Il metodo Monte Carlo

"Le proprietà davvero uniche del cervello umano mi sembrano caratterizzate proprio dal possente sviluppo e dall'impiego intensivo della funzione di simulazione"
J. Monod, Il caso e la necessità

Franco Bocci

Idro, 31 Agosto 2006

Sommario

- Che cos’è il metodo Monte Carlo
- Un antenato
- Sequenze di numeri casuali
- Produzione di variabili casuali
  - Variabili discrete
  - Variabili continue
- Calcolo d’integrali
- Metodi di riduzione della varianza

Bibliografia

- R. Rosa: *Il metodo Monte Carlo,* Lo scarabeo, 1992
- Rotondi, Pedroni, Pievatolo: *Probabilità, statistica e simulazione, 2ª ed.,* Springer, 2005

Articolazione dell'intervento

- Presentazione
- Esperimento
- Ritorno in aula per:
  - Raccolta dati
  - Presentazione di Scilab
  - Simulazione esperimento al computer

Perché il metodo Monte Carlo?

- Che cosa c'entra il metodo Monte Carlo:
  - Con l'argomento del corso?
  - Con la didattica nelle scuole superiori?
    - Pressoché niente
    - Ma è giusto?
- Questo intervento non vuole fornire ricette, ma solo costituire lo spunto per l'inizio di una riflessione

Che cos’è il metodo Monte Carlo

- Nome: J. von Neumann e S. Ulam (progetto Manhattan)
- *“La simulazione Monte Carlo calcola una serie di realizzazioni possibili del fenomeno in esame, con il peso proprio della probabilità di tale evenienza, cercando di esplorare in modo denso tutto lo spazio dei parametri del fenomeno. Una volta calcolato questo campione rappresentativo, la simulazione esegue delle 'misure' delle grandezze di interesse su tale campione”* Wikipedia

Che cos'è il metodo Monte Carlo

- *"Il metodo Monte Carlo consiste nel cercare la soluzione di un problema, rappresentandola quale parametro di una ipotetica popolazione e nello stimare tale parametro tramite l'esame della popolazione ottenuto mediante sequenze di numeri casuali"* R. Rosa

Che cos'è il metodo Monte Carlo

- *"Con il temine di "metodo Monte Carlo" vengono in genere denominate tutte quelle tecniche che fanno uso di variabili aleatorie artificiali (cioè generate al calcolatore) per la risoluzione di problemi matematici.*
- *Indubbiamente questo non è un modo molto efficiente per trovare la soluzione di un problema, in quanto la procedura di campionamento simulato porta ad un risultato che è sempre affetto dall'errore statistico. Nella pratica però ci si trova spesso di fronte a situazioni in cui è troppo difficile, se non addirittura impossibile, utilizzare i tradizionali procedimenti numerici o analitici"* Rotondi, Pedroni, Pievatolo

Che cos'è il metodo Monte Carlo

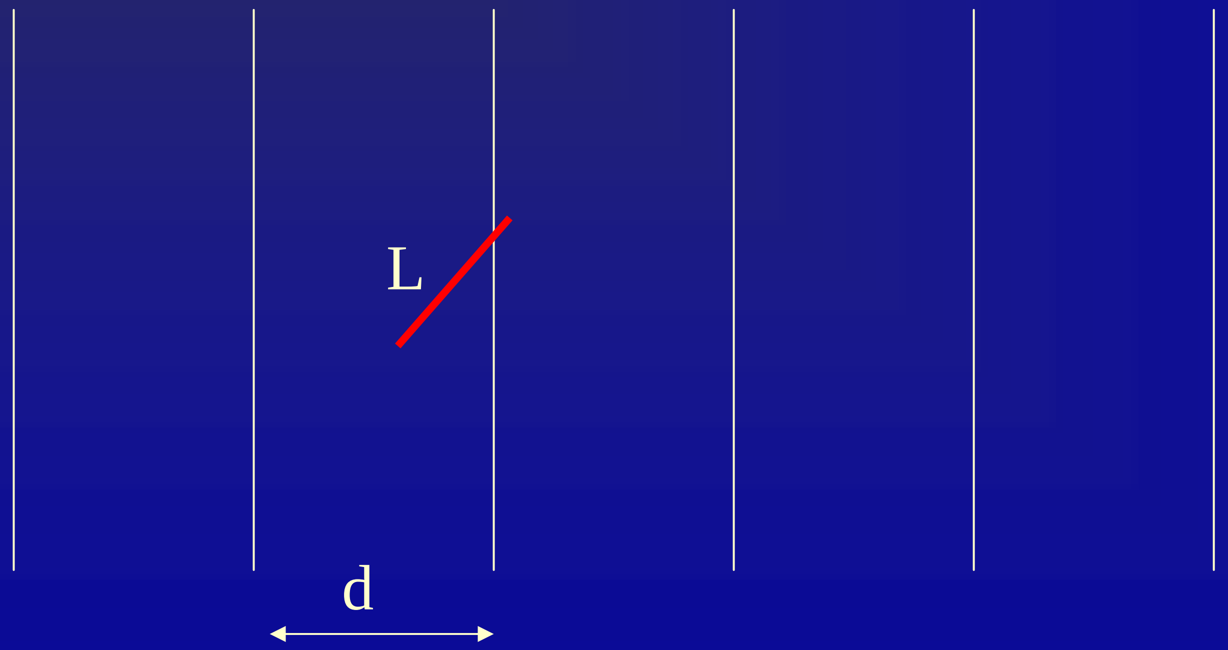
- Problema ⇔ Popolazione
- ⇒ Campione
  - ⇒ Programma
- Problema
  - Probabilistico
  - Deterministico

