

粒子物理与核物理实验中的数据分析

陈少敏
清华大学

第三讲:蒙特卡罗方法

http://hep.tsinghua.edu.cn/~chensm/lectures/lecture_3.pdf

本讲要点

- 蒙特卡罗方法
- 随机数产生子
- 任意分布抽样之函数变换法与舍选法
- 蒙特卡罗方法中的精度问题
- 在粒子与核物理中的应用

蒙特卡罗方法简介

蒙特卡罗方法就是利用一系列随机数来计算各种概率和相关量的数值分析技术。通常的步骤为：

- 1) 产生一系列在 $[0, 1]$ 之间均匀分布的随机数 r_1, r_2, \dots, r_m 。
- 2) 利用这些随机数按某些概率密度函数 $f(x)$ 抽样生成我们感兴趣的另一随机序列 x_1, x_2, \dots, x_n 。
- 3) 利用这些 x 值来估计 $f(x)$ 的一些特性，例如：通过找到在区间 $a \leq x \leq b$ 的 x 比例，给出积分值 $\int_a^b f(x)dx$ 。

第一层面上的应用：

蒙特卡罗计算 = 积分

第二层面上的应用：

蒙特卡罗变量 = “模拟的数据”

随机数

用物理方法产生
真正的随机数



不可重复
产生速度慢

用数学方法产生
伪随机数



可以重复
产生的速度快

随机数产生子

目的是在[0, 1]范围内产生的伪随机数满足:

均匀性; 相互独立性; 长周期性

乘同余法

$\xi_i \equiv \text{余数}(\lambda \xi_{i-1} / M) \Rightarrow \text{随机数 } r_i = \xi_i M^{-1}$
 λ 与 M 为选定常数, ξ_0 为随机数种子。

友情推荐

$M=2^K$	$\lambda=5^{2q+1}$	ξ_0	周期 = 2^{K-2}
2^{32}	5^{13}	1	$20^{30} \approx 10^9$
2^{36}	5^{13}	1	$20^{34} \approx 2 \cdot 10^{10}$
2^{42}	5^{17}	1	$20^{40} \approx 10^{12}$

CERN库的随机数产生子

PAW用户

...

Real random(1)

Call Rmarin(ISEED,0,0)

...

Call Ranmar(random,1)

...

Root 用户

...

gRandom->SetSeed();

...

Float t random = gRandom->Rndm(1);

...

注意：用于产生子的随机数种子还可以用来保证后续进程的随机数不重复。

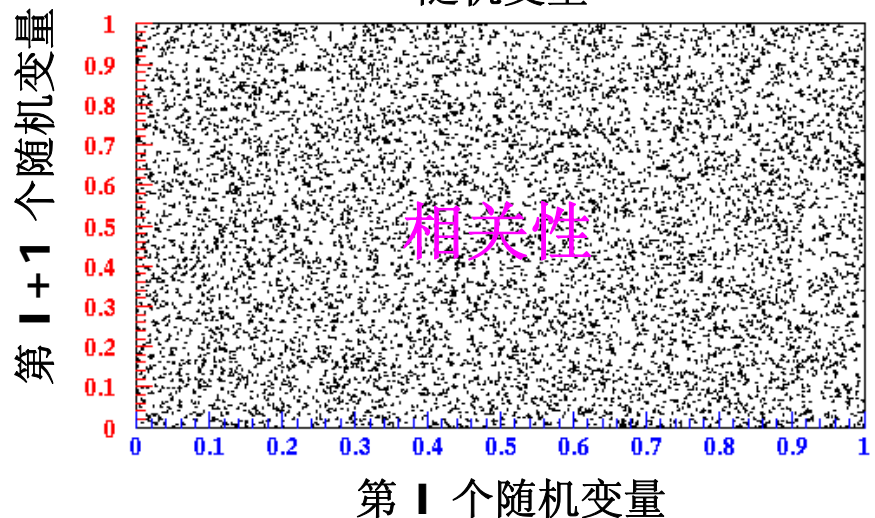
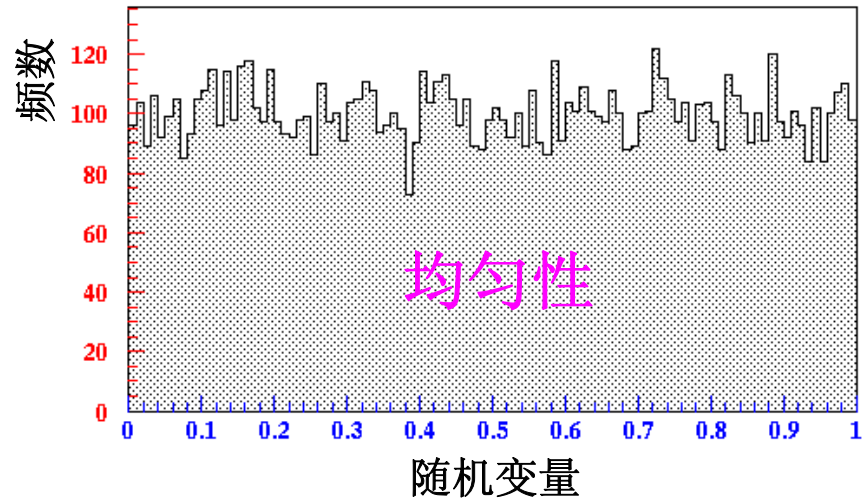
粒子物理与核物理研究中，大都采用**CERN**程序库提供的随机数产生子。

