Hauptseminar Methoden der experimentellen Teilchenphysik
WS 2011/2012

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

Marco A. Harrendorf
Karlsruhe Institut für Technologie, Bachelor Physik

Vortrag gehalten am 25.11.2011

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

1.1 Definition

„Die Monte-Carlo-Methode ist eine numerische Methode zur Lösung mathematischer Probleme mit Hilfe der Modellierung von Zufallsgrößen“ [5].
Bei der Monte-Carlo-Methode werden folglich Zufallszahlen genutzt, um mathematische und physikalische Probleme, die auf statistischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Prozessen beruhen, näherungsweise zu beschreiben und zu berechnen.
Die Monte-Carlo-Methode wird namentlich erstmals 1949 in der theoretischen Abhandlung „The Monte Carlo method“ von Metropolis und Ulam [3] erwähnt.
Die Monte-Carlo-Methode wurde allerdings bereits früher angewandt: Georges-Louis Leclerc benutzte sie 1727 zur Bestimmung der Kreiszahl π.

1.2 Anwendungsgebiete

Die Monte-Carlo-Methode umfasst im Wesentlichen zwei Teilbereiche:

- Die Integration
- Die Simulation

Beiden Bereichen ist gemeinsam, dass unter Zuhilfenahme der Monte-Carlo-Methode die Problemstellung numerisch gelöst wird und damit das Ergebnis immer mit einer Unsicherheit behaftet ist, die allerdings durch eine Vergrößerung der statistischen Stichprobe verkleinert werden kann.

In den nachfolgend genannten wissenschaftlichen Teilgebieten findet die Monte-Carlo-Methode zum Beispiel Anwendung:

- Teilchen- und Neutronenphysik: Weite Teile der Teilchen- und Neutronenphysik wären ohne Monte-Carlo-Simulationen undenkbar. Zum einen werden in diesem Gebiet Monte-Carlo-Simulationen genutzt, um statistische Messergebnisse vorherzusagen, und zum anderen werden damit Größen in einem Messszenario abgeschätzt, die über direkte Messungen nicht zu bestimmen sind.
- Bedienungstheorie: In der Bedienungstheorie werden Monte-Carlo-Simulationen zur Behandlung von Warteschlangen-Problemen genutzt. So ist es beispielsweise möglich, die Auslastung einer Telefon-Hotline mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode basierend auf erhobenen statistischen Daten in Abhängigkeit von der Anzahl an Telefonleitungen vorherzusagen.
- Spieltheorie: In der Spieltheorie kann die Monte-Carlo-Methode unter anderem eingesetzt werden, um die Handlung einzelner Individuen in einer interdependenten Entscheidungssituation zu simulieren und damit den Ausgang einer Entscheidungssituation vorherzusagen.

- Ökonometrie: Die Monte-Carlo-Methode ist für die Ökonometrie ein wichtiges Handwerkszeug, da sie erlaubt, auf Basis wirtschaftstheoretischer Modelle und empirisch gewonnener Daten Aussagen über die Zukunft, z.B. zukünftige Kursveränderungen an der Börse, zu treffen.
- Festkörperphysik: In der Festkörperphysik eignet sich die Monte-Carlo-Methode gut zur Lösung physikalischer Problemstellungen, die nicht geschlossen lösbar sind, sondern einer numerischen Herangehensweise bedürfen, sofern nicht geeignetere (genauere) Lösungsmethoden existieren.

Abgesehen von den oben genannten Gebieten werden in vielen anderen Gebieten Monte-Carlo-Simulationen angewandt und die Monte-Carlo-Methode zur Lösung numerischer Integrale genutzt.