Applicazioni

- Fisica
- Statistica: studio di distribuzioni, …
- Matematica: calcolo d'integrali, …
- Medicina
- Economia - finanza
- Studio di processi stocastici: fenomeni di attesa (traffico automobilistico, ferroviario, aereo), gestione di magazzini, …
- Chimica
- Ingegneria
- …

Un antenato

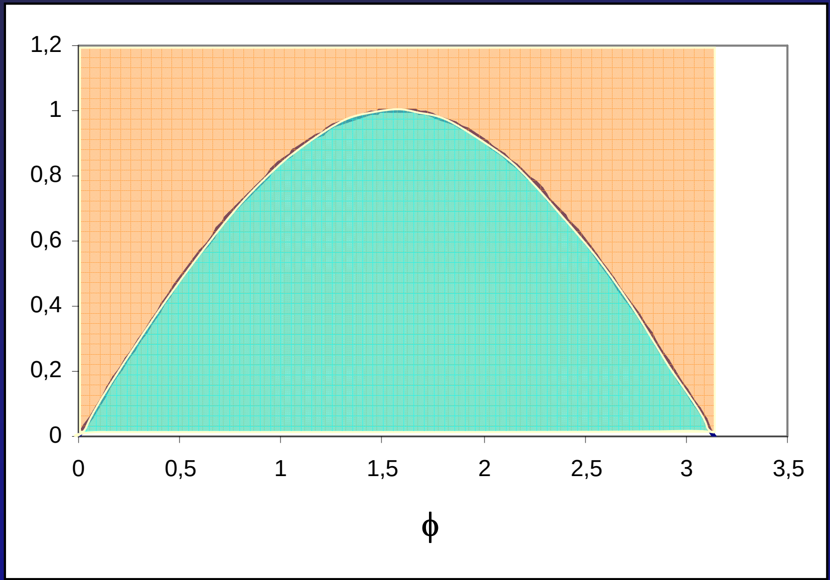
- Ago di Buffon (1777)



Un antenato

- x: distanza tra il centro dell'ago e la riga più vicina $0 \le x < d/2$
- ϕ: angolo tra l'ago e le righe $0 \le \phi < \pi$
- x e ϕ hanno densità di probabilità uniforme
- x e ϕ sono indipendenti
- L'ago taglia una riga se: $x \le \frac{L}{2} sin\,\phi$

Un antenato



- d = 2,4 L = 2
- Area rettangolo: $A_R = \frac{d}{2} \cdot \pi$
- Area sotto la curva:

$$A_C = \int_0^{\pi} \frac{L}{2} \sin\phi \, d\phi = L$$

$$\pi = 2 \frac{L}{d} \frac{A_R}{A_C}$$

- Stima di π: $\pi \approx 2 \frac{L}{d} \frac{N.lanci}{n.successi}$

Wolf (1850-90): 5000 lanci π = 3,15955 errore: 0,57%

Sequenze di numeri “casuali”

- Un elemento essenziale di un metodo Monte Carlo è la generazione di sequenze di numeri “casuali”
- Che cos’è una sequenza di numeri “casuali”?
- von Mises (1964): principio dell’impossibilità di un sistema di gioco: la conoscenza di una qualunque sottoserie non fornisce nessuna informazione per migliorare la possibilità di prevedere il numero successivo
- Solomonoff, Kolmogorov, Chaitin (1964-66): criterio dell’incomprimibilità: una sequenza è casuale se l’informazione in essa contenuta non può essere compressa

Classificazioni delle sequenze di numeri

- In genere siamo portati a distinguere tra sequenze casuali e sequenze non casuali (algoritmiche)
- Queste ultime hanno un “criterio generatore” che permette di calcolare gli elementi della successione, le prime no
- Nella pratica però la distinzione importante è un’altra: quella tra sequenze che chiameremo “regolari” e “aregolari”
- Non ci si chiede “a monte” della sequenza se c’è una logica che la genera, ma la si esamina “a valle” e si cerca se c’è qualche regolarità

Classificazioni delle sequenze di numeri

Casuali		Algoritmiche
Aregolari		Regolari
Casuali	Pseudocasuali	

- Le sequenze pseudocasuali sono:
  - Generate da un algoritmo
  - Indistinguibili “a valle” da una sequenza genuinamente casuale:
  - I suoi elementi soddisfano tutti i test di verifica basati sul calcolo delle probabilità

Esempi di sequenze

- 1, 7, 2, 1, 7, 2, 1, 7, 2, 1, 7, 2, 1, 7, 2, …
- 1, 8, 3, 10, 5, 0, 7, 2, 9, 4, 11, 6, 1, 8, …
- 1, 5, 9, 2, 6, 5, 3, 5, 8, 9, 7, 9, 3, 2, 3, …
- 8, 3, 0, 0, 1, 1, 8, 9, 0, 3, 8, 7, 4, 3, 1, …
- Seconda sequenza: aritmetica dell'orologio (modulare)
- Terza sequenza: pi greco
- Quarta sequenza: estrazione carte
- Se proviamo a classificare le sequenze in base ai due criteri, vediamo che la differenza è nella terza serie

