

Grundlagen der MONTE-CARLO-METHODE

Probieren geht über studieren

Oliver Frost

Institut für experimentelle Kernphysik
Karlsruher Institut für Technologie

16. November 2009

Übersicht

- 1 Definitionen und Motivation
 - Typische Problemstellung
- 2 Monte-Carlo-Methode
 - Monte-Carlo-Schätzer
- 3 Monte-Carlo-Integration
 - Varianzreduktion
 - Quasi-Monte-Carlo-Integration
- 4 Zufallszahlen
 - Charakterisierung
 - Erzeugung
- 5 Lösung der Problemstellung
- 6 Zusammenfassung und Ausblicke
 - Steckbrief eines Monte-Carlo-Problems
 - Anwendungsbereiche

Definition Monte-Carlo-Algorithmus

Definition

Monte Carlo ist eine Technik zur **numerischen Lösung** von Problemen mit Hilfe von **Zufallszahlen**.

Motto

- Ausprobieren anstatt exakt zu berechnen.

Problemstellung am Collider

- Teilchen kollidieren mit hoher Geschwindigkeit
- Gehen Reaktionen ein
- Jede mit eigener Wahrscheinlichkeit, Streuwinkel- und Impulsverteilung
- Wechselwirken mit Detektormaterie
- Elektronisches Rauschen und **viele andere Fehlerquelle**



Analytische Behandlung

Komplette aussichtslos

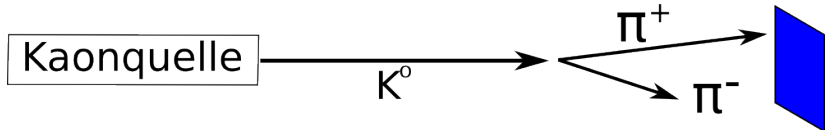
Ausweg

Monte-Carlo-Simulation

Beispiel Kaonzerfall

(hypothetische) Experiment:

- Kaonen fliegen aus einer Quelle mit einer bestimmten Impulsverteilung in x-Richtung.
- Irgendwo auf dem Weg zerfällt es in zwei Pionen.
- In einiger Entfernung steht ein Detektor für Pionen.



Mögliche Fragen:

- Treffen beide Pionen den Detektor?
- Kann man das Impulsspektrum des Kaons rekonstruieren?

Annahmen

Massen

- Kaonmasse $m_{K^0} = 497.614 \text{ MeV}$
- Pionmasse $m_{\pi^\pm} = 139.57018 \text{ MeV}$

Zerfälle

- Mittlere Zerfallszeit im Ruhesystem des Kaons $\tau = 1,2945 \cdot 10^{-10} \text{ s}$
- Zerfall findet im Ruhesystem des Kaons isotrop statt.
- Pionen zerfallen nicht.

Apperatureigenschaften

- Impulsverteilung der Quelle $f(p) = a \cdot p^b \cdot e^{-c \cdot p}$
- Detektormaße: quadratisch mit $2 \text{ m} \cdot 2 \text{ m}$
- Entfernung Detektor zu Quelle 50 m

Lösungsansatz analytisch

- 1 Nehme **Impulsverteilung** und transformiere sie in eine **Geschwindigkeitsverteilung**.
- 2 Nehme **exponentielles Zerfallsgesetz** und ersetze τ mit $\tau(v)$ für die unterschiedlichen Zeitdilatationen.
- 3 **Falte** beides zu einer **Weglängenverteilung** in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit.
- 4 Nehme zwei antikorrelierte **Gleichverteilung** im (Raum-)Winkel für den Zerfall im Ruhesystem und booste mit der Geschwindigkeitsverteilung des Kaons \simeq **Faltung**.
- 5 Kombiniere Weglängen und **Flugrichtungsverteilung** zu einer Verteilung auf dem Detektor \simeq **Faltung**.
- 6 **Integriere** über die Detektorfläche.

Viel zu kompliziert

Ganze **Verteilungen** werden betrachtet.

Lösungsansatz Monte-Carlo

- 1 **Würfel** einen Impuls.
- 2 **Würfel** eine Zerfallszeit.
- 3 Berechne den geflogenen Weg.
- 4 **Würfel** einen Raumwinkel.
- 5 Bestimme die Impulsvektoren der Pionen.
- 6 Booste ins Laborsystem.
- 7 Verfolge Flugrichtungen und schaue, ob sie den Detektor schneiden.

