O METÓDE MONTE CARLO A MOŽNOSTIACH JEJ APLIKÁCIÍ

prof. RNDr. Dušan Knežo, CSc.
Technická univerzita v Košiciach
Strojnícka fakulta
Katedra aplikovanej matematiky ainformatiky
Letná 9, 042 00 Košice
e-mail: dusan.knezo@tuke.sk

Abstract

There are often investigated processes with a random character in the biomedical engineering, as well as in other areas. One of the methods, which enable a simulation of such processes, is the Monte Carlo method. There is presented in this paper description of the Monte Carlo method and its application possibilities for a CA-simulation of the random processes.

Key words: random process, Monte Carlo method

ÚVOD

Pri skúmaní procesov a systémov, ktoré podliehajú náhodným vplyvom, je jednou z možností skúmania simulácia týchto procesov a systémov. V mnohých takýchto prípadoch je možné ako metódu skúmania využiť metódu Monte Carlo, ktorá sa opiera o generovanie náhodných, resp. pseudonáhodných čísel.

Z HISTÓRIE METÓDY

Korene metódy Monte Carlo siahajú až do osemnásteho storočia a spájajú sa s tzv. Buffonovou úlohou.

Prvé použitie metódy sa pripisuje Johnovi von Neumannovi a Stanislavovi Ulamovi, ktorí sa pri vývoji atómovej bomby skúmali správanie sa neutrónov pri prenikaní nejakou látkou, napr. vodou. Vychádzali pri tom zo známeho faktu, že pri zrážke neutrónu s atómom vodíka dôjde k pohlteniu neutrónu v priemere v jednom zo sto prípadov. Pre simuláciu výsledku zrážky neutrónu s atómom vodíka použili formálne ruletu (odtiaľ zrejme názov metódy) rozdelenú na sto políčok, pričom iba jedno políčko predstavovalo takú zrážku, pri ktorej došlo k pohlteniu neutrónu. Ostané políčka predstavovali situáciu, keď po zrážke neutrón pokračuje v pohybe. Aj pre simuláciu parametrov ďalšieho pohybu neutrónu, napr. rýchlosť, smer pohybu, veľkosť dráhy, ktorú neutrón prejde do ďalšej zrážky, použili formálne rulety.

Simulácia navrhnutá Johnom von Neumannom a Stanislavom Ulamom je teda založená na generovaní náhodných čísel. Samozrejme, realizácia takejto simulácie pomocou rulety je časovo taká náročná, že jej využitie pri riešení problémov je prakticky nemožné.

So skonštruovaním prvých počítačov však metóda nadobudla na význame a začala sa výrazne rozvíjať. Softvérové generovanie náhodných, resp. pseudonáhodných čísel umožnilo aplikácie metódy v mnohých oblastiach.

CHARAKTERISTIKA METÓDY

Metóda Monte Carlo slúži na riešenie stochastických i deterministických úloh pomocou simulácie mnohokrát opakovaných náhodných pokusov.

Princíp metódy Monte Carlo môžeme zhrnúť v troch bodoch:

- vytvorenie modelu, ktorý dostatočne presne popisuje skúmaný objekt (proces, systém atď.),
- simulácia veľkého množstva experimentov v súlade s modelom založená na generovaní náhodných, resp. pseudonáhodných čísel,
- štatistické vyhodnotenie simulácie.

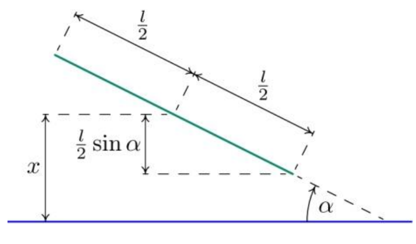
Existujú dva prístupy pri riešení úloh metódou Monte Carlo:

- prístup založený na geometrickej pravdepodobnosti,
- prístup založený na odhade strednej hodnoty náhodnej veličiny.

Možnosti využitia metódy si predstavíme na riešení niekoľkých problémov.

BUFFONOVA ÚLOHA

Na linajkový papier náhodne hádžeme ihlu a chceme určiť, aká je pravdepodobnosť, že ihla dopadne tak, že pretína niektorú z čiar, ktoré tvoria linajky. Predpokladajme, že vzdialenosť čiar na papieri je d a dĺžka ihly je l, pričom $l < d$. Z poslednej nerovnosti je zrejmé, že ihla môže pretínať nanajvýš jednu čiaru. Polohu ihly po dopade na papier vieme jednoznačne popísať usporiadanou dvojicou čísel $[x, \alpha]$, pričom x predstavuje vzdialenosť stredu ihly od najbližšej čiary a α je ostrý uhol, ktorý zviera táto čiara s priamkou, v ktorej leží ihla (obr. 1).



