Metody Monte Carlo

Materiały pomocnicze dla studentów realizujących przedmiot PRM u dr inż. Marka Niewińskiego

Założenia upraszczające

Będziemy jedynie rozważali zagadnienie obliczania całki postaci:

$$I = \int_{0}^{1} f(x) dx$$

Nie jest to żadne ograniczenie gdyż, przez odpowiednie przekształcenia możemy zawsze sprowadzić nasz problem do tej postaci np:

$$\int_{a}^{b} g(u) du$$

Stosując:

$$x = \frac{u - a}{b - a} i$$

$$f(x) = (b - a)g[(b - a)x + a]$$

otrzymamy problem: $\int_{0}^{1} f(x) dx$

Założenia upraszczające - cd

Możemy także założyć dodatkowo że: $0 \le f(x) \le 1$

Nie jest to również żadne istotne ograniczenie gdyż, stosując przekształcenie:

$$\frac{f(x) - f_o}{f_1 - f_o} gdzie$$

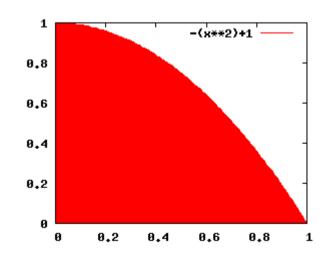
$$f_o \le f(x) \le f_1 dla 0 \le x \le 1$$

otrzymamy funkcję spełniającą zakładany postulat.

Metoda - "orzeł - reszka"

Rozważmy dwuwymiarową zmienną losową (X,Y) o rozkładzie równomiernym na kwadracie $(0 \le x \le 1, \ 0 \le y \le 1)$.

Z definicji tej zmiennej losowej wynika, że prawdopodobieństwo zdarzenia polegającego na tym, że zmienna losowa przyjmie wartość z zakreskowanej części jest równe polu tej powierzchni czyli wartości szukanej całki *I*



$$f(x) = -x^2 + 1$$

Metoda - "orzeł – reszka" - cd

Niech M będzie liczbą eksperymentów, które zakończyły się zaobserwowaniem wartości zmiennej losowej w obszarze zakolorowanym.

Jeżeli poszczególne obserwacje są niezależne to M jest zmienną losową o rozkładzie dwumianowym:

$$P\{M=m\} = {N \choose m} I^m (1-I)^{N-m}$$

Wobec powyższego zadanie sprowadza się do oszacowania parametru *I* omawianego rozkładu.

Za przybliżoną wartość całki przyjmuje się:.

$$\hat{I} = \frac{M}{N}$$

Pojęcie niepewności

Niepewność – jest to parametr związany z wynikiem pomiaru (obliczeń) charakteryzujący rozrzut wartości, które można w sposób uzasadniony przypisać wielkości mierzonej (obliczanej)

Niepewność standardowa – niepewność wyniku wyrażona jako odchylenie standardowe (dodatni pierwiastek kwadratowy wariancji zmiennej losowej)

Względna niepewność standardowa – niepewność standardowa podzielona przez estymatę wielkości.

Niepewność metody - "orzeł – reszka"

Poziom dokładności obliczeń MC określa się w następujący sposób: jeżeli mamy oszacować nieznany parametr I to definiujemy dwie funkcje I_{a} , I_{o} spełniające zależność:

$$P\{I_d \leq I \leq I_g\} = \gamma$$

Przedział $(I_{d'} I_{g})$ nazywany jest **przedziałem ufności**.

Liczbę γ nazywany jest **poziomem ufności**.

Zazwyczaj estymatory wielkości wyznaczanych metodami MC mogą być traktowane jako zmienne losowe o rozkładzie normalnym.

Niepewność metody - "orzeł – reszka" - cd

Jeżeli estymator $\hat{\theta}$ ma rozkład normalny o wartości oczekiwanej θ i wariancji $\sigma^2(\hat{\theta})$ to:

$$(\hat{\theta} - \sigma(\hat{\theta}), \hat{\theta} + \sigma(\hat{\theta})) \rightarrow \gamma = 0.6827$$

$$(\hat{\theta} - 2\sigma(\hat{\theta}), \hat{\theta} + 2\sigma(\hat{\theta})) \rightarrow \gamma = 0.9545$$

$$(\hat{\theta} - 3\sigma(\hat{\theta}), \hat{\theta} + 3\sigma(\hat{\theta})) \rightarrow \gamma = 0.9973$$

W przypadku metod MC przyjmuje się, że zdarzenie

$$\hat{\theta} - \theta \leq 2\sigma(\hat{\theta})$$

jest "praktycznie" pewnym a wielkość $2\sigma(\hat{\theta})$ nazywana jest niepewnością metody Monte Carlo.

