A munkára fogott véletlen
I. rész

A pécsi Zipernowsky Károly szakközépiskolai tanárom,
Balog József tiszteletére

Cserti József
ELTE Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

A Monte-Carlo-módszer

Mindennapi életünket gyakran befolyásolják a véletlen események. Jól tudjuk, hogy a játékkaszinókban a véletlen alapvető szerepet játszik. Számos véletlen jelenséget figyelhetünk meg a környezetünkben is (például a hegyére állított ceruza dőlési iránya). A természetben is számtalan véletlen jelenséget ismerünk. Egy tartályban lévő gázatomok véletlenszerűen mozognak. Az atommagok bomlása is véletlen folyamat.

A véletlen segítségével közelítőleg meghatározhatjuk a π értékét. Dobjunk rizsszemeket (véletlenszerűen) egy a oldalú négyzetlapra, amelybe egy a átmérőjű kört is berajzoltunk! Végezzünk N számú kísérletet (csak azokat a dobásokat tekintjük, melyeknél a rizsszemek nem esnek ki a négyzetből), és számoljuk meg hány esik a körbe! Jelöljük ezek számát N_k-val! Ekkor az N_k/N arány nagy számú kísérlet ($N \gg 1$) esetén jó közelítéssel megegyezik a kör és a négyzet területének arányával, azaz $N_k/N = (a/2)^2\pi/a^2 = \pi/4$. Így a π értéket $\pi \approx 4N_k/N$ alapján számíthatjuk ki. Természetesen ez módszer nem adja meg pontosan a π-t. Minél több kísérletet végzünk, annál pontosabb eredményt kaphatunk, feltéve, hogy a rizsszemek valóban véletlenül esnek a négyzetre.

A fenti kísérletet nem szükséges a valóságban elvégezni. A számítógéppel egyszerű programot írhatunk. Szükségünk van egy jó véletlenszám-generátorra. Ma már számos program létezik, mely a $[0,1]$ intervallumon egyenletes eloszlásban generál véletlen számokat. Generáljunk egymás után kettőt, és jelöljük ezeket x-szel ill. y-nal! E két számhoz (mint számpárhoz) egy pontot rendelhetünk a koordináta-rendszer első negyedében (rizsszem helye a dobás után). Ha a pont távolságára igaz, hogy $x^2 + y^2 < 1$, akkor a pont az egységsugarú körön belül van. Tegyük fel, hogy a fenti algoritmust N-szer elvégezve N_k számú esetben esik a pont a körön belül. Hasonlóan a rizsszemek esetéhez most is a $4N_k/N$ arány közelíti π értékét.

Az alábbi táblázatban egyre növekvő számú kísérlet során kapott (közelítő) π értéket és a hibát tüntettük fel (a pontos érték 9 tizedesjegyre $\pi = 3{,}141592654$).

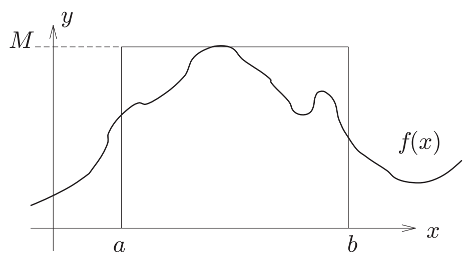
N	π	relatív hiba % -ban
10	3,6	14,6
10^2	3,16	0,6
10^3	3,108	1,1
10^4	3,127	0,5
10^5	3,135	0,2
10^6	3,141	0,02
10^7	3,14155	0,001

Látható, hogy N növelésével egyre pontosabb értéket kapunk π-re. Már néhány százezer kísérlet is elég π-nek két tizedesjegy pontos kiszámítására. A mai számítógépekkel akár 10^7 számú kísérlet is egy percen belül elvégezhető. Érdemes kipróbálni!

Teljesen véletlen jelenséget felhasználva egy jól meghatározott mennyiség értékét sikerült közelíteni. A fenti módszert tovább lehet fejleszteni, és így rendkívül bonyolult feladatok megoldásra használhatjuk a véletlent. Az eljárást a Monte-Carloban található nevezetes kaszinókra utalva, Monte-Carlo-módszernek hívják és kiterjedten alkalmazzák mind a matematikában, mind a fizikában. A Monte-Carlo elnevezést Metropolis és Ulam használták először egy 1949-es cikkükben arra utalva, hogy a módszerhez szükséges véletlen számokat akár egy játékkaszinó játékeredményeiből is vehetnénk. A gyakorlatban viszont a véletlen számokat a számítógépek maguk állítják elő. A módszert már a század elején is használta néhány statisztikus, de a Monte-Carlo-módszer csak akkor indult igazán fejlődésnek, amikor Neumann, Ulam és Fermi atommagreakciókra vonatkozó bonyolult matematikai problémák számítógéppel történő közelítő megoldására használták.

