

Univerzita Hradec Králové

Přírodovědecká fakulta

Katedra matematiky

Metoda Monte Carlo

Bakalářská práce

Autor: Gabriela Krejcarová
Studijní program: B 1103 Aplikovaná matematika
Studijní obor: Finanční a pojistná matematika
Vedoucí práce: Mgr. Jitka Kühnová, Ph.D.

Prohlášení:

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracovala samostatně a že jsem v seznamu použité literatury uvedla všechny prameny, z kterých jsem vycházela.

V Hradci Králové dne 28.6.2016

Gabriela Krejcarová

Anotace

KREJCAROVÁ, G. **Metoda Monte Carlo**. Hradec Králové, 2016. Bakalářská práce na Přírodovědecké fakultě Univerzity Hradec Králové. Vedoucí bakalářské práce Mgr. Jitka Kühnová, Ph.D.. 43 p.

Cílem práce bude pojednat o metodě Monte Carlo, která k hledání řešení úloh různého typu používá statistickou simulaci náhodných jevů. Protože různých aplikací této metody je velké množství, soustředí se práce jen na některé z nich, zejména na odhady hodnot parametrů nebo výpočty integrálů. Kromě samotného popisu metody Monte Carlo bude v práci přiblíženo historické pozadí jejího vzniku. V praktické části práce budou popsány metody simulovány pomocí jazyka R.

Klíčová slova

Monte Carlo, generování náhodných čísel, Ludolfovo číslo, integrál, jazyk R

Annotation

KREJCAROVÁ, G. **Monte Carlo method**. Hradec Králové, 2016. Bachelor thesis at Faculty of Science University of Hradec Králové. Thesis Supervisor Mgr. Jitka Kühnová, Ph.D.. 43 p.

An aim of the thesis is to describe Monte Carlo method, which uses statistic simulation of random events for finding the solution of different problems. The thesis focus on some of the applications of this method, especially on estimation of parameter values or integral calculation. In this thesis we can see a description of this method and its history. Described methods are simulated using R language.

Keywords

Monte Carlo, random number generation, Ludolf's number, integral, R language

Obsah

Úvod	6
1 Metoda Monte Carlo	7
1.1 Úvod do teorie	7
1.2 Podstata metody Monte Carlo	12
1.3 Historie metody Monte Carlo	17
2 Odhad Ludolfova čísla	19
2.1 Buffonova úloha	19
2.2 Poměr obsahu plochy čtverce a kruhu	21
3 Výpočet jednorozměrného integrálu metodou Monte Carlo	25
3.1 Metoda relativní četnosti	26
3.1.1 Základní funkce	26
3.1.2 Postup pro funkci $g(x)$ na množině $\langle 0, 1 \rangle \times \langle 0, 1 \rangle$	26
3.1.3 Transformace obecné funkce $h(x)$	29
3.1.4 Postup pro nezápornou funkci $f(x)$	32
3.2 Metoda střední hodnoty funkce náhodné veličiny	33
Závěr	41
Seznam použité literatury	42

Úvod

Pro řešení široké škály problémů v různorodých oborech se dnes používá spolu s výpočetní technikou numerická matematika. Často by tyto úlohy nebyly vůbec řešitelné, avšak některé metody nám pomáhají dospět alespoň k přibližným výsledkům. Právě jednou z nich je statistická metoda Monte Carlo, o které tato práce pojednává. Hlavním cílem je přiblížit čtenářům princip metody a ukázat i její praktické využití s pomocí generování náhodných čísel v jazyce R.

Práce je rozdělena na teoretickou část metody Monte Carlo, která je popsána v první kapitole, a na praktickou část, která je rozdělena do dvou kapitol – Odhad Ludolfova čísla a Výpočet jednorozměrného integrálu. Práci pro názornost doplňují obrázky, které jsou vypracované v programu Geogebra.

Abychom mohli vůbec vysvětlit podstatu metody, je nutné nejprve zmínit základní vztahy z oblasti pravděpodobnosti a statistiky [1], [2], [3], [4], [5]. Dále je v práci zpracována hlavní myšlenka a postup metody Monte Carlo podle [6], [7] a [8]. Konec první kapitoly je věnován historii metody [9], [7], která začala už v roce 1777. Přesnější formulaci získala potom v průběhu druhé světové války pro vyřešení problémů „života neutronu“, avšak zde její využití nekončí.

V druhé kapitole si řekneme o způsobu odhadnutí Ludolfova čísla π metodou Monte Carlo [9] [7] a ukážeme si konkrétní aplikaci tohoto problému v jazyce R.

Třetí kapitola je věnována vypočtení několika typů jednorozměrných integrálů [2], [5], které opět odhadneme pomocí jazyka R a můžeme sledovat, jak se naše výsledky mění s narůstajícím počtem vygenerovaných náhodných čísel.

Kapitola 1

Metoda Monte Carlo

1.1 Úvod do teorie

Než ukážeme, v čem spočívá podstata metody Monte Carlo, zdefinujeme si některé pojmy, se kterými se budeme v průběhu práce potkávat.

Jevové pole: Mějme neprázdnou množinu Ω . Systém podmnožin \mathcal{A} množiny Ω nazveme jevové pole, jestliže platí:

- $\Omega \in \mathcal{A}$,
- jestliže $A, B \in \mathcal{A}$, pak i $A - B \in \mathcal{A}$,
- jestliže $A, B \in \mathcal{A}$, pak i $A \cup B \in \mathcal{A}$.

Prvky jevového pole budeme označovat jako náhodné jevy.

Pravděpodobnost: Mějme neprázdnou množinu Ω a k ní příslušné jevové pole \mathcal{A} . Funkci $P : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$, pro kterou platí

- $P(A) \geq 0$ pro všechna $A \in \mathcal{A}$,
- $P(\Omega) = 1$,
- jestliže $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$ jsou po dvou disjunktní množiny, pak $P(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n) = \sum_{n=1}^{\infty} P(A_n)$,

nazveme pravděpodobnost. Trojici (Ω, \mathcal{A}, P) budeme nazývat pravděpodobnostní prostor.

Klasická pravděpodobnost: Klasickou pravděpodobnost používáme pro pokusy s konečnou množinou možných výsledků, které mohou nastat se stejnou pravděpodobností. Klasická pravděpodobnost je potom definována následovně:

$$P(A) = \frac{m}{n},$$

kde m je počet výsledků náhodného pokusu, které jsou příznivé jevu A a n je počet všech možných výsledků náhodného pokusu.

Geometrická pravděpodobnost: Nechť Ω je borelovsky měřitelná podmnožina \mathbb{R}^n , tj. $\Omega \in \mathcal{B}_n$, která má kladnou a konečnou Lebesgueovu míru μ . Nechť \mathcal{A} je třída všech borelovských podmnožin množiny Ω . Na \mathcal{A} definujeme funkci P takto:

$$P(A) = \frac{\mu(A)}{\mu(\Omega)}, \quad A \in \mathcal{A}.$$

Náhodná veličina: Nechť je dán pravděpodobnostní prostor (Ω, \mathcal{A}, P) . Reálnou funkci $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ nazveme náhodnou veličinou, je-li tato funkce \mathcal{A} -měřitelná, tj. jestliže pro každé $x \in \mathbb{R}$ platí:

$$\{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x\} \in \mathcal{A}.$$

Rozdělení náhodné veličiny: Jaké má náhodná veličina rozdělení, nám určuje distribuční funkce. Tu definujeme jako funkci F , která je dána vztahem

$$\forall x \in \mathbb{R} : F(x) = P(X \leq x),$$

kde $P(X \leq x)$ značí $P(\{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x\})$.

Diskrétní náhodná veličina Náhodná veličina X s distribuční funkcí $F(x)$ se nazývá diskrétní, pokud existuje neprázdná, nejvýše spočetná podmnožina N reálných čísel a funkce $p : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, pro kterou platí

- $p(x) > 0$ pro $x \in N$ a $p(x) = 0$ pro $x \in \mathbb{R} - N$
- $\sum_{x \in \mathbb{R}} p(x) = \sum_{x \in N} p(x) = 1$
- $\forall x \in \mathbb{R}$ je $F(x) = \sum_{t \leq x} p(t)$.

Funkci $p(x)$ nazýváme pravděpodobnostní funkce náhodné veličiny X .

Spojité náhodná veličina: Náhodná veličina X se nazývá spojitá, pokud existuje nezáporná borelovská funkce f taková, že pro každé $x \in \mathbb{R}$ platí

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt.$$

Funkci f nazýváme hustota náhodné veličiny X a platí

- $f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$,
- $\int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt = 1$.

Náhodný vektor: Nechť je dán pravděpodobnostní prostor (Ω, \mathcal{A}, P) . Zobrazení

$$\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

kteří je \mathcal{A} -měřitelné, se nazývá (n -rozměrný) náhodný vektor.

Aritmetický průměr: Nechť X_1, X_2, \dots, X_n je posloupnost náhodných veličin. Potom náhodná veličina

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n}(X_1 + X_2 + \dots + X_n)$$

se nazývá aritmetický průměr.

Střední hodnota: Mějme diskrétní náhodnou veličinu X , která má pravděpodobnostní funkci $p(x)$. Jestliže suma konverguje, potom

$$E(X) = \sum_{x=-\infty}^{\infty} xp(x)$$

se nazývá střední hodnotou náhodné veličiny X .

Pokud bychom uvažovali spojitou náhodnou veličinu s hustotou $f(x)$ a pravděpodobnostní prostor (Ω, \mathcal{A}, P) , její střední hodnota by vypadala takto:

$$E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx,$$

jestliže integrál $\int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx$ konverguje.

Rozptyl: Mějme náhodnou veličinu X . Pokud střední hodnoty existují, potom

$$D(X) = E[(X - E(X))^2]$$

je rozptyl náhodné veličiny X .

Směrodatná odchylka: je definována jako odmocnina rozptylu náhodné veličiny ($\sqrt{D(X)}$).

