

# Aplikace matematiky

---

Václav Dupač  
Metody Monte Carlo

*Aplikace matematiky*, Vol. 7 (1962), No. 1, 1-20

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/102783>

## Terms of use:

© Institute of Mathematics AS CR, 1962

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

## METODY MONTE CARLO

VÁCLAV DUPAČ

(Došlo dne 16. ledna 1961.)

Článek je úvodem do teorie a aplikací metod Monte Carlo. V odstavcích 1—4 je vysvětlen praktický význam metod Monte Carlo na příkladech z operačního výzkumu, fyziky, matematické statistiky a numerické matematiky. V odstavci 5 jsou formulovány obecné principy metod Monte Carlo a je vyložena technika korelovaného výběru a výběru podle důležitosti. V odstavci 6 je popsána konstrukce náhodných výběrů z předepsaného rozložení metodou přímou a metodou von Neumannovou. V odstavci 7 je vyložena kongruenční metoda vytváření pseudonáhodných čísel a jsou uvedeny některé vlastnosti těchto čísel.

Dříve než přistoupíme k formulaci obecných principů metod Monte Carlo, vyjmenujeme si hlavní oblasti, v nichž se metody Monte Carlo aplikují; z každé této oblasti si podrobněji probereme jeden nebo dva příklady.

### 1. OPERAČNÍ VÝZKUM

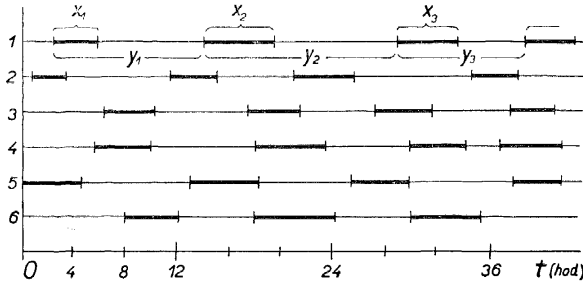
H. G. JONES a A. M. LEE [1] se zabývají ztrátovými časy v ocelárnách. Uvádějí pro určitý typ siemens-martinských pecí konkrétní údaje: vsázka peci obsahuje asi 80 t šrotu; složení šrotu kolísá ve váze i tvaru jednotlivých kusů a způsobuje kolísání vsázeční doby  $\xi$  kolem střední hodnoty  $4\frac{1}{4}$  hod.; doba jednoho cyklu  $\eta$ , který zahrnuje vsázení, tavbu, zušlechťování, lití a úpravu pecní pudy, je rovněž variabilní, zejména následkem chemické nestejnorodosti šrotu, a kolísá kolem střední hodnoty  $10\frac{1}{2}$  hod. Sdružené rozložení náhodných veličin  $\xi$  a  $\eta$  lze považovat za dvojrozměrné normální rozložení o známých parametrech.

Modelujme provoz ocelárny o šesti siemens-martinských pecích tak, že provoz každé peci znázorníme posloupností dvojic výběrových hodnot  $(x_i, y_i)$ , kterých nabývají náhodné veličiny  $(\xi, \eta)$  — obr. 1.

Otázku, jak konstruovat výběrové hodnoty náhodných veličin s předepsaným rozložením, odkládáme v tomto příkladě i v následujících příkladech do odstavce 6.

Model provozu, znázorněný na obr. 1, obsahuje nereálný předpoklad, že každá pec má k dispozici vlastní pomocnou soupravu, zejména vlastní vsázeční stroj. Nechť

však ocelárna o šesti SM-pecích má k dispozici jen tři vsázecí stroje. Pak může dojít k situaci, kdy se překrývají vsázecí doby čtyř nebo více pecí; tehdy nastane zdržení provozu. Autoři aproximují závislost zdržení na době překrytí takto: zdržení je u všech pecí, u kterých nastalo, rovno  $\frac{1}{2}$  hodině, překrývají-li se vsázecí doby o více než  $1\frac{1}{2}$  hod.; jinak je lze zanedbat. Nyní je možno na modelu studovat např. jakého zvýšení produkce se dosáhne zařazením dalšího vsázecího stroje; autoři se však podrobně zabývají jinou otázkou: zda lze redukovat ztrátové časy nějakým způsobem, který nevyžaduje investic, ani zvýšených nákladů. Výrobní zkušenosti i modelování

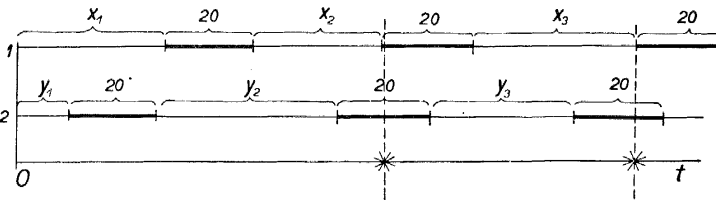


Obr. 1.

totiž ukazují, že překrývání operací, jednou nastalé, má tendenci opakovat se ještě několik dní; jen pozvolna se provoz pecí „odděluje“. Oddělený provoz trvá opět několik dní, dokud se operace nezačnou znovu překrývat. Autoři doporučují zkrátit „období překrývání“ tím, že u jedné z pecí, u kterých se operace překrývají, se doba cyklu zkrátí asi o 1 hod. (např. výrobou oceli jednodušší specifikace) a u jiné z těchto pecí se doba cyklu prodlouží o 1 hod. (např. použitím méně kvalitního šrotu). Na modelu pak autoři studují, jak se tyto zásahy do výroby projeví v průběhu dlouhého období; zjišťují zejména, že popsany zásah bude třeba provést průměrně jednou za  $2\frac{1}{2}$  dne a že se tak dosáhne zvýšení produkce v průměru o 2,3% (poslední hodnota je poněkud podceňena, neboť autoři vycházejí z pesimistického předpokladu, že z šesti pecí bude stále jedna v opravě; modelují tedy vlastně provoz pěti pecí, zato však bezporuchový).

Jako další příklad uvedme úlohu, kterou studuje W. N. JESSOP [2]: Podnik hodlá vybudovat provoz skládající se ze dvou pecí, každá o třech předeřhřívácích; obě peci vytápějí jedinou vypalovací pec. Pec je vyřazena z provozu, je-li vyřazen kterýkoliv její předeřhřívák; v tom případě se provádí oprava celé peci, tj. všech tří předeřhříváků. Doba opravy peci je konstantní – 20 dnů; během této doby stačí druhá pec udržet vypalovací pec v provozu; selže-li i druhá pec během této doby, je celý objekt vyřazen z provozu. Je známo empirické rozložení doby života předeřhříváku, tj. jeho nepřetržitého provozu. Autor hledá odpověď na otázku, jaká je pravděpodobnost jednoho nebo více vyřazení celého objektu během šestiměsíčního

provozu. Úloha se řeší modelováním: vytvářejí se výběrové hodnoty doby života předešlých a ty se sdružují v trojice; nejmenší hodnoty z každé trojice představují výběrové hodnoty života peci (např.  $x_1, x_2, \dots$  pro první pec,  $y_1, y_2, \dots$  pro druhou pec). Provoz obou pecí za delší časové období se znázorní na časové ose (obr. 2): Překrytí intervalů opravy je na obr. 2 znázorněno hvězdičkou na časové ose a značí vyřazení celého objektu z provozu. Z dostatečně dlouhého modelu se pak získá empirické rozložení dob mezi dvěma po sobě následujícími vyřazeními celého provozu. Autor citovaného článku modeloval tak dlouho, až dostal 400 výběrových hodnot tohoto rozložení; zjistil, že se dobře shoduje s exponenciálním rozložením



Obr. 2.

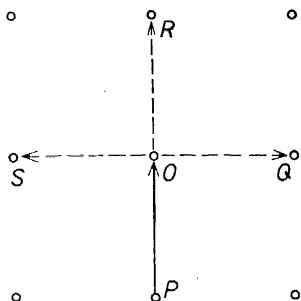
o střední hodnotě  $\mu = 570$  dní. Odtud pak vyplývá, že počet vyřazení během doby  $T$  lze považovat za náhodnou veličinu s Poissonovým rozložením o parametru  $T/\mu$ . Pro  $T = 180$  dní jest  $P_0 = 0,729, P_1 = 0,230, \sum_{i=2} P_i = 0,041$ , kde  $P_i$  značí pravděpodobnost, že během 180 dní dojde právě k  $i$  vyřazením celého provozu.

Obecně lze říci, že v oblasti operačního výzkumu se metody Monte Carlo aplikují hlavně na problémy hromadné obsluhy (front), skladu a dopravy (R. A. LEVINE, R. B. RAINEY [3], A. KORGANOFF [4], J. P. BOSS [4a]). Do této oblasti patří také aplikace metod Monte Carlo na problémy vojenské. (Např. modelování akce svazu bombardovacích letadel nebo modelování trajektorií řízených střel s ohledem na náhodné vlivy, zejména na náhodné fluktuace řídicího paprsku.)

