Метод Монте-Карло

Лекция №4

Статистические методы в ядерном эксперименте, ИЯФ, 2024 г.

1. Введение
2. Моделирование дискретных случайных величин
3. Моделирование непрерывных случайных величин
    - Интегральный метод
    - Метод браковки Неймана
    - Метод существенной выборки
    - Метод суперпозиции
    - Метод частичного аналитического интегрирования
4. Вычисление интегралов методом Монте-Карло

Метод Монте-Карло (I)

Метод Монте-Карло – численный метод решения сложных математических задач путем генерирования случайных величин. Позволяет моделировать сложные процессы, на которые влияет множество случайных факторов: рождение и распад частиц, прохождение частиц через вещество и.т.п.

Метод Монте-Карло может быть применен и для решения некоторых задач, вовсе не имеющих случайных составляющих, например, вычисление определенных (многомерных) интегралов от сложных функций, решение систем дифференциальных уравнений в частных производных со сложными граничными условиями.

Так, например, при равномерном выбрасывании точек N_0 раз в объёме гиперкуба ($V_{\text{hypercube}}$), вероятность p того, что точка попадёт в область, ограниченную заданными гиперповерхностями, пропорциональна объёму (V_{domain}) области, т.е. $p = V_{\text{domain}}/V_{\text{hypercube}}$:

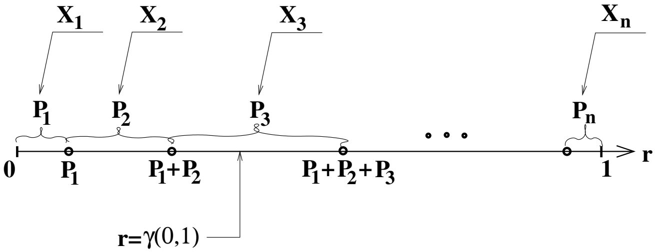
$$V_{\text{domain}} \approx \frac{N}{N_0} V_{\text{hypercube}}, \quad \sigma(V_{\text{domain}}) = \sqrt{N\left(1-\frac{N}{N_0}\right)}\frac{V_{\text{hypercube}}}{N_0},$$

$$\frac{\sigma(V_{\text{domain}})}{V_{\text{domain}}} = \sqrt{\frac{\left(1-\frac{N}{N_0}\right)}{N}} = \sqrt{\frac{\left(\frac{V_{\text{hypercube}}}{V_{\text{domain}}}-1\right)}{N_0}} \sim \frac{1}{\sqrt{N_0}}$$

Метод Монте-Карло (II)

- Являясь статистическим по своей природе, метод Монте-Карло дает ответ, которому также присуща некоторая статистическая неопределенность - точность результата. При этом точность улучшается с увеличением числа статистических испытаний (событий).
- Ключевым моментом в применимости метода Монте-Карло является возможность генерации (псевдо)случайных чисел, равномерно распределённых на интервале $(0, 1)$.
- По способу получения последовательности (псевдо)случайных чисел генераторы делятся на следующие типы:
  - Физические
  - Табличные
  - Алгоритмические

Отложим на единичном интервале $(0, 1)$ отрезки P_1, P_2, P_3, ..., P_n. Точка, соответствующая выпавшему равномерно распределённому на этом интервале случайному числу, укажет на один из отрезков P_i, $i = 1 \div n$. Это означает появление соответствующего значения X_i дискретной случайной величины.



Моделирование непрерывных случайных величин (I)

Интегральный метод:

Случайная величина $x = x(\gamma)$, являющаяся решением интегрального уравнения:

$$\gamma = \int\limits_{-\infty}^{x} f(t)dt, \quad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(t)dt = 1,$$

обладает ф.п.в. равной $f(x)$.

Замечание: Есть случайная величина y с ф.п.в. $g(y) = \gamma(0,1)$, сделаем замену $y = \int\limits_{-\infty}^{x} f(t)dt$ и найдём ф.п.в. для x: $g(y(x)) \cdot \frac{dy}{dx} = 1 \cdot f(x) = f(x)$

Пример 1: Случайная величина $x = \gamma(a,b) = (b-a)\gamma + a$

Пример 2: Случайная величина $x = -\lambda \ln \gamma$ распределена по экспоненциальному закону $\frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}$

Пример 3: Случайная величина $x = \sqrt{-2\ln\gamma_1}\cos(2\pi\gamma_2)$ (γ_1 и γ_2 – независимые случайные величины) распределена по $N(0,1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$ (т.н. преобразование Бокса-Мюллера)

Пример 4: Если ф.п.в. x равна $N(0,1)$, то $y = \sigma x + \mu$ распределена по $N(\mu, \sigma)$