Niepewność metody - "orzeł – reszka" - cd

W rozważanej metodzie - "orzeł – reszka" dla estymatora \hat{I}

wartość oczekiwana: $E\{\hat{I}\}=I$

wariancja: $\sigma^2(\hat{I}) = \frac{I(1-I)}{N}$

W praktyce wartość I jest nieznana a zatem wariancja estymatora musi być również szacowana (najczęściej w tym samym procesie obliczeniowym).

W metodzie - "orzeł – reszka" przyjmuje się:

$$\hat{\sigma}^{2}(\hat{I}) = \frac{1}{N} \frac{M}{N} (1 - \frac{M}{N})$$

$$\hat{\sigma}(\hat{I}) = \sqrt{\frac{1}{N} \frac{M}{N}} (1 - \frac{M}{N})$$

Niepewność metody - "orzeł – reszka" - cd

Ponieważ wariancja estymatora osiąga maksimum dla *I*=1/2

$$\sigma^{2}(\hat{I}) = \frac{I(1-I)}{N} \underset{I=1/2}{\to} \sigma^{2}(\hat{I}) = \frac{1}{4N}$$

to niepewność metody MC nie przekracza nigdy wartości:

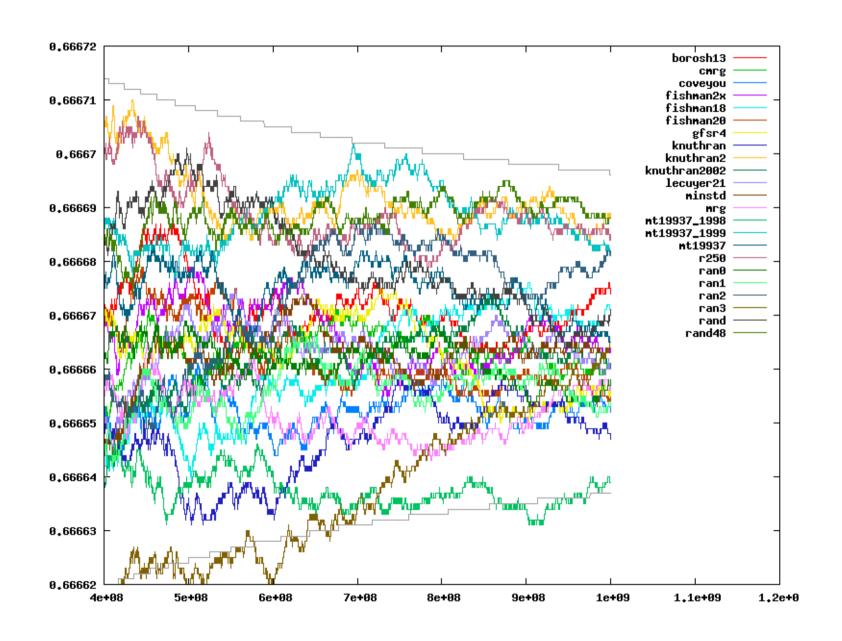
$$2\sigma_{max}(\hat{I}) = 2\sqrt{\frac{1}{4N}} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

<u>Uwaga:</u>

Wynik końcowy obliczeń MC podajemy zawsze w postaci:

$$I = \hat{I} \pm 2\,\hat{\sigma}(\hat{I})$$

Wyniki metody - "orzeł – reszka" - dla kilku generatorów



Metoda - "orzeł – reszka" - wielowymiarowa

Omawiana metoda może być łatwo zaadoptowana na potrzeby obliczania wartości całek wielokrotnych:

$$I = \iiint_{\Omega} f(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}) dx_{1} dx_{2} \dots dx_{n}$$

Niech dla każdego j=1...n $0 \le x_j \le 1$ i $0 \le f(x_1, x_2, ..., x_n) \le 1$

Wówczas algorytm ma postać:

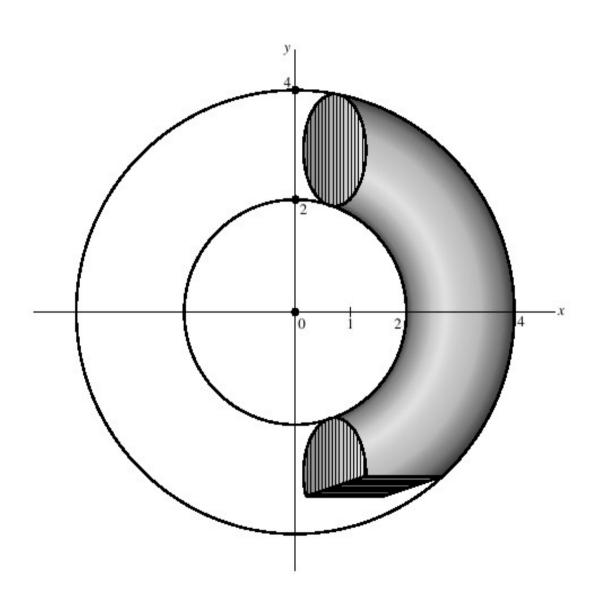
- wylosować N punktów $(x_1, x_2, ..., x_n, x_{n+1})$ według rozkładu równomiernego na (n+1) wymiarowej kostce jednostkowej,
- przez M oznaczmy liczbę punktów spełniających warunek

