

# Die Monte-Carlo-Methode mit Pseudo- und Quasi-Zufallszahlen

Marco A. Harrendorf

Hauptseminar Methoden der experimentellen Teilchenphysik  
WS 2011/2012  
Karlsruhe Institut für Technologie (KIT)

25.11.2011

- 1 Einführung und Motivation
- 2 Wahrscheinlichkeitstheorie
- 3 Generierung von Zufallszahlen
- 4 Pseudo-Zufallszahlen
- 5 Quasi-Zufallszahlen
- 6 Anwendungsbeispiele zur Teilchenphysik

# Herkunft des Namens



(a) Spielbank Monte-Carlo



(b) Roulette-Tisch [2]

## Definition: Monte-Carlo-Methode

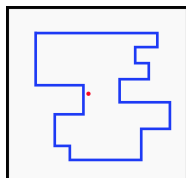
Numerische Methode zur Lösung mathematischer Probleme mit Hilfe der Modellierung von Zufallsgrößen

- Erste Verwirklichung 1727: Bestimmung von  $\pi$  durch Georges-Louis Leclerc – Comte de Buffon
- Erste theoretische Abhandlung 1949: „The Monte Carlo method“, Metropolis N., Ulam S., J. Amer. statistical Assoc. **44** (1949), 335-341

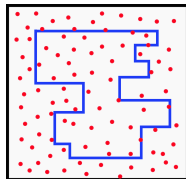
- Integration
- Simulation
  
- Teilchen- und Neutronenphysik
- Bedienungstheorie
- Spieltheorie
- Ökonometrie
- Festkörperphysik
- ...

- 1 Einfache Struktur des Rechenalgorithmus

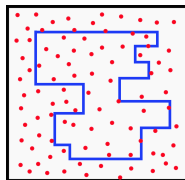
- 1 Einfache Struktur des Rechenalgorithmus
  - Realisierung eines zufälligen Versuchs



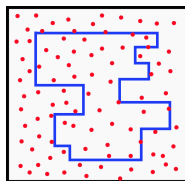
- 1 Einfache Struktur des Rechenalgorithmus
  - Realisierung eines zufälligen Versuchs
  - N-malige Wiederholung des Versuchs



- 1 Einfache Struktur des Rechenalgorithmus
  - Realisierung eines zufälligen Versuchs
  - N-malige Wiederholung des Versuchs
  - Statistische Auswertung



- 1 Einfache Struktur des Rechenalgorithmus
  - Realisierung eines zufälligen Versuchs
  - N-malige Wiederholung des Versuchs
  - Statistische Auswertung
- 2 Rechengenauigkeit entsprechend dem Gesetz der großen Zahlen



# Beispiel: Bestimmung von $\frac{\pi}{4}$

Eigenes Simulationsprogramm abrufbar unter  
<https://www.stud.uni-karlsruhe.de/~ugcvy/mc> .

Benutzername: HS

Passwort: montecarlo

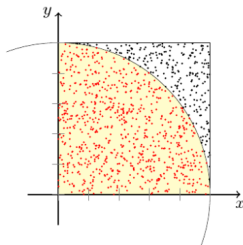


Abbildung: Skizze zur Bestimmung von  $\frac{\pi}{4}$  [4]

- 1 Einführung
- 2 Wahrscheinlichkeitstheorie

- Zufallsgröße:  $\xi$
- Diskreter Wert:  $x_i$
- Zugeordnete Wahrscheinlichkeitsdichte:  $p_i$
- Wahrscheinlichkeitsverteilung von  $\xi$ :

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}$$

- Wahrscheinlichkeit für  $\xi = x_i$ :  $P\{\xi = x_i\} = p_i$
- Erwartungswert einer Zufallsgröße:  $E\xi = \sum_{i=1}^n x_i p_i$
- Dispersion einer Zufallsgröße:  $D\xi = E\left((\xi - E\xi)^2\right)$   
 $D\xi = E(\xi^2) - (E\xi)^2$

Verteilungsdichte einer normalverteilten Zufallsgröße  $\xi \in (-\infty, \infty)$ :

