El Método de Monte Carlo

Curso de Estadística

TAE, 2005

J.J. Gómez-Cadenas

El método de Monte Carlo es una técnica numérica para calcular probabilidades y otras cantidades relacionadas, utilizando secuencias de números aleatorios.

Para el caso de una sola variable el procedimiento es la siguiente:

> Generar una serie de números aleatorios, r_1, r_2,…,r_m, uniformemente distribuidos en [0,1]
>
> Usar esta secuencia para producir otra secuencia, x_1, x_2,…,x_m, distribuida de acuerdo a la pdf en la que estamos interesados.
>
> Usar la secuencia de valores x para estimar alguna propiedad de f(x). Los valores de x pueden tratarse como medidas simuladas y a partir de ellos puede estimarse la probabilidad de que los x tomen valores en una cierta región.

Formalmente un cálculo MC no es otra cosa que una integración.

En general, para integrales unidimensionales pueden usarse otros métodos numéricos más optimizados. El métdo MC es, sin embargo muy útil para integraciones multidimensionales

Generación de números aleatorios

Son necesarios para proporcionar la secuencia aleatoria inicial (uniformemente distribuida entre 0 y 1).

Existen numerosos algoritmos de generación de números (pseudo) aleatorios. En particular, las diferentes variantes de RANLUX, disponibles en todas las bibliotecas matemáticas modernas (CERN, GSL, etc.)

Un ejemplo sencillo es el algoritmo MLCG (multiplicative linear congruential generator)

$$n_{i+1} = (a n_i) \bmod m,$$

$n_i =$ entero

$a =$ multiplicador

m= módulo

n_0 semilla

a=3, m=7, $n_0 = 1 \to n_{i+1} = (3n_i)\bmod 7$

$n_0 = 1$

$n_1 = (3 \cdot 1)\bmod 7 = 3$

$n_2 = (3 \cdot 3)\bmod 7 = 2$

$n_3 = (3 \cdot 2)\bmod 7 = 6$

$n_4 = (3 \cdot 6)\bmod 7 = 4$

$n_5 = (3 \cdot 4)\bmod 7 = 5$

$n_6 = (3 \cdot 5)\bmod 7 = 1$

n_1,n_2…siguen una secuencia periódica en el rango $[1,m-1]$. En general se escoge a y m para obtener un periodo largo: Por ejemplo en una máquina de 32 bits, m=2147483399, a=40692 proporcionan buenos resultados y el máximo periodo.

La secuencia se repite!

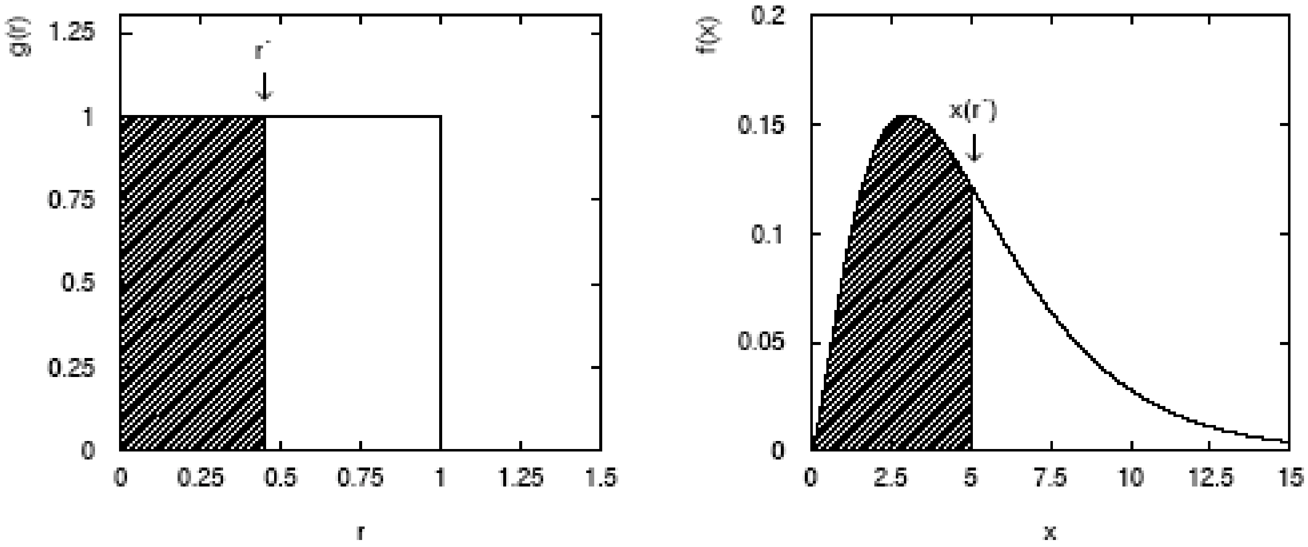
Para obtener valores uniformemente distribuidos entre 0 y 1 usamos la transformación:

$$r_i = \frac{n_i}{m_i}$$

La secuencia n_1,n_2… no es aleatoria, sino por el contrario determinista (y reproducible!) pero para todos los efectos puede considerarse como una secuencia de números aleatorios.