Konvergence podle pravděpodobnosti Mějme posloupnost náhodných veličin X_1, X_2, \dots s distribučními funkcemi $F_1(x_1), F_2(x_2), \dots$ a náhodnou veličinu X s distribuční funkcí $F(x)$. Necht' jsou všechny tyto veličiny definované na stejném pravděpodobnostním prostoru (Ω, \mathcal{A}, P) . Posloupnost náhodných veličin X_n konverguje k náhodné veličině X podle pravděpodobnosti, právě když pro všechna $\varepsilon > 0$ platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|X_n - X| \leq \varepsilon) = 1.$$

Slabý zákon velkých čísel: Řekneme, že posloupnost náhodných veličin $(X_n)_{n=1}^{\infty}$ splňuje slabý zákon velkých čísel, jestliže platí:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left(\left|\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - E(X_i))\right| > \varepsilon\right) = 0,$$

pro všechna $\varepsilon > 0$.

Věta 1 (Čebyševova věta). *Pro libovolnou náhodnou veličinu X se střední hodnotou $E(X)$ a rozptylem $D(X)$, je pravděpodobnost, že absolutní hodnota $|X - E(X)|$ nabude hodnoty menší než libovolné $\varepsilon > 0$:*

$$P(|X - E(X)| < \varepsilon) \geq 1 - \frac{D(X)}{\varepsilon^2}.$$

Věta 2 (Chinčinova věta). *Nechť X_1, X_2, \dots je posloupnost nezávislých, stejně rozdělených náhodných veličin s konečnou střední hodnotou $E(X_i) = \mu$ pro $i = 1, 2, \dots$. Pak platí konvergence podle pravděpodobnosti*

$$\overline{X_n} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{P} \mu$$

a je splněn slabý zákon velkých čísel.

Věta 3 (Bernoulliho věta). *Je-li p pravděpodobnost jevu A a m počet případů, v nichž nastal jev A v n nezávislých pokusech, pak pro každé $\varepsilon > 0$ platí*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left(\left| \frac{m}{n} - p \right| < \varepsilon \right) = 1.$$

Silný zákon velkých čísel: Řekněme, že posloupnost náhodných veličin $(X_n)_{n=1}^{\infty}$ splňuje silný zákon velkých čísel, jestliže platí

$$P \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - E(X_i)) = 0 \right) = 1.$$

Centrální limitní věta

Věta 4 (Moivreova-Laplaceova věta). *Nechť Y_1, Y_2, \dots je nekonečná posloupnost stochasticky nezávislých náhodných veličin, které pocházejí z alternativního rozdělení $A(\theta)$. Náhodná veličina Y_n udává součet prvních n náhodných veličin z uvažované posloupnosti, která má binomické rozdělení, tedy $Y_n \sim Bi(n, \theta)$, se střední hodnotou $E(Y) = n\theta$ a rozptylem $D(Y) = n\theta(1 - \theta)$. Pak pro náhodnou veličinu*

$$U_{Y_n} = \frac{Y_n - n\theta}{\sqrt{n\theta(1 - \theta)}}$$

platí limitní vztah

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(U_{Y_n} \leq u) = \Phi(u)$$

pro všechna $u \in \mathbb{R}$, kde $\Phi(u)$ je distribuční funkce náhodné veličiny s rozdělením $N(0, 1)$.

Náhodná veličina U_{Y_n} má asymptoticky normální standardizované rozdělení.

1.2 Podstata metody Monte Carlo

Ať už v přírodovědných oborech, medicíně, ale i ekonomice a technice je čím dál větší potřeba matematických metod, které by napomohly urychlit a vůbec uskutečnit rozvoj daného oboru a výrobu nových přístrojů. Zejména díky stále kvalitnějším počítačům, jde numerická matematika ruku v ruce s výpočetní technikou a umožňuje provádění numerických výpočtů, které jsou k daným problematikám potřebné.

Při konkrétním řešení problému se obecně postupuje tak, že se určí posloupnost operací, která pomáhá k hledání veličiny θ s předem určenou přesností. Výsledky, které shromáždíme si označíme

$$\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n, \dots$$

a požadujeme, aby splňovali

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \theta_n = \theta.$$

Po dostatečném počtu opakovaných operací se proces zastaví. Jestliže nebudeme uvažovat chyby, které se mohou ve výpočtu objevit, při použití stejného algoritmu by dva různí výpočtáři měli dojít ke stejnému výsledku.

Některé algoritmy ale mohou být složitější v jejich samotné konstrukci ale také z časového hlediska. Proto se hledal nějaký efektivnější způsob, jak dané úlohy řešit. Jevilo se jako dobrý nápad obrátit celý postup a použít pravděpodobnost a matematicko-statistické vztahy.

Právě metoda Monte Carlo využívá vztah mezi pravděpodobnostními charakteristikami různých náhodných procesů, pod kterými si můžeme představit například náhodné jevy či střední hodnotu náhodných veličin, a veličinami, které představují řešení úlohy (například výpočet integrálu). Pod pojmem metoda Monte Carlo se tedy skrývají veškeré postupy numerického řešení matematických (ale i jiných) úloh, které se řeší pomocí mnohokrát opakovaných náhodných pokusů. Jelikož tyto odhady získáváme statistickými metodami, mají pravděpodobnostní charakter.

Naše odhady za hledané hodnoty θ , můžeme opět označit

$$\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n, \dots$$

Tyto odhady dostaneme po statistickém zpracování výsledků mnohokrát opakovaných náhodných pokusů. Chceme, aby náhodná veličina θ_n (n je počet pokusů) konvergovala podle pravděpodobnosti pro n jdoucí k nekonečnu k hledané hodnotě θ . Tj. požadujeme, aby platilo

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|\theta_n - \theta| < \varepsilon) = 1.$$

Hodnota θ , kterou hledáme, označuje nějaký statistický parametr a náhodné veličiny θ_n můžeme interpretovat jako statistické odhady, které souvisejí s θ podle pravděpodobnostních zákonitostí.

Ještě před 20. stoletím se náhodné procesy zkoumali formou analytických úloh, které ale byly složité. Až v roce 1949 se objevila myšlenka toho, že se celý postup může obrátit a místo řešení analytické úlohy je možné modelovat náhodný proces a využít statistické odhady pravděpodobností, středních hodnot apod. pro přibližné řešení analytické úlohy. Experimentální určení hodnot, které odpovídají statistickým charakteristikám, tak zastoupí výpočty analytických výrazů. Musíme vždy jen vytvořit pravděpodobnostní model s parametry, které zastupují řešení dané úlohy.

Pravděpodobnostní modely ale můžeme uvažovat jen ty, které mají relativně jednoduchou realizaci, můžeme je nějak zapsat do počítače a dovolují získat odhady neznámých parametrů s co nejmenší chybou. Opět vidíme, že použití metody Monte Carlo v praxi vyžaduje spojení s výpočetní technikou.

Výhodou metody Monte Carlo je také to, že nemusíme znát souvislosti výsledků experimentů a hledané řešení úlohy a vystačíme si pouze se znalostí podmínek, u kterých nám stačí znalost vnějších souvislost. To nám dává možnost použít tuto metodu na velké spektrum úloh.

V matematickém oboru můžeme metodu Monte Carlo použít na řadu problémů, mezi které patří například výpočet určitých integrálů (i vícerozměrných), řešení soustav lineárních rovnic či hledání kořenů rovnic a výpočet hodnoty funkce.

Celý postup metody bychom mohli vyjádřit těmito třemi kroky:

- tvorba modelu, který co nejpřesněji popisuje zkoumaný proces
- simulace dostatečně velkého souboru experimentů založená na generování náhodných čísel
- statistické zpracování simulace.

Možnost řešení dané úlohy je potom možný provést dvěma způsoby:

- postupem založeným na geometrické pravděpodobnosti
- postupem založeným na odhadu střední hodnoty náhodné veličiny

Jak úspěšná potom metoda Monte Carlo bude, ovlivňují tři následující faktory:

- kvalita generátoru náhodných čísel
- výběr racionálního algoritmu
- kontrola přesnosti získaného výsledku.

Nyní si ukažme, jak přesně by postup vypadal:

Předpokládejme, že provedeme pokus, jehož výsledky jsou hodnoty x_i námi předem definované náhodné veličiny ξ . Pokud při provedeném pokusu hodnota x_i padne do nějaké oblasti ω , budeme pokus považovat za zdařilý a naopak. Těchto pokusů provedeme n a sečteme počet zdařilých pokusů (m). Pak můžeme vypočítat relativní četnost \bar{p} jevu, že se náhodná veličina ξ realizuje do množiny ω

$$\bar{p} = \frac{m}{n}. \quad (1.1)$$

Pomocí relativní četnosti \bar{p} můžeme odhadnout hledanou pravděpodobnost p podle zákona velkých čísel, k čemuž použijeme Bernoulliovu větu.

Pokud provedeme dostatečně velký počet pokusů, můžeme nahradit odhad pravděpodobnosti relativní četností $\frac{m}{n}$, tj.

$$p \approx \bar{p}. \quad (1.2)$$

Výhodou metody Monte Carlo je, že nemusíme provádět skutečný pokus, postačí nám modelování pokusů pomocí generování náhodných čísel.

Modelování každého pokusu je dáno podle následujícího algoritmu:

- Z množiny náhodných čísel s rozložením $f(x)$ vybereme číslo x_i .
- Zjistíme, zda náhodné číslo x_i leží v množině ω a výsledek zaznamenáme. Pokud číslo x_i bude do množiny ω patřit, budeme tento pokus považovat za zdařilý a naopak.
- Po provedení každého pokusu, přičteme k hodnotě n jedničku. Jestliže bude daný pokus zdařilý, jedničku připočteme k hodnotě m . Nezdařilý pokus do m nezaznamenáváme.
- Poté, co provedeme n pokusů, určíme přibližnou hodnotu hledané pravděpodobnosti

$$p \approx \frac{m}{n}.$$

Jak bylo již zmíněno, vlastností metody Monte Carlo je snížení počtu operací při různých výpočtech. Povědomí o přesnosti vztahu (1.2) můžeme získat, pokud budeme \bar{p} zkoumat jako náhodnou veličinu, která má asymptoticky normální rozložení.