Einfacher

- Betrachte Einzelereignisse und wiederhole.
- Faltungen werden zu arithmetischen Operationen.

Erinnerung an Statistik

Diskrete Zufallszahl $X \sim f_X(x)$

- Wahrscheinlichkeit

$$f_X(x) = P(X = x)$$

- Kumulierte Wahrscheinlichkeit

$$F_X(x) = \sum_{x' < x} P(X = x')$$

- Erwartungswert

$$E[X] = \sum_x x \cdot f_X(x)$$

- Varianz

$$V[X] = E[(X - E[X])^2]$$

Kontinuierliche Zufallszahl $X \sim f_X(x)$

- Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$f_X(x) dx = P(x < X < x + dx)$$

- Kumulierte Verteilungsfunktion

$$F_X(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f_X(x') dx'$$

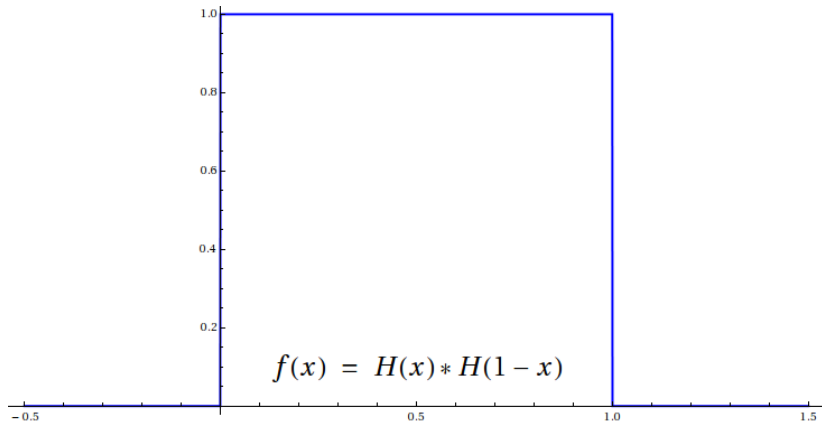
- Erwartungswert

$$E[X] = \int_x dx x \cdot f_X(x)$$

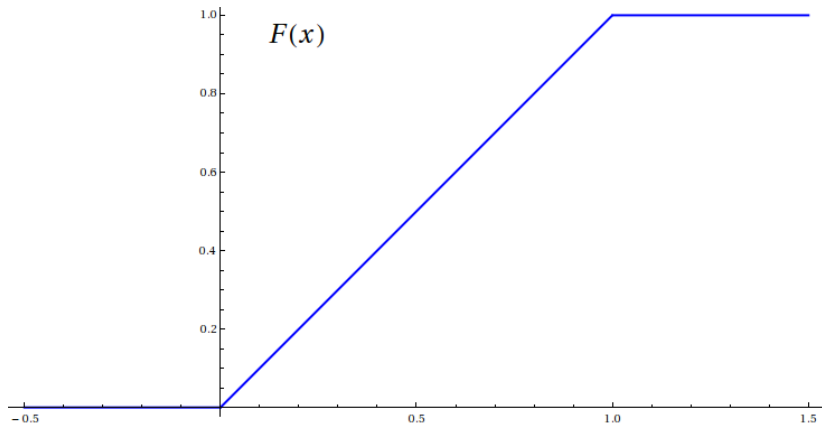
- Varianz

$$V[X] = E[(X - E[X])^2]$$

Wahrscheinlichkeitsverteilung - Beispiel



Verteilungsfunktion - Beispiel



Erwartungswert und Varianz

Varianz von X nochmal anders

$$V[X] = E[(X - E[X])^2] = E[X^2] - E^2[X]$$

Erwartungswert von $Y = g(X)$

$$E[g(X)] = \int dx g(x) \cdot f_X(x)$$

Varianz von $Y = g(X)$

$$V[g(X)] = E[g^2(X)] - E^2[g(X)] = \int dx g^2(x) \cdot f_X(x) - \left(\int dx g(x) f_X(x) \right)^2$$

