ je $s_Y^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(X_i)^2 - \overline{Y}^2$. **Pro obsah plochy tedy dostáváme odhad $S \doteq \frac{b-a}{N}\sum_{i=1}^{N} f(X_i)$ pro dostatečně velké N.**

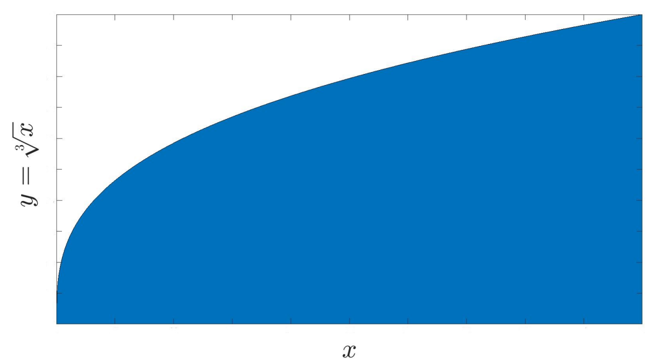
2. Druhá metoda je založena na geometrické definici pravděpodobnosti. Postupujeme tedy analogicky jako při odhadu čísla π. Uvažujeme obdélník o stranách délky $b - a$ a h, který obsahuje graf funkce f. Zvolme v obdélníku náhodné body, jejichž rozdělení na ploše obdélníka je rovnoměrné. Pak pravděpodobnost, že takto náhodně zvolený bod padne do plochy pod grafem funkce f je rovna podle geometrické definice pravděpodobnosti $P = \frac{S}{(b-a)h}$.

   Při výpočtu obsahu S budeme postupovat následujícím způsobem. Generujeme N náhodných čísel X_i s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle a, b)$ a posloupnost N náhodných čísel Y_i s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle 0, h)$. Dvojice (X_i, Y_i) pak představují souřadnice náhodných bodů v obdélníku. Pomocí podmínky $Y_i < f(X_i)$ zjistíme, kolik bodů leží pod grafem funkce f. Jejich počet označme N'. Relativní četnost $\frac{N'}{N}$ pak bude odhadem pravděpodobnosti P a **pro obsah dostáváme odhad $S \doteq (b-a)h\frac{N'}{N}$ pro dostatečně velké N.**

   Pro formulaci pomocí střední hodnoty definujeme náhodnou veličinu Z, která nabývá hodnoty 1, pokud $Y < f(X)$, kde X, Y jsou náhodné veličiny s rovnoměrným rozdělením na $\langle a, b)$, resp. $\langle 0, h)$, v opačném případě nabývá hodnoty 0. Potom platí, že $E(Z) = P$. Jejím odhadem je právě relativní četnost $\frac{N'}{N}$. Odhadem rozptylu $D(Z)$ je $s_Z^2 = \frac{N'}{N} - (\frac{N'}{N})^2$.

Lze ukázat, že druhá metoda má větší nebo v optimálním případě stejný rozptyl jako první metoda, a bývá proto méně přesná. V konkrétních příkladech odhad chyby $\frac{s_Y}{\sqrt{N}}$, resp. $\frac{s_Z}{\sqrt{N}}$ pro ilustraci tohoto faktu počítáme. Ovšem je třeba mít na paměti, že při hodnocení účinnosti metod je třeba uvažovat i jejich časovou náročnost. Tím se může pro složitější funkce stát geometrická metoda výhodnější.

Příklad 1. *Určete obsah plochy pod grafem funkce $f(x) = \sqrt[3]{x}$ pro $x \in \langle 0, 1)$, viz obr. 3. V programu dle své volby implementujte obě výše uvedené metody a porovnejte jejich chybu pro rostoucí počet realizací N.*



Obrázek 3: Graf funkce $f(x) = \sqrt[3]{x}$ na intervalu $\langle 0, 1)$.

1. *V programu Matlab vypadá skript při použití první metody např. takto:*

```
=======================
prumerY=0; % aritmeticky prumer Ȳ
sY2=0; % vyberovy rozptyl
N=10^6; % pocet nahodnych bodu
for i=1:N
Xi=rand;
Yi=nthroot(Xi,3); % dosadime Yi=∛Xi
prumerY=prumerY+(1/N)*Yi;
sY2=sY2+Yi^2/N;
end
odhadS=prumerY % odhad obsahu plochy pod grafem funkce
sY2=sY2-prumerY^2;
sY=sqrt(sY2);
err=sY/sqrt(N) % odhad chyby
=======================
```