Veličina \bar{p} má potom střední hodnotu

$$E(\bar{p}) = p$$

a rozptyl

$$D(\bar{p}) = \frac{p(1-p)}{n}.$$

Odchylka $\sigma_{\bar{p}}$ náhodné veličiny \bar{p} bude tedy rovna

$$\sigma_{\bar{p}} = \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}. \quad (1.3)$$

Zde můžeme vidět, že odchylka $\sigma_{\bar{p}}$ nabývá svého maxima pro $p = 0,5$.

Jestliže se dále budeme zabírat přesností metody Monte Carlo, můžeme říci, že přibližná rovnost (1.2) má přesnost ε se spolehlivostí α , pokud platí

$$P(|p - \bar{p}| < \varepsilon) = \alpha. \quad (1.4)$$

Pokud bychom například položili $\varepsilon = 0,001$ a $\alpha = 0,95$, můžeme tvrdit, že po opakovaném používání vzorce (1.2) se průměrně v 95% případů přibližná hodnota \bar{p} hledané pravděpodobnosti nebude lišit od skutečné hodnoty p více než o 0,001.

S využitím Čebyševovy nerovnosti můžeme zjistit, jaký je vztah mezi veličinami ε , α a počtem pokusů n .

V našich označeních má Čebyševova nerovnost tvar

$$P(|p - \bar{p}| < \varepsilon) \geq 1 - \frac{\sigma_{\bar{p}}^2}{\varepsilon^2}.$$

Pokud tento výraz srovnáme s (1.4), dostaneme

$$\alpha \geq 1 - \frac{\sigma_{\bar{p}}^2}{\varepsilon^2}.$$

Pokud dále dosadíme za $\sigma_{\bar{p}}$ hodnotu podle výrazu (1.3), dostaneme

$$\alpha \geq 1 - \frac{p(1-p)}{n\varepsilon^2},$$

z čehož vyjádříme počet pokusů n

$$n \leq \frac{p(1-p)}{(1-\alpha)\varepsilon^2}. \quad (1.5)$$

Nyní můžeme pomocí hodnot ε , α a p zjistit potřebný počet pokusů n . Jestliže například chceme, aby chyba ε nebyla vyšší než 0,01 se spolehlivostí 95% při $p = 0,5$, nemusíme vykonávat více než 50 000 pokusů.

Chceme-li ale dosáhnout přesnějšího odhadu pro počet pokusů n , můžeme využít rozložení náhodné veličiny \bar{p} objevující se ve výrazu (1.4).

V našem případě má náhodná veličina \bar{p} asymptoticky normální rozložení a pro dostatečně velká n můžeme s použitím Moivreovy-Laplaceovy věty rovnici (1.4) přepsat následovně:

$$P\left(\frac{|p - \bar{p}|}{\sigma_{\bar{p}}} < u_{\alpha}\right) = \alpha,$$

kde u_{α} značí α -kvantil normálního rozložení s koeficientem spolehlivosti α , kterou můžeme vyhledat v tabulkách. Jestliže tuto rovnici porovnáme s rovnicí (1.4), dostaneme

$$\varepsilon = u_{\alpha}\sigma_{\bar{p}}$$

a následně

$$\varepsilon = u_\alpha \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}.$$

Odtud můžeme opětovně vyjádřit n

$$n = \frac{p(1-p)}{\varepsilon^2} u_\alpha^2. \quad (1.6)$$

Nyní můžeme opět zkoumat, kolik pokusů budeme potřebovat, určíme-li si, s jakou přesností chceme výsledku dosáhnout. Z následující tabulky (1.1) můžeme vyčíst, že s rostoucí přesností (neboli nižší hodnotou ε), se zvětší i počet pokusů n . Proto bychom měli zvážit, kdy metodu Monte Carlo použít, jelikož je opravdu vhodná spíše v těch případech, kdy neklademe tak výrazný důkaz na velkou přesnost výsledku úlohy.

Pokud bychom ale výraz (1.6) porovnali s předchozím (1.5) s využitím Čebyševovy nerovnosti, vidíme, že zde nám stačí mnohem menší počet pokusů n .

$p \setminus \varepsilon$	0,05	0,01	0,005	0,001
0,1	140	3600	14000	360000
0,2	250	6200	25000	620000
0,3	330	8400	33000	840000
0,4	380	9400	38000	940000
0,5	390	9800	39000	980000

Tabulka 1.1: Hodnoty n pro $\alpha = 0,095$ a různá p a ε při využití vzorce (1.6), zdroj: [5]

1.3 Historie metody Monte Carlo

Úplné počátky metody Monte Carlo sahají do roku 1777, kdy se slavný francouzský matematik Georges-Louis Leclerc Comte de Buffon snažil odhadnout hodnotu Ludolfova čísla π . Avšak přesnější formulaci, uplatnění a své jméno získala tato metoda v průběhu druhé světové války díky dvěma vědcům: Johnu von Neumannovi a Stanislavu Ulamovi, kteří

hledali odpověď na otázku „Jak určit procento neutronů v určité spršce, které pronikne například nádrží vody určitých rozměrů?“. Když dnes vyslovíme název „Monte Carlo“, vybaví se nám krásné město Monackého knížectví, které je známé svým přístavem, Velkou cenou Formule 1 a také kasiny s ruletami, kde náhoda hraje velkou roli. Neumann s Ullmannem právě díky tomu vyřešili svůj problém, a to připodobněním „historie života neutronu“ k principu techniky kola rulety. Odtud tedy pochází název metody Monte Carlo.

Jelikož je známo, že náhodný jev, že neutron při srážce s atomem vodíku jím bude pohlcen, nastane průměrně jednou ze sta případů. Pro simulaci pohybu neutronu se roztočí kolo rulety, které je rozdělené na sto dílků, z nichž jeden je barevně odlišený a znázorňuje tak pohlcení neutronu. Pokud se kolo rulety zastaví na tomto dílku, znamená to „konec života“ neutronu. Jestliže tento případ nenastane, zjistí se pomocí jiného kola rulety směr a rychlost neutronu po srážce. Potom se díky dalšímu kolu rulety určí, jakou cestou projde neutron, než se střetne s dalším atomem vodíku či kyslíku.

Simulace se opakuje tak dlouho, dokud nenastanou 3 možnosti – neutron je pohlcen, ztratí tolik energie, že jeho chování nás dále nezajímá, nebo se mu podaří vylétnout z nádrže.

Jestliže je provedeno dostatečný počet těchto simulací, dostaneme relativně přesnou informaci o procentu neutronů, kterým se podařilo uniknout z nádrže.

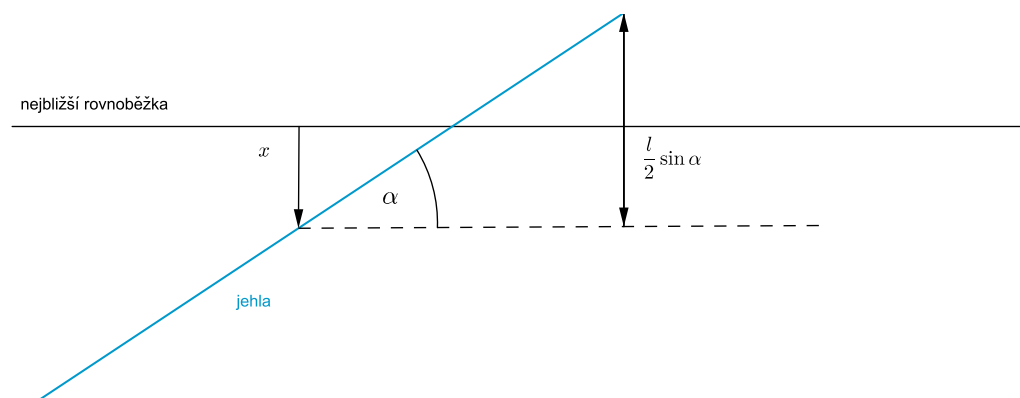
Když bychom chtěli provést skutečnou simulaci cesty svazků z velkého počtu neutronů, kde každý neutron naráží do stovek atomů vodíku a kyslíku, realizace pomocí kola rulety a zaznamenávání všech možných výsledků by byly časově velmi náročné a prakticky skoro neproveditelné. Ale veliký rozvoj výpočetní techniky nám napomáhá k urychlení takovýchto postupů a víme, že realizace tohoto experimentu skutečně dospěje k hledaným výsledkům.

Kapitola 2

Odhad Ludolfova čísla

2.1 Buffonova úloha

Nyní se vraťme zpět k roku 1777, kdy se Buffon snažil odhadnout hodnotu čísla π . Této úloze říkáme Buffonova úloha a je založena na geometrické pravděpodobnosti. Jde o náhodný pokus, kde máme v rovině dány rovnoběžky, které mají mezi sebou stejnou vzdálenost. Na tuto rovinu házíme shora jehlu, jež má délku l , která je stejná nebo menší, než je vzdálenost mezi těmito rovnoběžkami. Zajímá nás pravděpodobnost, že jehla protne jednu z těchto přímek.

