8 Monte-Carlo metoda

Pod Monte-Carlo metodou se rozumí, že namísto systematického (a obvykle zdlouhavého) procházení nějakého parametrického prostoru využíváme náhodně generované body a hledané vlastnosti našeho systému určíme statisticky.[34] V tomto cvičení zúročíme veškeré dosavadní zkušenosti s náhodnými čísly a budeme ze zabývat zejména integrací Monte-Carlo.

Možná jste se již setkali se problémem tzv. Buffonovy jehly: ppomocí náhodného házení jehly (či jakékoliv tyčky) na síť rovnoběžných čar nakreslenou na zemi lze určit číslo π,

$$\pi \approx \frac{2l}{h}\frac{N_{\text{zásah}}}{N_{\text{celkem}}}, \tag{78}$$

kde h je vzdálenost čar, $l \leq h$ délka jehly, N_{celkem} celkový počet hodů a $N_{\text{zásah}}$ počet hodů, při kterých jehla po dopadu kříží nějakou z čar. Buffonova jehla je názorné experimentální použití metody Monte-Carlo, konkrétně varianty nazývané hit-and-miss. Té jsme se již dotkli v sekci 7.3 a nyní si rozebereme podrobněji.

Úkol 8.1: *Metodou Monte-Carlo vyřešte tzv. narozeninový problém: Uvažujte skupinu n lidí. Jaká je pravděpodobnost, že dva lidi ve skupině budou mít narozeniny ve stejný den? Úloha se samozřejmě dá vyřešit exaktně, ale zkuste si úlohu vyřešit metodou Monte-Carlo: Pokud nagenerujete náhodně N_{celkem}-krát narozeniny n lidí a označíte $N_{zásah}$ případy, kdy alespoň dvoje narozeniny padnou na stejný den, bude podle zákona velkých čísel hledaná pravděpodobnost rovna*

$$p \approx \frac{N_{zásah}}{N_{celkem}} \tag{79}$$

(rovnost by nastala pro $N_{celkem} \to \infty$). Naprogramujte tuto úlohu a určete,

1. *jaká je pravděpodobnost pro skupinu 30 lidí a*
2. *jak velkou skupinu potřebujete, aby byla pravděpodobnost alespoň 30%.*

8.1 Hit-And-Miss

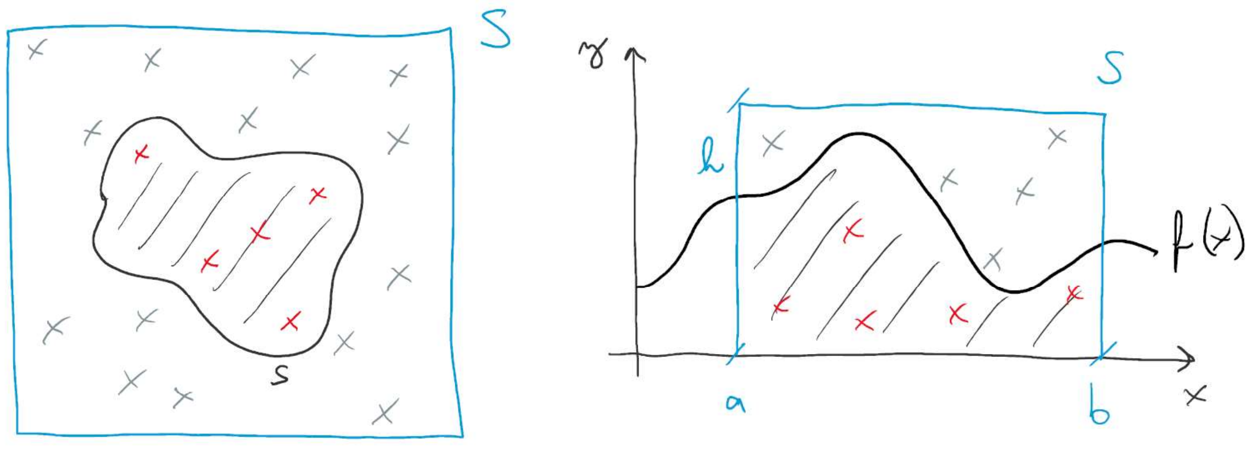
Tato metoda spočívá v jednoduché aplikaci zákona velkých čísel. Její esence je načrtnuta na obrázku 10. Uvažujme nejprve, že chceme změřit plochu s černého obrazce složitého tvaru znázorněného na panelu (a). Obrazec vepíšeme do jiného jednoduchého obrazce, jehož plochu S známe (nejčastěji obdélník, případně kruh). Poté do tohoto obrazce S náhodně „házíme“ body (křížky) a počítáme, kolikrát se trefíme do černého obrazce (červené křížky). Neznámá hledaná plocha s je pak při již použitém značení

$$s \approx S\frac{N_{\text{zásah}}}{N_{\text{celkem}}}. \tag{80}$$

Analogicky postupujeme při integrování, což je ukázáno na panelu (b). Integrál v mezích (a, b) je plocha pod křivkou funkce $f(x)$ (na obrázku černě vyšrafovaná plocha ohraničená zespodu osou x, shora funkcí $f(x)$ a ze stran modrými čarami $x = a$ a $x = b$). Uvedenou oblast vepíšeme do obdélníku o hranách $l = b - a$ a h s plochou $S = (b - a)h$ a stejnou metodou jako u panelu (a) a pomocí stejného vzorce jako je (80) vypočítáme hodnotu integrálu:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx S\frac{N_{\text{zásah}}}{N_{\text{celkem}}} = (b-a)h\frac{N_{\text{zásah}}}{N_{\text{celkem}}}. \tag{81}$$

[34] Monte Carlo je oblast Monaka, ve kterém se nacházely a doposud nacházejí slavná kasina. Odtud název.