Obr. 1 Poloha ihly a čiary

Pre dvojicu $[x, \alpha]$ platí

$$0 \le x \le \frac{d}{2}, \qquad 0 \le \alpha \le \frac{\pi}{2}. \qquad (1)$$

Z obrázku 1 je zrejmé, že ihla pretne čiaru v prípade, ak platí

$$x \le \frac{l}{2}\sin\alpha\,. \qquad (2)$$

Z predpokladu, že každá poloha ihly po dopade je rovnako možná, vyplýva, že hádzanie ihly môžeme simulovať tak, že budeme generovať usporiadané dvojice náhodných čísel $[x, \alpha]$, pričom náhodná veličina x podlieha rovnomernému rozdeleniu pravdepodobnosti s hustotou

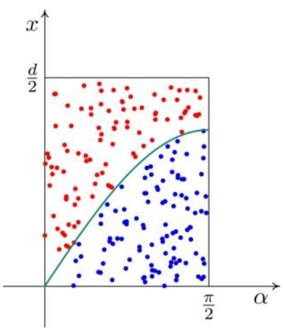
$$f_x(x) = \begin{cases} \frac{2}{d}, & x \in \langle 0; d/2 \rangle, \\ 0, & \text{inak}, \end{cases}$$

a náhodná veličina α podlieha rovnomernému rozdeleniu pravdepodobnosti s hustotou

$$f_\alpha(\alpha) = \begin{cases} \frac{2}{\pi}, & \alpha \in \langle 0; \pi/2 \rangle, \\ 0, & \text{inak}. \end{cases}$$

Vygenerované údaje slúžia pre ďalšie štatistické spracovanie. Ak vychádzame z klasickej definície pravdepodobnosti a Bernoulliho vety, tak s rastúcim počtom pokusov, resp. simulácií pokusov, sa bude relatívna početnosť pokusov, pri ktorých ihla pretína čiaru, približovať teoretickej pravdepodobnosti. Vyhodnocovanie jednotlivých pokusov vykonáme tak, že pokus pokladáme za úspešný, t.j. ihla pretína čiaru, ak bude vygenerovaná dvojica čísel $[x, \alpha]$ spĺňať vzťah (2).

Na obr.2 sú graficky zobrazené výsledky simulácií 200 pokusov pre hodnoty $d = 4$ a $l = 3$.



Obr. 2 Výsledky simulácií 200 pokusov

V tabuľke 1 sú uvedené výsledky simulácií pokusov pre hodnoty $d = 4$ a $l = 3$, pričom n predstavuje počet vykonaných pokusov, m počet úspešných pokusov a podiel m/n je príslušná relatívna početnosť.

Tab. 1: Výsledky simulácií

n	10^6	10^7	10^8
m	477 119	4 774 023	47 748 999
m/n	0,477119	0,4774023	0,47748999

Dá sa ukázať, že pre teoretická pravdepodobnosť p toho, že ihla pretne nejakú čiaru platí

$$p = \frac{2l}{\pi d}.$$

V našom prípade, pre hodnoty $d = 4$ a $l = 3$, je $p = 0{,}4774648$. Porovnaním tejto hodnoty a hodnôt v tabuľke 1 vidíme, že štatisticky získaná hodnota pravdepodobnosti je skutočne blízka hodnote teoretickej pravdepodobnosti.

V tomto prípade sme použili prístup založený na geometrickej pravdepodobnosti. Pravdepodobnosť náhodného javu A je daná vzťahom

$$p(A) = \frac{\mu(G)}{\mu(\Omega)},$$

kde $\mu(G)$ je miera množiny zodpovedajúcej náhodnému javu A a kde $\mu(\Omega)$ je miera množiny zodpovedajúcej priestoru elementárnych javov. V našom prípade je

$$\Omega = \left\{[x,\alpha]; 0 \le x \le \frac{d}{2}, 0 \le \alpha \le \frac{\pi}{2}\right\},$$

$$G = \left\{[x,\alpha];\ [x,\alpha] \in \Omega, x \le \frac{l}{2}\sin\alpha\right\}.$$

Pri použití metódy sme vychádzali zo skutočnosti, že

$$p(A) = \frac{\mu(G)}{\mu(\Omega)} = \lim_{n\to\infty} \frac{m}{n}.$$

VÝPOČET URČITÉHO INTEGRÁLU

Jedným z typických problémov, ktoré môžeme riešiť metódou Monte Carlo s prístupom založenom na odhade strednej hodnoty náhodnej veličiny je experimentálne určenie hodnoty určitého integrálu.

