

GENEROVÁNÍ NÁHODNĚ PROMĚNNÝCH VELIČIN V METODĚ MONTE CARLO

Milan Guštar

Abstrakt

Základem simulačních programů Monte Carlo jsou generátory náhodných čísel s definovaným statistickým rozdělením. Volba generátoru a způsob jeho implementace ovlivňuje rychlost výpočtu i přesnost výsledků. Příspěvek podává přehled základních metod užívaných pro generování statistických rozdělení. Zvláštní důraz je kladen na omezená rozdělení a jejich aproximaci po částech rovnoměrným, případně obecným diskrétním rozdělením.

1. Úvod

Jako metody Monte Carlo lze označit takové metody výpočtu nebo simulace, při kterých je při výpočetním postupu použito posloupnosti náhodných čísel. Pomocí metod Monte Carlo lze určit přibližná řešení celé řady jak stochastických, tak i deterministických problémů. Jediným požadavkem je, že řešení problému musí být popsáno pomocí funkce hustoty pravděpodobnosti. Jakmile je tato funkce známa, lze provést řadu simulací (experimentů) s náhodnými vstupními veličinami. Výsledné řešení je získáno statistickým zpracováním výsledků simulací. Jelikož je při řešení většiny problémů třeba provést velké množství simulací, obvykle tisíce až miliony, je generování vstupních náhodných čísel, provádění vlastních simulací i ukládání a zpracování výsledků prováděno pomocí počítače.

Pro všechny metody Monte Carlo je k provedení simulací třeba získat numerické realizace vstupních náhodných proměnných - náhodná čísla. Generování těchto náhodných čísel s definovaným statistickým rozdělením se obvykle provádí ve dvou krocích. Nejprve je pomocí primárního generátoru generována posloupnost náhodných, vzájemně nezávislých čísel s rovnoměrným rozdělením. Z této posloupnosti je vhodnou transformací vytvořena posloupnost čísel s požadovaným rozdělením.

2. Primární generátory

Pro generování primární posloupnosti náhodných čísel lze použít jednoho ze dvou základních typů generátorů - fyzikální generátor nebo generátor pseudonáhodných čísel. Při použití fyzikálních generátorů jsou náhodná čísla získávána na základě nějakého přírodního jevu s náhodným chováním. Pseudonáhodná čísla jsou generována počítačem podle speciálního algoritmu. Posloupnost pseudonáhodných čísel je ve skutečnosti zcela deterministická, ovšem z hlediska simulovaného problému má vlastnosti náhodné posloupnosti.

3. Fyzikální generátory náhodných čísel

Jako základ fyzikálního generátoru náhodných čísel lze použít téměř libovolný fyzikální princip který má náhodný charakter známých vlastností. Jako příklad lze uvést házení mincí nebo kostkou. K nejběžnějším v praxi používaným generátorům patří šumové generátory využívající vlastnosti polovodičového přechodu nebo kombinace radioaktivního zářiče a detektoru.

Fyzikální generátory mají řadu nevýhod a proto se používají zřídka. Posloupnost generovaných čísel je neopakovatelná, což ztěžuje vývoj algoritmů, ladění programů a porovnávání výsledků testování. Stabilita vlastností generátorů je závislá na vnějších vlivech a je obtížně dlouhodobě udržitelná. Změny vlastností generátorů jsou nesnadno zjištělné a mohou významně ovlivnit výsledky simulací. Skutečné chování generátorů se často liší od teoretického v důsledku výrobních tolerancí atd. Z popsaných důvodů jsou fyzikální generátory nahrazovány pseudonáhodnými generátory.

4. Generátory pseudonáhodných čísel

Generátory pseudonáhodných čísel jsou založeny na aritmetických procedurách využívajících rekurentní vzorce. Nejužívanější a teoreticky nejpropracovanější jsou kongruenční generátory. Posloupnost čísel je vytvářena podle vztahu

$$X_{n+1} = (A \times X_n + C) \bmod M \quad (1)$$

kde $\bmod M$ je celočíselný zbytek po dělení M . Vlastnosti takovéto posloupnosti závisí na volbě konstant A , C a M . Tyto konstanty se volí podle typu použitého počítače s ohledem na statistické vlastnosti generované posloupnosti a rychlost generování. Ačkoli jsou známa některá doporučení z teorie čísel, která volbu konstant usnadňují [1], je teoretické odvození vlastností kongruenčních generátorů obvykle prakticky nemožné. Proto je velmi důležité testování vlastností konkrétních generátorů.

Rozdělení generované podle vztahu (1) je diskrétní a nabývá hodnot z intervalu $\langle 0, M \rangle$. Pro dostatečně velká M získané hodnoty po jednoduchou transformací dobře aproximují výběr ze spojitého rovnoměrného rozdělení na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$.