2. *V programu Matlab vypadá skript při použití druhé metody např. takto:*

```
=======================
cetnost=0; % cetnost vyskytu nahodnych bodu pod grafem funkce
N=10^6; % pocet nahodnych bodu
for i=1:N
Xi=rand;
Yi=rand;
if Yi< nthroot(Xi,3)
cetnost=cetnost+1;
end
end
odhadS=cetnost/N % odhad obsahu plochy pod grafem funkce
sZ2=odhadS-odhadS^2; % vyberovy rozptyl
sZ=sqrt(sZ2);
err=sZ/sqrt(N) % odhad chyby
=======================
```

Ti z vás, kteří už znají pojem určitý integrál, si mohou odhady získané programy porovnat s přesnou hodnotou $S = \int_0^1 \sqrt[3]{x}dx = \frac{3}{4}$.

Příklad 2. *Určete obsah plochy pod grafem funkce* $f(x) = \frac{\sin x}{x}$ *pro* $x \in (0, 1)$ *a* $f(0) = 1$. *V programu dle své volby implementujte obě výše uvedené metody a porovnejte jejich chybu pro rostoucí počet realizací* N.

Skripty v MATLABu budou vypadat stejně jako v příkladu 1, pouze místo $\sqrt[3]{x}$ *dosadíme v obou případech* $\frac{\sin x}{x}$, *tj. ve skriptu píšeme* sin(Xi)/Xi *místo* nthroot(Xi,3). *Výsledek bude* $0,946$ *s platností na tři desetinná místa (pro* $N = 10^8$*).*

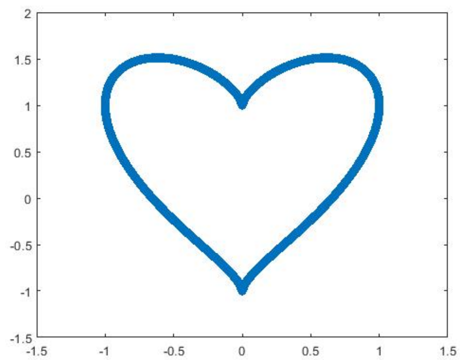
Tentokrát nemůžeme obsah plochy získat vyčíslením integrálu. Jde totiž o funkci, která nemá primitivní funkci zapsatelnou pomocí elementárních funkcí, a neobejdeme se bez použití integrování nekonečných řad.

Příklad 3. *Určete obsah plochy ohraničené spojitou křivkou (obr. 4)*

$$x^2 + (y - \sqrt[3]{x^2})^2 = 1.$$

I v tomto případě lze použít druhou z výše uvedených metod. Výsledek je $3,14$ *s platností na dvě desetinná místa.*
V programu Matlab vypadá skript např. takto:

```
=======================
cetnost=0; % cetnost vyskytu nahodnych bodu uvnitr krivky
N=10^8; % pocet nahodnych bodu
for i=1:N
Xi=-1.5 + 3*rand;
Yi=-1.5 + 3.5*rand;
if Xi^2+(Yi-nthroot(Xi^2,3))^2<1
cetnost=cetnost+1;
```



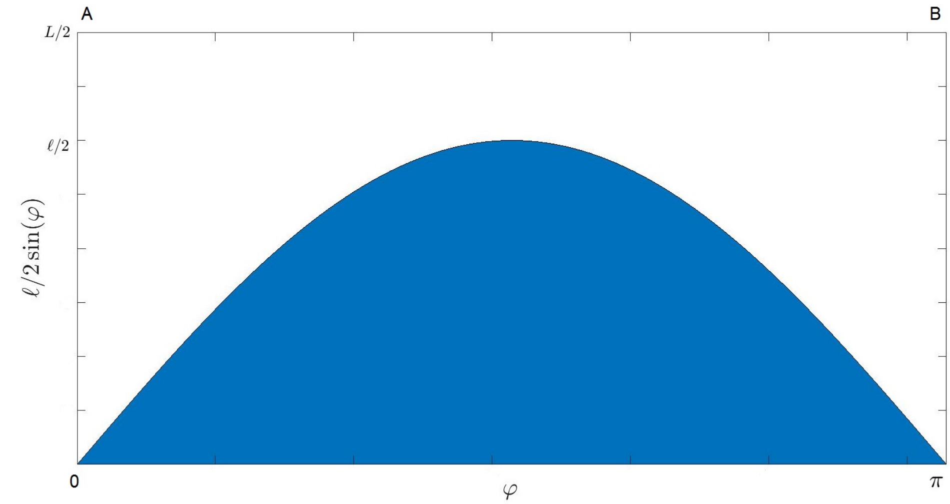
Obrázek 4: Graf křivky $x^2 + (y - \sqrt[3]{x^2})^2 = 1$.

```
end
end
S_obd = 3*3.5; % Obsah obdelnika
odhadS=(cetnost/N)*S_obd % odhad obsahu plochy ohranicene krivkou
=======================
```