Пример 5: Случайная величина $x = \operatorname{ctg} \gamma\pi$ распределена по $\frac{1}{\pi} \frac{1}{x^2+1}$

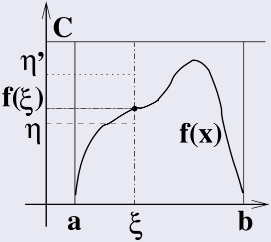
Пример 6: Сгенерировать интегральным методом случайные величины с ф.п.в.: $f(x) = \beta / x^{1-\beta}$, $x \in (0,1)$ и $g(y) = \beta / y^{1+\beta}$, $y \in (1, +\infty)$, $0 < \beta < 1$

Моделирование непрерывных случайных величин (II)

Далеко не всегда можно воспользоваться интегральным методом (решить аналитически интегральное уравнение), если ф.п.в. $f(x)$ определена на конечном интервале $[a, b]$ и ограничена сверху $f(x) < C$, $\forall x \in [a, b]$, то используют метод браковки по Нейману.

Метод браковки по Нейману:

- Разыгрываем пару случайных величин (равномерно в прямоугольнике $(b-a)\times C$): $\xi = (b-a)\gamma_1 + a$, $\eta = C\gamma_2$
- Если $\eta \le f(\xi)$, то сгенерированное $x = \xi$ принимается, в противном случае возвращаемся к предыдущему пункту и повторяем всё сначала



Замечание 1: Функцию $f(x)$ не нужно нормировать в методе браковки.
Замечание 2: Эффективность метода зависит от того, какую долю от площади прямоугольника $(b-a)\times C$ занимает площадь под кривой.

Моделирование непрерывных случайных величин (III)

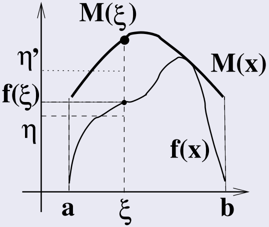
Если невозможно воспользоваться интегральным методом, а также область определения ф.п.в. бесконечна или ф.п.в. неограничена (но интегрируема), используют метод существенной выборки, который является комбинацией интегрального метода и метода браковки.

Метод существенной выборки:

Заключается в поиске/подборе т.н. мажорирующей функции (мажоранты), $M(x)$, для заданной ф.п.в. $f(x)$, такой что $f(x) \le M(x)\ \forall x$ и для нормированной $M(x)$ применим интегральный метод (если нормированную $M(x)$ рассматривать как некоторую простую ф.п.в.).

Пусть $\widetilde{M}(x) = \mathrm{const} \cdot M(x)$, такая что $\int \widetilde{M}(x)dx = 1$. Тогда процедура:

- Генерируем с.в. ξ согласно ф.п.в. $\widetilde{M}(x)$ интегральным методом
- Генерируем $\eta = M(\xi)\gamma$
- Если $\eta < f(\xi)$, то сгенерированное $x = \xi$ принимается, в противном случае возвращаемся к предыдущему пункту и повторяем всё сначала



Замечание: Метод существенной выборки применяется также для повышения эффективности генерирования с.в.

Моделирование непрерывных случайных величин (IV)

Пример 1: Сгенерировать с.в., распределённую по нормальному закону ($N(0,1)$) используя подходящую мажоранту.

Пример 2: Сгенерировать с.в., распределённую по закону $\sim 1/\sqrt{\sin x}$, в диапазоне $x \in (0, \pi)$ подобрав подходящую мажоранту.

Пример 3: Физическая величина, x, распределена согласно ф.п.в. $f(x)$. В реальном эксперименте детектор имеет конечное разрешение, поэтому ф.п.в. для измеренного значения физической величины, x', будет:

$$g(x') = \int f(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-\frac{(x'-x)^2}{2\sigma_x^2}} dx$$

Если уже есть выборка величины x объёмом n $(x_1, ..., x_n)$, как из неё получить выборку измеренной величины x' объёмом n ?

Пример 4: Вероятность излучения фотона электроном или позитроном пучка пропорциональна $D(x) = \frac{\beta}{x^{1-\beta}} h(x)$, где $0 < x < 1$ – доля энергии пучка, уносимая фотоном, $h(x) = 1 + \frac{3}{4}\beta - \frac{\beta^2}{12}\left(\frac{L}{3} + \pi^2 - \frac{47}{8}\right) - \frac{1}{2}x^{1-\beta}(2-x) + \frac{\beta}{8}x^{1-\beta}\left(4(x-2)\ln x - (1+3(1-x)^2)\frac{\ln(1-x)}{x} + x - 6\right)$, $\beta = \frac{\alpha}{\pi}(L-1)$, $L = \ln\frac{s}{m^2}$, $s = 4E^2$, E – энергия пучка.