Konkretisierung der Problemstellung

Funktion (Algorithmus) F mit Zufallszahlen $X_1 \dots X_n$

$$F = F(X_1, \dots, X_n)$$

Erwartungswert für die Funktion \simeq Faltung

$$E[F] = I = \int \dots \int dx_1 \dots dx_n F(x_1, \dots, x_n) \cdot f_{X_1}(x_1) \cdot \dots \cdot f_{X_n}(x_n)$$

Monte-Carlo-Methode schätzt (berechnet numerisch) dieses Integral.

$$\hat{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F(x_1^{(i)}, \dots, x_n^{(i)})$$

wobei $x_1^{(i)}$ konkrete Zufallszahlen mit Verteilung von X_1 sind.

Eigenschaften des Monte-Carlo-Schätzers

Der Monte-Carlo-Schätzer

- hat **Form**

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F(x^{(i)})$$

- ist **konsistent**
- ist **unverzerrt**
- ist asymptotisch **normalverteilt**
- hat eine **Varianz** von

$$V[\hat{\mu}] = \frac{V[F(X)]}{n} \approx \frac{1}{n} \cdot \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F^2(x^{(i)}) - \hat{\mu}^2 \right)$$

- **berechnet** immer ein **Integral**

Monte-Carlo-Integration

Algorithmus für Integration in einer Dimension

$$\begin{aligned} X &\sim f_X(x) = \frac{1}{b-a} H(x-a) \cdot H(b-x) \\ F(X) &= g(X) \quad (g \text{ stückweise stetig}) \\ E[F] &= I = \frac{1}{b-a} \int_a^b g(x) dx \end{aligned}$$

Monte-Carlo-Schätzer für I

$$\hat{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(x^{(i)})$$

Monte-Carlo-Integration - Algorithmus

Integration einer Funktion f in beliebiger Dimension

- Verteile zufällig Zahlen $x^{(i)}$ gleichverteilt im Integrationsgebiet G
- Integral (geschätzt)

$$\hat{I} = \frac{|G|}{n} \cdot \sum_{i=1}^n g(x^{(i)})$$

- Varianz (geschätzt)

$$\hat{V}[\hat{I}] = \frac{1}{n} \cdot \left[\frac{|G|^2}{n} \sum_{i=1}^n g^2(x^{(i)}) - \hat{I}^2 \right]$$

In vielen Dimensionen bester Methode zur Integration.

Monte-Carlo-Integration - Varianzreduktion

Bestimme Integral auf 2
Weisen

- 1 Ganzes
Integrationsgebiet
 $\Rightarrow I, V$
- 2 Teile Gebiet in 2 Hälften
 $\Rightarrow I_1, I_2, V_1, V_2$
Kombiniere Ergebnisse

$$I' = I_1 + I_2$$

$$V' = V_1 + V_2$$

Es gilt stets $V' \leq V$

Grund:

Fehlerfortpflanzungsgesetze

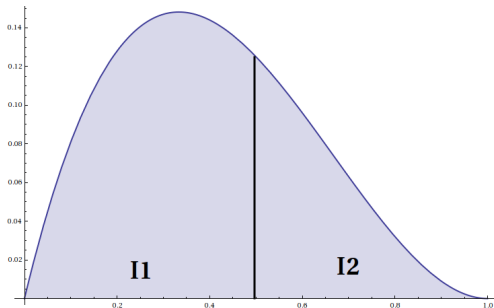


Abbildung: Teilung des Intervalls

Quasi-Monte-Carlo-Integration

Quasizufallszahlen

- sind weniger zufällig verteilt (supergleichverteilt)
- sind nur für wenige Integrationsgebiete verfügbar

Quasi-Monte-Carlo-Integration

- führen zu schnellerer (theoretischer) Konvergenz

$$V[\hat{I}_{quasi}] < \frac{c_d \cdot \text{Variation}^2(g) \cdot (\log n)^{2d}}{n^2}$$

- ist nur effektiv für geringe Dimension d (wegen $(\log n)^{2d}$)

Charakterisierung

Konkrete Zufallszahlen

Eine Reihe von Zahlen die keiner (schwache) inneren Korrelation unterliegen.