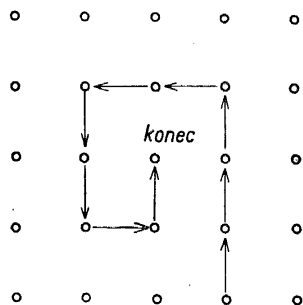
## 2. FYZIKÁLNÍ ÚLOHY

Různí autoři se zabývali studiem neprotínající se náhodné procházky. Neprotínající se náhodnou procházku koná bod pohybující se po mřížových (celočíselných) bodech v rovině ve směru souřadných os a to tak, že na každém kroku se náhodně rozhoduje mezi těmi ze čtyř sousedních mřížových bodů, jimiž dosud neprošel. Jestliže např. na obr. 3 pohybující se bod byl po  $(i - 1)$ -ním kroku v poloze  $P$  a po  $i$ -tém kroku v poloze  $O$ , pak v  $(i + 1)$ -ním kroku přejde se stejnou pravděpodobností  $\frac{1}{3}$  do jednoho z mřížových bodů  $Q, R, S$ , za předpokladu, že dosud v žádném z nich nebyl. Náhodná procházka končí, dostane-li se pohybující se bod do takového mřížového bodu, jehož všemi čtyřmi sousedy již prošel. (Viz např. obr. 4.)

Neprotrínající se náhodné procházky se studují jakožto teoretický model řetězců vyšších polymerů. Podmínka neprotrínání odpovídá fyzikálnímu názoru, že žádné dvě molekuly polymerního řetězce nemohou zaujímat touž polohu. Pomocí modelu náhodného řetězce lze odvodit některé fyzikální vlastnosti vyšších polymerů, jako je jejich pružnost, vazkost, rozpustnost, sedimentace aj. V těchto vlastnostech vystupuje veličina  $E(r_n^2)$ , tj. střední hodnota čtverce vzdálenosti koncových bodů náhodného řetězce skládajícího se z  $n$  článků. Funkční závislost veličiny  $E(r_n^2)$  na  $n$  není přesně známa a byla proto počítána metodou Monte Carlo, tj. odhadována



Obr. 3.



Obr. 4.

z velkého počtu náhodných procházek, modelovaných pomocí náhodných čísel (R. S. LEHMAN, G. H. WEISS [5], J. HAMMERSLEY, K. MORTON [6], M. ROSENBLUTH, A. ROSENBLUTH [7]).

Jedním z typických problémů, jež lze řešit metodami Monte Carlo je problém transmise neutronů — H. KAHN [8]. Nechť na desku, jež má konečný rozměr  $a$  ve směru osy  $x$  a je nekonečná ve směru osy  $y$  a  $z$ , dopadá zleva svazek neutronů o známém rozložení úhlů a energií. Má se určit podíl transmitovaných neutronů, resp. jejich rozložení úhlů a energií. Úloha se řeší modelováním historií jednotlivých neutronů:

1. Zvolí se náhodně neutron z počátečního rozložení úhlů a energií; jeho energie budiž  $\alpha_0$ , úhel, který jeho dráha svírá s normálou (tj. s osou  $x$ ), budiž  $\lambda_0$ .
2. Zvolí se souřadnice  $x_1$  první interakce z exponenciálního rozložení

$$h(x_1) = \frac{\mu(\alpha_0)}{\cos \lambda_0} e^{-\frac{\mu(\alpha_0)x_1}{\cos \lambda_0}},$$

kde  $\mu(\alpha_0)$  je celkový účinný průřez ( $1/\mu(\alpha_0)$  je celková střední volná dráha).

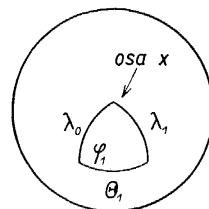
3. Zvolí se typ jádra, s nímž dochází k první interakci. Pravděpodobnosti jednotlivých typů jsou dány složením desky a účinnými průřezy jader.
4. Zvolí se typ první interakce; je-li jím absorpce, pak historie končí; je-li jím rozptyl (srážka), zvolí se nová hodnota energie neutronu z příslušného rozložení.

5. Jde-li o pružnou srážku, pak se ze změny energie neutronu přímo vypočte nový úhel jeho dráhy. Jde-li o nepružnou srážku, zvolí se nejprve odchylka  $\Theta_1$  z rozložení úhlových odchylek při nepružných srážkách a azimutální odchylka  $\varphi_1$  z rovnoměrného rozložení v intervalu  $\langle 0, 2\pi \rangle$  a nový směrový kosinus (vzhledem k ose  $x$ ) dráhy neutronu se vypočte ze vzorce

$$\cos \lambda_1 = \cos \lambda_0 \cos \Theta_1 + \sin \lambda_0 \sin \Theta_1 \cos \varphi_1$$

(viz obr. 5).

Nyní se kroky 2–5 opakují s novými hodnotami  $\alpha_1, \lambda_1$ . Modelování pokračuje do té doby, pokud nedojde k absorpci, odrazu, transmisi nebo k poklesu energie neutronu na zanedbatelnou úroveň. Z velkého počtu modelovaných historií lze pak zodpovědět danou otázku.



Obr. 5.

Popsaný postup modelování se často modifikuje tím, že se vylučuje možnost absorpce a namísto toho se každému neutronu na počátku historie přidělí statistická váha 1, která se při každé interakci násobí pravděpodobností „přežití“ (tj. doplňkem pravděpodobnosti absorpce). Pravděpodobnost přežití  $i$ -té interakce je rovna  $\sigma(\alpha_{i-1})/\mu(\alpha_{i-1})$ , kde  $\sigma$  značí účinný průřez rozptylu a  $\mu$  celkový účinný průřez.

Zdůrazněme ještě, že nestejnorodost složení desky ani její geometrie neovlivňují podstatně složitost řešení metodou Monte Carlo.

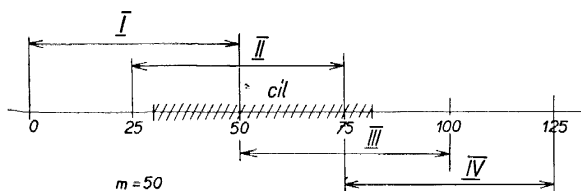
Podobnou tematikou se zabývali M. J. BERGER [9] a L. A. BEACH, R. B. THEUS [10], kteří použili metod Monte Carlo na problém difuze záření gama, a N. M. DISMUKE [11], která studovala metodou Monte Carlo účinky záření složeného z neutronů na lidskou tkáň.

Popišme si konečně použití metod Monte Carlo v problémech statistické detekce (volně podle G. P. DINNEEN, I. S. REED [12], J. V. HARRINGTON [13]).

Přehledový radiolokátor vysílá nosnou vlnu modulovanou krátkodobým pulsem (o trvání např. 1  $\mu$ s), periodicky opakovaným (např. s opakovací periodou 1 ms). Během každé opakovací periody je v činnosti přijímač, zachycující pulsy odražené od cíle; změřením doby mezi vysláním pulsu a příjmem odraženého pulsu je určena délka cíle. Anténní systém lokátoru soustřeďuje vyzařovanou energii v úzký svazek (např. o šířce 3°), jehož směr se plynule mění otáčením antény; tím je umožněno přibližně stanovení azimutu cíle. (Rychlost otáčení je např. 10 otáček za min.) Dosah lokátoru je omezený, neboť intenzita odraženého signálu klesá s rostoucí délkou cíle; běžnými prostředky lze odlišit odražený signál na šumovém pozadí jen tehdy, převyšuje-li úroveň odraženého signálu několikanásobně střední úroveň šumu.

Jednou z metod, jak zvýšit dosah lokátoru, je metoda statistické detekce; popíšeme si jednu její variantu. Rozdělme každou opakovací periodu na dílčí intervaly o délce rovné trvání jednoho pulsu (1  $\mu$ s); každý interval tedy odpovídá určitému rozmezí délky cíle. Stanovme určitou kritickou úroveň signálu a přiřadme každému intervalu

počítací obvod, který zaznamená jedničku, byla-li v tomto intervalu kritická úroveň překročena, a nulu, nebyla-li překročena. Ve všech počítacích obvodech se sčítají jedničky za  $m$  po sobě následujících period; po jejich uplynutí se počítače opět nastaví na nulu; za  $m$  se volí počet opakovacích period odpovídající šířce vyzařovaného svazku, tj.  $m$  period značí dobu, po kterou lokátor „vidí“ cíl. (V našem numerickém příkladě vychází  $m = 50$ .) Dále zvolme číslo  $k$  ( $1 \leq k \leq m$ ); je-li v některém počítači číslo  $k$  dosaženo, hlásí samočinné zařízení detekci cíle (na příslušné dálce). Známe-li statistické vlastnosti šumu, lze pro danou kritickou úroveň určit pravděpodobnost  $p_0$  jejího překročení za hypotézy, že je přijímán pouze šum, i pravděpodobnost  $p_1$  jejího překročení za hypotézy, že je přijímána směs šumu a signálu;



Obr. 6.