El método de transformación de variables

Dados $r_1, r_2, \ldots, r_n$, distribuidos uniformemente en [0,1] se trata de encontrar un conjunto $x_1, x_2, \ldots, x_m$, distribuidos conforme a f(x) mediante una transformación x(r).



Siendo:

g(r)dr la probabilidad de obtener un valor *r* en *[r,r+dr]*

f(x)dx la probabilidad de obtener un valor x en el intervalo correspondiente a *[r,r+dr]*, es decir *[x(r),x(r)+dx(r)]*

Ambas probabilidades tienen que ser iguales

Para determinar la transformación *x(r)* para la que la condición anterior se verifica puede imponerse (la receta no es única) que:

$P(r \leq r') = P(x \leq x(r'))$ es decir:

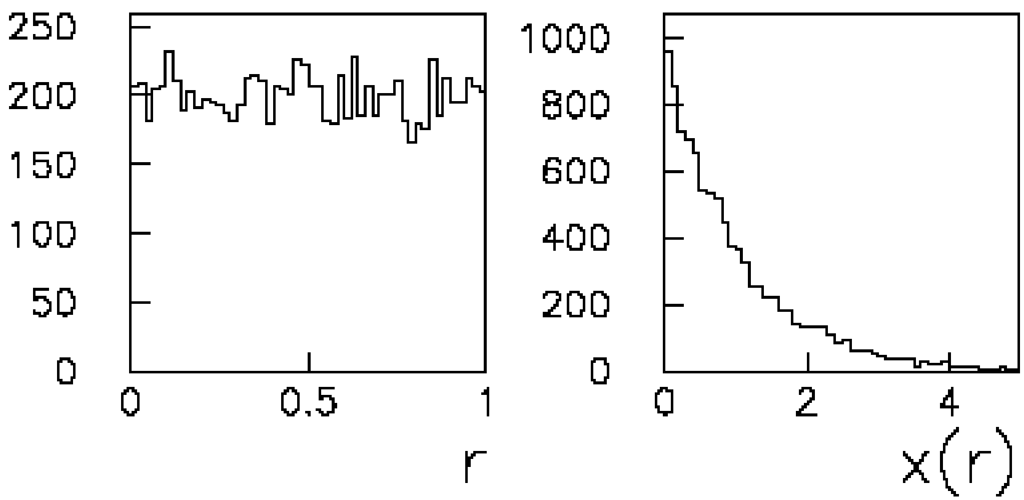
$$\int_{-\infty}^{r'} g(r)dr = G(r') = r' = \int_{-\infty}^{x(r')} f(x')dx' = F(x(r'))$$

Por lo tanto, para determinar x(r) la receta es:

Igualar $F(x(r)) = r$ y resolver para x(r)

Ejemplo:

pdf exponencial:



$$f(x;\xi) = \frac{1}{\xi} e^{-x/\xi}, \quad x \geq 0 :$$ Receta

Igualar $\int_0^x \frac{1}{\xi} e^{-x'/\xi} dx' = r$ y resolver para $x(r)$

$$x(r) = -\xi \log(1-r)$$

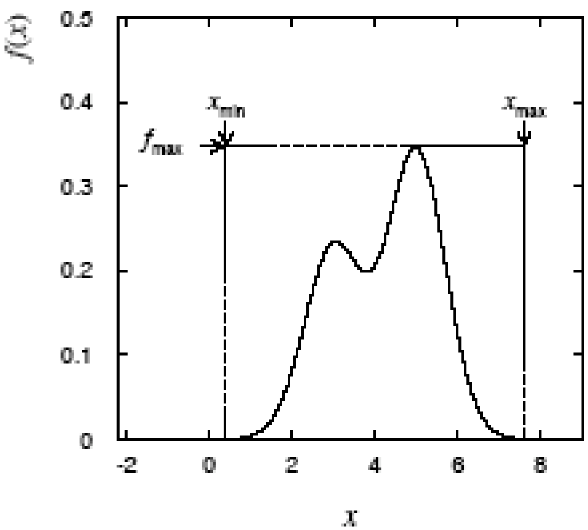
Si r sigue una distribución uniforme entre 0 y 1, x sigue una distribución exponencial, con media ξ

Método de aceptar/rechazar

En muchos casos es difícil resolver analíticamente la ecuación que nos da x(r) por el método de transformación.