5. Transformace rovnoměrně rozdělených veličin na veličiny s libovolným rozdělením

Za předpokladu, že můžeme pomocí vhodného primárního generátoru vytvořit posloupnost náhodných čísel s rovnoměrným rozdělením, lze vhodnou transformací z této posloupnosti získat posloupnost čísel s libovolným požadovaným rozdělením.

Pro některá teoretická rozdělení byly vytvořeny exaktní postupy. Např. normální rozdělení lze generovat podle vzorců

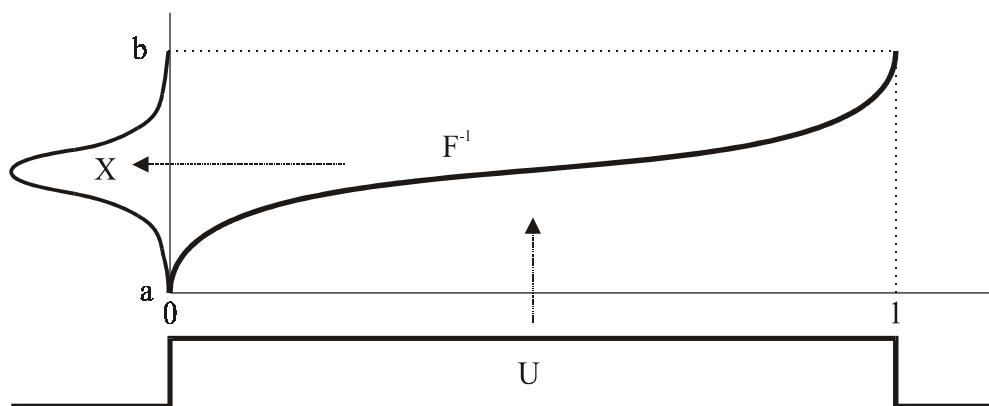
$$\begin{aligned} Z_1 &= \sqrt{-2\ln(X_1)} \times \sin(2\pi X_2) \\ Z_2 &= \sqrt{-2\ln(X_1)} \times \cos(2\pi X_2) \end{aligned} \quad (2)$$

kde X_1 a X_2 jsou nezávislé veličiny s rovnoměrným rozdělením z intervalu $(0, 1)$ [2].

Pro generování obecných náhodných rozdělení existuje řada metod. Jako příklad lze uvést metodu inverzní transformace (viz obr. 1). Pokud má požadovaná náhodná veličina distribuční funkci $F(x)$ a máme-li generátor spojitého rovnoměrného rozdělení U na intervalu $(0, 1)$, lze náhodnou veličinu X s požadovaným rozdělením získat podle vzorce

$$X = F^{-1}(U) \quad (3)$$

kde F^{-1} je inverzní funkce k funkci $F(x)$.



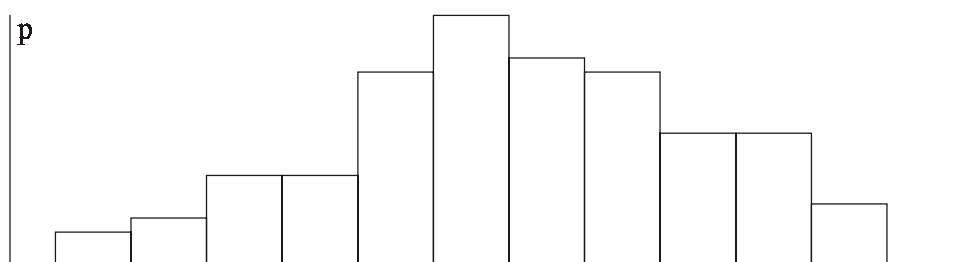
Obr. 1 : Princip metody využívající inverzní transformaci

Nutným předpokladem pro existenci funkce F^{-1} je, že funkce $F(x)$ musí být rostoucí. Pro efektivní použití uvedené metody je třeba aby funkce F^{-1} byla jednoduše a rychle vypočitatelná. Tyto podmínky u mnoha požadovaných rozdělení nebývají splněny. Často lze použít namísto původního rozdělení jeho vhodné aproximace.