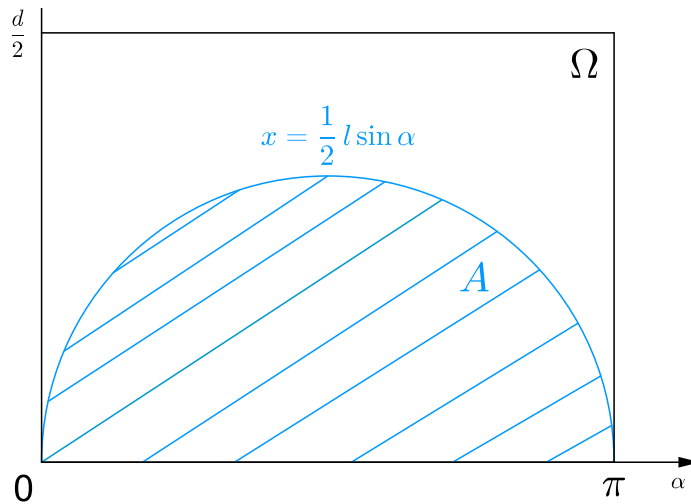


Obrázek 2.1: Buffonova úloha

Číslo π můžeme odhadnout, pokud si určíme vzdálenost středu jehly od nejbližší rov-

noběžky (x) a úhel, který svírá jehla s rovnoběžkami (α) (Obrázek 2.1). Potom je poloha naší jehly spadlé na rovinu s rovnoběžkami dána právě těmito dvěma hodnotami (x, α), kde $0 \leq \alpha \leq \pi$ a $0 \leq x \leq \frac{d}{2}$ (kde d je vzdálenost mezi rovnoběžkami). Pokud jehlu hodíme na naši rovinu, můžou nastat dvě možnosti: jehla protne některou z rovnoběžek, či žádnou z nich neprotne. První možnost nastane, pokud bude platit $x \leq \frac{l}{2} \sin \alpha$.

Uvažujme nyní obdélník Ω všech možných výsledků pokusu (viz Obrázek 2.2) a mějme souřadnice (x, α) , které určují kombinaci polohy a orientaci jehly. Jak už víme, souřadnice x je z intervalu $(0, \frac{d}{2})$ a α z intervalu $(0, \pi)$. Plocha čtverce Ω znázorňuje všechny možnosti, které mohou nastat. Po vhození jehly na rovinu může tedy poloha jehly nabývat jakýchkoliv hodnot z celého obdélníku Ω . Pokud ale jehla protne některou z rovnoběžek, souřadnice (x, α) jehly bude ležet v oblasti A , což je plocha pod křivkou, která je dána předpisem $x = \frac{l}{2} \sin \alpha$.



Obrázek 2.2: Buffonova úloha

Potom můžeme určit pravděpodobnost $P(A)$ toho, že jehla protne rovnoběžku pomocí poměru těchto dvou oblastí.

$$P(A) = \frac{S_A}{S_\Omega} = \frac{\int_0^\pi \frac{1}{2} l \sin \alpha \, d\alpha}{\frac{\pi d}{2}} = \frac{\frac{1}{2} l [-\cos]_0^\pi}{\frac{\pi d}{2}} = \frac{l(1+1)}{\pi d} = \frac{2l}{\pi d}$$

Následně můžeme určit hodnotu čísla π podle relativní četnosti $\frac{m}{n}$, kde n je počet všech

možných pokusů (hodů) a m počet případů, kdy jehla protne rovnoběžku. Hodnota π se tedy ze vztahu pravděpodobnosti $P(A)$ a poměru $\frac{m}{n}$ přibližně rovná

$$\pi \doteq \frac{2l}{md/n} = \frac{2ln}{md}$$

Pokud tedy zrealizujeme dostatečně velký počet pokusů, dá se tento vztah použít k odhadnutí hodnoty Ludolfova čísla π .

Nyní si ukážeme, jak například můžeme tuto úlohu nasimulovat v jazyce R. Vygenerujeme si soubor náhodných čísel x_i a α_i , kde $i = 1, 2, \dots, n$, která splňují výše zmíněné podmínky. Následně zjistíme hodnotu čísla π například pro hodnoty $l = 5, d = 4$. U této metody je ovšem potřeba i určit přibližnou hodnotu čísla π , abychom mohli zadat horní hranici pro α . Položme tedy například $\pi = 3,14$. V tabulce (2.1) můžeme vidět, jak se hodnota odhadnutého čísla π liší v závislosti na n , které jsme položili rovnu 10 000, 100 000, 1 000 000 (není uvedeno ve zdrojovém kódu). Jak jsme očekávali, s narůstajícím počtem n pokusů se náš výsledek zpřesňuje.

Zdrojový kód v jazyce R:

```
> d<-5
> l<-4
> pi<-3.14
> x <- runif(n, min=0, max=d/2)
> alpha <- runif(n, min=0, max=pi)
> ano <- which(x < l*sin(alpha)/2)
> m <- length(ano)
> Pi <- 2*l*n/d/m
> Pi
```

2.2 Poměr obsahu plochy čtverce a kruhu

Buffonova úloha s jehlou ale samozřejmě není jediným způsobem, jak můžeme číslo π odhadnout. Alternativním postupem může být odhadnutí Ludolfova čísla pomocí náhodného

	získané π		
n	pokus 1	pokus 2	pokus 3
10 000	3,166436	3,117086	3,153952
100 000	3,129523	3,152585	3,122195
1 000 000	3,138886	3,141733	3,142313

Tabulka 2.1: Hodnoty čísla π získané pomocí Buffonovy úlohy

házení malého předmětu (např. zrnko hrachu) na čtverec o straně a , do kterého je vepsána kružnice o poloměru r . Představíme si, že předmět do čtverce vždy padne a my pozorujeme, zda padne i do vepsané kružnice. Pravděpodobnost tohoto jevu je dána poměrem obsahu čtverce a obsahu kružnice.

Obsah čtverce:

$$S_c = a^2 \quad (2.1)$$

Obsah kružnice:

$$S_k = \pi r^2 \quad (2.2)$$

Pravděpodobnost dopadu předmětu do kružnice:

$$P(A) = \frac{\pi r^2}{a^2} \quad (2.3)$$

Pravděpodobnost dopadu do kružnice můžeme odhadnout pomocí relativní četnosti předmětů, které dopadly do kružnice. Bereme tedy poměr počtu předmětů v kružnici a počet všech předmětů ve čtverci.

$$\bar{p} = \frac{m}{n}$$

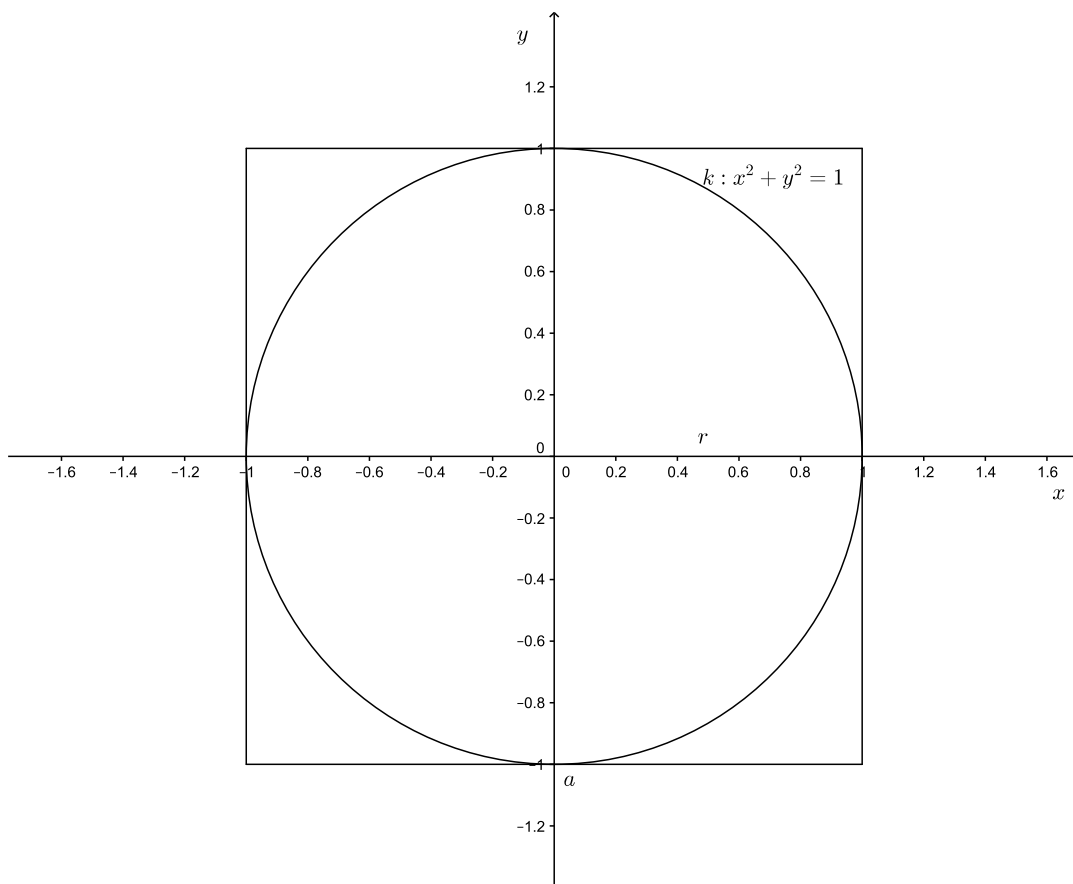
Ze vztahu (2.2) vyjádříme π a odhadnutou pravděpodobnost pomocí relativní četnosti můžeme dosadit do vzorce, čímž vyjádříme hodnotu π .

$$\pi = \frac{ma^2}{nr^2}$$

Celý tvar můžeme ještě zjednodušit, jestliže si uvědomíme, že platí $r = a/2$. Číslo π se potom rovná relativní četnosti dopadnutých předmětů do čtverce vynásobeného čtyřmi.

$$\pi = \frac{4m}{n} = 4\bar{p}$$

Nyní si opět nasimulujeme úlohu v jazyce R. Výhodou tohoto postupu je, že nemusíme předem znát hodnotu čísla π . Postačí nám, pokud určíme velikost čtverce. Ten si například položíme do soustavy souřadnic následovně:



Obrázek 2.3: Čtverec s vepsanou jednotkovou kružnicí

Z obrázku můžeme určit následující hodnoty:

$$a = 2$$

$$r = 1$$

$$\pi = \frac{4m}{n}.$$

Zdrojový kód v jazyce R:

```
> x <- runif(n, min=-1, max=1)
> y <- runif(n, min=-1, max=1)
> ano <- which(x^2 + y^2 < 1)
> m <- length(ano)
> Pi <- 4*m/n
> Pi
```

Opět položíme $n = 10\,000$, $100\,000$ a $1\,000\,000$ (n není uvedeno ve zdrojovém kódu) a v následující tabulce můžeme vidět získané hodnoty čísla π .

	získané π		
n	pokus 1	pokus 2	pokus 3
10 000	3,1672	3,148	3,1476
100 000	3,13648	3,14524	3,1414
1 000 000	3,141356	3,14206	3,141336

Tabulka 2.2: Hodnoty čísla π získané pomocí poměru ploch čtverce a kružnice do něj vepsané

Opět vidíme, že při vyšší hodnotě n je přesnost čísla π větší. Pokud porovnáme tuto metodu s předchozí, můžeme také pozorovat, že tento postup pomocí poměru ploch čtverce a kruhu nám přináší přesnější odhad hodnoty π .