$$x_{n+1} \le f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

obliczamy estymator całki

$$\hat{I} = \frac{M}{N}$$

Metoda - "orzeł – reszka" - wielowymiarowa przykład z NUMERICAL RECIPLES



Całkowanie - metoda podstawowa

Całkę
$$\int_a^b f(x) dx$$
 można zapisać postaci: $(b-a) \int_a^b f(x) dP$ $gdzie$ $dP = \frac{dx}{b-a}$

Wobec powyższego wartość całki I można interpretować jako wartość oczekiwaną $E\{Y\}$ zmiennej losowej Y=f(X) gdzie X oznacza zmienną losową o rozkładzie równomiernym na przedziale (a,b)

W szczególności gdy a=0 i b=1 wartość oczekiwaną $E\{Y\}$ można oszacować na podstawie zależności:

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{N} y_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

Metoda podstawowa - algorytm

- 1) Wylosować punkty $x_1, x_2, ..., x_n$ według rozkładu równomiernego U(0,1),
- 2) Obliczyć wartości $f(x_1)$, $f(x_2)$,..., $f(x_n)$,
- 3) Jako estymator wartości całki przyjąć wartość

$$\hat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

Niepewność w metodzie podstawowej

Niepewność metody (podobnie jak i metody "orzeł-reszka") wynosi $2\sigma(\hat{I})$

Wariancja oszacowania wartości całki wyznaczamy z zależności:

$$\sigma^{2}(\hat{I}) = \sigma^{2} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(X_{i}) \right\} = \frac{1}{N} \sigma^{2} [f(X)] = \frac{1}{N} \sigma_{f}^{2} \quad gdzie \quad \sigma_{f}^{2} = \int_{0}^{1} f^{2}(x) dx - I^{2}$$

Ponieważ wartość *I* jest zazwyczaj nieznana, wobec czego czego wykorzystuje się estymator wariancji:

$$\hat{\sigma}_{f}^{2} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} [f(x_{i}) - \hat{I}]^{2}$$

Praktycznie estymator ten wyznaczmy z zależności:

$$\hat{\sigma}_{f}^{2} = \frac{1}{(N-1)} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^{2}(x_{i}) - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_{i}) \right)^{2} \right]$$

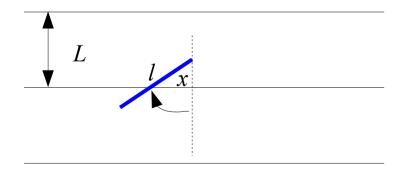
Zakład Metod Projektowania w Mikroelektronice IMiO

Przykład – liczba Π i igła Buffona

Igłę o długości l rzucamy na poziomą płaszczyznę pokrytą równoległymi liniami prostymi o odstępie L ($L \ge l$).

igła przecina linię oznacza "trafienie" w przeciwnym przypadku "chybienie".

Zliczając ilość trafień i chybień można wyznaczyć wartość liczby π



n – liczba trafień,

N – liczba prób.

Przykład – liczba π i igła Buffona - cd

Rozwiązanie:

x – kąt między igłą a normalną do linii, $x \in [0,\pi)$ - zmienna losowa,

funkcja gęstości prawdopodobieństwa zmiennej x:

$$g_X(x) = \frac{1}{\pi}$$

p(x) – prawdopodobieństwo "trafienia" przy danej wartości x:

$$p(x) = \frac{l}{L} |\cos x|$$

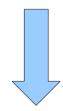
Całkowite prawdopodobieństwo "trafienia":

$$P = E[p(x)] = \int_{0}^{\pi} p(x)g_{X}(x)dx = \frac{2l}{\pi L}$$

Igła Buffona i PWL

Zgodnie z prawem wielkich liczb:

$$\hat{P} = \frac{n}{N} \underset{N \to \infty}{\longrightarrow} P = \frac{2l}{\pi L}$$



$$\hat{\pi} = \frac{2Nl}{nL} \underset{N \to \infty}{\longrightarrow} \pi$$