6. Aproximace omezených rozdělení po částech rovnoměrným rozdělením

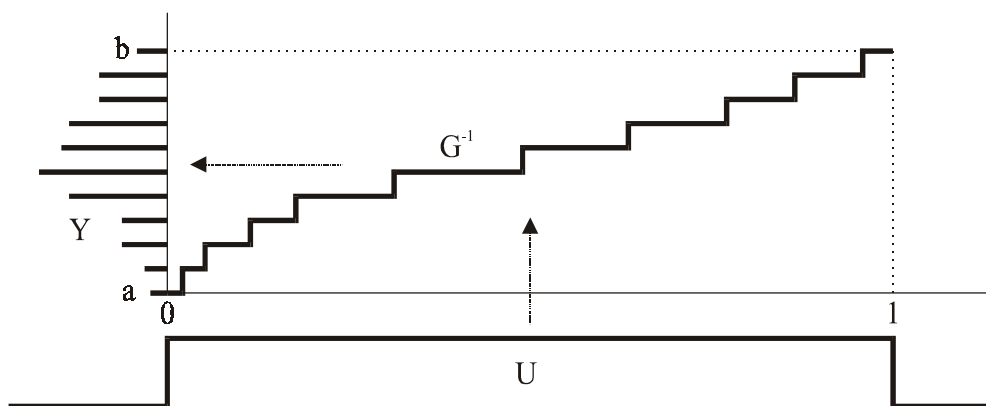
Typy a parametry rozdělení mnoha fyzikálních veličin nejsou známy. K jejich určení jsou používána data získaná na základě měření, testů a zkoušek. Tříděním těchto dat od tříd je vytvářen histogram (sloupcový graf četností). Po statistickém zpracování histogramu bývá získané empirické rozdělení nahrazováno zvoleným rozdělením teoretickým. Takto získaná teoretická rozdělení jsou používána jako vstupy pro Monte Carlo simulace.

Jelikož většina reálných náhodných veličin nabývá pouze hodnot z omezeného intervalu $\langle a, b \rangle$, lze k jejich popisu použít omezená (useknutá) rozdělení. Tato omezená rozdělení lze dobře aproximovat po částech rovnoměrným rozdělením – histogramem (viz obr. 2).



Obr. 2 : Po částech rovnoměrné rozdělení

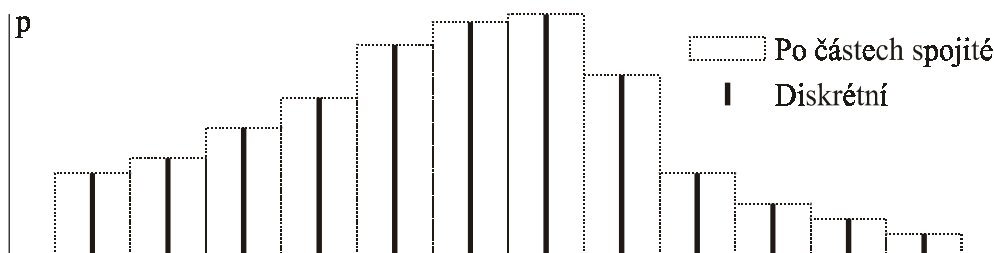
Toto rozdělení lze generovat pomocí modifikované metody inverzní transformace. Nejprve je vygenerována hodnota z diskrétního rozdělení odpovídajícího relativním četnostem hodnot v jednotlivých třídách. Diskrétní rozdělení má schodovitou distribuční funkci, ke které neexistuje funkce inverzní. Pokud však tuto funkci považujeme za relaci, lze vytvořit relaci inverzní. Z ní lze vhodnou úpravou vytvořit funkci vhodnou pro použití v metodě inverzní transformace (viz obr. 3). Po tabelaci této funkce je generování diskrétního rozdělení velmi efektivní.



Obr. 3 : Generování diskrétního rozdělení

Vygenerovaná hodnota určuje číslo třídy. Pro tuto třídu je následně vygenerována hodnota ze spojitého rovnoměrného rozdělení z intervalu odpovídajícího hranicím třídy. Takto získané hodnoty jsou realizacemi náhodné veličiny s daným po částech rovnoměrným rozdělením.

Pokud je třeba rychlost generování dále zvýšit, a je možné původní spojitě rozdělení nahradit diskrétním, je možné vypustit druhý krok popsaného postupu a generované diskrétní hodnoty považovat za velikosti středních hodnot jednotlivých tříd (viz obr. 4).



Obr. 4 : Po částech rovnoměrné a diskrétní rozdělení

7. Souhrn a závěry

Výše popsaný postup reprezentace náhodně proměnných veličin byl implementován v programech pro určování spolehlivosti konstrukcí metodou SBRA („Simulation-Based Reliability Assessment“) [3]. V průběhu poslední dekády byly touto metodou řešeny stovky různých konkrétních úloh a publikováno mnoho prací o dílčích výsledcích, jak v ČR, tak v zahraničí (viz např. seznamy publikací uvedené v [4]). Zvyšování výkonnosti dostupných počítačů umožňuje efektivní aplikaci metody Monte Carlo. Tímto směrem se rozvíjí metoda SBRA, která může m.j. sloužit projektantům, studentům a dalším odborníkům k uvedení do problematiky netradičního pojetí posudku spolehlivosti konstrukcí.

Literatura

- [1] KNUTH, D. E., *The Art of Computer Programming*, Addison-Wesley, 1997.
- [2] HURT, J., *Simulační metody*, SPN Praha, 1982.
- [3] MAREK, P., GUŠTAR, M., ANAGNOS, T., *Simulation-Based Reliability Assessment for Structural Engineers*, CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida, 1995.
- [4] <http://www.itam.cas.cz/sbra>

Príspevek byl vypracován za podpory GAČR, číslo projektu 103/00/0215.