Kapitola 3

Výpočet jednorozměrného integrálu metodou Monte Carlo

Výpočet integrálů je důležitou úlohou v různých oborech. Pracují s nimi ekonomové, inženýři i vědci. U některých případů je nutný takový výpočet udělat co nejpřesnější a využívá se k němu různých numerických metod. U n -rozměrných integrálů už může být takové řešení výpočetně i časově náročné. Pokud bychom například pozorovali pronikání částic silným stíněním, musíme počítat $3n$ -rozměrné integrály, pokud částice narazila při průchodu n -krát. Už při položení $n = 4$ bychom museli obvyklými numerickými metodami řešit až $2,4 \cdot 10^{14}$ operací, které by i počítač řešil přes tisíc let. Daleko rychleji bychom tento typ úloh mohli řešit pomocí metody Monte Carlo, která je v tomto případě efektivní a relativně rychlá. Metodu Monte Carlo využíváme při výpočtu n -rozměrných integrálů hlavně v těch úlohách, kde neklademe až tak velký důraz na přesný výsledek.

Měli bychom tedy vždy zvážit, zda k výpočtu integrálu použít numerickou metodu či metodu Monte Carlo. V některých případech je metoda Monte Carlo jediným možným postupem, jak daný úkol vyřešit, ovšem v jiných úlohách můžou být numerické metody daleko vhodnější.

I přesto, že je metoda Monte Carlo přínosnější spíše při výpočtech vícerozměrných integrálů, tato práce bude zaměřena na příklady jednorozměrných integrálů.

3.1 Metoda relativní četnosti

3.1.1 Základní funkce

Nechť ξ je spojitá náhodná veličina, jejíž hodnoty patří do některé oblasti Ω na ose x . Rozložení této veličiny je dáno hustotou pravděpodobnosti $f(x)$ definovanou na oblasti Ω a má rovnoměrné či normální rozložení. Uvažujeme pravděpodobnost, že náhodná veličina ξ padne do intervalu ω s pevnými koncovými body a a b , který patří do oblasti Ω . Označíme hledanou pravděpodobnost

$$P(a \leq \xi < b) = p.$$

Tu můžeme následně vyjádřit integrálem

$$p = \int_a^b f(x) dx. \quad (3.1)$$

Tento integrál můžeme odhadnout metodou Monte Carlo. Zvolíme náhodnou veličinu ξ , uděláme n náhodných realizací pomocí generátoru náhodných čísel (máme tedy normální nebo rovnoměrně spojitě rozdělení) a určíme, které realizace padly do intervalu $\langle a, b \rangle$ a které nikoli. Z následné relativní četnosti odvodíme odhad integrálu.

Pokud bychom takto počítali určitý integrál, zajímala by nás také přesnost přibližné rovnosti (1.2). Dále bychom mohli určit počet pokusů n , které by byly pro náš výpočet postačující.

3.1.2 Postup pro funkci $g(x)$ na množině $\langle 0, 1 \rangle \times \langle 0, 1 \rangle$

Integrand v rovnici (3.1) představoval hustotu náhodné veličiny a splňoval následující požadavky:

- 1) $f(x)$ je nezáporná,
- 2) $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$.

Pokud bychom ale chtěli vypočítat i integrály, jejichž integrand není hustotou náhodné veličiny, musíme tento integrál transformovat tak, aby dva výše uvedené požadavky byly

splněny. Problém ovšem nastává v tom, že upravený integrand už nebude mít normální či rovnoměrné rozložení, pro které jsou metody náhodných čísel zpracovány. Proto musíme zkoumat jiný postup s použitím metody Monte Carlo, který používá náhodná čísla s rovnoměrným rozložením. Tento způsob už můžeme použít na poměrně velkou škálu úloh.

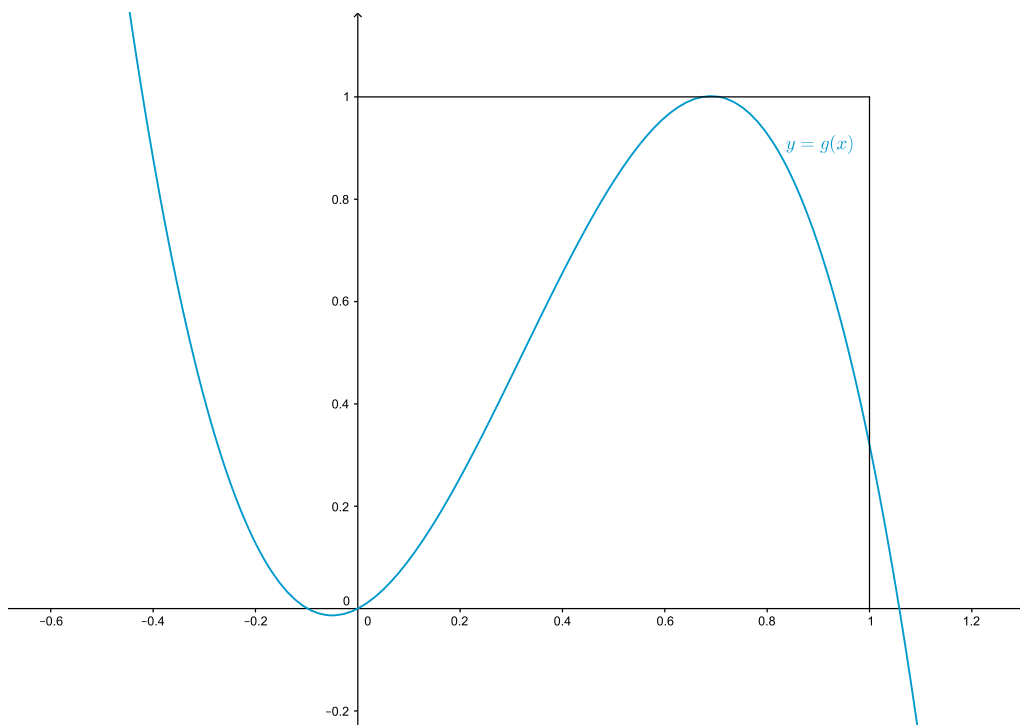
Mějme například integrál

$$I = \int_0^1 g(x) dx, \quad (3.2)$$

kde integrovaná funkce $g(x)$ splňuje podmínku

$$0 \leq g(x) \leq 1. \quad (3.3)$$

Daná funkce může tedy vypadat jako například na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1: Funkce $g(x)$

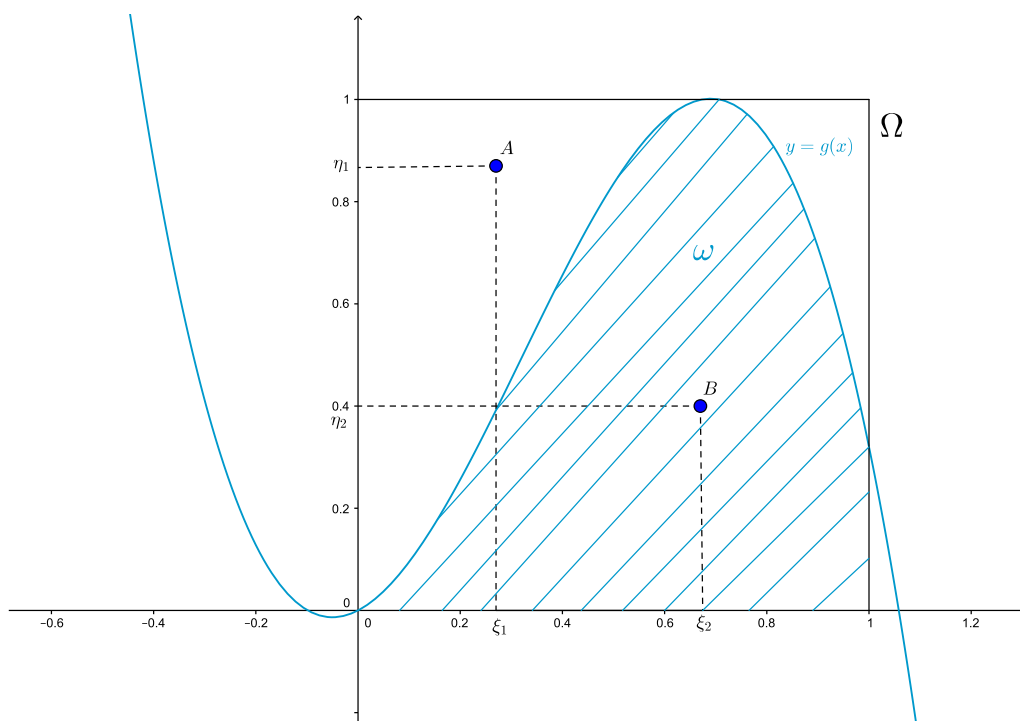
Nyní budeme uvažovat dvě oblasti:

- oblast Ω , která je určena nerovnostmi

$$0 \leq x \leq 1,$$

$$0 \leq y \leq 1$$

- oblast ω , která je omezená křivkou funkce $g(x)$, osou x a přímkami $x = 0$ a $x = 1$.