$p_1$  je funkcí úrovně „užitečného“ signálu. Počet jedniček zaznamenaných na určité dálce během  $m$  opakovacích period je pak náhodnou veličinou s binomickým rozložením o parametru  $p_0$  resp.  $p_1$ ; volba čísla  $k$  je určena volbou pravděpodobnosti „falešného poplachu“  $\alpha$ , tj. ve statistické terminologii: pravděpodobnosti chyby prvního druhu. Rozhodování o přítomnosti cíle se provádí současně na všech dálkách; za jistých předpokladů o šumu a při vhodné volbě propustného pásma přijímače jsou všechny testy nezávislé. Pravděpodobnost  $\alpha$  se obvykle určí požadavkem, aby došlo průměrně k jednomu „falešnému poplachu“ za dobu  $T$ . (Číslo  $\alpha$  v těchto úlohách bývá mnohem menší než je ve statistické praxi běžné; volíme-li  $T = 1$  hod. a sledujeme-li současně 700 dálek, vychází v našem příkladě  $\alpha \approx 2 \cdot 10^{-8}$ .)

Pravděpodobnost detekce  $\beta$ , tj. pravděpodobnost, že cíl bude skutečně objeven (ve statistické terminologii: síla testu) se snadno určí z tabulek binomického rozložení, ovšem za předpokladu, který jsme dosud činili, že  $m$  period, během nichž lokátor „vidí“ cíl, splývá s některou skupinou  $m$  period, během nichž se provádí sčítání. Tento předpoklad je však nereálný; proto se provádí sčítání jedniček v  $m$ -členných skupinách s překrýváním; např. se sčítá v periodách 1 až  $m$ , pak v periodách  $m/2$  až  $3m/2$ , pak  $m + 1$  až  $2m$  atd. Ani nyní nemusí splývat oblast cíle se žádnou skupinou sčítání. Jejich vzájemně posunutí považujeme za náhodnou veličinu, nabývající hodnot 0, 1, ...,  $m/2$  se stejnými pravděpodobnostmi, a počítáme pravděpodobnost detekce  $\beta$ . Detekci budeme rozumět příklad, kdy aspoň v jedné ze skupin sčítání, do nichž zasahuje oblast cíle, je dosaženo čísla  $k$ . Oblast cíle může zasahovat nejvýš do čtyř překrývajících se skupin sčítání (obr. 6): Při výpočtu metodou Monte

Carlo potřebujeme k jednomu modelu skutečné situace ve skupinách I až IV  $3m/2$  výběrových hodnot náhodné veličiny, nabývající hodnot 1 a 0 s pravděpodobnostmi  $p_0$  resp.  $1 - p_0$  a  $m$  výběrových hodnot náhodné veličiny nabývající hodnot 1 a 0 s pravděpodobnostmi  $p_1$  resp.  $1 - p_1$  (a konečně jedno náhodné číslo mezi 0 až  $m/2$ , které určí posunutí začátku cíle vůči skupině II). Dosáhne-li aspoň v jedné ze skupin I, II, III, IV počet jedniček čísla  $k$ , dojde k detekci cíle. Těchto modelů realizujeme  $N$ ; dojde-li v  $M$  z nich k detekci cíle, pak podíl  $M/N$  je odhadem pravděpodobnosti  $\beta$ ; směrodatná odchylka tohoto odhadu je  $\sqrt{\beta(1 - \beta)/N}$ .

Dinneen a Reed řeší v citovaném článku metodou Monte Carlo poněkud složitější varianty statistické detekce, založené na výskytu iterací nul a jedniček.

### 3. MATEMATICKÁ STATISTIKA

Do této skupiny aplikací náleží vlastně také posledně uvedený příklad, který, nehledě na fyzikální formulaci, je jen příkladem statistického ověřování hypotéz.

Uveďme ještě (v poněkud obecnější formulaci) problém vylučování hrubých chyb měření. Mějme  $n$  pozorování náhodné veličiny, která má normální rozložení o neznámých parametrech  $\mu$ ,  $\sigma$ . Nechť jedna z pozorovaných hodnot je o tolik vyšší než ostatní, že budí podezření, že nepochází z téhož souboru jako ostatní, nýbrž ze souboru, jehož střední hodnota  $\mu'$  je vůči  $\mu$  posunuta ( $\mu' = \mu + \lambda\sigma$ , měříme-li posunutí v násobcích směrodatné odchylky  $\sigma$ ). Je třeba rozhodnout, zda „podezřelou“ hodnotu máme ze skupiny pozorování vyloučit, či zda ji máme ponechat. Pro toto rozhodování byla navržena řada kritérií; jedním z nich je např. kritérium  $r_{10} = (x_n - x_{n-1})/(x_n - x_1)$ , kde  $x_n$  značí největší,  $x_{n-1}$  druhou největší a  $x_1$  nejmenší hodnotu pozorování; je-li  $r_{10}$  větší než jisté číslo  $k$ , pak pozorování  $x_n$  vyloučíme, je-li  $r_{10} < k$ , ponecháme. Číslo  $k$  je určeno požadavkem, aby pravděpodobnost nesprávného vyloučení pozorování  $x_n$  byla rovna  $\alpha$  (např.  $\alpha = 0,05$ ); výpočet čísla  $k$  lze provést analyticky. Pro posouzení účinnosti kritéria je pak nutno nalézt pravděpodobnost správného vyloučení  $\beta$  (přesněji: pravděpodobnost, že kritérium vyloučí hodnotu, která náleží do souboru  $N(\mu + \lambda\sigma, \sigma)$ ; tato pravděpodobnost je funkcí posunutí  $\lambda$ ). Výpočet metodou Monte Carlo pro  $n = 5$  a  $n = 15$ , pro  $\lambda = 1, 2, 3, \dots, 8$  a pro různá kritéria provedl W. J. DIXON [14]. Početní postup je zřejmý: vytvoříme uměle  $n$  pozorování náhodné veličiny s normálním rozložením; jednu z pozorovaných hodnot (náhodně zvolenou) zvětšíme o  $\lambda\sigma$  a aplikujeme vyšetřované kritérium; je-li jím tato zvětšená hodnota vyloučena, považujeme „pokus“ za zdařilý. Relativní počet zdařilých pokusů z celkového počtu  $N$  pokusů je odhadem hledané pravděpodobnosti  $\beta$ . (V citované práci bylo číslo  $N$  voleno v rozmezí 66 až 200.)

Metodami Monte Carlo bylo dále studováno např. rozložení složitých výběrových charakteristik (ARNOLD, BUCHER, TROTTER, TUKEY [15]), nebo byly srovnávány metody odhadu strukturních parametrů v soustavě lineárních stochastických rovnic (H. M. WAGNER [15a]) apod.



#### 4. NUMERICKÁ MATEMATIKA

Řešme rovnici

$$(1) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

uvnitř čtverce  $A = \langle 0, 1 \rangle \times \langle 0, 1 \rangle$ , jsou-li předepsány hodnoty funkce  $u$  na obvodě tohoto čtverce (Dirichletova úloha). Ve čtverci  $A$  sestrojíme čtvercovou síť o straně  $h$ ; rovnici (1) aproximativně nahradíme (známým způsobem) diferenční rovnici

$$u(P) = \frac{1}{4}[u(P_1) + \dots + u(P_4)],$$

kde  $P$  značí mřížový bod uvnitř čtverce  $A$  a  $P_1, \dots, P_4$  značí mřížové body sousední k  $P$ , s okrajovou podmínkou

$$u(R) = f(R)$$

pro mřížové body  $R$  na obvodě čtverce  $A$ ;  $f$  je daná funkce.

Definujme nyní náhodnou procházku a s ní spojenou náhodnou veličinu tímto předpisem: náhodná procházka začíná v pevně zvoleném bodě  $P$ ; jsme-li v některém kroku v některém vnitřním bodě  $Q$ , pak v následujícím kroku přejdeme se stejnou pravděpodobností  $\frac{1}{4}$  do některého ze čtyř sousedních bodů  $Q_1, \dots, Q_4$ ; procházka končí, dosáhneme-li některého okrajového bodu  $R$ ; náhodná veličina pak nabude hodnoty  $f(R)$ . Modelujme nyní  $N$  náhodných procházek vycházejících z bodu  $P$ ; výběrový průměr uvažované náhodné veličiny je pak odhadem hodnoty funkce  $u$  v bodě  $P$ .

Důkaz: Označme  $w_{P,R}^{(n)}$  pravděpodobnost, že náhodná procházka vycházející z bodu  $P$  bude po  $n$  krocích v bodě  $R$ ; zřejmě platí vztah

$$w_{P,R}^{(n+1)} = \frac{1}{4}[w_{P_1,R}^{(n)} + \dots + w_{P_4,R}^{(n)}];$$

přejdeme k limitě pro  $n \rightarrow \infty$ ; (existence  $\lim_{n \rightarrow \infty} w_{P,R}^{(n)} = w_{P,R}$  je zaručena jistou obecnou větou z teorie Markovových řetězců); dostáváme:

$$w_{P,R} = \frac{1}{4}[w_{P_1,R} + \dots + w_{P_4,R}].$$

Násobme obě strany výrazem  $f(R)$  a sečtěme přes všechna okrajová  $R$ :

$$(2) \quad \sum_R f(R) w_{P,R} = \frac{1}{4}[\sum_R f(R) w_{P_1,R} + \dots + \sum_R f(R) w_{P_4,R}].$$

Označme střední hodnotu uvažované náhodné veličiny jako  $U(P)$ ; pak lze (2) psáti:

$$(3) \quad U(P) = \frac{1}{4}[U(P_1) + \dots + U(P_4)].$$

Konečně uvažme, že náhodná procházka vycházející z okrajového bodu  $R$  v tomto bodě setrvá; je tedy uvažovaná náhodná veličina i její střední hodnota rovna  $f(R)$ , tj.

$$(4) \quad U(R) = f(R).$$

Z (3) a (4) plyne, že střední hodnota  $U$  je řešením dané úlohy. Srv. FRIEDRICHS, COURANT, LÉVY [16].