(a) (b)

Obrázek 10: Metoda hit-and-miss (a) pro výpočet plochy složitého obrazce a (b) pro výpočet integrálu jednorozměrné funkce. Podrobnosti k obrázku jsou uvedeny v textu.

8.1.1 Chyba

Počet zásahů je vlastně počet nezávislých „hodů“, kterými se trefíme do oblasti, jejíž plochu S hledáme. Pokud budeme opakovat metodu hit-and-miss s fixním N_{celkem}, bude mít náhodná veličina $N_{\text{zásah}}$ Poissonovo rozdělení se střední hodnotou (68) a rozptylem (69)

$$\lambda = \mathrm{E}\left[N_{\text{zásah}}\right] = \sigma^2_{N_{\text{zásah}}}. \tag{82}$$

Budeme-li mít jen jednu realizaci s dostatkem zásahů, můžeme střední hodnotu odhadnout pomocí této realizace, $\mathrm{E}\left[N_{\text{zásah}}\right] \approx N_{\text{zásah}}$ a absolutní chybu odhadneme směrodatnou odchylkou

$$\Delta N_{\text{zásah}} = \sqrt{\sigma^2_{N_{\text{zásah}}}} \approx \sqrt{N_{\text{zásah}}}. \tag{83}$$

Relativní chyba pak je

$$\delta N_{\text{zásah}} = \frac{\Delta N_{\text{zásah}}}{N_{\text{zásah}}} \approx \frac{1}{\sqrt{N_{\text{zásah}}}}. \tag{84}$$

Tento vzorec platí i pro relativní chybu ve výpočtu plochy (80) či integrálu (81).

Jelikož $N_{\text{zásah}} \propto N_{\text{celkem}}$, z uvedených úvah vyplývá, že

- relativní chyba klesá jako převrácená hodnota odmocniny celkového počtu pokusů N_{celkem} a
- chceme-li zpřesnit výsledek získaný touto metodou desetkrát, musíme zestonásobit počet pokusů.

V praxi za použití běžných výpočetních prostředků lze dosáhnout nanejvýš $N_{\text{celkem}} \approx 10^{10}$, což dá výsledek s relativní chybou minimálně $\delta \approx 10^{-5}$, tj. pět desetinných míst.

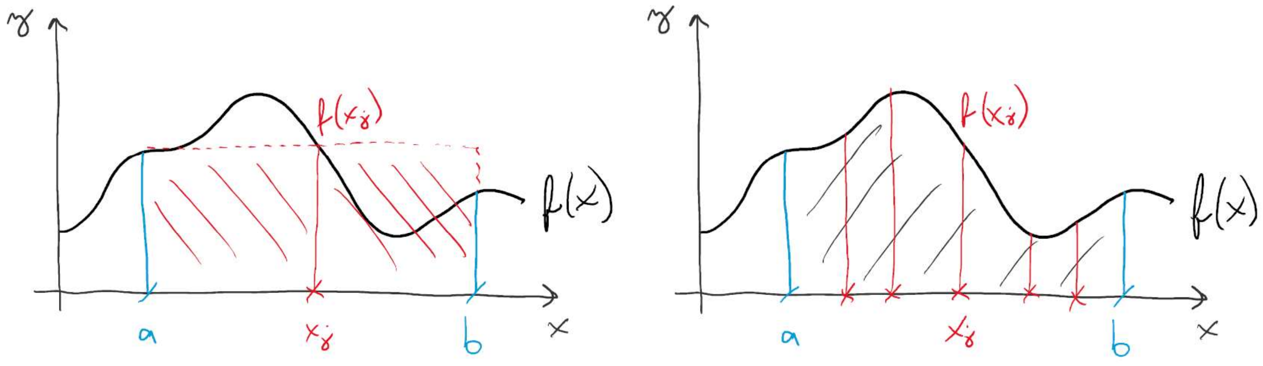
8.1.2 Použití

Integrace pomocí metody hit-and-miss se nepoužívá, jelikož je příliš neefektivní. K jejímu úspěšnému použití totiž musíme znát maximum funkce na zadaném intervalu, abychom efektivně určili výšku obdélníku h, a obecně je $N_{\text{zásah}}/N_{\text{celkem}}$ velmi malé číslo (funkce mají dlouhý chvost nebo jsou příliš vysoké), většina „hodů“ jde tedy mimo a i při jejich velkém množství získáme málo zásahů, a tudíž velkou chybu podle vztahu (84).