Obrázek 3.2: Oblast ω a Ω

Vidíme (Obrázek 3.2), že obsah oblasti Ω (S_Ω) je roven jedné a obsah oblasti ω (S_ω) se rovná hodnotě integrálu I .

Mějme náhodný vektor (ξ, η) , který se řídí rovnoměrným rozložením na oblasti Ω , tedy hustota pravděpodobnosti nad touto oblastí je rovna jedné, tj.

$$f(x, y) = 1.$$

Pravděpodobnost, že se náhodný vektor (ξ, η) realizuje do oblasti ω , je

$$P(\omega) = \iint_{\omega} f(x, y) \, dx \, dy = S_{\omega}.$$

Hodnota integrálu I se tedy rovná pravděpodobnosti, že náhodný bod (ξ, η) padne do oblasti ω .

Nyní budeme provádět n pokusů a zaznamenávat, zda bod v daném pokusu padl do oblasti ω či nikoliv. Pozorujme tuto situaci na obrázku 2.2. Pokus budeme považovat za zdařilý, pokud bod do oblasti padne (bod B) a za nezdařilý, pokud bod padne mimo oblast ω (bod A). Následně všechny zdařilé pokusy sečteme a vypočítáme relativní četnost \bar{I} jevu, že náhodný bod (ξ, η) padne do oblasti ω .

Můžeme tedy říci, že pokud chceme odhadnout hodnotu integrálu I a zrealizovali jsme dostatečný počet pokusů n , stačí, když vezmeme relativní četnost \bar{I} .

$$\bar{I} = \frac{m}{n}, \quad (3.4)$$

čili

$$\bar{I} \approx I$$

Přesnost této přibližné rovnosti můžeme odhadnout jako u vztahu (1.2).

3.1.3 Transformace obecné funkce $h(x)$

Jestliže chceme postupovat, jak jsme nyní uvedli, daná funkce musí splňovat výše zmíněnou podmínku (3.3). Pokud by ale funkce tuto podmínku nesplňovala, můžeme postupovat následovně. Mějme např.

$$I = \int_a^b h(x) \, dx, \quad (3.5)$$

kde a a b jsou libovolné konečné meze. Snažme se nyní odhadnout hodnotu integrálu I . Označíme suprem a infimum funkce $h(x)$ v intervalu (a, b) :

$$A = \sup h(x), \quad B = \inf h(x),$$

a zavedeme substituci:

$$x = a + (b - a)t. \quad (3.6)$$

Nyní převedeme integrál (3.5) na tvar:

$$I = (A - B)(b - a) \int_0^1 \frac{h[a + (b - a)t] - B}{A - B} dt + (b - a)B.$$

a označíme

$$\begin{aligned} S_\Omega &= (A - B)(b - a), \\ S_0 &= B(b - a), \\ h^*(t) &= \frac{h[a + (b - a)t] - B}{A - B}. \end{aligned}$$

Integrál I můžeme přepsat

$$I = S_\Omega I^* + S_0, \quad (3.7)$$

kde

$$I^* = \int_0^1 h^*(t) dt.$$

V tomto integrálu již funkce $h^*(t)$ splňuje podmínku (3.3) a integrál můžeme odhadnout dříve zmíněným způsobem.

Důkaz. Chceme dokázat, že platí

$$0 \leq h^*(t) \leq 1,$$

tedy

$$0 \leq \frac{h[a + (b - a)t] - B}{A - B} \leq 1.$$

Víme, že platí

$$h(x) \leq A$$

jelikož $A = \sup h(x)$.

Za x dosadíme podle substituce

$$h[a + (b - a)t] \leq A.$$

Od obou stran odečteme B

$$h[a + (b - a)t] - B \leq A - B$$

a následně můžeme vydělit celou nerovnicí výrazem $A - B$, který je nenulový a získáváme nerovnost na pravé straně nerovnice, kterou chceme dokázat.

$$\frac{h[a + (b - a)t] - B}{A - B} \leq 1.$$

Obdobně upravíme druhou stranu nerovnice. Jelikož $B = \inf h(x)$, platí

$$B \leq h(x).$$

Dosadíme za x substituci

$$B \leq h[a + (b - a)t]$$

a od nerovnice odečteme B

$$0 \leq h[a + (b - a)t] - B.$$

Následně obě strany nerovnice vydělíme rozdílem $A - B$ a získáme výraz, který jsme chtěli dokázat.

$$0 \leq \frac{h[a + (b - a)t] - B}{A - B}$$

□

3.1.4 Postup pro nezápornou funkci $f(x)$

U integrálu, kde integrand není hustotou náhodné veličiny, můžeme také postupovat jako u již zmíněného příkladu s odhadem hodnoty čísla π a použít geometrickou pravděpodobnost, když předpokládáme, že integrand je nezáporná funkce. Máme tedy integrál $\int_a^b f(x) dx$, kde oblast Ω je dána $x \in \langle a, b \rangle$ a $y \in \langle 0, A \rangle$ (hodnota A je supremum funkce $f(x)$ na intervalu $\langle a, b \rangle$) a oblast ω je určena plochou pod křivkou funkce $f(x)$ a nerovností $x \geq a \wedge x \leq b$. Tento postup spočívá v tom, že si vygenerujeme n dvojic náhodných čísel $[x_i, y_i]$ s rovnoměrným rozdělením, které patří do oblasti Ω . Následně pozorujeme, zda daná dvojice náhodných čísel patří do oblasti ω . Zapišeme si počet zdařilých pokusů (m) a odhadnutá hodnota integrálu je potom rovna

$$I = \frac{m}{n} S_{\Omega},$$

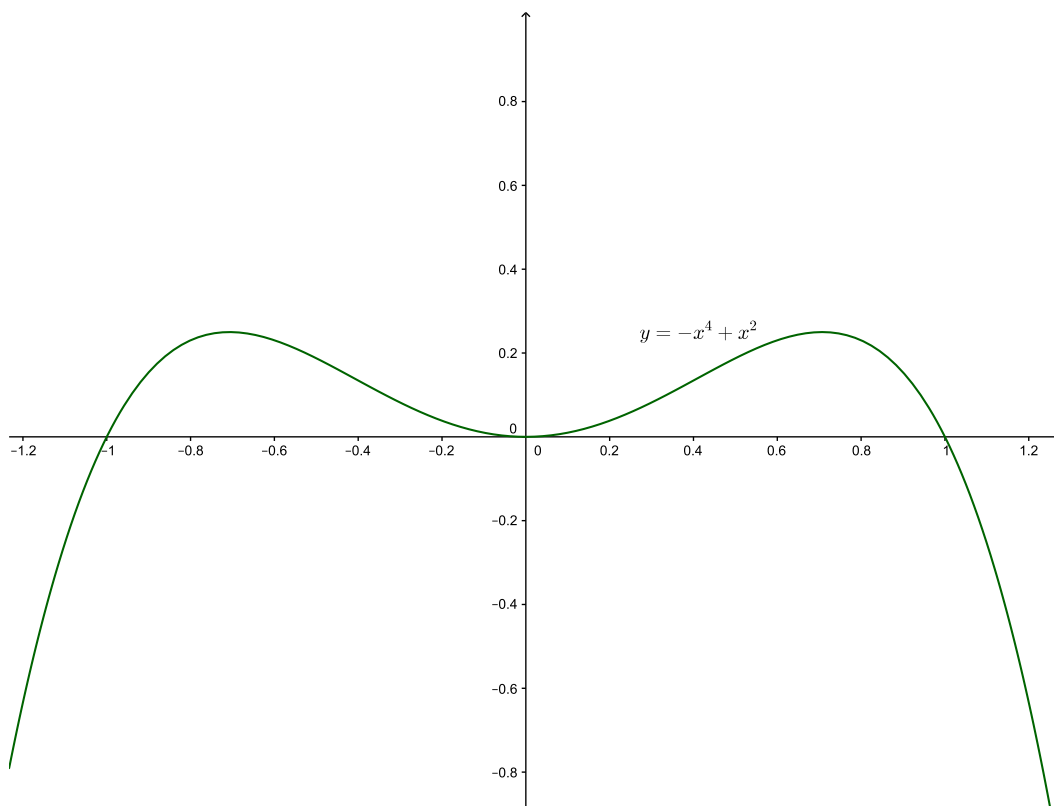
kde S_{Ω} je obsah plochy Ω .

Vypočítejme například pomocí jazyka R následující integrál:

$$\int_{-1}^1 (-x^4 + x^2) dx.$$

Zdrojový kód v jazyce R:

```
> x <- runif(n,min=-1, max=1)
> max1 <- max(-x^4+x^2)
> min1 <- min(-x^4+x^2)
> max2 <- max(max1,0)
> min2 <- min(min1,0)
> y <- runif(n,min=min2, max=max2)
> ano1 <-which(y<(-x^4+x^2) & y>0)
> ano2 <-which(y>(-x^4+x^2) & y<0)
> m <- (length(ano1)-length(ano2))
> I <- m/n*(1+1)*(max2 - min2)
> I
```

Obrázek 3.3: Funkce $f(x) = -x^4 + x^2$

Za n , které opět není uvedeno ve zdrojovém kódu, jsme zvolili 1 000, 10 000, 100 000 a 1 000 000. V tabulce (3.1) vidíme, že u vyššího počtu vygenerovaných dvojic čísel dostáváme přesnější odhad integrálu I , který se rovná $\frac{4}{15} \doteq 0,2\bar{6}$. Ale i u $n = 1\,000$ můžeme tvrdit, že metoda přináší relativně přesnou hodnotu integrálu.