Modifikací popsané náhodné procházky lze řešit i složitější okrajové úlohy; W. F. BAUER [17] udal např. metodou Monte Carlo řešení rovnice

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, y) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} u(x, y) + g(x, y) \cdot u(x, y) = f(x, y)$$

uvnitř nějaké oblasti  $S$ , s okrajovou podmínkou

$$\frac{\partial}{\partial n} u(x, y) = p \cdot u(x, y)$$

(zde  $\partial/\partial n$  značí derivaci ve směru vnitřní normály ke hranici oblasti;  $g, f$  jsou dané funkce ( $g \leq 0$ ),  $p$  je kladná konstanta.)

Metodami Monte Carlo lze dále řešit úlohy inverse matic – G. E. FORSYTHE, R. A. LEIBLER [18] – numerického řešení integrálních rovnic – J. H. CURTISS [19], B. C. ВЛАДИМИРОВ [20] – výpočtu vícerozměrných integrálů – K. D. ТОЧЕР [21], V. ДУРАЧ [22] – a některé jiné úlohy.

Je třeba říci, že všechny tyto úlohy jsou řešitelné i běžnými numerickými metodami. Ačkoliv metody Monte Carlo mají některé výhody – umožňují např. vypočítat jediný prvek inverzní matice bez výpočtu ostatních prvků, nebo řešení okrajové úlohy v jednom nebo několika bodech – zůstane asi jejich praktické použití v numerické matematice omezeno na ojedinělé případy.

## 5. OBECNĚ O METODÁCH MONTE CARLO

Zvláštností společnou všem probraným příkladům je to, že určitý problém, v němž vystupují náhodné veličiny, se neřeší (a často ani neformuluje) matematicky, nýbrž řeší se vytvářením umělých náhodných výběrů a početními operacemi, většinou velmi jednoduchými, s těmito výběrovými hodnotami. Tento postup řešení se nazývá metodou Monte Carlo (nebo také metodou matematického experimentu). Probrané příklady metod Monte Carlo lze popsat tímto schématem:

Řešením daného problému je střední hodnota veličiny  $\Xi$ , která může být i více-rozměrná a která je známou funkcí nenáhodných veličin (parametrů) i náhodných veličin:

$$\Xi = f(a, b, c, \dots; \xi, \eta, \zeta, \dots).$$

Hodnoty parametrů  $a, b, c, \dots$  jsou známy, rovněž je známo sdružené rozložení náhodných veličin  $\xi, \eta, \zeta, \dots$ . Pro libovolné výběrové hodnoty  $x, y, z, \dots$  náhodných veličin  $\xi, \eta, \zeta, \dots$ , lze vypočítati příslušnou hodnotu  $X$  náhodné veličiny  $\Xi$ ; teoretický výpočet střední hodnoty  $E(\Xi)$  je však prakticky neproveditelný. Přibližné určení  $E(\Xi)$  se pak provádí tak, že se vytvoří výběrové hodnoty  $x_i, y_i, z_i, \dots$ , náhodných veličin  $\xi, \eta, \zeta, \dots$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), k nim se vypočtou výběrové hodnoty  $X_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) a střední hodnota  $E(\Xi)$  se odhaduje aritmetickým průměrem

$$\sum_{i=1}^N X_i / N.$$

Řešení nalezená metodou Monte Carlo mají tedy povahu statistických odhadů. Jejich přesnost je zpravidla řádu  $N^{-\frac{1}{2}}$ , tedy poměrně malá. Názorně to znamená, že musíme stonásobně zvýšit rozsahy výběrů, chceme-li výsledky zpřesnit o jedno desetinné místo; pro výpočty s velkými nároky na přesnost se tedy metody Monte Carlo nehodí. U některých výpočtů metodou Monte Carlo lze předem stanovit rozsah výběru potřebný k dosažení žádané přesnosti výsledků (např. při výpočtu pravděpodobnosti detekce  $\beta$  nebo při vyšetřování účinnosti kritéria  $r_{10}$ ); jindy tomu tak není (např. při modelování provozu SM pecí). Obyčejně však lze během výpočtu rozhodnout, zda získané výsledky jsou již dostatečně přesné, či zda se má v modelování pokračovat.

Konstrukce umělých náhodných výběrů je podstatnou částí každé aplikace metod Monte Carlo; metody Monte Carlo tedy jistě souvisí s technikou výběrových šetření a lze při nich uplatnit různé obraty, jež snižují rozptyl odhadů resp. potřebný rozsah výběrů. Popišme si dva z těchto obrátů, jež jsou nejběžnější v metodách Monte Carlo: korelovaný výběr a výběr podle důležitosti – H. KAHN, A. W. MARSHALL [23].

Korelovaný výběr. Srovnáváme-li efektivnost dvou (např. výrobních) postupů, odhadujeme vlastně střední hodnotu rozdílu dvou náhodných veličin  $\Xi = \Xi^{(1)} - \Xi^{(2)}$ ; v příkladě o ztrátových časech v ocelárně jsme srovnávali provoz bez umělých zásahů a provoz s umělým zkracováním období překrývání;  $\Xi^{(1)}$  znamenalo produkci za určité období při prvním postupu,  $\Xi^{(2)}$  – produkci za totéž období při druhém postupu. Ježto

$$\sigma^2(\Xi) = \sigma^2(\Xi^{(1)}) + \sigma^2(\Xi^{(2)}) - 2\rho(\Xi^{(1)}, \Xi^{(2)})\sigma(\Xi^{(1)})\sigma(\Xi^{(2)}),$$

je zřejmé, že rozptyl  $\sigma^2(\Xi)$  je podstatně menší je-li mezi  $\Xi^{(1)}$  a  $\Xi^{(2)}$  vysoká kladná korelace než v případě, kdy  $\Xi^{(1)}$  a  $\Xi^{(2)}$  jsou nekorelované. Jsou-li  $\Xi^{(1)}$  a  $\Xi^{(2)}$  funkcemi týchž náhodných veličin

$$\begin{aligned} \Xi^{(1)} &= f^{(1)}(a^{(1)}, b^{(1)}, c^{(1)}, \dots; \xi, \eta, \zeta, \dots), \\ \Xi^{(2)} &= f^{(2)}(a^{(2)}, b^{(2)}, c^{(2)}, \dots; \xi, \eta, \zeta, \dots) \end{aligned}$$

a jestliže se funkce  $f^{(1)}$  a  $f^{(2)}$  příliš neliší (tj. jsou-li srovnávané postupy podobné, jako je tomu v našem příkladě), lze kladné korelace mezi  $\Xi^{(1)}$  a  $\Xi^{(2)}$  dosáhnout párováním modelů, to znamená, že na základě týchž výběrových hodnot  $x_i, y_i, z_i, \dots$ , vypočteme jak výběrovou hodnotu  $X_i^{(1)}$ , tak  $X_i^{(2)}$ . V našem příkladě nejprve znázorníme provoz všech pecí posloupnostmi výběrových hodnot vsázecích dob a dob cyklů, při čemž neuvažujeme zdržení, a pak do téhož modelu zavedeme příslušnými úpravami zdržení odpovídající prvému resp. druhému postupu.

Korelovaného výběru použil také Dixon ve výše citovaném příkladě vyšetřování kritérií pro vylučování hrubých chyb měření; aby srovnal účinnost různých kritérií, aplikoval (pro dané  $n$  a  $\lambda$ ) vždy všechna srovnávaná kritéria na tutéž skupinu pozorování.