Numeri casuali
test di casualità

- Per controllare la "*casualità*" di una sequenza, **se ne confrontano le caratteristiche con quanto previsto dalla teoria delle probabilità**
  - Test di equidistribuzione: i numeri vengono disposti in un istogramma a k canali
  - Test seriale: si forma una matrice di $k \times k$ elementi con le coppie di numeri consecutivi
  - Test del poker: si considerano gruppi di 5 numeri consecutivi
  - Test del gap: si misurano i *gap*, ovvero le distanze tra numeri uguali
  - …

Numeri casuali

test di casualità

- Riconsideriamo la sequenza:
  - 1, 8, 3, 10, 5, 0, 7, 2, 9, 4, 11, 6, 1, 8, …
- Applichiamo il test seriale:

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
0								♦				
1									♦			
2										♦		
3											♦	
4												♦
5	♦											
6		♦										
7			♦									
8				♦								
9					♦							
10						♦						
11							♦					

Numeri casuali

test di casualità

- I test **non** distinguono le sequenze genuinamente casuali da quelle pseudocasuali, ma quelle aregolari da quelle regolari
- Forse sarebbe meglio chiamarli “test di regolarità”
- Il fatto che una sequenza superi uno o più test di casualità/regolarità non implica che sia effettivamente aregolare
- E’ successo che sequenze ritenute per lungo tempo aregolari (ed utilizzate) abbiano in seguito rivelato qualche regolarità

Produzione di sequenze aregolari

- Sequenze genuinamente casuali:
  - a) Processo fisico
  - b) Tabelle (es. Rand Corporation, 1955)
- Svantaggi:
  - a) Occupazione di memoria
  - b) Lentezza
  - c) Non sempre sono completamente aregolari (dadi di Wolf - Jaynes)

Produzione di sequenze aregolari

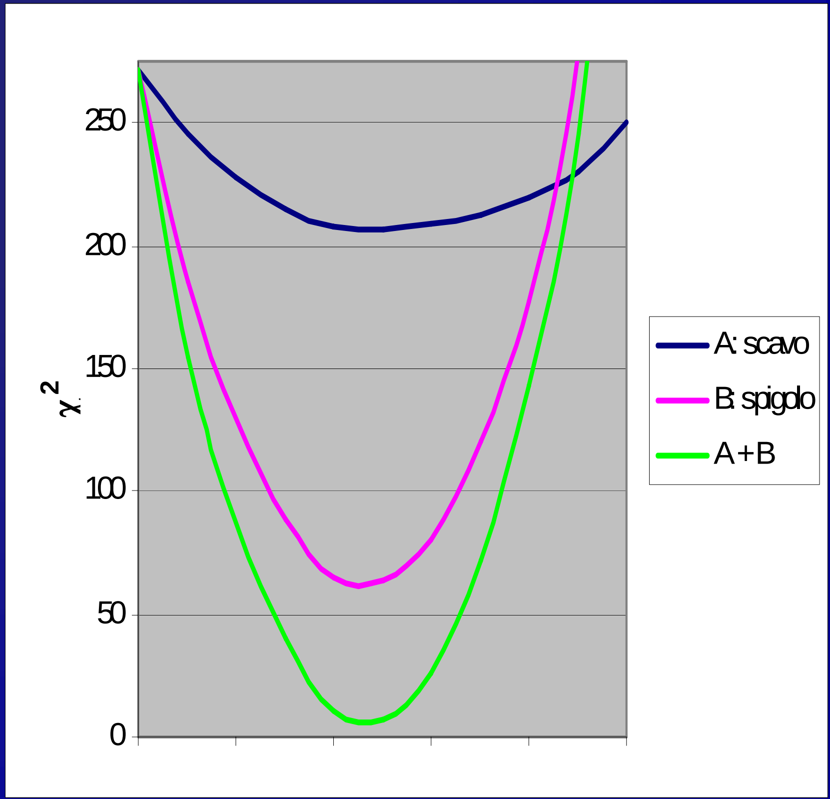
- Wolf eseguì 20.000 lanci di un dado, trovando i seguenti risultati:
- Il 6 è più frequente dell'1. Jaynes: È plausibile che lo scavo dell'avorio abbia alleggerito la faccia col 6 rispetto a quella opposta (con l'1), spostando il baricentro

k	n_k	f_k	$f_k - p_k$
1	3246	0,16230	-0,00437
2	3449	0,17245	0,00578
3	2897	0,14485	-0,02182
4	2841	0,14205	-0,02462
5	3635	0,18175	0,01508
6	3932	0,19660	0,02993

- Con questa ipotesi la plausibilità dei dati di Wolf migliora, ma di poco

Produzione di sequenze aregolari

- I numeri 3 e 4 (su facce opposte) hanno una frequenza minore degli altri. Questo suggerisce che la dimensione dello spigolo perpendicolare alle due facce sia leggermente maggiore delle altre due, probabilmente per un difetto di fabbricazione