Predpokladajme, že chceme metódou Monte Carlo určiť približnú hodnotu určitého integrálu

$$\int_a^b g(x)\,dx. \qquad (3)$$

Ak x je náhodná premenná s hodnotami z intervalu $\langle a, b \rangle$, ktorej hustota pravdepodobnosti je $f(x)$, tak integrál môžeme upraviť nasledovne

$$\int_a^b g(x)\,dx = \int_a^b g_1(x) \cdot f(x)\,dx. \qquad (4)$$

kde

$$g_1(x) = \frac{g(x)}{f(x)}.$$

Zo vzťahu (4) je zrejmé, že hodnota integrálu (3) je rovná strednej hodnote $g_1(x)$ a pre túto hodnotu môžeme použiť bodový odhad

$$\int_a^b g(x)\,dx = E\big(g_1(x)\big) = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} g_1(x_i),$$

kde hodnoty $x_1, x_2, \cdots, x_n$ sú vygenerované náhodné čísla z rozdelenia s hustotou $f(x)$.

Ak uvedený postup aplikujeme pre výpočet integrálu

$$\int_0^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}\,dx,$$

tak v prípade voľby rovnomerného rozdelenia s hustotou

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & x \in \langle 0; 2 \rangle, \\ 0, & \text{inak}, \end{cases}$$

dostávame odhad

$$I = \int_0^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}\,dx = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} 2e^{-\frac{1}{2}x_i^2}.$$

V tab. 2 sú uvedené výsledky pre rôzne hodnoty počtov vygenerovaných náhodných čísel.

Tab. 2 Výsledky experimentálneho určenia hodnoty integrálu

n	10^6	10^7	10^8
I	1,1966860	1,1964708	1,1962620

APLIKÁCIA METÓDY PRI ODHADE NÁKLADOV NA VYDANÉ PROTETICKÉ A ORTOTICKÉ POMÔCKY

Hodnota vydaných, resp. predaných protetických a ortotických pomôcok podlieha mnohým náhodným vplyvom, a preto je pri jej odhade jednou z možností použiť metódu Monte Carlo (pozri [5]).

Vychádzame z praktických údajov o počte a hodnote vydaných, resp. predaných protetických a ortotických pomôcok za rok 2011 vo vymedzenom regióne Slovenska. Zo získaných údajov boli vybrané len údaje týkajúce sa štyroch základných kategórií pomôcok:

- obuv a ortetické vložky,
- mäkké ortézy dolných a horných končatín,
- dlahy dolných a horných končatín,
- trupové ortézy.

V týchto kategóriách bolo vo vybranom regióne vydaných celkom 5 620 pomôcok o celkovej hodnote 666 059 €.

Za prepokladu, že počet vydaných pomôcok v roku podlieha Poissonovmu rozdeleniu pravdepodobnosti s parametrom $\lambda = 56$ (počet pomôcok vyjadrený v stovkách), teda

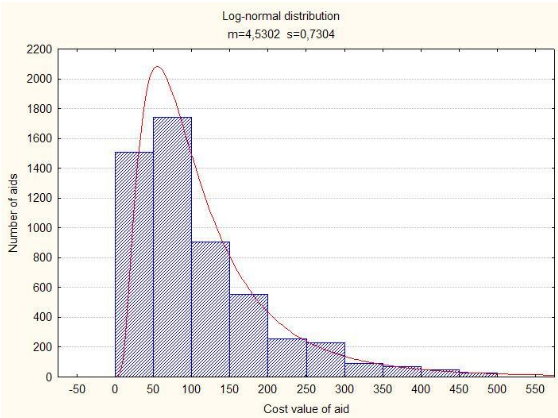
$$P(x = k) = \frac{56^k \cdot e^{-56}}{k!}, \qquad (5)$$

sme vygenerovali 100 náhodných hodnôt $N_1, N_2, \cdots, N_{100}$ podliehajúcich Poissonovmu rozdeleniu danému vzťahom (5). Tieto hodnoty predstavujú počty vydaných pomôcok pre rôznych 100 rokov. Generovanie náhodných hodnôt bolo vykonané v dvoch krokoch:

- generovanie náhodného čísla p z intervalu $\langle 0,1 \rangle$,
- určenie nezáporného celého čísla x spĺňajúceho podmienku $x = F^{-1}(p)$, kde F^{-1} je inverzná funkcia ku distribučnej funkcii Poissonovho rozdelenia s parametrom $\lambda = 56$.