1.3 Besonderheiten der Monte-Carlo-Methode

Die Monte-Carlo-Methode weist folgende Besonderheiten gegenüber anderen numerischen Verfahren auf:

- Vielseitige Anwendbarkeit: Die Monte-Carlo-Methode ist für alle modellierbaren Vorgänge geeignet, deren Ablauf durch zufällige Faktoren bestimmt wird. Weiterhin eignet sie sich für alle mathematischen Aufgaben, die sich durch ein künstliches wahrscheinlichkeitstheoretisches Modell beschreiben lassen.
- Einfache Struktur des Rechenalgorithmus: Die Monte-Carlo-Methode ist in der Regel für eine gegebene Problemstellung relativ leicht umzusetzen, wobei es meist möglich ist, zunächst bei einer Simulation mit einem relativ groben Simulationsmodell zu beginnen und dieses dann – entsprechend den Anforderungen an die Simulationsgenauigkeit – sukzessive auszubauen.
  Der Rechenalgorithmus gliedert sich hierbei bei allen Monte-Carlo-Simulationen in die folgenden abstrakten Teilschritte:
  - Realisierung eines zufälligen Versuchs
  - Mehrmalige Wiederholung des Versuchs mit unterschiedlichen Zufallszahlen
  - Statistische Auswertung des Versuchs
- Abhängigkeit der Rechengenauigkeit von der Anzahl der Wiederholungen: Die Genauigkeit des Ergebnisses bei der Monte-Carlo-Methode steigt mit der Anzahl der realisierten zufälligen Versuche und lässt sich für Pseudozufallszahlen mit dem Gesetz der großen Zahl und für Quasizufallszahlen mit der Koksma-Hlawka-Ungleichung abschätzen (später dazu mehr).

2 Wahrscheinlichkeitstheorie

2.1 Wahrscheinlichkeit, Wahrscheinlichkeitsverteilung, Erwartungswert und Dispersion einer diskreten Zufallsgröße

Es sei ξ eine diskrete Zufallsgröße und x_i ein diskreter Wert mit zugeordneter Wahrscheinlichkeitsdichte p_i, die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zufallsgröße ξ ist dann gegeben durch:

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

Die Wahrscheinlichkeit als Zufallsgröße ξ den Zahlenwert von x_i zu erhalten ist dann wie folgt:

$$P\{\xi = x_i\} \;=\; p_i$$

Der Erwartungswert $E\xi$ der Zufallsgröße ξ lässt sich dann folgendermaßen bestimmen:

$$E\xi \;=\; \sum_{i=1}^{n} x_i p_i$$

Die Dispersion $D\xi$ der Zufallsgröße ξ beträgt:

$$D\xi \;=\; E\left((\xi \;-\; E\xi)^2\right)$$
$$D\xi \;=\; E\left(\xi^2\right) \;-\; (E\xi)^2$$

2.2 Normalverteilte Zufallsgrößen

Im Vergleich zu einer diskreten Zufallsgröße ist eine normalverteilte Zufallsgröße ξ auf der gesamten Menge der reellen Zahlen definiert ($\xi \in (-\infty, \infty)$) und die Verteilungsdichte $p(x)$ lautet wie folgt:

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

Aus der Kenntnis der Eigenschaften einer Normalverteilung sind folgende Abhängigkeiten für den Erwartungswert $E\xi$ und die Dispersion $D\xi$ der Zufallsgröße bekannt:

$$E\xi \;=\; a$$
$$D\xi \;=\; \sigma^2$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass die Zufallsgröße ξ im Intervall (x', x'') liegt, berechnet sich dann über das Wahrscheinlichkeitsintervall zu

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

Wählt man $x' \;=\; (a \;-\; 3\sigma)$ und $x'' \;=\; (a \;+\; 3\sigma)$, so weiß man, dass die Wahrscheinlichkeit, dass die Zufallsgröße ξ im Intervall $(a - 3\sigma, a + 3\sigma)$ liegt, ungefähr 99.7% beträgt.

$$P\left\{(a \;-\; 3\sigma) \;<\; \xi \;<\; (a \;+\; 3\sigma)\right\} \;\approx\; 0.997 \tag{1}$$