Sok esetben a feladatokat csak közelítések alkalmazásával lehet megoldani. Szerencsére legtöbbször nincs is szükségünk nagyon pontos értékekre. Ilyenkor gyakran igen hatékonynak bizonyul a Monte-Carlo-módszer. A továbbiakban néhány példát szeretnénk bemutatni a módszer alkalmazására a matematikában és a fizikában. Igyekeztünk olyan problémákat választani, melyeket a mai számítógépes lehetőségek mellett középiskolai szinten vizsgálhatunk.

Matematikai alkalmazás

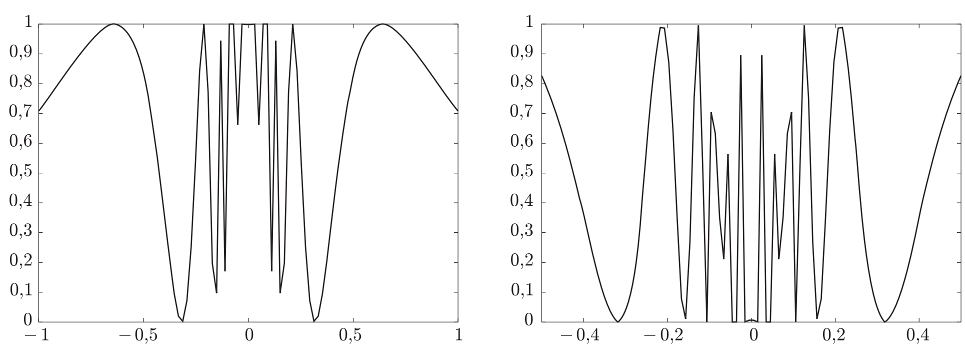


1. ábra. Egy $f(x)$ függvénynek a görbe alatti területe az $[a, b]$ intervallumon

Gyakori feladat egy görbe alatti terület meghatározása. Az *1. ábrán* látható $f(x)$ függvénynek az $[a, b]$ intervallumon a görbe alatti A területét úgy határozhatjuk meg, hogy az $[a, b]$ szakaszt felosztjuk N egyenlő $\Delta x = (b-a)/N$ hosszúságú intervallumra, és a területet az ún. téglányösszeggel közelítjük:

$$A \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\Delta x,$$

ahol x_i az i-edik intervallum közepe. Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a függvény pozitív az $[a, b]$ szakaszon, és legyen a függvény legnagyobb értéke M ezen a szakaszon. A téglányösszeg annál pontosabb, minél nagyobb N. Ez az eljárás a legismertebb (és legegyszerűbb) módszer egy függvény görbe alatti területének meghatározására. A *2. ábrán* látható $f(x) = \sin^2\left(\dfrac{1}{x}\right)$ függvény azonban nagyon gyorsan oszcillál az origó körül, és így a terület kielégítő pontosságú kiszámításához nagyon nagyra kellene választani N értékét. A gyorsan változó függvények görbe alatti területét a Monte-Carlo-módszer segítségével hatékonyabban becsülhetjük meg. Ismét „rizsszemek” dobálását alkalmazzuk. Generáljunk egy x véletlen számot (általában az egyes programnyelvekben található olyan véletlenszám-generátor, mely a $[0, 1]$ intervallumon egyenletes eloszlásban ad egy véletlen számot)! Ekkor az $x \to a + x(b-a)$ transzformációval a kapott véletlen szám az $[a, b]$ intervallumba kerül. Generáljunk egy másik y véletlen számot! Az $y \to yM$ transzformáció után az y véletlen szám a $[0, M]$ intervallumba esik. Tekintsük a két számot egy pont (x, y) koordinátáinak! Ez a pont az *1. ábrán* látható $(b-a)$ és M oldalhosszúságú téglalapon belül található. Ha viszont a pont (x, y) koordinátáira teljesül az $y < f(x)$ egyenlőtlenség, akkor a pont (rizsszem) az $f(x)$ görbe alá esik.