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}}$$
$$\Rightarrow E\xi = a, \quad D\xi = \sigma^2$$

Bestimmung des Wahrscheinlichkeitsintegrals:

$$P\{x' < \xi < x''\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{x'}^{x''} \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right\} dx$$

Mit Wahl  $x' = (a - 3\sigma)$  und  $x'' = (a + 3\sigma)$  folgt:

$$P\{(a - 3\sigma) < \xi < (a + 3\sigma)\} = 0.997$$

# Der zentrale Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Betrachtung  $N$  gleichartig verteilter Zufallsgrößen  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ .  
Erwartungswert  $m$  und Dispersion  $b$ :

$$E\xi_1 = E\xi_2 = \dots = E\xi_N = m$$

$$D\xi_1 = D\xi_2 = \dots = D\xi_N = b^2$$

Aus der Summe dieser  $N$  Zufallsgrößen

$$\varrho_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N$$

folgt

$$E\varrho_N = E(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = Nm$$

$$D\varrho_N = D(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = Nb^2$$

Betrachte normalverteilte Zufallsgröße  $\chi$  mit Parametern:

$$a = Nm$$

$$\sigma^2 = Nb^2$$

Behauptung des zentralen Grenzwertsatzes für ein beliebiges Intervall  $(x', x'')$ :

$$P \{x' < \varrho_N < x''\} = \int_{x'}^{x''} p_{\chi_N}(x) dx$$

$\Rightarrow \varrho_N$  asymptotisch normalverteilt für großes  $N$

Aus

$$P\{(a - 3\sigma) < \xi < (a + 3\sigma)\} = 0.997$$

folgt mit  $a = Nm$  und  $\sigma^2 = Nb^2$ :

$$P\{(Nm - 3b\sqrt{N}) < \xi < (Nm + 3b\sqrt{N})\} \approx 0.997$$

$$\Leftrightarrow P\left\{\left(m - \frac{3b}{\sqrt{N}}\right) < \xi < \left(m + \frac{3b}{\sqrt{N}}\right)\right\} \approx 0.997$$

$$\Rightarrow P\left\{\left|\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \xi_j - m\right| < \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} \approx 0.997$$

- 1 Einführung
- 2 Wahrscheinlichkeitstheorie
- 3 Generierung von Zufallszahlen

# Generierung von Zufallszahlen auf einem Computer

- Tabellenwerke
- Zufallszahlengeneratoren
- Pseudo-Zufallszahlen
- Quasi-Zufallszahlen

- Aperiodizität
- Equidistribution Test
- Serial Test
- Runs-up and Runs-down Test

- 1 Einführung
- 2 Wahrscheinlichkeitstheorie
- 3 Generierung von Zufallszahlen
- 4 Pseudo-Zufallszahlen

Wahl von  $\xi_0 = 0.9876$  als Startwert (engl. Seed).

- $\xi_0^2 = 0.97535376 \Rightarrow \xi_1 = 0.5353$
- $\xi_1^2 = 0.28654609 \Rightarrow \xi_2 = 0.6546$
- $\xi_2^2 = 0.42850116 \Rightarrow \xi_3 = 0.8501$
- $\xi_3^2 = 0.72267001 \Rightarrow \xi_4 = 0.2670$
- $\xi_4^2 = 0.07128900 \Rightarrow \xi_5 = 0.1289$
- ...

# Kongruenzmethode (Methode der Reste)

Wahl von  $s_0 = 1$  als Seed.