2.3 Der zentrale Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Betrachtet man N gleichartig verteilte und unabhängige Zufallsgrößen $\xi_1,\ \xi_2,\ \ldots,\ \xi_N$, deren Wahrscheinlichkeitsdichten $p_i(x)$ übereinstimmen, so besitzen diese auch jeweils denselben Erwartungswert und dieselbe Dispersion:

$$\begin{aligned} E\xi_1 &= E\xi_2 = \ldots = E\xi_N = m \\ D\xi_1 &= D\xi_2 = \ldots = D\xi_N = b^2 \end{aligned}$$

Für eine aus diesen N gleichartig verteilten Zufallsgrößen $\xi_1,\ \xi_2,\ \ldots,\ \xi_N$ gebildete Summe ϱ_N gilt dann

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

und deren Erwartungswert $E\varrho_N$ und Dispersion $D\varrho_N$ ist dann wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} E\varrho_N &= E(\xi_1 + \xi_2 + \ldots + \xi_N) = Nm \\ D\varrho_N &= D(\xi_1 + \xi_2 + \ldots + \xi_N) = Nb^2 \end{aligned}$$

Betrachtet man nun eine speziell gewählte, normalverteilte Zufallsgröße χ mit den Parametern

$$\begin{aligned} a &= Nm \quad , \\ \sigma^2 &= Nb^2 \quad , \end{aligned}$$

so behauptet der zentrale Grenzwertsatz, dass die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Summe ϱ_N gerade im Intervall (x', x'') liegt, gerade dem Wahrscheinlichkeitsintegral der speziell gewählten Zufallsgröße χ entspricht.

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

Hieraus folgt dann, dass die Wahrscheinlichkeitsdichten $p_{\varrho_N}(x)$ und $p_{\chi_N}(x)$ nahezu gleich sein müssen, wenn die Summe ϱ_N aus einer großen Anzahl gleichartig verteilter Zufallsgrößen ξ_i besteht. Daraus lässt sich dann allerdings ableiten, dass die Summe ϱ_N asymptotisch normalverteilt sein muss.
Dieser Zusammenhang lässt sich soweit erweitern, dass man nicht mehr die Gleichverteilung und Unabhängigkeit der einzelnen Zufallsgrößen ξ_i fordern muss, sondern nur noch sichergestellt sein muss, dass die einzelnen Zufallsgrößen ξ_i jeweils nur einen geringen Beitrag zur Gesamtsumme ϱ_N liefern.
Der zentrale Grenzwertsatz besagt also, dass jede Zufallsgröße, die aus einer Vielzahl einzelner, weitestgehend unwesentlicher Zufallsgrößen resultiert, einer Normalverteilung unterliegt.

2.4 Das Gesetz der großen Zahlen

Betrachtet man wieder eine aus N unabhängigen Zufallsgrößen $\xi_1,\ \xi_2,\ \ldots,\ \xi_N$ gebildete Summe $\varrho_N = \xi_1 + \xi_2 + \ldots + \xi_N$, so ist diese Summe ϱ_N entsprechend dem zentralen

Grenzwert der Wahrscheinlichkeitsrechnung asymptotisch normalverteilt und für die Parameter der Normalverteilung gilt entsprechend

$$\begin{aligned} E\varrho_N &= a = Nm \quad , \\ D\varrho_N &= \sigma^2 = Nb^2 \quad . \end{aligned}$$

Aus Gleichung 1 ergibt sich dann die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Summe ϱ mit einer Wahrscheinlichkeit von 3σ im Intervall $(a - 3\sigma, a + 3\sigma)$ liegt, wie folgt:

$$\begin{aligned} P\left\{(a - 3\sigma) < \varrho_N < (a + 3\sigma)\right\} &\approx 0.997 \\ \Leftrightarrow P\left\{(Nm - 3b\sqrt{N}) < \varrho_N < (Nm + 3b\sqrt{N})\right\} &\approx 0.997 \\ \Leftrightarrow P\left\{(m - \frac{3b}{\sqrt{N}}) < \frac{\varrho_N}{N} < (m + \frac{3b}{\sqrt{N}})\right\} &\approx 0.997 \\ \Rightarrow P\left\{\left|\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\xi_j - m\right| < \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} &\approx 0.997 \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung zeigt, dass bei gegebener Wahrscheinlichkeit (hier: 3σ) die Streuung der Zufallsgrößen ξ_i um den Erwartungswert m von der Ordnung $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ ist.
Dies bedeutet, dass die statistische Unsicherheit bei der Monte-Carlo-Methode ungefähr mit $\sqrt{N}$ abnimmt.
Möchte man beispielsweise die statistische Unsicherheit einer Zufallssumme ϱ_N um den Faktor 2 verringern, so muss man N – die Anzahl an realisierten Zufallsgrößen ξ_i – um den Faktor 4 vergrößern.