V ďalšom kroku sme odhadli, z akého rozdelenia (vrátane parametrov) pochádzajú naše údaje z praxe. Testovaním sme došli k záveru, že empirické údaje sú z logaritmicko-normálneho rozdelenia s parametrami $\mu = 4{,}5302$ a $\sigma = 0{,}7304$ (pozri obrázok 3), teda s hustotou pravdepodobnosti

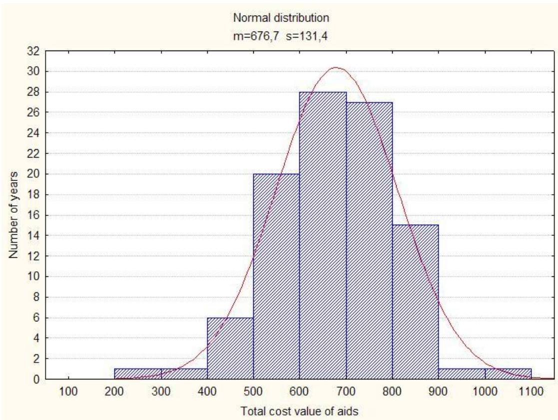
$$f(x) = \frac{1}{0{,}7304x\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln x - 4{,}5302}{0{,}7304}\right)^2}, x > 0. \qquad (6)$$



Obr. 3 Histogram počtov vydaných pomôcok [5]

Pre každú z hodnôt $N_1, N_2, \cdots, N_{100}$ sme vygenerovali N_i náhodných hodnôt podliehajúcich logaritmicko-normálnemu rozdeleniu s hustotou danou vzťahom (6), ktoré predstavujú hodnoty $P_1, P_2, \cdots, P_{N_i}$ jednotlivých vydaných pomôcok v jednotlivých rokoch. Postupovali sme pri tom podobne, ako pri generovaní údajov o počte pomôcok.

V ďalšom kroku boli vypočítané súčty hodnôt (v tisíckach €) $S_1, S_2, \cdots, S_{100}$ vydaných pomôcok pre jednotlivé roky a odhadli sme, z akého rozdelenia pochádzajú údaje o súčtoch hodnôt. Testovaním sme došli k záveru, že údaje o súčtoch hodnôt podliehajú normálnemu rozdeleniu s parametrami $\mu = 676{,}7$ a $\sigma = 131{,}4$. Na základe toho je možné stanoviť intervalové, ale i iné odhady hodnoty vydaných pomôcok v danom regióne, ktoré môžu poslúžiť ako základ pri plánovaní výrobných a skladovacích kapacít, a tiež pri finančných nákladov súvisiacich so zabezpečením pomôcok v potrebnom rozsahu.



Obr. 4 Histogram celkovej hodnoty pomôcok vydaných za rok [5]

ZÁVER

Metóda Monte Carlo predstavuje všade tam, kde skúmame procesy alebo systémy podliehajúce náhodným vplyvom silný nástroj. Jej sila výrazne vzrástla s prudkým rozvojom výpočtovej techniky, pomocou ktorej, na rozdiel od minulosti, nie je problém generovať veľké počty náhodných, resp. pseudonáhodných čísel.

Literatúra

[1] Buslenko, N. P., Šrejder, J. A.: Stochastické početní metody, Praha, Státní nakladatelství technické literatury, 1965.

[2] Fabian, F., Kluiber, Z.: Metoda Monte Carlo : možnosti jejího uplatnění. 1.vyd., Praha, Prospektrum, 1998, ISBN 80-7175-058-1.

[3] Glasserman, P.: Monte Carlo methods in financial engineering. 1st ed. New York, Springer, 2004. 596 s. ISBN 0-387-00451-3.

[4] Hurt, J.: Simulační metody, Praha, Státní pedagogické nakladatelství, 1982.

[5] Knežo, D.: Estimation of costs concerning prothetic and orthotic aids using the Monte Carlo method, International Conference on Applied Electrical Engineering and Informatics 2012, p. 145-148, Germany, 2012, ISBN 978-80-553-1030-5.

[6] Kunderová, P.: Úvod do teorie pravděpodobnosti a matematické statistiky, Olomouc, 2004.

[7] Sobol, I. M.: Die Monte-Carlo-Methode, Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1971.

[8] Virius, M.: Aplikace matematické statistiky : metoda Monte Carlo. 1. vyd. Praha, České vysoké učení technické, 1991, ISBN 80-01-00057-5