Verteilung

- beschreibt Wahrscheinlichkeit für auftretende Zahl
- ändert sich nicht durch das Ziehen

Erzeugung von Zufallszahlen

Durch physikalischen Zufall

Beispiel: Radioaktiver Zerfall

Vorteil: Echter Zufall

Nachteil: Verteilung meist nicht bekannt, technisch aufwendig, nur in geringer Zahl vorhanden im Vergleich zur Rechenleistung eines PC

Durch geeignete deterministische Funktionen

Beispiel: TRandom in ROOT

Vorteil: Schnell und in großer Zahl erzeugbar, reproduzierbar

Nachteil: Kein echter Zufall, endliche Periode, oft versteckte Korrelationen

Erzeugung von Zufallszahlen

Durch physikalischen Zufall

Beispiel: Radioaktiver Zerfall

Vorteil: Echter Zufall

Nachteil: Verteilung meist nicht bekannt, technisch aufwendig, nur in geringer Zahl vorhanden im Vergleich zur Rechenleistung eines PC

Durch geeignete deterministische Funktionen

Beispiel: TRandom in ROOT

Vorteil: Schnell und in großer Zahl erzeugbar, reproduzierbar

Nachteil: Kein echter Zufall, endliche Periode, oft versteckte Korrelationen

Weitere Generatoren

Generatoren weit verbreitet (z.B. in ROOT)

- TRandom1 \simeq RANLUX
 - langsam
 - bester Zufall
 - Periode 10^{171}
- TRandom2 \simeq Tausworthe Generator
 - schnell
 - mäßige Periode 10^{26}
- TRandom3 \simeq Mersenne-Twister
 - sehr hohe Periode 10^{6000}

Produzieren gleichverteilte Zufallszahlen in $[0, 1]$

Erzeugung weiterer Verteilungen

- Rückweisungsmethode
- Transformationsmethode
- Majorantenmethode

Rückweisungsmethode

- SchlieÙe Verteilung in Rechteck ein
- Verteile dort Zufallspunkte mit konstanten Verteilungen
- Verwirf die Punkte auÙerhalb der Verteilungskurve

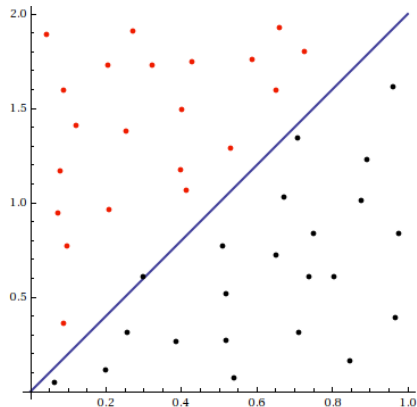


Abbildung: Rückweisungsmethode

Rückweisungsmethode - Beispiel

Gleichverteilung in der 3-dimensionalen Kugel

$$f_X(\vec{x}) = \frac{3}{4 \cdot \pi} \cdot \begin{cases} 1 & |\vec{x}| \leq 1 \\ 0 & |\vec{x}| > 1 \end{cases}$$

Verfahren:

- Erzeuge 3 Zufallszahlen x, y, z zwischen -1 und 1 .
- Bilde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$
- Verwirf, wenn $r > 1$

Zusatz: Gleichverteilung auf der Kugeloberfläche

- Bilde $x' = \frac{x}{r}$, $y' = \frac{y}{r}$, $z' = \frac{z}{r}$ für einen Vektor auf der Kugeloberfläche.

Rückweisungsmethode - anschaulich

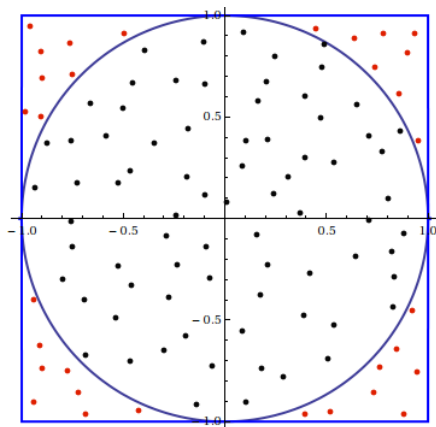


Abbildung: Gleichverteilung in der Kugel

Transformationsmethode

Gegeben:

$$X \sim H(x) \cdot H(1 - x)$$

$$Y = g(X) \quad \text{mit } g \text{ monoton wachsend}$$

Frage: Was hat Y für eine Verteilung?