En estos casos puede aplicarse el método de aceptar/rechazar (Von Neumann)

Considerar una pdf que puede ser totalmente acotada por una "caja" (definida por x_{min}, x_{max} y la altura máxima f_{max})



Generar un número aleatorio x distribuido uniformemente entre $[x_{min}, x_{max}]$

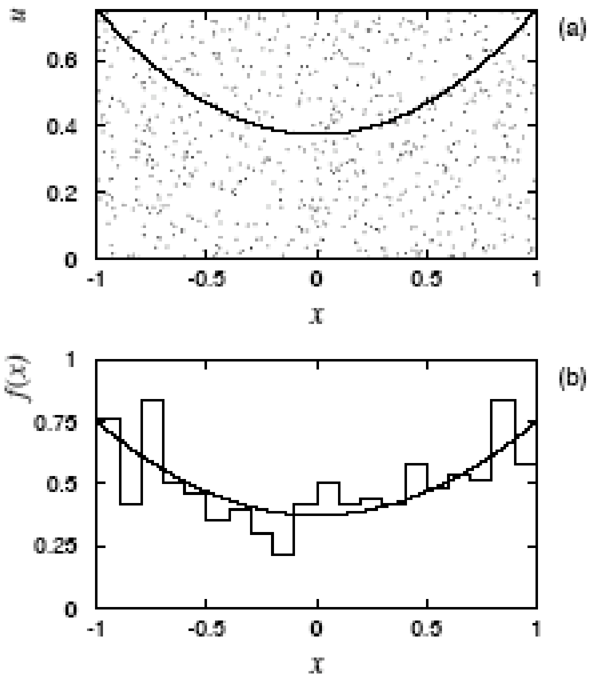
$x=x_{min} + r_1(x_{max}-x_{min})$, r_1 uniforme en [0,1]

Generar un segundo número aleatorio, u, uniformemente distribuido entre 0 y f_{max}

$u=r_2 fmax$

Si $u<f(x)$ aceptar x. Si no, rechazar x y repetir.

Ejemplo:



$$f(x) = \frac{3}{8}(1 + x^2)$$

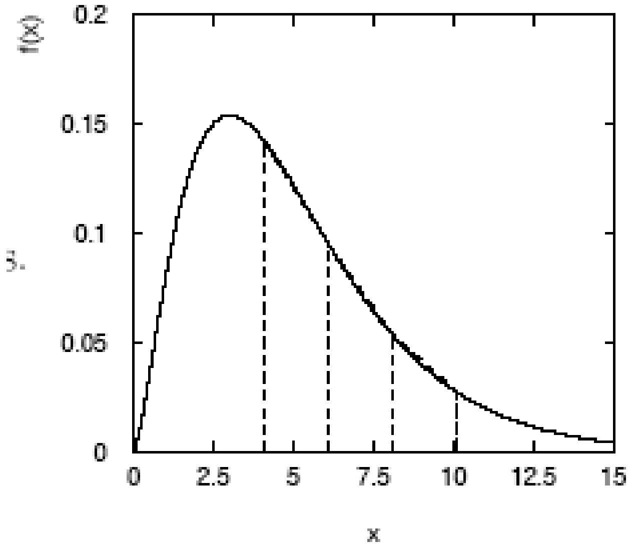
Precisión del método de MC

Cálculo MC = integración.

Precisión $\sim 1/\sqrt{n}$ donde n es el número de valores aleatorios generados.