Výběr podle důležitosti. Střední hodnotu  $E(\Xi)$ , jež je řešením dané úlohy, lze psát (omezíme-li se na spojitý příklad)

$$E(\Xi) = \int f(a, b, c, \dots; x, y, z, \dots) \varphi(x, y, z, \dots) dx dy dz \dots,$$

kde  $\varphi(x, y, z, \dots)$  je hustota pravděpodobnosti náhodných veličin  $\xi, \eta, \zeta, \dots$  v problému vystupujících; v zjednodušeném zápisu

$$E(\Xi) = \int f(U) \varphi(U) dU.$$

Nechť  $\psi(U)$  je libovolná hustota taková, že  $\psi(U) \neq 0$  pro všechna  $U$ , pro která  $f(U) \varphi(U) \neq 0$ ; potom je také

$$E(\Xi) = \int \frac{f(U) \varphi(U)}{\psi(U)} \cdot \psi(U) dU = \int g(U) \psi(U) dU.$$

Místo odhadu  $\sum_{i=1}^N f(U_i)/N$ , kde  $U_1, U_2, \dots, U_N$  je náhodný výběr z  $\varphi(U)$ , lze tedy použít odhadu  $\sum_{i=1}^N g(U'_i)/N$ , kde  $U'_1, U'_2, \dots, U'_N$  je náhodný výběr z  $\psi(U)$ . Oba odhady mají tutéž střední hodnotu  $E(\Xi)$ , obecně však různé rozptyly. Rozptyl odhadu  $\sum_{i=1}^N g(U'_i)/N$  jest roven

$$\frac{1}{N} \left\{ \int g^2(U) \psi(U) dU - [E(\Xi)]^2 \right\};$$

je-li  $f(U)$  nezáporná funkce, pak volbou

$$\psi(U) = \frac{f(U) \varphi(U)}{\int f(U) \varphi(U) dU}$$

lze zřejmě tento rozptyl anulovat. Těto volby lze ovšem použít jen tehdy, známe-li už řešení celé úlohy —  $\int f(U) \varphi(U) dU$ ; nicméně praktický význam popsaného obratu je značný: vhodnou volbou „pracovní“ hustoty  $\psi(U)$  můžeme pronikavě snížit rozptyl odhadu a tedy i potřebný rozsah výběru, totiž tehdy, je-li zvolená  $\psi(U)$  blízka optimálnímu výrazu. Popsaný obrat se uvádí pod názvem výběr podle důležitosti; snažíme se totiž konstruovat umělý náhodný výběr tak, aby pravděpodobnost, že bude vybrána hodnota  $U$  (lépe: mezi  $U$  a  $U + dU$ ), byla úměrná  $f(U) \varphi(U)$ ; tuto funkci lze však považovat za jakousi míru důležitosti bodu  $U$ , neboť  $f(U) \varphi(U)$  je mírou příspěvku bodu  $U$  k hledané hodnotě  $E(\Xi) = \int f(U) \varphi(U) dU$ .

Např. v úloze o transmisi neutronů znamená  $\varphi(U)$  sdružené rozložení všech náhodných veličin vystupujících v historii neutronu, tj. počáteční energie neutronu a úhel dopadu, souřadnice bodu první interakce, typ první interakce, energie neutronu po první srážce, úhlová odchylka, azimutální odchylka, úhel dráhy neutronu po

první srážce, souřadnice bodu druhé interakce atd. Zajímá-li nás otázka, jaký podíl  $P$  dopadajících neutronů projde deskou, pak funkce  $f(U)$  ve výrazu  $P = \int f \varphi dU$  nabývá jen hodnot 1 nebo 0, podle toho, zda neutron projde či neprojde deskou. Budeme se tedy snažit zvýšit pravděpodobnost „důležitých“ historií  $U$ , tj. těch, pro něž  $f(U) = 1$ . K tomuto cíli vedou zřejmě takové transformace  $\varphi(U)$  na  $\psi(U)$ , které zvyšují a) pravděpodobnost srážek, jejichž výsledkem jsou malé hodnoty  $\lambda$  ( $\lambda$  je úhel dráhy neutronu s kladným směrem osy  $x$ ); b) pravděpodobnost srážek, jejichž výsledkem jsou malé ztráty energie; c) pravděpodobnost dlouhých volných drah v kladném směru osy  $x$ ; d) pravděpodobnost přežití. Při tom je třeba, aby odpovídající transformace funkce  $f(U)$  na  $g(U)$  byla početně snadno proveditelná. H. Kahn [8] udává následující transformaci, jež splňuje požadavek c):

Podmíněná rozložení souřadnic jednotlivých srážek, jež jsou dána hustotami

$$\frac{\mu(\alpha_{k-1})}{\cos \lambda_{k-1}} e^{-\frac{\mu(\alpha_{k-1})(x_k - x_{k-1})}{\cos \lambda_{k-1}}} \quad \text{pro } x_k > x_{k-1}, k = 1, 2, \dots$$

(resp. se zřejmou obměnou, je-li  $\cos \lambda_{k-1} < 0$ ) nahradíme hustotami

$$\frac{\mu(\alpha_{k-1}) - c \cos \lambda_{k-1}}{\cos \lambda_{k-1}} e^{-\frac{[\mu(\alpha_{k-1}) - c \cos \lambda_{k-1}](x_k - x_{k-1})}{\cos \lambda_{k-1}}},$$

kde  $c$  je konstanta menší než minimální hodnota  $\mu(\alpha)$ ; současně nahradíme pravděpodobnosti přežití  $\sigma(\alpha_{k-1})/\mu(\alpha_{k-1})$  pravděpodobnostmi  $\sigma(\alpha_{k-1})/[\mu(\alpha_{k-1}) - c \cos \lambda_{k-1}]$ ; zavádějí-li se tyto pravděpodobnosti do modelu jako statistické váhy, pak nevádí, nabude-li poslední výraz případně hodnoty větší než jedna. Lze dokázat, že příslušná transformace funkce  $f(U)$  je pak  $e^{-ca} f(U)$  (kde  $a$  je rozměr desky) a že rozptyl takto sestrojeného odhadu je  $e^{ca}$ -krát menší než rozptyl odhadu původního.

Další transformace popisují L. A. Beach, R. B. Theus [10].

Přesnost metod Monte Carlo se značně zvýší použitím automatických počítačů, které umožňují pronikavě zvýšit rozsah výběrů. Na počítačích byly modelovány např. fyzikální úlohy uvedené v odstavci 2. Předpokládejme na okamžik, že známe způsob, jak v počítači vytvářet výběrové hodnoty z předepsaného rozložení; touto otázkou se budeme zabývat až v následujícím odstavci. Potom je úloha více či méně snadnou záležitostí programování. R. S. Lehman a G. H. Weiss [5] modelovali neprotínající se náhodnou procházku na počítači ORDVAC, který pracuje v dvojkové soustavě a má 1024 slov operační paměti po 39 bitech. Použili 624 slov paměti (tj.  $624 \times 39$  bitů) k reprezentaci mřížových bodů ve čtverci  $156 \times 156$ , a to tak, že každému mřížovému bodu bylo přiřazeno určité dvojkové místo na určité adrese; 0 na tomto místě značí, že pohybující se bod příslušným mřížovým bodem dosud neprošel, 1 značí, že příslušný mřížový bod byl již obsazen. Čtyři po sobě následující slova paměti popisují všechny mřížové body o dané pořadnici; předchozí čtyři slova popisují mřížové body ležící o řádek níže atd. Polohu pohyblivého bodu lze tedy zaznamenat adresou  $A$  a slovem  $\langle A \rangle$  obsahujícím na příslušném místě 1 a na ostatních místech 0. Pohyb vpravo či vlevo znamená pak (až na krajní

bity) posun „1“ vpravo či vlevo; pohyb nahoru či dolů znamená zvětšení či zmenšení adresy  $A$  o čtyři. Na každém kroku procházky se volí náhodně (se stejnými pravděpodobnostmi) směr: nahoru, napravo, dolů, nalevo, a zjišťuje se, zda sousední bod ve zvoleném směru je přístupný, či zda byl již obsazen; byl-li již obsazen, pak se postup opakuje (tj. volí se znovu jeden ze čtyř směrů atd.). Zjišťování, zda daný bod je přístupný, se provádí takto:

Nechť např. daný bod je reprezentován slovem 00100000 (pro jednoduchost nepíšeme všech 39 bitů) a příslušné slovo v paměti, které obsahuje informaci o tomto bodě, nechť je 00010011; nyní se tato dvě slova logicky násobí (tj. násobí se stejnoohlé bity) a výsledek se srovná s nulou; výsledek totiž zřejmě obsahuje buďto samé nuly, je-li daný bod přístupný, nebo právě jednu jednotku, byl-li bod již obsazen.

N. M. Dismuke [11] řešila metodou Monte Carlo otázku o účinku záření složeného z neutronů na lidskou tkáň; modelování bylo provedeno na počítači ORACLE; v citované práci je uvedeno stručné i podrobnější blokové schéma výpočtu.

Dinneen, Reed [12] uvádějí pro jednu variantu statistické detekce blokové schéma výpočtu pravděpodobnosti detekce  $\beta$  metodou Monte Carlo.

## 6. KONSTRUKCE UMĚLÝCH NÁHODNÝCH VÝBĚRŮ

Všimněme si nyní otázky, jak vytvářet výběrové hodnoty náhodné veličiny o předepsaném rozložení. Budeme (v tomto odstavci) předpokládat, že máme k dispozici posloupnost výběrových hodnot náhodné veličiny s rovnoměrným rozložením v intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$ ; budeme jim říkat náhodná čísla. Dosavadní terminologie není zcela důsledná; tzv. tabulky náhodných čísel — např. M. G. KENDALL, B. B. SMITH [24], M. KADYROV [25], RAND Corporation [26] — jsou vlastně tabulky náhodných číslic 0, 1, 2, ..., 9; náhodná čísla v našem smyslu lze z nich vytvořit tak, že skupiny  $k$  číslic považujeme za prvních  $k$  decimál desetinného rozvoje náhodného čísla (tj. před skupinu  $k$  číslic napíšeme nulu a desetinnou čárku).