Produzione di sequenze aregolari

- Sequenze pseudocasuali
- Vantaggi:
  - Velocità di produzione
  - Ripetibilità
  - Indistinguibilità da una sequenza genuinamente casuale

Sequenze pseudo-casuali
produzione

- Vogliamo generare numeri casuali nell'intervallo [0, 1) con distribuzione uniforme
- Elementi che caratterizzano la serie:
  - Algoritmo
  - Seme
  - Periodo
    - (dipende anche dalla precisione del calcolatore)
  - Precisione

Sequenze pseudo-casuali

produzione

- Metodo del quadrato centrale (von Neumann)
  - $x_0 = 3949$ (seme)
  - $x_0^2 = 15594601 \Rightarrow x_1 = 5946 \Rightarrow u_1 = 0{,}5946$
  - $x_1^2 = 35354916 \Rightarrow x_2 = 3549 \Rightarrow u_2 = 0{,}3549 \ldots$
- Svantaggi:
  - Non è possibile determinare a priori il periodo
  - Con alcuni semi è molto breve

Sequenze pseudo-casuali
produzione

- Metodi congruenziali:
  - $x_i = (ax_{i-1} + b) \bmod m$
  - $u_i = x_i/m$
- Generatori di Fibonacci:
  - $x_i = x_{i-p} \circledcirc x_{i-q} \bmod m$

Sequenze pseudo-casuali
produzione

- Ranlux (Martin Luescher, 1993)
  - RANLUX genera numeri pseudocasuali distribuiti uniformemente nell’intervallo (0,1), estremi esclusi
  - Ogni chiamata produce un vettore di numeri reali in cui 24 bit della mantissa sono casuali
  - L’utente può scegliere un livello di qualità a seconda delle necessità della sua applicazione. Il livello più basso (0) fornisce un generatore veloce che però non soddisfa alcuni sofisticati test di causalità. Il livello più alto (4) è circa cinque volte più lento ma **garantisce una completa casualità.** In tutti i casi il periodo è maggiore di 10^{165}

Produzione di variabili casuali

- Numeri con densità di probabilità uniforme in [0,1) : u $\Rightarrow$
  - Variabili casuali discrete con probabilità assegnate
  - Variabili casuali continue con densità di probabilità assegnata

Produzione di variabili casuali

Variabili discrete

- Variabile X, valori $\{x_i\}$ con probabilità p_i ($i = 1, 2 \dots k$)
- I valori x_i possono anche non essere numerici
- Si suddivide l'intervallo [0, 1) in k subintervalli di ampiezza p_i
- Si genera u
- Si guarda in quale subintervallo cade
- Si pone $X = x_i$

Produzione di variabili casuali

Variabili discrete

- Fotone da 30 keV in alluminio
  - Effetto fotoelettrico (74%) $\gamma \Rightarrow e$
  - Scattering Rayleigh (11%) $\gamma \Rightarrow \gamma$
  - Scattering Compton (15%) $\gamma \Rightarrow \gamma + e$

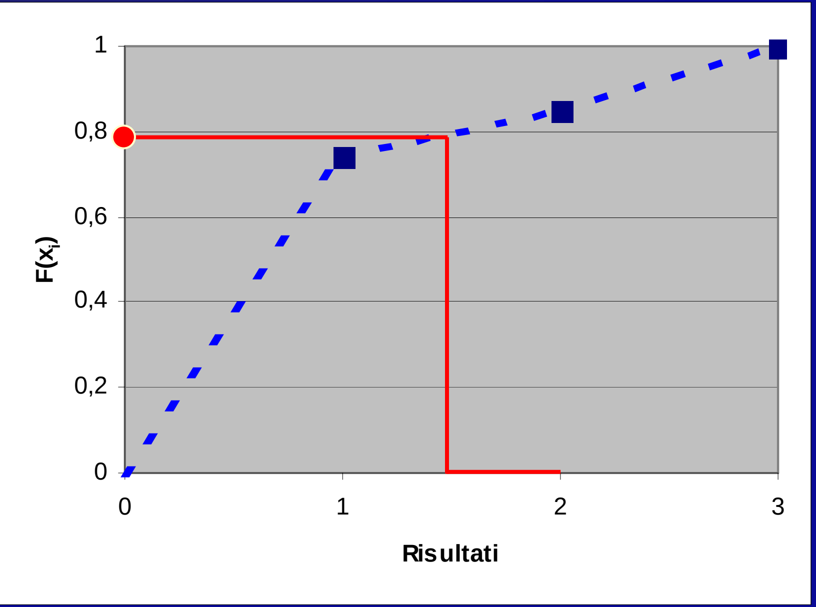
- L’ordine non ha importanza

Produzione di variabili casuali

Variabili discrete

- Interpretazione grafica
  - Si numerano i risultati (1, … N)
  - Si costruisce la *funzione cumulativa,* F(x):
    - F(0) = 0
    - F(i) = F(i - 1) + p(i)
- Le linee tratteggiate non hanno nessun significato

	Risultato	p(i)	F(i)
	0		0
Fotoelettrico	1	0,74	0,74
Rayleigh	2	0,11	0,85
Compton	3	0,15	1