Comparamos con otros métodos de integración numérica: Trapezoidal:

Precisión $\sim 1/n^2$



Sin embargo para d dimensiones la precisión del método de MC es independiente de d (siempre $\sim 1/\sqrt{n}$) mientras que, por ejemplo, la trapezoidal, $\sim 1/n^{2/d}$

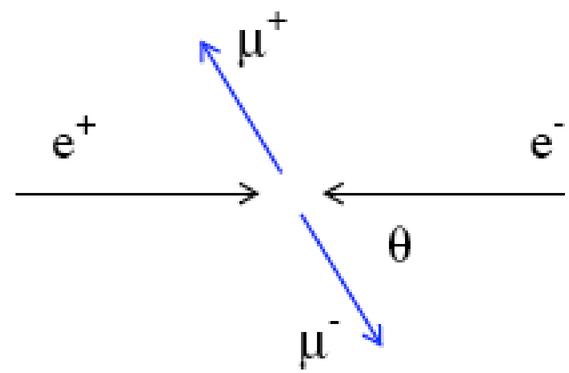
En resumen: Para d alta (d > 4 típicamente) el método MC da la mayor precisión

Generación de sucesos (físicos) vía MC

Generar θ y ϕ

$$f(\cos\theta; A_{\mathrm{FB}}) \propto \left(1 + \tfrac{8}{3} A_{\mathrm{FB}} \cos\theta + \cos^2\theta\right)$$

$$g(\phi) = \frac{1}{2\pi}$$



$e^+e^- \to$ hadrons:	JETSET (PYTHIA)
	HERWIG
	ARIADNE
$pp \to$ hadrons:	ISAJET
	PYTHIA
	HERWIG
$e^+e^- \to WW$:	KORALW
	EXCALIBUR
	ERATO

Toda una industria!

Otros ejemplos: NEUT y NUANCE para generación de interacciones de neutrinos.

TAUOLA y KORAL para física del tau.

etc., etc.

Simulación de la respuesta del detector

Paquetes que simulan la interacción de las partículas con la materia

multiple Coulomb scattering (generate scattering angle)

particle decays (generate lifetime)

ionization energy loss (generate Δ)