- Berechnungsformel für weitere Seeds:

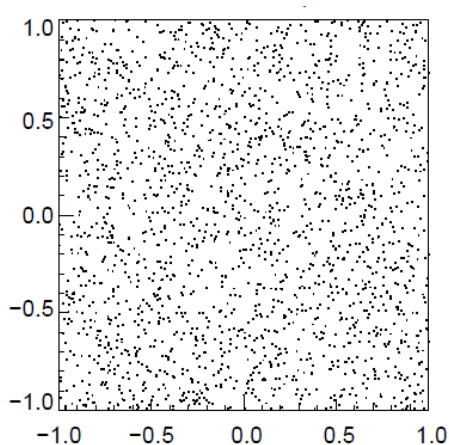
$$s_{k+1} = (5^{17} \cdot s_k) \% (2^{40})$$

- Berechnungsformel für Zufallszahlen:

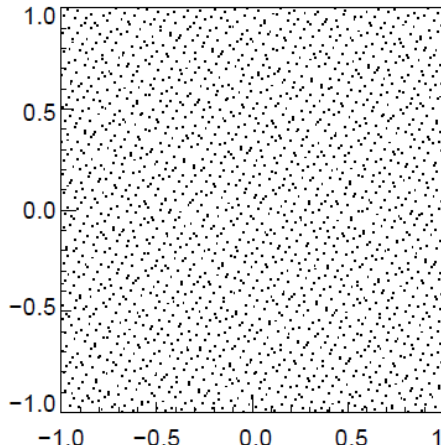
$$\xi_k = 2^{-40} \cdot s_k$$

- $s_1 = 762939453125 \Rightarrow \xi_1 = 0.6938893904$
- $s_2 = 1030993477632 \Rightarrow \xi_2 = 0.9376831055$
- $s_3 = 967441383424 \Rightarrow \xi_3 = 0.8798828125$
- $s_4 = 920196743168 \Rightarrow \xi_4 = 0.8369140625$
- ...

- 1 Einführung
- 2 Wahrscheinlichkeitstheorie
- 3 Generierung von Zufallszahlen
- 4 Pseudo-Zufallszahlen
- 5 Quasi-Zufallszahlen



(a) Pseudo-Zufallszahlen [1]



(b) Quasi-Zufallszahlen [1]

Abbildung: Vergleich der Häufung von Zufallszahlen

# Die Koksma-Hlawka-Ungleichung

Approximation eines Integrals mit Hilfe deterministischer Zahlenfolgen  $y_1, \dots, y_N$ :

$$\int_{[x', x'']^d} f(\vec{u}) d\vec{u} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(y_N)$$

Fehlerabschätzung durch Koksma-Hlawka-Ungleichung

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(y_N) - \int_{[x', x'']^d} f(\vec{u}) d\vec{u} \right| \leq V(f) D_N$$

mit

- Variation der Funktion:
- Diskrepanz der Zahlenfolge:

$$D_N \approx O\left(\frac{V(f) (\log N)^d}{N}\right)$$

# Beispiel für Verwendung der Quasi-Zufallszahlen

Gegeben: Funktion  $f(\vec{y}_N)$  mit  $Ef(\vec{y}_N) = 1$ :

$$f(\vec{y}_N) = \frac{1}{10!} (1 + 2y_1)(2 + 2y_2) \dots (9 + 2y_9)$$

Wahrscheinlicher Fehler für Näherung mit Pseudo-Zufallszahlen [3]:

$$\Delta_P = \frac{0.3}{\sqrt{N}}$$

Wahrscheinlicher Fehler für Näherung mit Quasi-Zufallszahlen [3]:

$$\Delta_Q = \frac{2}{N}$$

- 1 Einführung
- 2 Wahrscheinlichkeitstheorie
- 3 Generierung von Zufallszahlen
- 4 Pseudo-Zufallszahlen
- 5 Quasi-Zufallszahlen
- 6 Anwendungsbeispiele zur Teilchenphysik

# Anwendungsbeispiel: Neutronendurchgang durch eine Platte

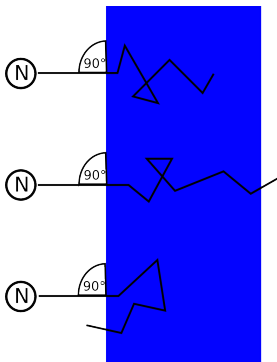


Abbildung: Skizze zur Simulation des Neutronendurchgangs durch eine Platte

# Auslosen der freien Weglänge

- Absorptionsquerschnitt:  $\Sigma_C$
- Streuquerschnitt:  $\Sigma_S$
- Gesamtwirkungsquerschnitt:  $\Sigma = \Sigma_C + \Sigma_S$
- Weglänge:  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$
- Freie Weglänge eines Neutrons:  $\lambda$
- Wahrscheinlichkeitsdichte für freie Weglänge:  $p(r) = \Sigma e^{-\Sigma r}$
- Auslosen der freien Weglänge:

$$\xi = \int_0^\lambda \Sigma e^{-\Sigma r} dr$$
$$\Leftrightarrow \xi = 1 - e^{-\Sigma \lambda}$$
$$\Leftrightarrow \lambda = -\frac{1}{\Sigma} \ln(1 - \xi)$$

Wegen der Gleichverteilung folgt:

$$\lambda = -\frac{1}{\Sigma} \ln \xi$$

# Auslösen der Bewegungsrichtung

- Annahme: Alle Streurichtungen gleichwahrscheinlich
- Kosinus des Raumwinkels:
- Sinus des Raumwinkels:
- Auslösen des Kosinus:

$$\mu = \cos \phi$$

$$\nu = \sin \phi$$

$$\mu = 2 \cdot \xi - 1$$

- Bestimmung des Sinus:

Wegen

$$1 = \sin^2 \phi + \cos^2 \phi$$

folgt:

$$\nu = \pm \sqrt{1 - \mu^2}$$

- Festlegung des Sinus-Vorzeichens durch weiteres Auslösen

# Berechnung der weiteren Neutronenbewegung

- Berechnung der nächsten x-Position:

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k \cdot \mu_k$$

- Berechnung der nächsten y-Position:

$$y_{k+1} = y_k + \lambda_k \cdot \nu_k$$

- Prüfen auf Durchdringung der Platte:

$$x_{k+1} > x_{max}?$$

$$x_{k+1} < x_{min}?$$

$$y_{k+1} > y_{max}?$$

$$y_{k+1} < y_{min}?$$

- Prüfen auf Absorption in der Platte durch erneutes Auslösen:

$$\xi < \frac{\Sigma_C}{\Sigma}?$$

- Anzahl der simulierten Neutronen:  $N$
- Anzahl der durchgedungen Neutronen:  $N^+$
- Anzahl der reflektierten Neutronen:  $N^-$
- Anzahl der absorbierten Neutronen:  $N^0$
- Wahrscheinlichkeit für Durchdringung:

$$p^+ \approx \frac{N^+}{N}$$

- Wahrscheinlichkeit für Reflexion:

$$p^- \approx \frac{N^-}{N}$$

- Wahrscheinlichkeit für Absorption:

$$p^0 \approx \frac{N^0}{N}$$

Eigenes Simulationsprogramm abrufbar unter  
<https://www.stud.uni-karlsruhe.de/~ugcvy/mc> .






Benutzername: HS

Passwort: montecarlo

- **GEometry And Tracking Version 4**
- Entwicklungsplattform zur Simulation von Strahlungsteilchen in Materie
- Entwicklung und Verwendung am CERN

```
int getRandomNumber()  
{  
    return 4; // chosen by fair dice roll.  
              // guaranteed to be random.  
}
```

Abbildung: Zufallszahlengenerator von xkcd [5]

-  M.O. Distler: Statistik, Datenanalyse und Simulation, [www1.kph.uni-mainz.de/Vorlesungen/WS07/Statistik/Kapitel2d.pdf](http://www1.kph.uni-mainz.de/Vorlesungen/WS07/Statistik/Kapitel2d.pdf), Abrufdatum: 24.10.2011
-  T. Lozano: A roulette wheel, [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Roulette\\_wheel.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Roulette_wheel.jpg), Abrufdatum: 01.11.2011
-  I.M. Sobol: Die Monte-Carlo-Methode, Berlin, 1991
-  Springob: Statistische Berechnung von pi, [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Pi\\_statistisch.png](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Pi_statistisch.png), Abrufdatum: 01.11.2011
-  xkcd: Random Number, <http://xkcd.com/221/>, Abrufdatum: 09.11.2011