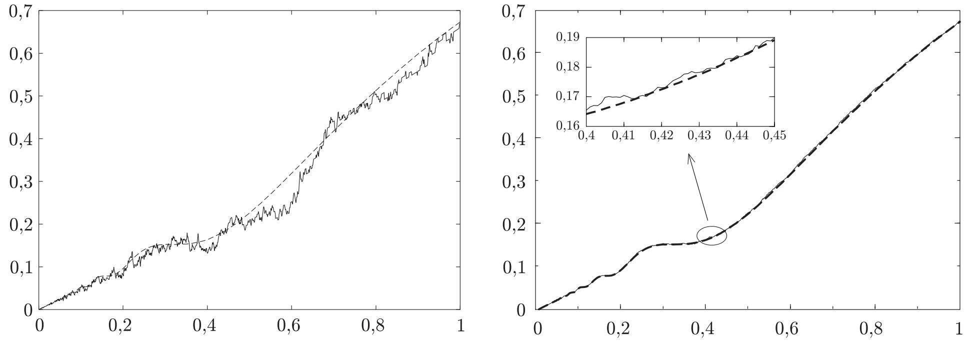


2. ábra. Az $f(x) = \sin^2(1/x)$ függvény számítógéppel készített grafikonja. A függvény erősen oszcillál 0 és 1 között, ezeket az értékeket azonban a számítógépes program „véges felbontása” miatt a görbe néha nem éri el. Ez pusztán egy numerikus probléma, amelyet az sem old meg, ha a görbe középső tartományát kinagyítjuk (jobb oldali ábra)

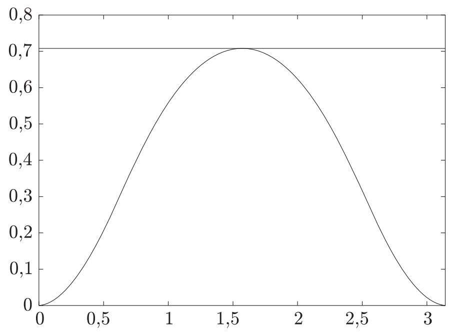
Ismételjük meg a fenti műveletsort $N_{\text{össz}}$ alkalommal, és számoljuk meg hányszor esik az adott pont a görbe alá. Jelöljük ezeknek az eseményeknek a számát N_{be}-vel! Elegendően sok kísérlet után azt várjuk, hogy a függvény görbe alatti A területének és az $M(b-a)$ területű téglalapnak az aránya jó közelítéssel megegyezik az $N_{\text{be}}/N_{\text{össz}}$ aránnyal, és így

$$A \approx M(b-a)\frac{N_{\text{be}}}{N_{\text{össz}}}.$$

Alkalmazzuk a fenti Monte-Carlo-módszert a *2. ábrán* látható függvényre! Kiszámítottuk a görbe alatti területet az $[a, b] = [0, b]$ intervallumon úgy, hogy b értékét 0 és 1 között változtatjuk. A különböző számú kísérlet során kapott eredmények a *3. ábrán* láthatók. A görbék területét általában felsőbb matematikai módszerrel, az integrálszámítással lehet kiszámítani. Ezt a módszert tekinthetjük az egzakt, azaz pontos számításnak. Az ábrákon berajzoltuk az így kapott eredményeket is a Monte-Carlo-módszer hatékonyságának illusztrálása érdekében. Látható, hogy $N_{\text{össz}} = 100$ kísérlet esetén a Monte-Carlo-módszer még elég nagy hibával közelíti a pontos eredményt. Ugyanakkor $N_{\text{össz}} = 10\,000$ kísérlet során már nagyon jó egyezést kapunk az integrálszámításból nyert pontos eredménnyel.



3. ábra. Az $f(x) = \sin^2(1/x)$ függvénynek a görbe alatti területe $N_{\text{össz}} = 100$ (bal oldali ábra) és $N_{\text{össz}} = 10\,000$ (jobb oldali ábra) kísérlet során. Az egzakt eredményt a szaggatott görbe mutatja



4. ábra. A „kalapfüggvény”. A $[0, \pi]$ intervallumon a függvény maximuma: $M = \sin^2(1) = 0{,}7081$

A továbbiakban szükségünk lesz a *4. ábrán* látható

$$f(x) = \sin^2\big(\sin(x)\big)$$

„kalapszerű” függvénynek a görbe alatti területére a $[0, \pi]$ intervallumon. Ez a terület a Monte-Carlo-módszer alapján $A \approx 1{,}2194$, melyet

$$N_{\text{össz}} = 2^{22} = 4\,194\,304$$

számú kísérlet elvégzése után kaptunk, három tizedesjegy pontosan egyezik az integrálszámítással kapott $A = 1{,}2191$ pontos eredménnyel.

A Monte-Carlo-módszert rendkívül sokféle területen használják a fizikusok is. Cikkünk II. részében a véletlenen alapuló számítási módszerek fizikai alkalmazásaiból mutatunk be néhányat.