3.2 Metoda střední hodnoty funkce náhodné veličiny

Odhad integrálu pomocí metody Monte Carlo, kdy využíváme odhad pravděpodobnosti nějakého jevu pomocí relativní četnosti výskytu tohoto jevu, můžeme provést, jestliže meze integrálu a a b jsou konečné. Pokud bychom ale chtěli vypočítat i integrály s nekonečnými mezemi, vhodnou cestou je užití metody založené na odhadu střední hodnoty náhodné

	získaná hodnota I	získaná hodnota I	získaná hodnota I
n	pokus 1	pokus 2	pokus 3
1 000	0,2609995	0,2534994	0,2569973
10 000	0,2661	0,2663	0,2669
100 000	0,2658	0,26575	0,26613
1 000 000	0,267404	0,2664795	0,266232

Tabulka 3.1: Hodnoty odhadnutého integrálu pomocí geometrické pravděpodobnosti

veličiny.

Mějme náhodnou veličinu ξ , jejíž hodnoty patří do intervalu (a, b) . Rozložení náhodné veličiny ξ bude určeno pomocí hustoty $f_\xi(x)$ a krajní hodnoty intervalu (a, b) mohou být konečné i nekonečné.

Uvažujme spojitou funkci $g(\xi)$. Jestliže je absolutní hodnota funkce $g(x)$ integrovatelná vzhledem k $f_\xi(x)$, potom existuje střední hodnota náhodné veličiny $\eta = g(\xi)$ a je definována vztahem

$$E(\eta) = \int_a^b g(x) f_\xi(x) dx. \quad (3.8)$$

Nyní se snažme vypočítat integrál ve vztahu (3.8) pomocí metody Monte Carlo.

Provedeme pokus, jehož výsledkem bude hodnota x_i náhodné veličiny ξ . Výsledkem řady takovýchto náhodných pokusů získáme posloupnost hodnot x_1, x_2, \dots, x_k . Jestliže hodnoty převedeme podle následujícího vzorce

$$y_i = g(x_i),$$

dostaneme posloupnost y_1, y_2, \dots, y_k hodnot náhodné veličiny η . Nezávislost a stejné rozložení náhodných veličin y_ξ je dáno ze způsobu tvoření posloupnosti y_1, y_2, \dots, y_k . Nyní můžeme použít zákon velkých čísel ve tvaru Chincinovy věty, jelikož řešení integrálu (3.8) má smysl pouze, pokud $|E(\eta)| < \infty$.

Pokud tedy provedeme dostatečný počet pokusů n , kterým získáme hodnoty x_i náhodné veličiny ξ , můžeme místo přibližné hodnoty \bar{E} integrálu (3.8) dosadit aritmetický průměr

hodnot $g(x_i)$

$$\bar{E} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(x_i). \quad (3.9)$$

Abychom mohli určit dostatečný počet pokusů n a přesnost přibližné rovnosti

$$E(\eta) \approx \bar{E},$$

potřebujeme znát rozložení náhodné veličiny \bar{E} . Pro velká n můžeme uvažovat asymptoticky normální rozložení.

Věta 5. *Nechť náhodné veličiny Y_1, Y_2, \dots jsou nezávislé a mají shodné rozložení. Jestliže je jejich rozptyl konečný*

$$\sigma_y^2 = \int_a^b [g(x) - E]^2 f(x) dx, \quad (3.10)$$

potom aritmetický průměr \bar{E} má asymptoticky normální rozložení se střední hodnotou E a směrodatnou odchylkou

$$\sigma^* = \frac{\sigma_y}{\sqrt{n}}. \quad (3.11)$$

Nyní tedy lze pro náš odhad přesnosti přibližné rovnosti $\bar{E} \approx E$ použít vztah

$$P(|E - \bar{E}| < \sigma^* u_\alpha) = \alpha.$$

Pokud určíme hodnoty ε a α a známe velikost směrodatné odchylky σ^* , můžeme již zjistit počet pokusů n , které nám zajistí přesnost ε se spolehlivostí α .

$$n = \frac{\sigma_y^2}{\varepsilon^2} u_\alpha^2, \quad (3.12)$$

kde

$$\varepsilon = u_\alpha \sigma^*.$$

Řešíme-li ale konkrétní úlohy, hodnotu σ_y většinou neznáme. Proto obvykle začneme s vypočtením úlohy tak, že si nejprve odhadneme předběžný počet pokusů $n = n_0$. Následně určíme přibližnou velikost rozptylu

$$\bar{\sigma}_y^2 = \frac{1}{n_0} \sum_{i=1}^{n_0} \left[g(x_i) - \frac{1}{n_0} \sum_{j=1}^{n_0} g(x_j) \right]^2. \quad (3.13)$$

Do rovnice (3.12) za σ_y^2 dosadíme $\bar{\sigma}_y^2$ a dostaneme přibližnou hodnotu pokusů n . Pokud $n > n_0$, měli bychom provést ještě další pokusy. Aby byl náš výpočet σ^2 co nejpřesnější, měli bychom n brát s ohledem na proměnlivost veličiny $\bar{\sigma}^2$. Pokud budeme předpokládat, že směrodatnou odchylku σ' k $\bar{\sigma}^2$ známe, použijeme pro určení n vztah

$$(\sigma^*)^2 = \bar{\sigma}^2 + k\sigma',$$

přičemž k pokládáme rovno 3 nebo 4 podle toho, jaká je naše požadovaná spolehlivost odhadu n . Velikost σ' můžeme také odhadnout pomocí vztahu, který platí pro $g(x_i)$, jakožto normálně rozloženou veličinu.

$$\sigma' = \bar{\sigma} \sqrt{\frac{2}{n}}.$$

Můžeme ale pozorovat, že tímto způsobem a použitím vztahu (3.13) získáváme daleko menší počet pokusů n v porovnání s tabulkou 1.1. Také bychom měli brát ohled na to, že hodnota veličiny $\bar{\sigma}$ může značně kolísat.

Při použití metody Monte Carlo ve výpočtu integrálu typu (3.8) je nutné si pamatovat velký počet dílčích výsledků, a to zejména souvisejících s výpočtem přibližných hodnot \bar{E} (vztah (3.9)) a $\bar{\sigma}$ (vztah (3.13)). Ale můžeme použít vzorce, které tato množství eliminují. Náhodnou veličinu $\bar{\sigma}$ můžeme vyjádřit následujícím vztahem:

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [g(x_i)]^2 - \bar{E}^2 \quad (3.14)$$

a budeme předpokládat, že již proběhlo k pokusů. Jsou tedy známy tyto veličiny:

- $\bar{E}_k = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k g(x_i)$,
- $\bar{\sigma}_k^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k [g(x_i)]^2 - \bar{E}_k^2$.

Po provedení $k + 1$ pokusů vypočteme:

- $\bar{E}_{k+1} = \frac{1}{k+1} \sum_{i=1}^k [k\bar{E}_k + g(x_{k+1})]$,
- $\sigma_{k+1}^2 = \frac{1}{k+1} k[\bar{\sigma}_k^2 + \bar{E}_k^2] + [g(x_{k+1})]^2 - \bar{E}_{k+1}^2$.

Veličiny \bar{E}_{k+1} a $\bar{\sigma}_{k+1}^2$ můžeme uložit do těch paměťových míst počítače, kde se před $k + 1$ pokusem nacházely veličiny \bar{E}_k a $\bar{\sigma}_k^2$.

Nyní vyzkoumáme využití tohoto postupu metody Monte Carlo k výpočtu integrálu (3.5) z předchozí části.

Chceme tedy vypočítat integrál

$$I = \int_a^b h(x) dx.$$

Mějme libovolné rozložení $f(x)$, pro které můžeme generovat náhodná čísla a jehož definiční obor je interval $\langle a, b \rangle$ a platí $f(x) \neq 0$.

$$\int_a^b f(x) dx = 1.$$

Integrovaný výraz z (3.5) si upravíme následovně

$$I = \int_a^b \frac{h(x)}{f(x)} f(x) dx. \quad (3.15)$$

Podíl $\frac{h(x)}{f(x)}$ označíme jako $g^*(x)$ a integrál (3.15) přepíšeme:

$$I = \int_a^b g^*(x) f(x) dx.$$

Integrál v tomto tvaru již můžeme vypočítat výše popsáním postupem. I tedy můžeme chápat jako střední hodnotu náhodné veličiny $\eta = g(\xi)$. Proto přibližná hodnota tohoto integrálu bude rovna aritmetickému průměru vygenerovaných (a transformovaných) hodnot $g(x_i)$.