$$P(Y < g(x)) = P(X < x)$$

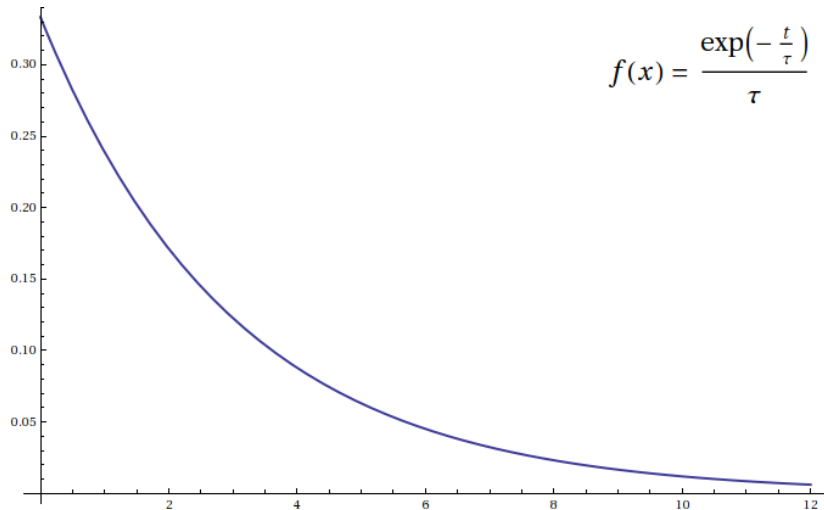
$$F_Y(g(x)) = \int_{-\infty}^{g(x)} dy' f_Y(y') = \int_0^x dx' = x$$

$$f_Y(y) = (g^{-1})'(y)$$

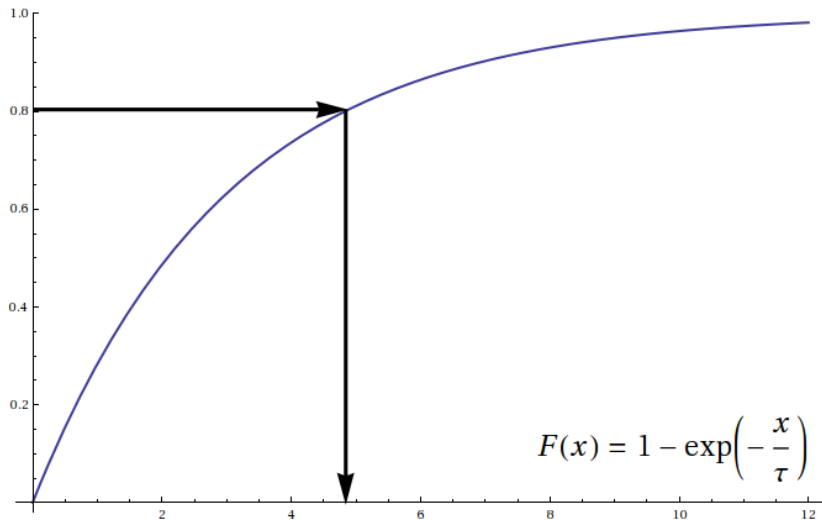
Vice versa: $f_Y(y)$ gewünscht \Rightarrow wähle

$$g(x) = F_Y^{-1}(x)$$

Transformationsmethode - anschaulich



Transformationsmethode - anschaulich



Transformationsmethode - Beispiele

Konstante Verteilung GLV($[a,b]$)