Náhodná čísla lze transformovat na výběrové hodnoty náhodné veličiny s libovolně předepsanou distribuční funkcí. Má-li totiž náhodná veličina  $\xi$  rovnoměrné rozložení v intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$  a je-li  $\Phi(t)$  rostoucí distribuční funkce, potom náhodná veličina  $\eta = \Phi^{-1}(\xi)$  má distribuční funkci  $\Phi(t)$ . Jsou-li tedy  $x_1, x_2, \dots$ , náhodná čísla, pak  $y_1 = \Phi^{-1}(x_1)$ ,  $y_2 = \Phi^{-1}(x_2)$ , ..., lze považovat za výběrové hodnoty náhodné veličiny s distribuční funkcí  $\Phi(t)$ . Je-li distribuční funkce  $\Phi(t)$  schodovitá se skoky v bodech  $t_1, t_2, \dots, t_s$ , pak náhodná veličina  $\eta$ , jež nabude hodnoty  $t_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, s$ , jestliže  $\xi$  nabude hodnoty z intervalu  $\langle \Phi(t_k), \Phi(t_{k+1}) \rangle$ , má distribuční funkci  $\Phi(t)$ . Jsou-li tedy  $x_1, x_2, \dots$ , náhodná čísla, pak příslušná  $y_1, y_2, \dots$ , lze považovat za výběrové hodnoty náhodné veličiny s distribuční funkcí  $\Phi(t)$ . Těmito větami je popsána tzv. přímá metoda vytváření náhodných výběrů z předepsaného rozložení pomocí náhodných čísel. Použijeme jí vždy při modelování „ručním“ (tj. s tužkou, papírem a tabulkami náhodných čísel). Je však zpravidla méně vý-

hodná při modelování na počítačích. Zde ji použijeme jen tehdy, je-li funkce  $\Phi^{-1}(t)$  na počítači snadno vyčíslitelná. Např. při modelování exponenciálního rozložení, jehož hustota resp. distribuční funkce jsou

$$\varphi(t) = \mu e^{-\mu t}, \quad \Phi(t) = 1 - e^{-\mu t} \quad \text{pro } t > 0,$$

jest inverzní funkce

$$\Phi^{-1}(t) = -\frac{1}{\mu} \lg(1-t) \quad \text{pro } 0 \leq t < 1.$$

Jsou-li  $x_1, x_2, \dots$  náhodná čísla, jsou jimi i  $1 - x_1, 1 - x_2, \dots$ . Lze tedy považovat za výběrové hodnoty z exponenciálního rozložení čísla  $y_k = -(1/\mu) \lg x_k$ , kde  $x_k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) jsou náhodná čísla. Přímá metoda zde vyžaduje jen výpočet logaritmů, pro něž je na většině počítačů vhodný podprogram. Přímé metody použijeme na počítači také pro konstrukci náhodných výběrů z diskretních rozložení (není-li jiné, výhodnější metody) s tím, že nalezení oné hodnoty  $t_k$ , pro kterou dané náhodné číslo  $x$  leží v intervalu  $\langle \Phi(t_k), \Phi(t_{k+1}) \rangle$ , se provádí tvořením postupných součtů  $\sum \varphi_j$  ( $\varphi_j$  – skok funkce v bodě  $t_j$ ) a jejich srovnáváním s číslem  $x$ :

$$\sum_{j=1}^k \varphi_j \leq x < \sum_{j=1}^{k+1} \varphi_j.$$

Pro spojitá rozložení se často užívá „vylučovací“ metody, J. v. NEUMANN [27]: necht hustota  $\varphi(t)$  náhodné veličiny  $\zeta$  je (pro jednoduchost) definována na intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$  a necht  $M = \text{Max}_{0 \leq t \leq 1} \varphi(t)$ . Necht  $x, y$  jsou dvě náhodná čísla; je-li  $y \leq \varphi(x)/M$ , položíme  $z = x$ ; je-li  $y > \varphi(x)/M$ , pak přejdeme k další dvojici náhodných čísel. Takto vytvářená čísla  $z_1, z_2, \dots$  představují výběrové hodnoty veličiny  $\zeta$ . Jest totiž

$$\begin{aligned} P\left(\zeta < t \mid \eta < \frac{\varphi(\zeta)}{M}\right) &= P\left(\zeta < t; \eta < \frac{\varphi(\zeta)}{M}\right) \Big/ P\left(\eta < \frac{\varphi(\zeta)}{M}\right) = \\ &= \int_0^t d\xi \int_0^{\varphi(\xi)/M} d\eta \Big/ \int_0^1 d\xi \int_0^{\varphi(\xi)/M} d\eta = \int_0^t \varphi(\xi) d\xi = \Phi(t). \end{aligned}$$

Např. pro hustotu

$$(1) \quad \varphi(t) = (n+1)t^n, \quad \text{pro } 0 \leq t \leq 1, n - \text{přirozené},$$

by přímá metoda vyžadovala výpočty  $n$ -tých odmocnin náhodných čísel; naproti tomu vylučovací metoda vyžaduje pouze výpočty  $n$ -tých mocnin náhodných čísel, což je pro počítač podstatně snadnější. V případě rozložení (1) existuje však ještě jednodušší způsob vytváření náhodných výběrů, založený na tom, že  $\varphi(t) = (n+1) \cdot t^n$  je rozložením maximální hodnoty z  $n+1$  nezávislých náhodných veličin s rovnoměrným rozložením v intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$ . Jsou-li tedy  $x_1, \dots, x_{n+1}; x_{n+2}, \dots, x_{2n+2}; \dots$  náhodná čísla, položíme  $z_1 = \text{Max}_{1 \leq i \leq n+1} x_i$ ,  $z_2 = \text{Max}_{n+2 \leq i \leq 2n+2} x_i$  atd.

Výhodnou vlastností vylučovací metody je to, že jí lze použít i pro vytváření náhodných výběrů z vícerozměrných rozložení: necht hustota  $\varphi(t_1, t_2, \dots, t_r)$   $r$ -rozměrné

náhodné veličiny  $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_r)$  je definována v intervalu  $\langle 0, 1 \rangle \times \dots \times \langle 0, 1 \rangle$  a nechť  $M = \text{Max}_{j=1,2,\dots,r}^{\substack{0 \leq t_j \leq 1 \\ j=1,2,\dots,r}} \varphi(t_1, t_2, \dots, t_r)$ . Nechť  $x_1, x_2, \dots, x_r, y$  jsou náhodná čísla; je-li  $y \leq \varphi(x_1, x_2, \dots, x_r)/M$ , položíme  $z = (x_1, x_2, \dots, x_r)$ ; je-li  $y > \varphi(x_1, x_2, \dots, x_r)/M$ , vezmeme další skupinu  $r + 1$  náhodných čísel atd.

Při použití přímé metody ve vícerozměrném případě, řekněme v případě dvojrozměrné náhodné veličiny  $\eta = (\eta_1, \eta_2)$  s hustotou  $\varphi(t_1, t_2)$ , je nutno nejprve vybrat hodnotu  $y_1$  z marginálního rozložení  $\varphi_{\eta_1}(t_1)$  a pak hodnotu  $y_2$  z podmíněného rozložení  $\varphi_{\eta_2|\eta_1}(t_2|t_1)$ . Např. v úloze o ztrátových časech u SM peci je třeba vytvářet výběrové hodnoty  $(x_i, y_i)$  z dvojrozměrného normálního rozložení vsázecí doby a doby cyklu. Vzhledem k tomu, že normální rozložení se v aplikacích často vyskytuje, jsou k dispozici přímo tzv. tabulky normálních náhodných odchylek, tj. nezávislých výběrových hodnot z normálního rozložení  $N(0, 1)$  – H. WOLD [28], RAND Corporation [26]. Jsou-li  $\varepsilon_{2i-1}, \varepsilon_{2i}$  dvě hodnoty z těchto tabulek, pak v našem příkladě je příslušná dvojice  $(x_i, y_i)$  dána vztahy:

$$x_i = \mu_1 + \sigma_1 \varepsilon_{2i-1}, \quad y_i = \mu_2 + \varrho \frac{\sigma_2}{\sigma_1} (x_i - \mu_1) + \sigma_2 (1 - \varrho^2)^{\frac{1}{2}} \varepsilon_{2i},$$

kde  $\mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2, \varrho$  jsou parametry dvojrozměrného normálního rozložení.

Na počítači se k vytváření náhodných výběrů z normálního rozložení využívá konvergence součtů nezávislých náhodných veličin k normálnímu rozložení; sčítají se skupiny  $n$  náhodných čísel ( $n = 6$  až  $10$ ) a součty se normalizují, tj. zmenšují se o  $n/2$  a dělí se  $\sqrt{n/12}$ ; výsledné hodnoty lze s uspokojivou přesností považovat za náhodný výběr z  $N(0, 1)$ .

V některých aplikacích metod Monte Carlo se modeluje náhodná procházka po mřížových bodech v rovině, tj. na každém kroku se rozhoduje mezi čtyřmi stejně pravděpodobnými eventualitami; rozhodnutí se provádí podle toho, zda náhodné číslo leží v intervalu  $\langle 0, \frac{1}{4} \rangle$  nebo  $\langle \frac{1}{4}, \frac{1}{2} \rangle$  nebo  $\langle \frac{1}{2}, \frac{3}{4} \rangle$  nebo  $\langle \frac{3}{4}, 1 \rangle$ . Je-li náhodné číslo vyjádřeno ve dvojkové soustavě, pak při tomto rozhodování záleží jen na jeho prvních dvou bitech (00, 01, 10, 11).