Když si navíc představíme situaci, kdy hranice intervalu jsou konečné, můžeme funkci $f(x)$ pokládat za rovnoměrné rozložení náhodných čísel. Jelikož hustota pravděpodobnosti rovnoměrného rozložení v intervalu (a, b) je rovna

$$f(x) = \frac{1}{b-a},$$

integrál (3.15) převedeme do tvaru

$$I = \int_a^b \frac{h(x)}{\frac{1}{b-a}} \cdot \frac{1}{b-a} dx = (b-a) \int_a^b h(x) \frac{1}{b-a} dx, \quad (3.16)$$

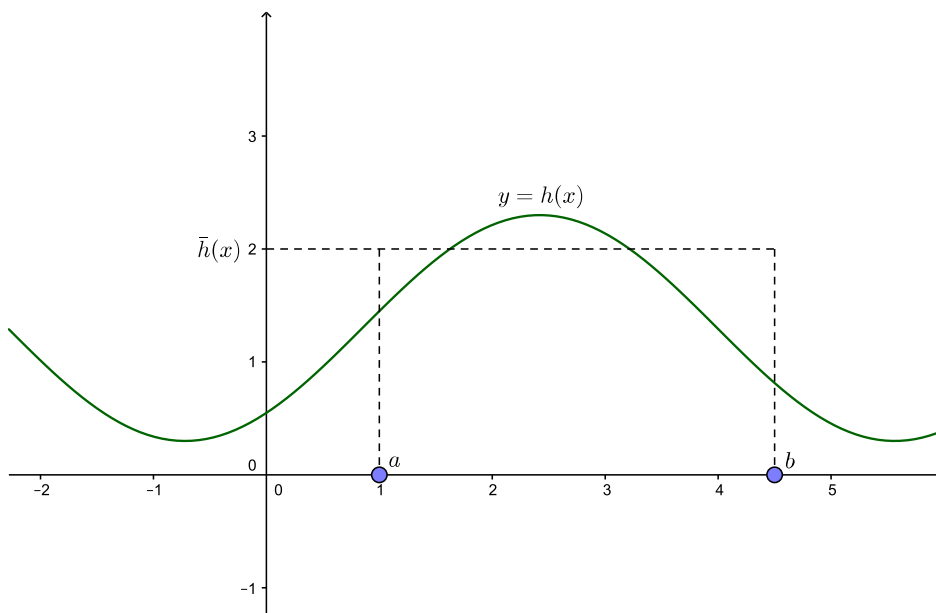
Z množiny náhodných čísel s rovnoměrným rozložením v intervalu (a, b) vybíráme čísla x_i a pro každé toto číslo vypočítáme hodnotu funkce $h(x_i)$. Následně nalezneme střední hodnotu funkce $h(x)$ v (a, b)

$$\bar{h}(x_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)$$

Integrál (3.9) nyní přibližně odhadneme jako

$$I \approx (b - a)\bar{h}(x_i). \quad (3.17)$$

Pokud se podíváme na obrázek 3.4, vidíme, že touto metodou nahrazujeme obsah plochy ohraničené osou x , přímkami $x = a$, $x = b$ a křivkou danou funkcí $y = h(x)$ obsahem obdélníku určeným osou x , přímkami $x = a$, $x = b$ a přímkou, která je daná funkcí $y = \bar{h}(x)$.

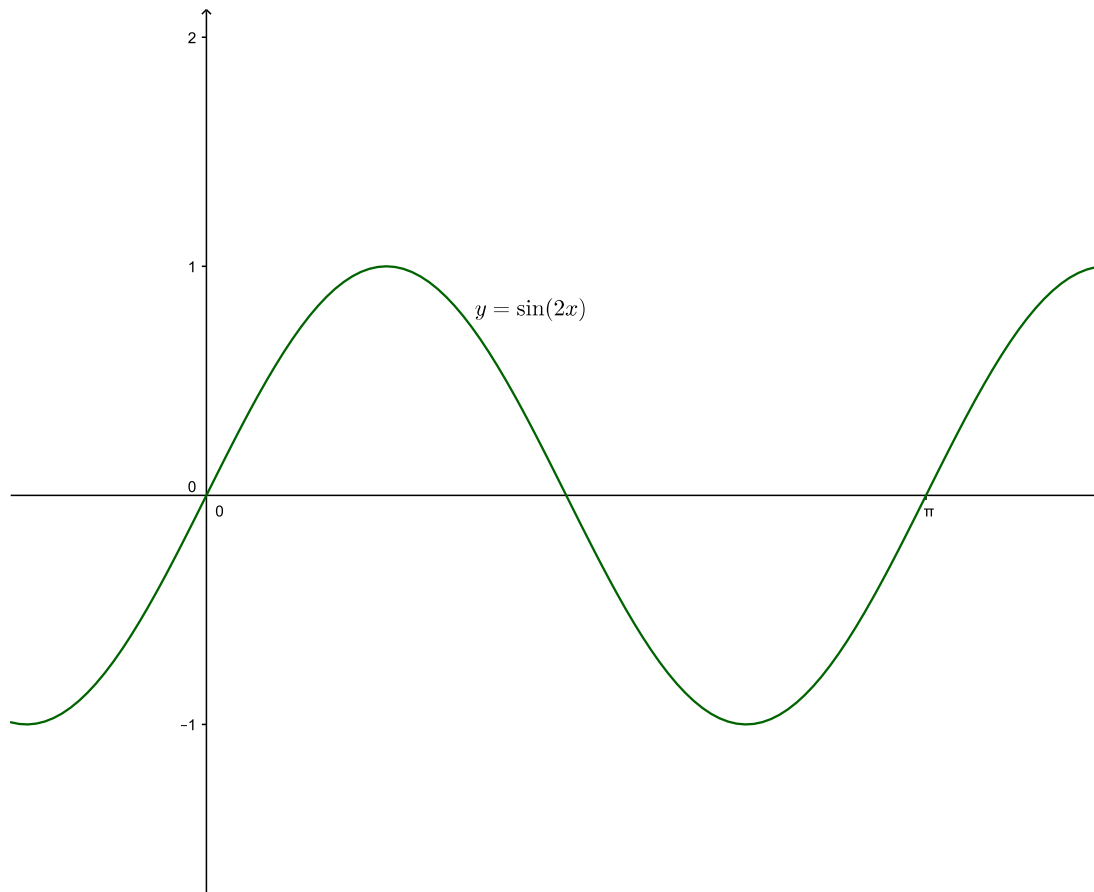


Obrázek 3.4: Integrál daný přímkami $x = a$, $x = b$ a střední hodnotou funkce $h(x)$

Pro názornou ukázkou vypočtíme tento integrál:

$$I = \int_0^{\pi} \sin(2x) dx$$

Opět pro odhad integrálu použijeme jazyk R:



Obrázek 3.5: Funkce $f(x) = \sin(2x)$

```
> x <- runif(n,min=0, max=pi)
> y <- (sin(2*x))
> I<-mean(y)*(pi-0)
> I
```

Dosaďme za n hodnoty 1 000, 10 000, 100 000 a 1 000 000 (není uvedeno ve zdrojovém kódu) a pozorujme, jaké nám vycházejí výsledky integrálu. S rostoucím počtem vygenerovaných čísel odhadnuté hodnoty konvergují ke skutečnému výsledku 0.

n	získaná hodnota I pokus 1	získaná hodnota I pokus 2	získaná hodnota I pokus 3
1 000	0,04006816	-0,04086429	-0,01173857
10 000	-0,03751924	0,0008761604	0,01625094
100 000	0,01003586	0,01052875	-0,01462601
1 000 000	-0,002786431	-0,002567043	-0,001934606

Tabulka 3.2: Hodnoty odhadnutého integrálu pomocí střední hodnoty funkce náhodné veličiny

Závěr

Bakalářská práce byla zaměřena na popis statistické metody Monte Carlo, které při svém postupu využívají pravděpodobnost. Naším úkolem bylo představit historii metody a popsat její podstatu, což jsme ukázali v první kapitole. Dále jsme chtěli předvést její využití při odhadu čísla π , a to dvěma způsoby – pomocí dopadu jehly na rovinu s rovnoběžkami, tzv. Buffonovi úlohy a poměru obsahu čtverce a kruhu. Obě varianty jsme nasimulovali v jazyce R a dospěli jsme k závěru, že druhá metoda přináší přesnější výsledky.

Metoda Monte Carlo slouží mimo jiné i k odhadu hodnoty integrálů. V naší práci jsme se zaměřili na popis výpočtu jednorozměrných integrálů několika typů. Jeho postup jsme přiblížili pomocí simulace metody v jazyce R, jejíž výsledky jsme zaznamenali do tabulek. Z odhadnutých hodnot můžeme říci, že metoda Monte Carlo je velice přínosná pro rychlejší a snadnější postup některých úloh, pokud nevyžadujeme naprosto přesný výsledek. Ovšem čím větší počet náhodných čísel vygenerujeme, tím blíže jsou naše odhadnuté hodnoty ke skutečnému výsledku.

Seznam použité literatury

- [1] KUNDEROVÁ, Pavla. *Úvod do teorie pravděpodobnosti a matematické statistiky*. Olomouc: Univerzita Palackého Olomouc, 2004, ISBN: 80-244-0843-0.
- [2] VIRIUS, Miroslav. *Aplikace matematické statistiky, Metoda Monte Carlo*. Praha: Vydavatelství ČVUT, 1998, ISBN: 80-01-01779-6.
- [3] BUDÍKOVÁ, Marie a kol.. *Statistika a pravděpodobnost* [online]. 2016, [cit. 2016-05-20], dostupné z: <http://is.muni.cz/do/rect/el/estud/prif/ps15/statistika/web/index.html>, ISBN: 978-80-210-8205-2.
- [4] BEJDA, Přemysl. *Zákony velkých čísel*. [online]. Univerzita Karlova v Praze, 2016, [cit. 2016-05-20], dostupné z: <https://is.cuni.cz/webapps/zzp/download/130017571>.
- [5] BUSLENKO, N.P. a ŠREJDER, J.A.. *Stochastické početní metody*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1965, ISBN: 80-200-0655-9.
- [6] NEZBEDA, Ivo, KOLAFA, Jiří a KOTRLA, Miroslav. *Úvod do počítačových simulací metody Monte Carlo a molekulární dynamiky*. Praha: Karolinum, 1998, ISBN: 80-7184-788-7.
- [7] FABIAN, František a KLUIBER, Zdeněk. *Fyzika a pravděpodobnost*. Praha: ARSCI, 2005, ISBN: 80-86078-52-3.
- [8] KNEŽO, Dušan. *O metodě Monte Carlo a možnostech jej aplikací*. [online]. 2012, [cit. 2016-05-25], dostupné z:

<http://www.sjf.tuke.sk/transferinovacii/pages/archiv/transfer/24-2012/pdf/178-181.pdf>, ISSN: 1337-7094.

[9] BECKMANN, Petr. *Historie čísla π* . Praha: ACADEMIA, 1998, ISBN: 80-200-0655-9.