$$f_Y(y) = \frac{1}{b-a} H(x-a) \cdot H(b-x)$$

$$g(x) = (b-a) \cdot x + a$$

Breit-Wigner-Verteilung

$$f_Y(y) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{y^2 + 1}$$

$$g(x) = \tan\left(\pi \cdot x - \frac{\pi}{2}\right)$$

Exponentialverteilung

$$f_Y(y) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{y}{\tau}}$$

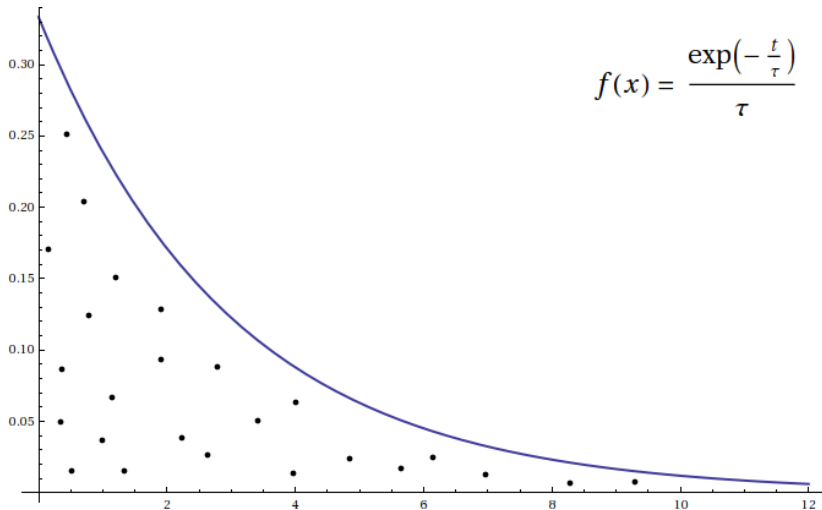
$$g(x) = -\tau \cdot \ln(1-x)$$

Log-Weibull-Verteilung

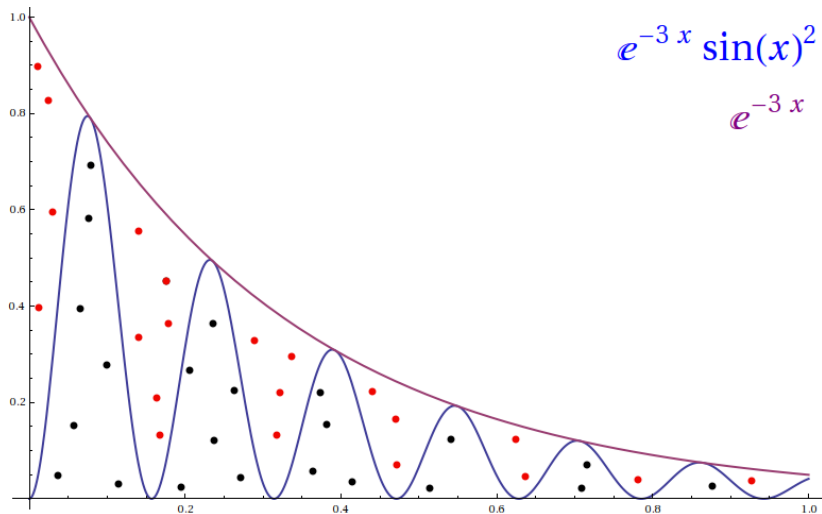
$$f_Y(y) = e^{-x-e^{-x}}$$

$$g(x) = -\ln(-\ln(x))$$

Transformationsmethode - anschaulich



Majorantenmethode - anschaulich



Majorantenmethode

Kombination beider Methoden!

- Suche Einhüllende $m(x)$ zur Verteilung $f(x)$
(Transformationsmethode)
- Benötige $I = \int dx M(x)$
- Ziehe y aus GLV($[0, I]$)
- Bilde $x = M^{-1}(y)$
- Ziehe z aus GLV($[0, 1]$)
- Verwirf, wenn $f(x) < m(x) \cdot z$

Impulsverteilung mit Majorantenmethode

Impulsverteilung

$$f_P(p) = a \cdot p^b \cdot e^{-c \cdot p}$$

Wähle zusammengesetzte Hüllenfunktion

$$m(p) = \begin{cases} f_{max} & 0 \leq p \leq p_s \\ g \cdot e^{-d \cdot p} & p_s < p \end{cases}$$