Produzione di variabili casuali

Variabili discrete

- Si genera u
- Si trova l’indice i per cui è verificata la relazione:

$$F(i-1) < u \leq F(i)$$

- Si pone $X = x_i$

Produzione di variabili casuali

Variabili discrete. Esempi

- Distribuzione binomiale
  - Una variabile X con distribuzione binomiale è la somma di N variabili Y_i aventi valori 1 o 0 con probabilità rispettivamente p e 1 – p:

    $X = X(N,p) \qquad X = Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_N$

    $\forall i \in \{1, 2, \ldots N\}: \qquad p(Y_i = 1) = p \qquad p(Y_i = 0) = 1 - p$
  - Trovare la probabilità di ottenere x teste in un lancio di 5 monete: N = 5, p = 0,5
  - Possiamo generare 5 numeri casuali e contare il numero di valori inferiori a 0,5

Produzione di variabili casuali

Variabili discrete. Esempi

- Algoritmo:
  - $c \leftarrow 0$
  - Per i che va da 1 a N:
    - Genera u
    - Se $u \le p$, $c \leftarrow c + 1$
  - $x \leftarrow c$
- Svantaggi: se N è alto, l'algoritmo è lento

Produzione di variabili casuali

Variabili discrete. Esempi

- Conviene approssimare la binomiale
  - Se N è alto e $p << 1$, si può approssimare la binomiale con una poissoniana con valore medio $\mu = N \cdot p$
  - Se Np e N(1-p) sono entrambi alti (≥ 10) si può approssimare la binomiale con una gaussiana con $\mu = Np$ e deviazione standard

$$\sigma = \sqrt{Np(1-p)}$$

Produzione di variabili casuali

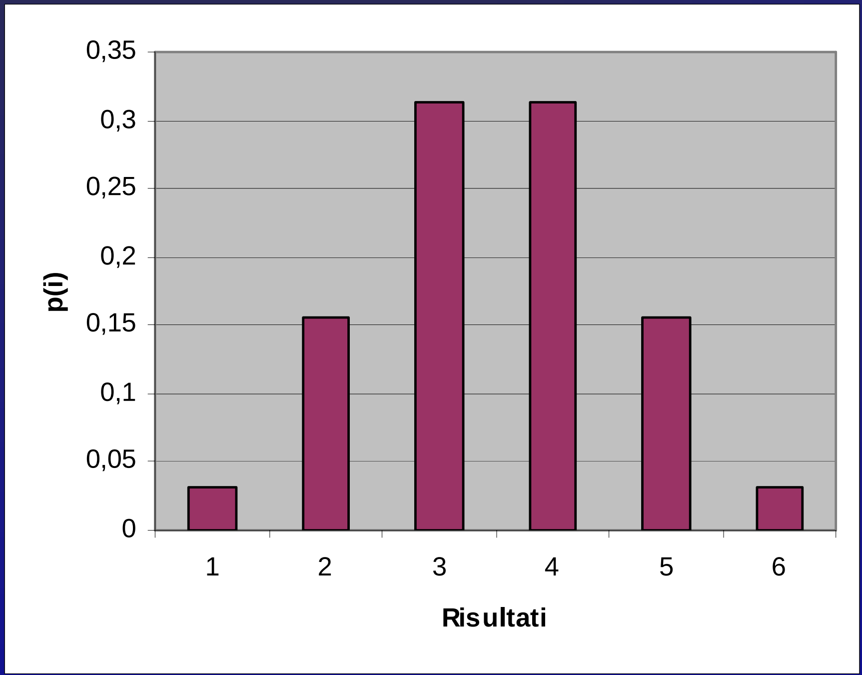
Variabili discrete. Esempi

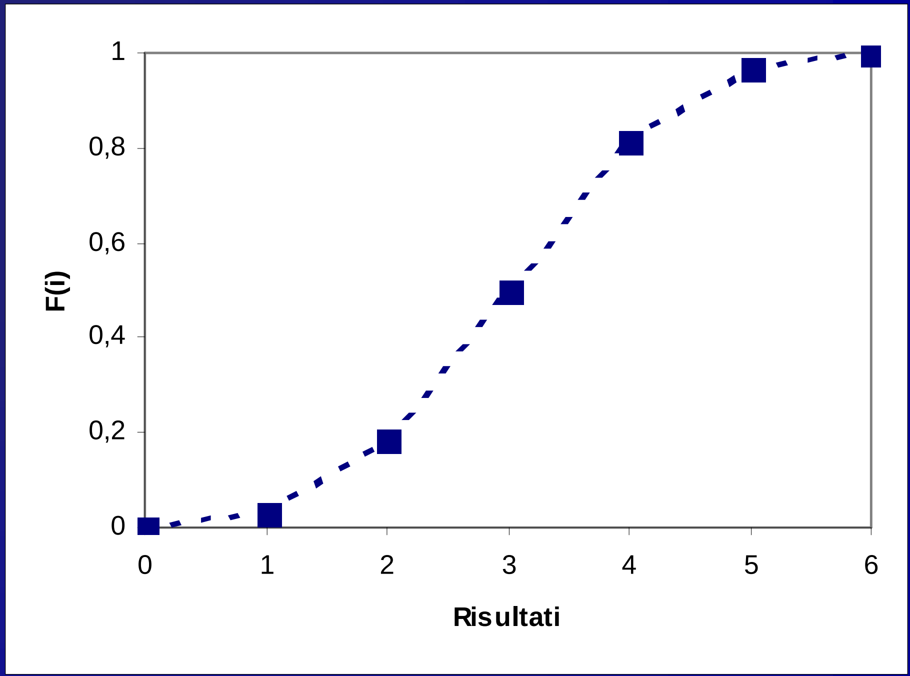
i	x_i	$p(x_i)$	F(i)
0			0
1	0	0,03125	0,03125
2	1	0,15625	0,1875
3	2	0,3125	0,5
4	3	0,3125	0,8125
5	4	0,15625	0,96875
6	5	0,03125	1