Na druhou stranu se tato metoda hodí k výpočtu povrchů, objemů či hyperobjemů v případě vícerozměrných objektů.

Úkol 8.2: *Vytvořte program na výpočet objemu d-rozměrné jednotkové koule metodou Monte-Carlo.*[35] *Pro jakou dimenzi bude tento objem největší číslo?*

8.2 Monte-Carlo integrace



(a) (b)

Obrázek 11: Monte-Carlo integrace. Vysvětlení je v hlavním textu.

Pro hledání integrálu je mnohem efektivnější metoda, již lze vysvětlit pomocí obrázku 11. Uvažujme neprve, že známe pár hodnot $(x_j, f(x_j))$, nic víc, nic míň. Na základě těchto hodnot můžeme učinit pouze velmi hrubý odhad integrálu, a to jako plochu červeně vyšrafovaného obdélníku jako na panelu (a),

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(x_j). \tag{85}$$

Pokud budeme mít párů hodnot $(x_j, f(x_j))$ více, jak je znázorněno na panelu (b), vezmeme za odhad hodnoty integrálu průměr ploch takovýchto obdélníků,

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(b-a)f(x_j) = \frac{b-a}{N}\sum_{j=1}^{N} f(x_j). \tag{86}$$

V právě uvedeném postupu tkví je podstata integrace Monte-Carlo. Obecně platí, že pokud hodnoty x_j vybíráme z rozdělení s hustotou pravděpodobnosti $\rho(x)$, je integrál odhadnutý výrazem

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{f(x_j)}{\rho(x_j)}, \tag{87}$$

přičemž nejvhodnější je volit takové pravděpodobnostní rozdělení, jehož hustota pravděpodobnosti co nejlépe kopíruje integrovanou funkci.[36] V praxi, jelikož na funkci nejčastěji pohlížíme jako na „černou skříňku“ a o jejím průběhu nic nevíme, se jako nevhodnější jeví volit rovnoměrné rozdělení s hustotou pravděpodobnosti (61), která po dosazení dá předchozí vzorec (86).

[35]Pod 1-rozměrnou jednotkovou koulí rozumíme úsečku délky 2, pod 2-rozměrnou jednotkovou koulí jednotkový kruh. Povrch jednotkového kruhu je $S = \pi$, výsledek lze tedy použít i k určení čísla π, aniž byste museli házet Buffonovou jehlou.

[36]Tento postup se nazývá *importance sampling.*

Chybu metody integrace lze odhadnout pomocí směrodatné odchylky

$$\Delta \equiv \sigma = \sqrt{\overline{f^2} - \overline{f}^2}, \tag{88}$$
$$\overline{f^2} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} f^2(x_j),$$
$$\overline{f}^2 = \left[\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} f(x_j)\right]^2.$$

Úkol 8.3: *Metodou Monte-Carlo spočítejte integrály*

$$I_1 \equiv \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-x} \sin x \,\mathrm{d}x, \tag{89}$$
$$I_2 \equiv \int_0^{\sqrt{10\pi}} \frac{\sin x^2}{\sqrt{1+x^4}} \mathrm{d}x. \tag{90}$$

První integrál má analytické vyjádření, které si můžete odvodit a porovnat s hodnotou získanou Monte-Carlo integrací; druhý integrál lze spočítat pouze numericky. Metodu můžete otestovat i na jiných známých integrálech.

Síla metody Monte-Carlo se naplno projeví při výpočtu vícerozměrných integrálů. Jak bylo ukázáno, chyba metody závisí jen na celkovému počtu pokusů $N = N_{\text{celkem}}$. Zatímco u jiných metod při požadování určité dané přesnosti výsledku drasticky narůstá časová složitost integrace s rostoucí dimenzí integrované funkce, u Monte-Carla časová složitost na dimenzi závisí jen nepatrně. Ve více rozměrech bývá navíc integrační oblast složitější, k čemuž lze využít metodu hit-and-miss. To se nejlépe ukáže na příkladu.

Úkol 8.4: *Spočítejte čtyřrozměrný integrál*

$$I_3 \equiv \int_{\Omega} \sin \sqrt{\ln(x+y+z+w+2)} \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z \,\mathrm{d}w, \tag{91}$$

kde integrační oblast je hyperkoule

$$\Omega : \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(z - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(w - \frac{1}{2}\right)^2 \leq \frac{1}{4}. \tag{92}$$

Při výpočtu postupujte tak, že nejprve danou hyperkouli vepíšete do hyperkvádru (či hyperkrychle) známých rozměrů, a tudíž známého objemu V. Poté pro náhodně zvolený bod v hyperkvádru určíte, zda se trefí do hyperkoule Ω či nikoliv. Pokud ano, spočítáte funkční hodnotu integrandu v tomto bodě. Jedná se tedy o kombinaci integrace (86) a metody hit-and-miss. Budete-li si uchovávat počet hodů N_{celkem} a počet zásahů $N_{zásah}$, získáte jako vedlejší produkt objem integrační hyperoblasti pomocí vzorce (80).