Závěrem poznamenejme, že pro volbu nejvhodnější transformace náhodných čísel na náhodný výběr z předepsaného rozložení je třeba uvážit, kolika náhodných čísel je třeba k vytvoření jedné výběrové hodnoty, či lépe kolika operací je třeba k vytvoření jedné výběrové hodnoty (v tom je totiž zahrnut i počet potřebných náhodných čísel, která – jak uvidíme v následujícím odstavci – se na počítači vytvářejí rovněž jednou nebo několika operacemi).

## 7. PSEUDONÁHODNÁ ČÍSLA

Obraťme se nyní k otázce, jak získávat v počítači náhodná čísla. Použití tabulek náhodných čísel je zcela vhodné při „ručním“ modelování, avšak je zřejmě složitě a pomalé pro počítač. Fyzikálních zdrojů náhodných čísel se používá při konstrukci



tabulek náhodných čísel a ve spojení s analogovými počítači — G. W. BROWN [29], J. HAVEL [30] — nebylo jich však dosud použito přímo ve spojení s číslicovým počítačem. I tehdy, kdyby se podařilo toto spojení technicky vyřešit, zůstávají proti použití fyzikálních zdrojů určité námitky (např. realizace fyzikálního náhodného procesu je neopakovatelná, což ztěžuje kontrolu výpočtů); hlavní námitka je ta, že existuje jednoduchá osvědčená metoda, jak vytvářet náhodná čísla v počítači bez použití přídatných zařízení. Tato metoda záleží ve vytváření náhodných čísel aritmetickými operacemi, podle nějakého rekurentního vzorce. Takto vytvářeným číslům se obvykle říká pseudonáhodná čísla (neboť nejsou náhodná, pokud jde o jejich vytváření, avšak mají míti vlastnosti náhodných čísel). Bylo navrženo několik postupů vytváření pseudonáhodných čísel, tj. několik rekurentních vzorců; v praxi se používá nejčastěji metody kongruenční, navržené D. H. LEHMEREM [31]:

Posloupnost  $x_0, x_1, x_2, \dots$ , se vytváří podle vzorce

$$x_0 = 1, \quad x_{k+1} = ax_k \pmod{M}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

tj.

$$x_k = a^k \pmod{M}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

kde  $a$  a  $M$  jsou přirozená čísla a kde symbol  $\text{mod } M$  znamená redukci na nejmenší nezáporný zbytek modulo  $M$ . Čísla  $x_k$  jsou celá nezáporná čísla; abychom z nich dostali čísla z intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$  — jak jsme to požadovali v definici náhodných čísel — musíme je dělit modulem  $M$ , tj. pseudonáhodnými čísly budou teprve čísla  $x_k^* = x_k \cdot M^{-1}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$

Jak volit modul  $M$  a konstantu  $a$ ? Volba  $M$  je dána konstrukcí počítače: pracuje-li počítač v desítkové soustavě, a je-li maximální rozsah násobence  $\alpha$  dekadických řádů, pak volíme  $M = 10^\alpha$ . Operace  $x_{k+1} = ax_k \pmod{10^\alpha}$  záleží pak v tom, že ve výsledku  $ax_k$  ponecháme jen posledních  $\alpha$  řádů (číslíc). Dělit toto číslo modulem  $M = 10^\alpha$  znamená pak jen napsat před ně nulu a desetinnou čárku. U počítačů pracujících ve dvojkové soustavě bude analogicky  $M = 2^\alpha$ ; obvykle jest  $\alpha \approx 40$ . Všimněme si blíže jen případu dvojkové soustavy (úvahy pro desítkovou soustavu jsou o něco složitější).

Pokud jde o volbu konstanty  $a$ , je zřejmé, že za  $a$  nelze volit sudé číslo; je-li totiž  $a = 2s$ , pak  $x_\alpha = a^\alpha \pmod{2^\alpha} = 2^\alpha s^\alpha \pmod{2^\alpha} = 0$ , tedy také  $x_{\alpha+1} = x_{\alpha+2} = \dots = 0$ . Nechť tedy  $a$  je liché. Snadno se zjistí, že posloupnost  $\{x_k\}$  je periodická, tj. že existují  $L$  taková, že  $x_{L+k} = x_k$  pro všechna  $k$  a že jedním tím  $L$  je číslo  $2^{\alpha-2}$  (za předpokladu  $\alpha > 3$ , který je samozřejmě v těchto úvahách splněn).

Lze totiž psát  $a = 1 + 2s$ , tedy

$$a^2 = 1 + 4s + 4s^2 = 1 + 4s(s+1) = 1 + 8t_1$$

(neboť jedno z čísel  $s, s+1$  je sudé). Dále

$$a^4 = 1 + 16t_1 + 64t_1^2 = 1 + 16t_2,$$

$$a^8 = 1 + 32t_3 \text{ atd.}$$

To jest

$$\begin{aligned} a^{2^1} &= 1 + 2^3 t_1, \\ a^{2^2} &= 1 + 2^4 t_2, \\ a^{2^3} &= 1 + 2^5 t_3, \\ &\dots\dots\dots \\ a^{2^{x-2}} &= 1 + 2^x t_{x-2} \end{aligned}$$

Odtud  $x_{2^{x-2}} = a^{2^{x-2}} \pmod{2^x} = 1 = x_0$ , obecně  $x_{2^{x-2}+k} = x_k$ .

Nejmenší z čísel  $L$ , pro něž  $x_{L+k} = x_k$ , pro všechna  $k$ , nazveme délkou cyklu posloupnosti  $\{x_k\}$ ; zřejmě číslo  $2^{x-2}$  je celistvým násobkem délky cyklu; délkou cyklu může být tedy jen některé z čísel  $2^0, 2^1, 2^2, \dots, 2^{x-2}$ . Číslo  $a$  chceme volit tak, aby délka cyklu byla maximální.

Dokažme si, že existují čísla  $a$ , pro něž délka cyklu je rovna právě  $2^{x-2}$ . Jsou to taková  $a$ , pro něž  $a^2 = 1 + 8t_1$ , kde  $t_1$  je liché. Pak lze psát

$$\begin{aligned} a^2 &= 1 + 2^3 + 2^4 \tau_1, \\ a^{2^2} &= 1 + 2^4 + 2^5 \tau_2, \\ &\dots\dots\dots \\ a^{2^{x-3}} &= 1 + 2^{x-1} + 2^x \tau_{x-3}. \end{aligned}$$

Odtud plyne, že žádná z mocnin  $a^1, a^2, a^4, \dots, a^{2^{x-3}}$  není rovna 1 modulo  $2^x$ , tedy žádné z čísel  $2^0, 2^1, 2^2, \dots, 2^{x-3}$  není délkou cyklu posloupnosti  $\{x_k\}$ , a tedy délkou cyklu jest číslo  $2^{x-2}$ . Uvedenou vlastnost ( $a^2 = 1 + 8 + 16\tau_1$ ) mají např. všechny liché mocniny o základu 5, tedy čísla  $a = 5^{2q+1}$ . Je totiž

$$\begin{aligned} a^2 &= (5^{2q+1})^2 = (1 + 4)^{4q+2} = 1 + (4q + 2) \cdot 4 + \binom{4q + 2}{2} 4^2 + \dots = \\ &= 1 + 8 + 16 \left[ q + \binom{4q + 2}{2} + \dots \right] = 1 + 8 + 16\tau_1. \end{aligned}$$

Této volby  $a$  se skutečně používá; tj. používá se rekurentní formule

$$x_0 = 1, \quad x_{k+1} = 5^{2q+1} x_k \pmod{2^x}, \quad x_k^* = 2^{-x} x_k.$$

O. TAUSSKY a J. TODD [32] vyšetřovali posloupnost

$$x_0 = 1, \quad x_{k+1} = 5^{17} x_k \pmod{2^{42}}$$

(zde  $5^{17}$  je nejvyšší mocnina o základu 5, jež může být násobcem v daném počítací; délka cyklu jest  $2^{40} \approx 10^{12}$ ) a uvedli výsledky některých testů náhodnosti. Připomeňme, že testů náhodnosti lze užít jen na posloupnost  $\{x_k\}$  resp. na její konečné úseky, nikoliv však na jednotlivé bity čísel  $x_k$ ; o těch platí: poslední binární dvojčíslí všech čísel  $x_k$  jest 01, posloupnost třetích bitů (odzadu) má periodu  $2^1$ , tj. střídají se pravidelně 0 a 1, obecně  $i$ -té bity (odzadu) mají periodu  $2^{i-2}$ . Z praktického hlediska není tato okolnost na závadu, neboť ve většině případů stačí jen několika-místná náhodná čísla.

Taussky a Todd vyšetřovali prvních  $16\,384 = 2^{14}$  čísel  $x_k^*$ ; provedli  $\chi^2$  test dobré shody s rovnoměrným rozložením v intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$  (s roztříděním na 32 třídách

intervallů); dále rozdělili oněch 16 384 čísel na 128 skupin po 128 číslech a srovnali výběrové a teoretické střední hodnoty a rozptýly některých statistik vypočtených v každé z těchto 128 skupin  $(\bar{x}, \alpha_2, \sum_i (x_i - x_{i+1})^2/N)$ ; konečně rozdělili oněch 16 384 čísel do 16 skupin po 1024 číslech a srovnávali pozorovaný a očekávaný počet iterací nahoru a dolů a počet iterací nad a pod průměrem. Všechny provedené testy vyšly nevýznamně; projevuje se tedy dobrá shoda s rovnoměrným rozložením, a to i tzv. „lokální“.