6 Buffonova úloha

Tato historická úloha může rovněž posloužit k výpočtu hodnoty čísla π. Navíc ji lze provést jako experiment (např. se zápalkami) o přestávkách ve třídě nebo i v rámci celé školy. [5] V roce 1773 Georges-Louis Leclerc, Comte de Buffon, popsal experiment, který dává do souvislosti číslo π a náhodné jevy. Původně byl problém formulovaný jako hra, kde dva hráči házeli bagetou na podlahu. Vyhrál ten, jehož bageta padla na čáru. Buffon si položil otázku, jaký vliv na hru má délka bagety a vzdálenost čar. Odpověď našel roku 1777. Zjednodušená verze této hry spočívá v házení jehly na rovinu, kde jsou narýsované rovnoběžky, a opakováním takového experimentu lze získat odhad čísla π. Předpokládáme, že sousední rovnoběžky mají mezi sebou vzdálenost L a délka jehly je ℓ, přičemž $\ell < L$ (tedy jehla protne vždy nejvýše jednu přímku). Předpokládáme, že d je vzdálenost středu jehly od nejbližší rovnoběžky a φ značí úhel, který svírá jehla s touto rovnoběžkou. Poloha jehly je tedy daná souřadnicemi (d, φ), kde $0 \leq d \leq \frac{L}{2}$ a $0 \leq \varphi \leq \pi$. Jak si čtenář rozmyslí, jehla protne rovnoběžku, pokud $d \leq \frac{\ell}{2} \sin\varphi$. Příznivé případy jsou znázorněné na obrázku 5 vybarvenou částí. Obdélník $AB0\pi$ má obsah $S_1 = \frac{L}{2}\pi$ a vybarvená plocha má obsah $S_2 = \int_0^\pi \frac{\ell}{2} \sin\varphi \mathrm{d}\varphi = \ell$. (Tento integrál buď umíme spočítat přímo, nebo ho vyčíslíme

[5] 17. prosince 2013 jsme na Jaderce (Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT v Praze) odhadovali Ludolfovo číslo π házením sirek po stole. Podívejte se, jak experiment dopadl a také proč tak dopadl na https://www.youtube.com/watch?v=zmHpm_tuvTg.



Obrázek 5: Ilustrace případů, kdy jehla protne přímku.

pomocí metody Monte Carlo jako obsah plochy pod grafem funkce $\frac{\ell}{2}\sin x$ na intervalu $\langle 0, \pi\rangle$.)

Pravděpodobnost, že jehla protne rovnoběžku, je rovna

$$P = \frac{S_2}{S_1} = \frac{\ell}{\frac{L}{2}\pi} = \frac{2\ell}{L\pi}.$$

Při praktickém pokusu můžeme pro jednoduchost volit vzdálenost rovnoběžek rovnu dvojnásobku délky jehly (nebo sirky apod.). Pravděpodobnost je pak přímo rovna $\frac{1}{\pi}$. My ji odhadneme relativní četností $\frac{N'}{N}$, kde N' je počet hodů, kdy jehla protla některou rovnoběžku, a N je počet všech hodů, přičemž N je třeba volit dostatečně velké.

Reference

[1] Calda E., Dupač V., *Matematika pro gymnázia: Kombinatorika, pravděpodobnost, statistika*, Prometheus, Praha, 1996. ISBN 80-85849-10-0.

[2] Dřímal J., Trunec D., Brablec A., *Úvod do Metody Monte Carlo*, skripta, Masarykova univerzita, Brno, 2006, http://www.physics.muni.cz/~trunec/mc.pdf.

[3] Fabian F., Kluiber Z., *Metoda Monte Carlo a možnosti jejího uplatnění*, PROSPEKTRUM s.r.o., Praha, 1998. ISBN 80-7175-058-1.

[4] Frýbort J., *Monte Carlo není jenom hazard*, Rozhledy matematicko-fyzikální **86(3)** (2011), 4–12.

[5] Malijevský Alexander, Kluiber Z., Obdržálek J., Malijevský Anatol, *Monte Carlo, stavové rovnice a tuhé koule*, Pokroky matematiky, fyziky a astronomie **40(2)** (1995), 88–95.