- Metodo alternativo:
  - Si calcolano le probabilità dei vari risultati x_i: $p(x_i) = \binom{N}{x_i} x_i^p (N - x_i)^{1-p}$
  - Si costruisce la funzione cumulativa: $F(i) = \sum_{k=1}^{i} p(x_k)$
- Ogni volta che si vuole generare x:
  - Si genera u
  - Si trova l'indice i che soddisfa la relazione: $F(i-1) \leq u < F(i)$
  - Si pone $X = x_i$

Produzione di variabili casuali

Variabili discrete. Esempi





Produzione di variabili casuali

Variabili continue

- Variabile X con valori continui x distribuiti con densità di probabilità p(x)
- Teorema: Se X soddisfa le ipotesi precedenti, la funzione cumulativa:

$$F(X) = \int_{-\infty}^{X} p(x)\,dx$$

è uniforme in [0, 1]

- Questo qualunque sia p(x)!

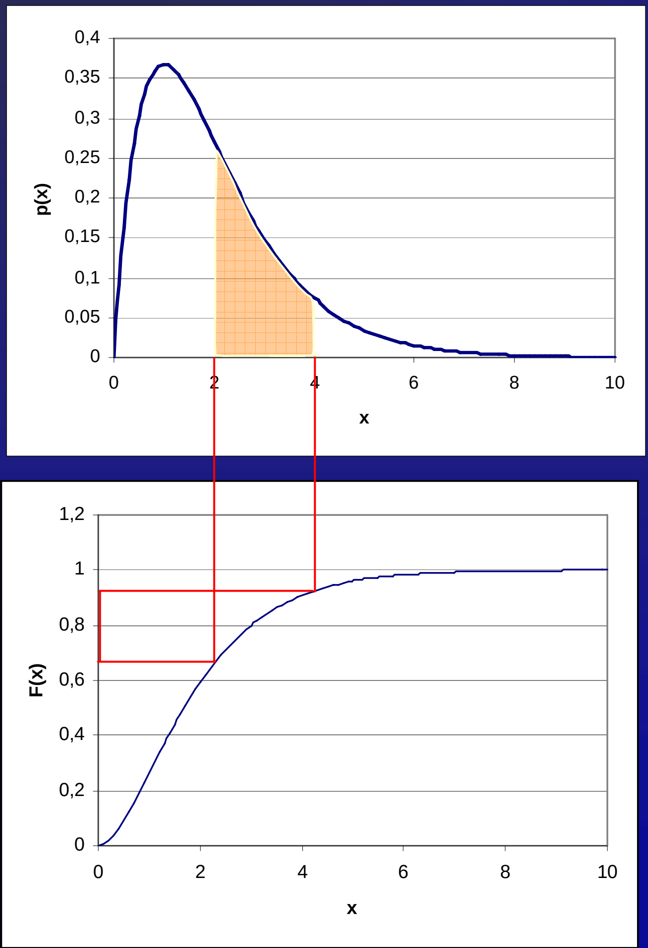
Produzione di variabili casuali

Variabili continue

- Facciamo le seguenti ipotesi:
  - p(x) è integrabile $\Rightarrow$ F(X) è nota analiticamente
  - F(x) è invertibile analiticamente
    - Nota: poiché $p(x) \geq 0$, F(X) è monotona (crescente), dunque invertibile
- Si genera u
- Si pone $X = F^{-1}(u)$
- X ha densità di probabilità p(x)

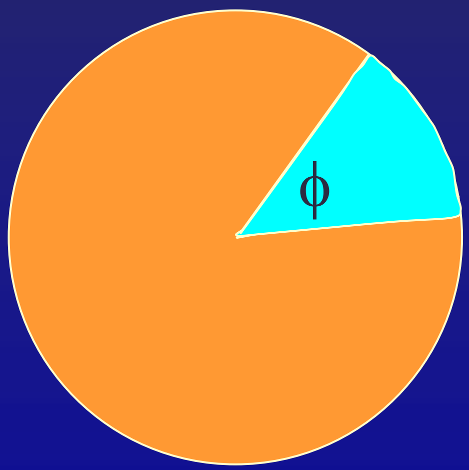
Produzione di variabili casuali

Variabili continue



Produzione di variabili casuali
Variabili continue

- Esempio: generare punti uniformemente distribuiti in un cerchio di raggio R



La frazione di punti che cadono nel settore circolare dev’essere uguale al rapporto tra le aree:

$$u_\phi = F(\phi) = \int_0^\phi p(\phi')\,d\phi' = \frac{\phi}{2\pi}$$

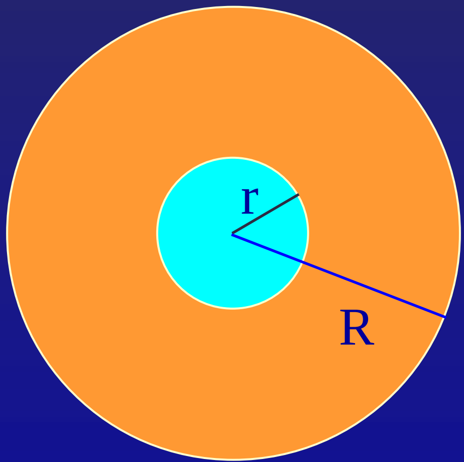
$$\phi = 2\pi u_\phi$$

Produzione di variabili casuali

Variabili continue

La frazione di punti che cadono nel cerchio interno dev'essere uguale al rapporto tra le aree:

$$u_r = F(r) = \int_0^r p(r')dr' = \frac{r^2}{R^2}$$



$$r = R\sqrt{u_r}$$

Problema: generare un insieme di punti distribuiti con densità uniforme in una sfera di raggio R

Soluzione: $r = R\sqrt[3]{u_R}$ $\phi = 2\pi u_\phi$ $\vartheta = \cos^{-1}(1-2u_\vartheta)$

Produzione di variabili casuali

Variabili continue

- Che fare se F(x) non è nota o non è invertibile analiticamente?

1. Ricerca lineare

   Si integra numericamente p(x) per ottenere F(x)

2. Metodo del rigetto semplice (o del *chiama e scarta*)

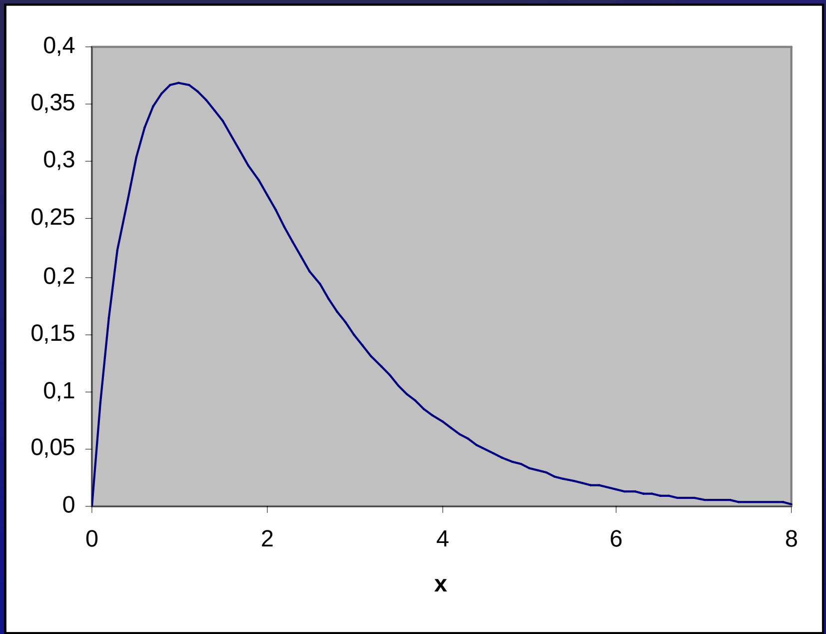
   Supponiamo p(x) definita in un intervallo [a, b]. Sia h $\geq$ Max[p(x)]. Generiamo punti casuali nel rettangolo di lati h e b-a, e li *rigettiamo* se non sono sotto la curva p(x).

   Vantaggi: aggiriamo i problemi analitici

   Svantaggi: occorrono due o più numeri casuali u per generare un solo numero casuale x

Produzione di variabili casuali

Variabili continue

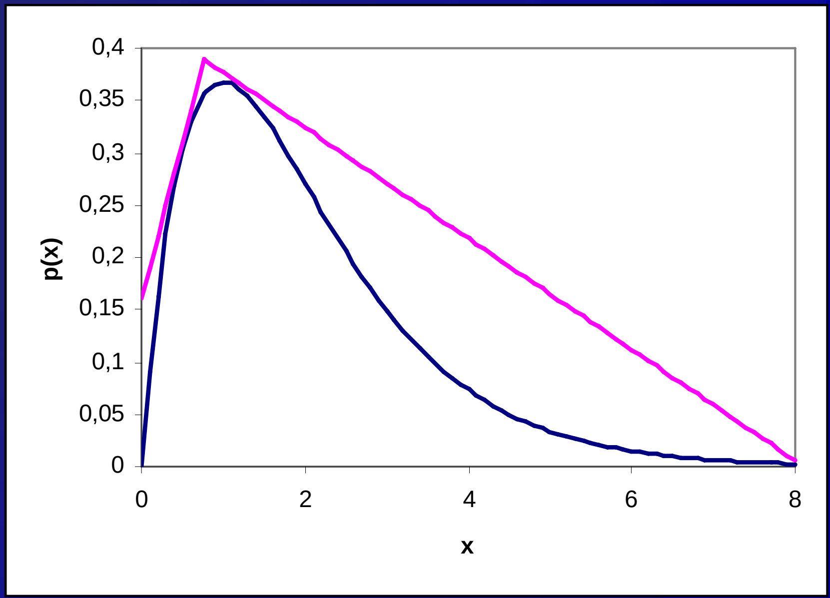


- Algoritmo del rigetto semplice:
  - Genera u_x
  - $x \leftarrow a + u_x(b - a)$
  - Calcola $p(x)$
  - Genera u_y
  - $y \leftarrow hu_y$
  - Se $y \leq p(x)$ accetta x, altrimenti rigetta e ricomincia