随机数均匀性与相关性检验

```
subroutine mc
double precision lamda,M,x,x0,y
call hbook1(10,'r',100,0.,1.,0.)
call hbook2(20,'r(i+1) vs. r(i)',
&100,0.,1.,100,0.,1.,0.)
x0=1.
lamda=1220703125 ! 5**13
M=4294967296. ! 2**32
do i=1,10000
  x=Mod(lamda*x0,M)
  y=x/M
  call hfill(10,real(y),0.,1.0)
  if(i.gt.1)call
& hfill(20,real(y_old),real(y),1.0)
  x0=x
  y_old=y
end do
return
end
```

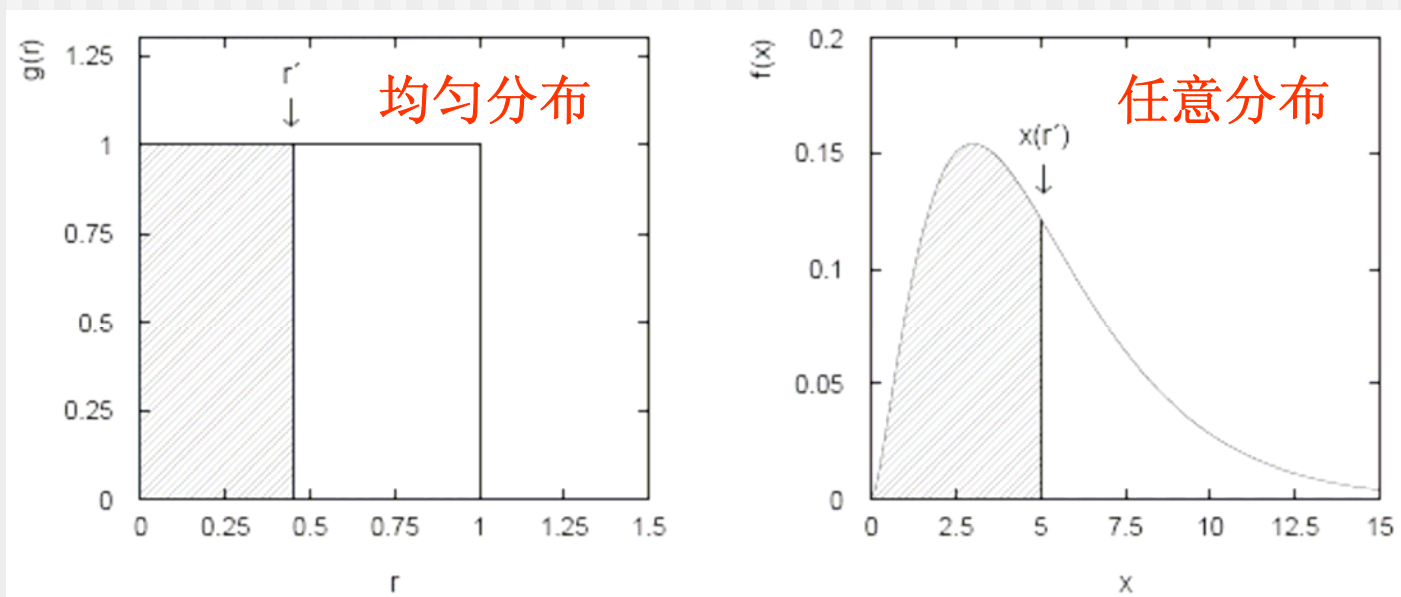
PAW > call mc.f