3 Generierung von Zufallszahlen

Zur Generierung von Zufallszahlen werden vorwiegend die folgenden drei Methoden angewandt.

- Verwendung von Zufallszahlen aus Tabellenwerken
- Erzeugung von Zufallszahlen durch Zufallszahlengeneratoren
- Berechnung von Pseudozufallszahlen und Quasizufallszahlen durch Computeralgorithmen

4 Pseudozufallszahlen

Die Pseudozufallszahlen haben in der heutigen Zeit die Tabellenwerke und Zufallszahlengeneratoren vollständig verdrängt, da sie eine Reihe von Vorteilen bieten:

- Einfache Implementierung: Zur Verwendung von Pseudozufallszahlen existieren eine Reihe von Programmbibliotheken, die Pseudozufallszahlen mit Hilfe der Kongruenzmethode berechnen und in Form von Pseudozufallszahlengeneratoren bereitstellen (siehe z.B. [1]).

- Fortsetzbarkeit: Wenn der letzte verwendete Seed-Wert eines Pseudozufallszahlengenerators bekannt ist, kann die Generierung von Zufallszahlen fortgesetzt werden, indem direkt aus dem letzten Seed-Wert die nächste Zufallszahl bestimmt wird.
- Vielseitige Anwendbarkeit: Mit Hilfe der Pseudozufallszahlengeneratoren und anschließender Transformation der Zufallszahlen lassen sich Zufallsgrößen, die verschiedensten Verteilungsfunktionen gehorchen und dem Gesetz der großen Zahl folgen, generieren, sodass die Pseudozufallszahlen in vielen Anwendungsfällen verwendet werden können.
- Bekannte Güte: Für einen Pseudozufallszahlengenerator ist es ausreichend, wenn dessen Berechnungsalgorithmus einmal auf die zufällige Verteilung der generierten Zufallszahlen hin untersucht wird, da dann die Güte der generierten Zufallszahlen auch für alle nachfolgenden Berechnungen bekannt ist.

5 Charakteristiken guter Zufallszahlengeneratoren

Wesentlich für die Güte eines Zufallszahlengenerators ist zum einen, dass die Aperiodizitätslänge, d.h. die Länge nach der sich die generierten Zufallszahlen wiederholen, möglich groß ist, und zum anderen, dass die generierten Zufallszahlen zufällig verteilt sind .
Zur Überprüfung von Pseudozufallszahlengeneratoren auf ihre Güte verwendet man daher eine Reihe statistischer Tests, die einzelne Aspekte der Verteilung untersuchen. Üblicherweise wird heutzutage die sogenannte DIEHARD Testsuite [2] zum Testen der Pseudozufallszahlengeneratoren herangezogen. Diese umfasst mittlerweile mehr als 13 verschiedene statistische Tests.
Bekannte Zufallszahlengeneratoren, die alle DIEHARD-Tests erfüllen und sich durch eine große Aperiodizitätslänge auszeichen, sind der RANLUX- und der RANECU-Zufallszahlengenerator. Beide sind in der bereits erwähnten C++-Bibliothek CLHEP [1] implementiert und damit einfach in eigene Projekte zu integrieren.

6 Quasizufallszahlen

Quasizufallszahlen werden bei der Approximation eines Integrals mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode angewandt.