Posloupnost  $x_0 = 1, x_{k+1} = 5^{2q+1} x_k \pmod{2^q}$  byla vyšetřována pomocí testů náhodnosti i pro jiné hodnoty exponentu a modulu; např. pro  $a = 5^{13}, \alpha = 39$ . U strojů pracujících v desítkové soustavě se podobně užívá posloupnosti

$$x_0 = 1, \quad x_{k+1} = 7^{4q+1} x_k \pmod{10^q}, \quad x_k^* = 10^{-q} x_k,$$

jež má délku cyklu  $5 \cdot 10^{2q-3}$  — J. MOSHMAN [33].

Popsaná kongruenční metoda je zvláště vhodná pro počítače s pevnou čárkou, které mohou na zvláštní příkaz vydat posledních  $\alpha$  míst  $2\alpha$ -místného součinu (jež se jinak zaokrouhluje). Přitom k vytvoření náhodného čísla  $x_{k+1}$  stačí uchovat v paměti počítače jediné předcházející náhodné číslo  $x_k$  a koeficient  $a$ ; k vytvoření  $x_{k+1}$  stačí jediná operace násobení. U počítačů, které nemají tohoto příkazu, se posledních  $\alpha$  míst součinu dvou  $\alpha$ -místných čísel

$$a = a_1 \cdot 2^{\alpha/2} + a_2, \quad b = b_1 \cdot 2^{\alpha/2} + b_2$$

získá třemi operacemi násobení  $\alpha/2$ -místných čísel  $a_1, a_2, b_1, b_2$ , dvěma operacemi sčítání a jednou operací posunutí:

$$ab \pmod{2^\alpha} = [(a_1 b_2 + a_2 b_1) 2^{\alpha/2} + a_2 b_2] \pmod{2^\alpha}.$$

#### Literatura

- [1] H. G. Jones, A. M. Lee: Monte Carlo methods in heavy industry. Operational research quarterly, 6 (1955), s. 108—116.
- [2] W. N. Jessop: Monte Carlo methods and industrial problems. Applied Statistics, 5 (1956), s. 158—165.
- [3] R. A. Levine, R. B. Rainey: Random variations and sampling models in production economics. Econometrica, 27 (1959), s. 294—295.
- [4] A. Korganoff: Aperçu général des méthodes de Monte Carlo, Application à la gestion d'un stock. Sborník Utilisation des calculateurs électroniques en recherche opérationnelle. Compagnie des machines Bull, Paris.
- [4a] J. P. Boss: Application de la méthode de Monte Carlo à la gestion d'un parc de camions. Týž sborník.
- [5] R. S. Lehman, G. H. Weiss: A study of the restricted random walk. Jrn. Soc. Ind. Appl. Mathem., 6 (1958), s. 257—278.
- [6] J. Hammersley, K. Morton: Poor man's Monte Carlo. Jrn. Roy. Statist. Soc., ser. B, 16 (1954), s. 23—38.
- [7] M. Rosenbluth, A. Rosenbluth: Monte Carlo calculation of the average extension of molecular chains. Jrn. Chem. Phys., 23 (1955), s. 356—359.
- [8] H. Kahn: Random sampling techniques in neutron attenuation problems I, II. Nucleonics 6 (1950), No 5, s. 27—33; 6 (1950), No 6, s. 60—65.

- [9] *M. J. Berger*: An application of the Monte Carlo method to a problem in gamma ray diffusion. Symposium on Monte Carlo methods, J. Wiley, N. Y. 1956, s. 89—102. [Dále jen Symposium.]
- [10] *L. A. Beach, R. B. Theus*: Stochastic calculations of gamma ray diffusion. Symposium, s. 103—122.
- [11] *N. M. Dismuke*: Monte Carlo computations. Symposium, s. 52—62.
- [12] *G. P. Dimneen, I. S. Reed*: An analysis of signal detection and location by digital methods. IRE Transactions, IT-2, March 1956, s. 29—38.
- [13] *J. V. Harrington*: An analysis of the detection of repeated signals in noise by binary integration. IRE Trans., IT-1, March 1955, s. 295. (Články (12) a (13) viz též sborník překladů: Прием сигналов при наличии шума. Изд. иностр. лит., Москва 1960.
- [14] *W. J. Dixon*: Analysis of extreme values. Ann. Math. Statist., 21 (1950), s. 488—506.
- [15] *H. J. Arnold, B. D. Bucher, H. F. Trotter, J. E. Tukey*: Monte Carlo techniques in a complex problem about normal samples. Symposium, s. 80—88.
- [15a] *H. M. Wagner*: A Monte Carlo study of estimates of simultaneous linear structural equations. Econometrica, 26 (1958), s. 117—133.
- [16] *R. Courant, K. Friedrichs, H. Lévy*: Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik. Math. Ann. 100 (1928), s. 32—74.
- [17] *W. F. Bauer*: The Monte Carlo method. Jrn. Soc. Ind. Appl. Math., 6 (1958), s. 438—451.
- [18] *G. E. Forsythe, R. A. Leibler*: Matrix inversion by a Monte Carlo method. Math. Tables Aids Comput., 4 (1950), s. 128—129.
- [19] *J. H. Curtiss*: Monte Carlo methods for the iteration of linear operators. Jrn. Math. Phys., 37 (1954), s. 209—232.
- [20] *B. C. Владимиров*: О применении методов Монте Карло для отыскания наименьшего характеристического числа и соответствующей собственной функции линейного интегрального уравнения. Теория вероятностей, 1 (1956), s. 113—130.
- [21] *K. D. Tocher*: The application of automatic computers to sampling experiments. Jrn. Roy. Statist. Soc., ser. B, 16 (1954), s. 39—60.
- [22] *V. Dupač*: Stochastické početní metody. Čas. pěst. matem., 81 (1956), s. 55—68.
- [23] *H. Kahn, A. W. Marshall*: Methods of reducing sample size in Monte Carlo computations. Jrn. Operat. Res. Soc. Amer., 1 (1953), s. 263—271.
- [24] *M. G. Kendall, B. Babington Smith*: Tables of random sampling numbers. Tracts for computers, No 24, 1940.
- [25] *М. Кадыров*: Таблицы случайных чисел. Ташкент, 1936.
- [26] *RAND Corporation*: A million random digits with 100 000 normal deviates. The Free Press, Glencoe, Illinois, 1955.
- [27] *J. von Neumann*: Various techniques used in connection with random digits. Monte Carlo methods, Nat. Bur. of Stand., Appl. Math. Ser. 12, 1951.
- [28] *H. Wold*: Random normal deviates. Cambridge Univ. Press, 1948.
- [29] *G. W. Brown*: History of RAND's random digits. The Monte Carlo method. Nat. Bur. of Stand., Appl. Math. Ser. 12, 1951.
- [30] *J. Havel*: An electronic generator of random sequences. Trans. of the 2-nd Prague conference on IT, Praha 1960, s. 219—231.
- [31] *D. H. Lehmer*: Mathematical methods in large scale computing units. Proc. 2-nd Symp. on Large-Scale Digital Calcul. Machinery. Harvard Univ. Press, 1951.
- [32] *O. Taussky, J. Todd*: Generation and testing of pseudo-random numbers. Symposium on Monte Carlo methods, J. Wiley, N. York 1956, s. 15—28.
- [33] *J. Moshman*: The generation of pseudo-random numbers on a decimal calculator. Jrn. Ass. for Computing Mach., 1 (1954), s. 88—91.

Резюме

## МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

ВАЦЛАВ ДУПАЧ (Václav Dupač)

Статья является введением в теорию и применения метода Монте-Карло. В параграфах 1—4 поясняется практическое значение метода Монте-Карло на примерах из исследования операций, физики, математической статистики и вычислительной математики. В параграфе 5 формулируются общие принципы метода Монте-Карло и излагается метод коррелированной выборки и выборки по значительности. В параграфе 6 описывается образование случайных выборок с данным законом распределения по прямому методу и по методу Неймана. В параграфе 7 излагается генерирование псевдослучайных чисел по методу сравнений, и приводятся некоторые свойства этих чисел.

Summary

## MONTE CARLO METHODS

VÁCLAV DUPAČ

The paper is intended as an introduction to the theory and applications of Monte Carlo methods. In sections 1 to 4, the practical importance of Monte Carlo methods is illustrated by examples from operational research, physics, mathematical statistics and numerical calculus. In section 5, general principles of Monte Carlo methods are formulated and the techniques of correlated sampling and of importance sampling are explained. In section 6, a direct method and a rejection technique of sampling from given probability distributions are described. In section 7, the congruential method of generating pseudorandom numbers is explained and some properties of these numbers are given.

Adresa autora: *Václav Dupač* C. Sc., Matematicko-fyzikální fakulta Karlovy university, Praha 2, Ke Karlovu 3.