PAW > zone 1 2; h/pl 10; h/pl 20



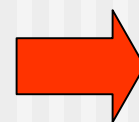
函数变换法

从在 $[0, 1]$ 均匀分布的随机数, 通过适当的变换 $x(r)$ 找出服从 $f(x)$ 分布的随机数 x_1, x_2, \dots, x_n



要求: $P(r \leq r') = P(x \leq x(r'))$,

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



令 $F(x) = r$
解出 $x = F^{-1}(r)$

例子:指数分布抽样

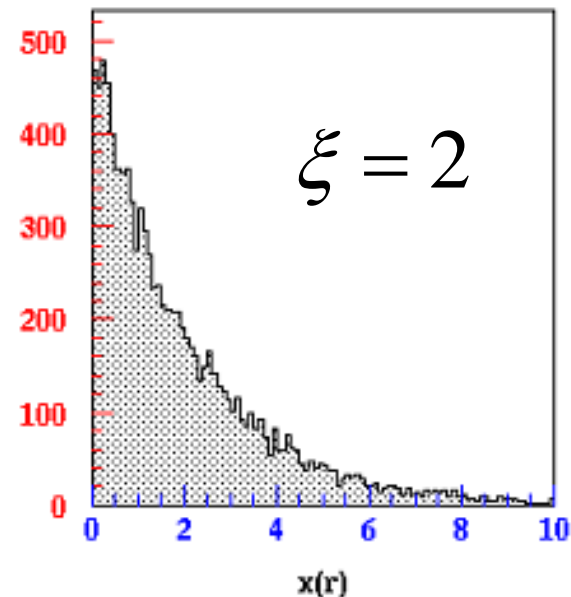
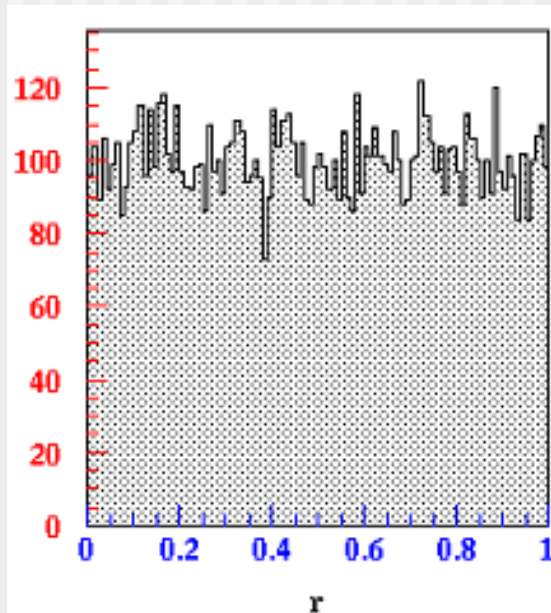
指数概率密度函数: $f(x, \xi) = \frac{1}{\xi} e^{-x/\xi} \quad (x \geq 0)$