6.1 Approximation eines Integrals mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode

Bei der Approximation eines Integrals

$$\int_{[x',x'']^d} f(\vec{u})d\vec{u}$$

der Funktion $f(\vec{u})$ mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode werden im Intervall $[x', x'']$ N Stützstellen $\vec{y_N}$ zufällig ausgewählt, an denen anschließend der Funktionswert $f(\vec{y_N})$ berechnet wird.

Der numerische Wert für das Integral ergibt sich dann aus der Summation der einzelnen berechneten Funktionswerte:

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

6.2 Eigenschaften von Quasizufallszahlen

Zur Berechnung von Quasizufallszahlen werden deterministische Zahlenfolgen (sogenannte low-discrepancy Zahlenfolgen) verwendet, die einer Folge von Punkten $(Q_1, Q_2, \ldots, Q_N)$ entsprechen. Die Dimension k und die Anzahl N der Punkte wird dabei durch die Zahlenfolge vorgegeben.
Der Vorteil bei der Verwendung dieser Zahlenfolgen ist, dass alle Punkte im k-dimensionalen Einheitswürfel gleichverteilt sind, sofern man alle N Punkte der Zahlenfolge berücksichtigt.
Im Vergleich zu den Pseudozufallszahlen wird eine Gleichverteilung der Punkte im k-dimensionalen Einheitswürfel also nicht erst für $N \to \infty$, sondern bereits bei der durch die Zahlenfolge vorgegebenen Punktanzahl N erreicht. Während die Pseudozufallszahlen dem Gesetz der großen Zahl folgen, muss deshalb die statistische Unsicherheit bei den Quasizufallszahlen durch die Koksma-Hlawa-Ungleichung abgeschätzt werden:

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

Die statistische Unsicherheit ist nach dieser Ungleichung bestimmt durch die Variation $V(f)$ der Funktion und der Diskrepanz D_N der Zahlenfolge. Die Diskrepenz D_N der low-discrepancy Zahlenfolgen ist von der folgenden Ordnung:

$$D_N \;\approx\; O\left(\frac{(\log N)^k}{N}\right)$$

Die statistische Unsicherheit nimmt also bei der Verwendung von Quasizufallszahlen ungefähr mit N ab. Im Vergleich dazu nimmt die statistische Unsicherheit bei den Pseudozufallszahlen nur mit $\sqrt{N}$ ab. Quasizufallszahlen sind aus diesem Grund also Pseudozufallszahlen vorzuziehen. Allerdings weisen sie auch ein paar gravierende Nachteile auf:

- Festgelegte Dimension k: Die Dimension der Punkte $(Q_1, Q_2, \ldots, Q_N)$ ist von vornherein festgelegt, dementsprechend müssen auch alle Zufallsgrößen im Anwendungsfall von dieser Dimension sein, da andernfalls die Gleichverteilung nicht mehr gewährleistet ist. Dies ist allerdings in den wenigsten Anwendungsfällen gegeben.

- Festgelegte Anzahl an Punkten N: Die Anzahl der Punkte N, die zu einer Gleichverteilung der Punkte im k-dimensionalen Einheitswürfel führen, ist durch die verwendete Zahlenfolge festgelegt. Eine nachträgliche Erhöhung der Punktanzahl und damit eine bessere Approximation ist nicht möglich. Stattdessen müssen die Berechnungen gegebenenfalls mit einer neuen Zahlenfolge erneut durchgeführt werden.

Literatur

[1] Boudreau J. et. al.: CLHEP – A Class Library for High Energy Physics, http://proj-clhep.web.cern.ch/proj-clhep/, Abrufdatum: 03.12.2011

[2] Marsaglia G.: The Marsaglia Random Number CDROM including the Diehard Battery of Tests of Randomness, http://www.stat.fsu.edu/pub/diehard/, Abrufdatum: 12.11.2011

[3] Metropolis N., Ulam S.: The Monte Carlo method, J. Amer. statistical Assoc. **44** (1949), 335-341

[4] RAND-Corporation: A million random digits with 1 000 000 normal deviates, Glencoe 1955

[5] Sobol I.M.: Die Monte-Carlo-Methode, Berlin 1991