Таким образом видимое сечение реакции с учётом т.н. радпоправок равно:

$$\sigma_{\text{vis}} = \int_0^1 \int_0^1 D(x_1)D(x_2)\sigma(s(1-x_1)(1-x_2))dx_1 dx_2$$

Сгенерировать с.в. x согласно ф.п.в. $D(x)/\int_0^1 D(x)dx$.

Моделирование непрерывных случайных величин (V)

Метод суперпозиции позволяет генерировать с.в. чьи ф.п.в. составлены из нескольких слагаемых с разным поведением:

$$f(x) = c_1 g_1(x) + c_2 g_2(x), \quad \int g_{1,2}(x) dx = 1, \quad c_1 + c_2 = 1$$

Введём вспомогательную дискретную с.в. r:
$P(r = 1) = c_1$, $P(r = 2) = c_2$. Для генерирования исходного распределения сначала разыгрываем r, а затем $g_r(x)$ (т.е. либо $g_1(x)$ либо $g_2(x)$). Достоинством метода является то, что применимость интегрального метода для $g_1(x)$ и $g_2(x)$ в отдельности может быть существенно проще чем для исходной ф.п.в. $f(x)$.
Пример: Сгенерировать с.в. с ф.п.в. $f(x) \sim 1 + x^4$, $-1 < x < 1$.

Моделирование непрерывных случайных величин (VI)

Метод частичного аналитического интегрирования применяется в ситуации, когда нужно сгенерировать многомерную с.в. с некоторой ф.п.в. $f(\vec{x}|\vec{\alpha})$, $\vec{x} = (x_1, ..., x_n)$, $\vec{\alpha} = (\alpha_1, ..., \alpha_k)$ – набор параметров распределения. Если возможно аналитическое интегрирование $f(\vec{x}|\vec{\alpha})$ по одной или нескольким переменным $(x_1, ..., x_m,\ m < n)$, то генерирование $\vec{x}$ можно проводить в два этапа:

- генерируем набор с.в. $(x_{m+1}, ..., x_n)$ согласно ф.п.в. $g(x_{m+1}, ..., x_n) = \int f(\vec{x}|\vec{\alpha}) dx_1 ... dx_m$
- генерируем набор оставшихся с.в. $(x_1, ..., x_m)$ согласно $f(\vec{x}|\vec{\alpha}) = f(x_1, ..., x_m | x_{m+1}, ..., x_n, \vec{\alpha})$, где уже сгенерированные с.в. $(x_{m+1}, ..., x_n)$ рассматриваются как дополнительные параметры распределения.

Замечание: Если $m = n - 1$, то генерирование $\vec{x}$ распадается на серию из n розыгрышей одномерных с.в.

Пример:

$f(x, y|\alpha) = (\alpha + 1)(\alpha + 2)(1 - x - y)^{\alpha} H(1 - x - y), 0 < x, y < 1$

Вычисление интегралов методом Монте-Карло

I. Метод Неймана (или геометрический метод)

Интеграл от функции (задающей профиль ф.п.в.) рассчитывается как $I = V\varepsilon,\ \sigma_I = V\sqrt{\frac{\varepsilon(1-\varepsilon)}{N_0}},\ \varepsilon = \frac{N_1}{N_0}$,, где N_0 – полное число испытаний при генерировании выборки из N_1 случайных величин по методу Неймана, V – объём гиперкуба (в одномерном случае $(b-a)\times C$), или интеграл от мажоранты.

II. Метод выборки (или обычный метод)

- $I = \int\limits_a^b f(t)dt \approx \frac{b-a}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} f(x_i) = (b-a)\langle f(x)\rangle_{\gamma(a,b)}$, где $(x_1, \ldots, x_n)$ – выборка с.в. с ф.п.в. $\gamma(a,b)$.
- В общем случае, если есть выборка $(x_1, \ldots, x_n)$ с.в. с ф.п.в. $g(x)$, то:
  $I = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(t)dt = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(t)}{g(t)}g(t)dt = \int\limits_0^1 \frac{f(t(y))}{g(t(y))}dy \approx \frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}\frac{f(x_i)}{g(x_i)} = \left\langle \frac{f(x)}{g(x)} \right\rangle_{g(x)}$,
  $y = \int\limits_{-\infty}^{t} g(z)dz,\ y = \gamma(0,1),\ x = t(y)$–распределена по $g(x)$.

Причём ошибка интеграла это просто ошибка среднего, т.е.

$$\sigma_I = \sqrt{\frac{s^2}{n}} = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{f(x_i)}{g(x_i)} - I\right)^2} \sim \frac{1}{\sqrt{n}}$$

Пример: Вычислить интеграл методом Монте-Карло: $I = \int\limits_0^{\pi} \frac{dx}{\sqrt{\sin x}} = 2\sqrt{2}K(1/2) = 5.24412$.