Produzione di variabili casuali

Variabili continue

- Efficienza: pari al rapporto tra l'area sotto p(x) e l'area del rettangolo
- Miglioramenti: Metodo del rigetto ottimizzato (si racchiude p(x) entro una funzione f(x) integrabile, con cumulativa invertibile analiticamente, che ne segua più da vicino l'andamento



Produzione di variabili casuali

Variabili continue. Esempi

- Distribuzione uniforme in un intervallo [a,b]
  - x = a + (b – a)u
- Distribuzione esponenziale [p(x) = λexp(-λx)]
  - Cumulativa: F(x) = 1 – exp(-λx) = u

$$x = -\frac{1}{\lambda} ln(1-u) \qquad x = -\frac{1}{\lambda} ln\, u$$

Produzione di variabili casuali

Variabili continue. Esempi

- Distribuzione gaussiana
  - Non è integrabile analiticamente
    - Rigetto ottimizzato
    - Ricerca lineare
  - Metodo basato sul Teorema Limite Centrale
    - Dati N numeri casuali $u_1 \ldots u_N$, la media è una variabile gaussiana di media 0,5 e varianza 1/12N
    - Nota: la media e la varianza si possono aggiustare successivamente con trasformazioni geometriche

Produzione di variabili casuali

Variabili continue. Esempi

- Vantaggi: buoni risultati già con piccoli N (= 12)
- Svantaggi: lentezza (occorrono 12 numeri casuali per generarne 1)

- Box e Muller (~ 1960)
  - Si considera una gaussiana in due dimensioni in coordinate polari:

$$g(r,\phi)dr\,d\phi = \frac{1}{2\pi} r\,e^{-\frac{r^2}{2}} dr\,d\phi = p(r)p(\phi)dr\,d\varphi$$

$$p(r) = r\,e^{-\frac{r^2}{2}} \qquad p(\phi) = \frac{1}{2\pi}$$

Produzione di variabili casuali

Variabili continue. Esempi

- Le densità di probabilità $p(r)$ e $p(\phi)$ sono integrabili e le cumulative sono invertibili
- Risulta:

$$r = \sqrt{-2\,\ln u_r} \qquad \phi = 2\pi u_\phi$$

$$x = \sqrt{-2\,\ln u_r} \cdot \cos\left(2\pi u_\phi\right)$$

$$y = \sqrt{-2\,\ln u_r} \cdot \sin\left(2\pi u_\phi\right)$$

- Con due numeri casuali u_r e u_f si generano due variabili gaussiane

Calcolo di integrali

- Metodo “vinci o perdi” (*hit or miss*)
  - (ago di Buffon-Wolf) Supponiamo $f(x) \leq h$ in un intervallo (a,b) e di voler calcolare:

$$I = \int_a^b f(x)\,dx$$

  - Generiamo punti a caso nel rettangolo di lati h e (a,b)
  - Abbiamo: $\dfrac{I}{h(b-a)} \cong \dfrac{n}{N}$ $\qquad I \cong h(b-a)\dfrac{n}{N}$

Calcolo di integrali

- Metodo della media (*Monte Carlo grezzo*)
  - $I = \langle f(x) \rangle (b - a)$
  - Algoritmo:
    - $s = 0$
    - Per i che va da 1 a N:
      - Genera u
      - $x \leftarrow a + (b - a)u$
      - Calcola f(x)
      - $s \leftarrow s + f(x)$
    - $I \leftarrow (b-a)s/N$

Calcolo di integrali

- Il metodo della media è un po' più efficiente del metodo "vinci o perdi"
- In entrambi i casi la varianza ~ $N^{-1} \Rightarrow \sigma \sim N^{-½}$
- La precisione è indipendente dalla dimensionalità *d* dell'integrale. Per altri metodi $\sigma \sim N^{-k/d}$
- $\Rightarrow$ Per d elevato il metodo Monte Carlo diventa competitivo

Metodi di riduzione della varianza

- Se si hanno informazioni sul problema, possono essere usate per ridurre la varianza
  - Nessuna informazione $\Rightarrow$ nessuna riduzione
  - Informazione completa $\Rightarrow$ varianza nulla

Metodi di riduzione della varianza

- Per ridurre la varianza si può usare:
  - La forza: aumentare N (velocità del computer e/o il tempo macchina)
  - L'intelligenza: migliorare l'algoritmo
- Tecniche:
  - Campionamento ad importanza
  - Campionamento stratificato
  - Controllo della variabilità
  - Variabili antitetiche
  - Calcolo parallelo

Grazie

Adesso fate l'esperimento, poi
ci rivediamo per la seconda parte
frncbcc@tin.it