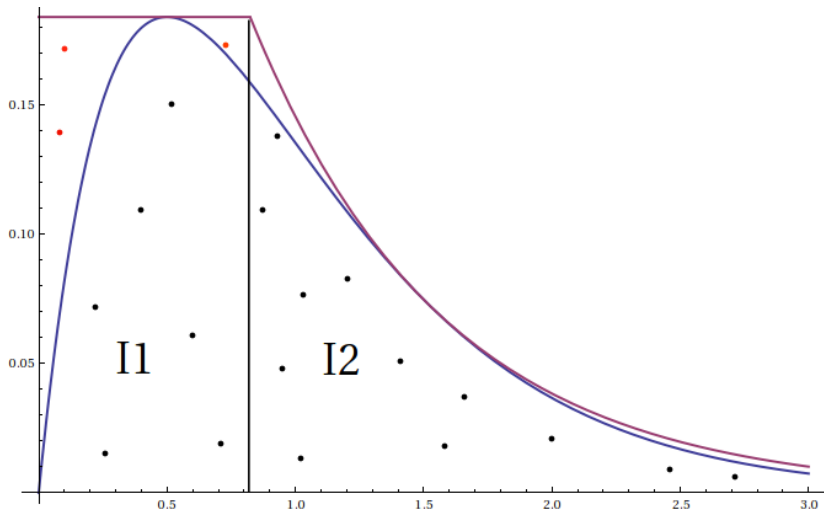
mit Parametern

$$g = a \cdot \left(\frac{b}{c-d} \right)^b \cdot e^{-b}$$

$$f_{max} = a \cdot \left(\frac{b}{c} \right)^b e^{-b}$$

$$p_s = -\frac{b}{d} \cdot \ln \left(1 - \frac{d}{c} \right)$$

Impulsverteilung - anschaulich



Impulsverteilung - Algorithmus

Benötige Integrale

$$I_1 = f_{max} \cdot p_s \quad I_2 = \frac{f_{max}}{d}$$

Algorithmus

- Würfel y aus $GLV([0, I_1 + I_2])$
- Würfel z aus $GLV([0, 1])$
- Falls $y < I_1$
 - $p = y \cdot \frac{p_s}{I_1}$
- Falls $I_1 < y < I_2$
 - $p = -\frac{1}{d} \ln\left(\frac{y - I_1}{I_2}\right) + p_s$
- Akzeptiere, wenn $f(p) > z \cdot m(p)$

Vergleich der Methoden

Rückweisungsmethode

- Vorteil: Immer anwendbar
- Nachteil: Geringe Effizienz

Transformationsmethode

- Vorteil: Hohe Effizienz
- Nachteil: Nur für invertierbare Verteilungsfunktion

Majorantenmethode

- Vorteil: Verbessert Rückweisungsmethode
- Nachteil: Gute Hüllenfunktion meist schwer bestimmbar

Zurück zum Problem

Haben alle Zutaten
Ab zum Quellcode

Schlussfolgerung

Monte-Carlo-Lösung

- 1 erfordert einen Bruchteil der analytischen Fähigkeiten.
- 2 ist nicht exakt
- 3 ist Zufallsgröße
- 4 hat einen (abschätzbaren) Fehler

Vorteile

- Eigenschaften vor Durchführung des Experiments bekannt (Toy-Monte-Carlo)
- Zerlegbarkeit des Problems
- Erweiterbarkeit

Steckbrief

Wanted to be solved

- Viele Freiheitsgrade
- Zufälliges Verhalten des Systems
- Interaktion von vielen Einzelkomponenten
- Unbekannten Verteilungsfunktionen und komplexe Transformationen
- Integration in hochdimensionalen Räumen

Anwendungsbereiche

- Physik
 - Wechselwirkung von Strahlung mit Materie
 - Phasenraumintegrationen
 - Systeme am Phasenübergang
 - ...
- Chemie
 - Simulationen von chemischen Reaktionen
 - ...
- Biologie
 - Schwarmverhalten
 - Populationsdynamik
 - ...
- Wirtschaft
 - Börse
 - Versicherung
 - ...
- ...

Ende

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit.

Quellen

- Einführung in Statistik und und Messwertanalyse für Physiker (Bohm und Zech)
- Statistische und numerische Methoden der Datenanalyse (Blobel und Lohrmann)
- Monte Carlo theory and practice (F. James)
- Physik per Computer (Kinzel und Reents)
- Particle Data Booklet (Ausgabe Juli 2008)
- Vorlesung Rechnernutzung in der Physik (Quast und Steinhauser)
- de.wikipedia.org
- root.cern.ch/root/