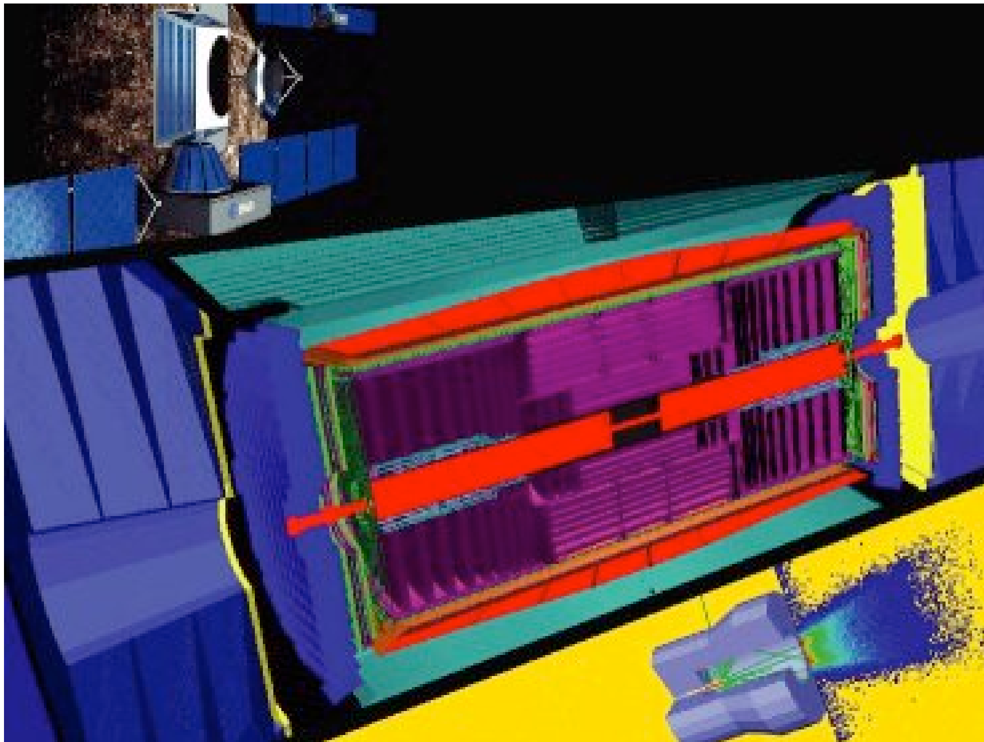
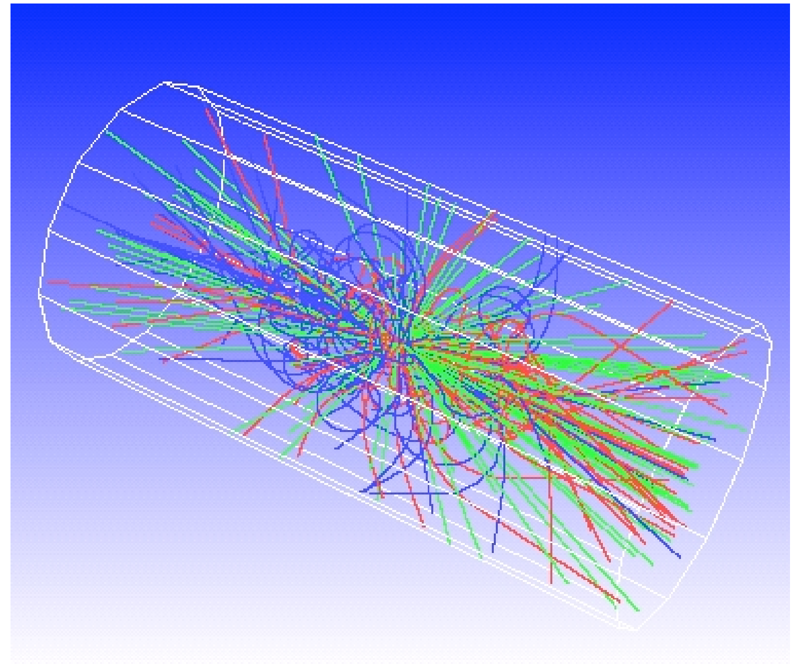
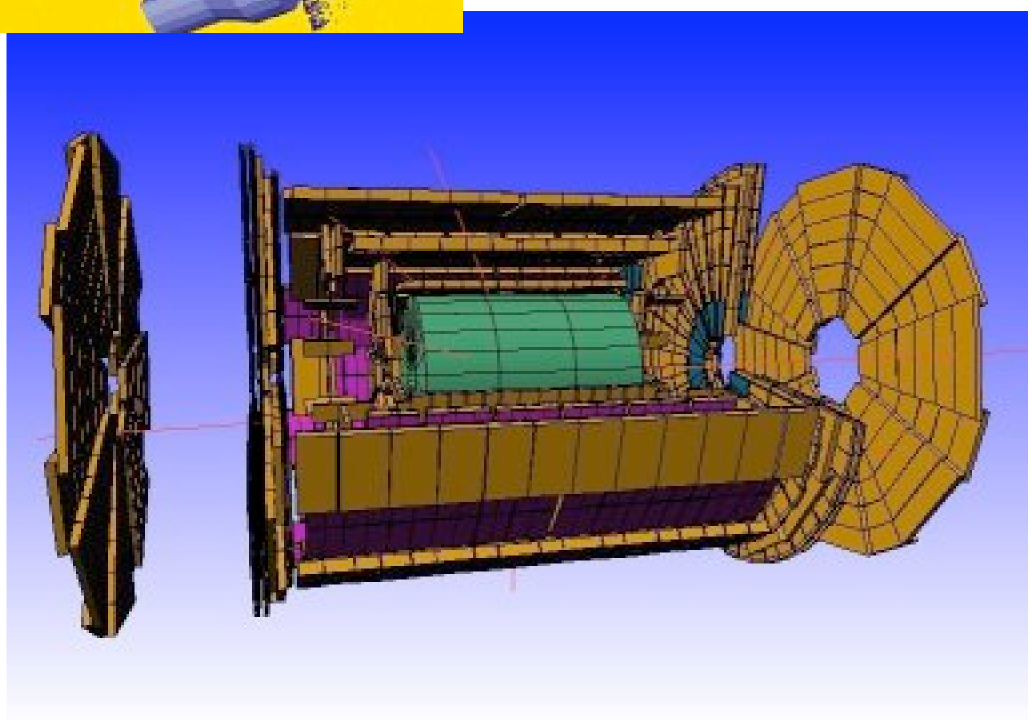
EM/hadronic showers

production of signals, electronics response

$\vdots$

Además de la geometría, respuesta electrónica, etc...

GEANT3, GEANT4, ROOT...

En aquel Imperio, el Arte de la Cartografía logró tal perfección que el mapa de una sola provincia ocupaba toda una ciudad, y el mapa del imperio, toda una provincia. Con el tiempo, esos mapas desmesurados no satisficieron y los Colegios de Cartógrafos levantaron un mapa del Imperio, que tenía el tamaño del Imperio y coincidía puntualmente con él.

Menos adictas al estudio de la Cartografía, las generaciones siguientes entendieron que ese dilatado mapa era inútil y no sin impiedad lo entregaron a las inclemencias del sol y de los inviernos. En los desiertos del Oeste perduran despedazadas ruinas del mapa, habitadas por animales y por mendigos; en todo el país no hay otra reliquia de las disciplinas geográficas.