令 $\int_0^{x(r)} \frac{1}{\xi} e^{-x'/\xi} dx' = r$ 并解出 $x(r)$, 得到

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

随机变量 r 与 $x(r)$
呈一一对应关系

抽样效率
为**100%**。



舍选法

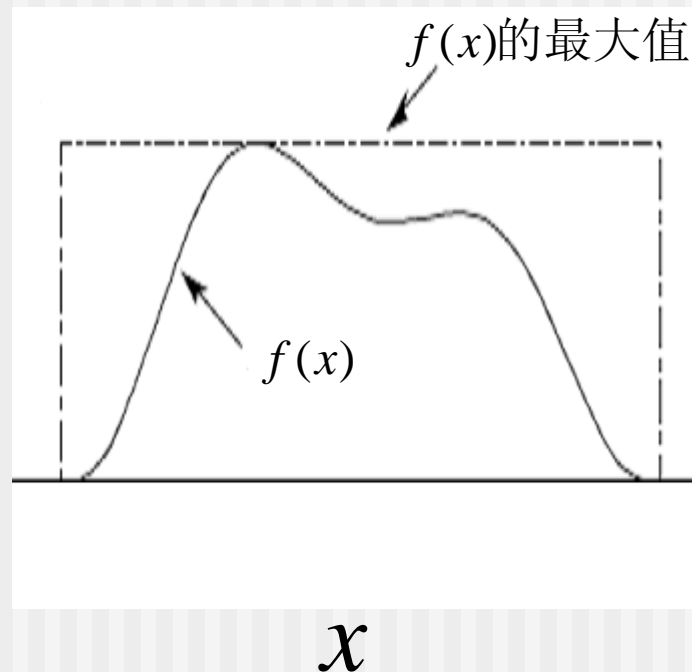
根据概率密度函数 $f(x)$ 的自变量 x 取值范围,由第一个随机变量产生均匀分布的 x ,即: $x = x_{\min} + r_1(x_{\max} - x_{\min})$



产生第二个独立的随机变量,均匀分布在 0 与 f_{\max} 范围内,即 $u = r_2 f_{\max}$



如果 $u < f(x)$,则接受该 x 值,否则,拒绝该 x 值,从新进行抽样。



问题: 如何找到函数的最大值?

舍选法举例

```
subroutine acc_rej
real rvec(1)
call hbook1(10,'x(r)',100,0.,10.,0.)
call hbook1(20,'x(r)',100,0.,10.,0.)
call hbook2(30,'f(x) vs. x(r)',100,0.,10.,100,0.,1.1,0.)
fmax=-999.
do i=1,100
  call ranmar(rvec,1)
  r=0+rvec(1)*(10.-0.)
  f=0.5*exp(-r/2.)
  if(fmax.lt.f)fmax=f
end do
fmax=1.2*fmax
ntot=0
do i=1,10000
  call ranmar(rvec,1)
  r=0+rvec(1)*(10.-0.)
  z=0.5*exp(-r/2.)
```

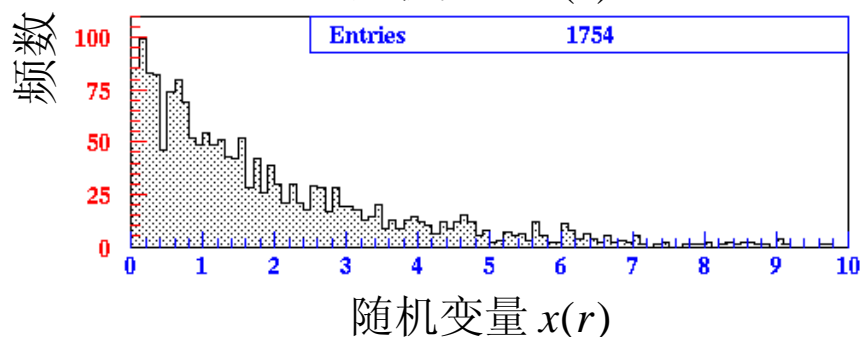
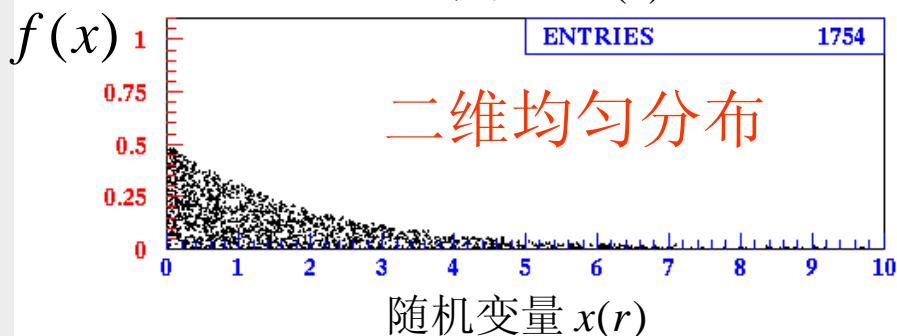
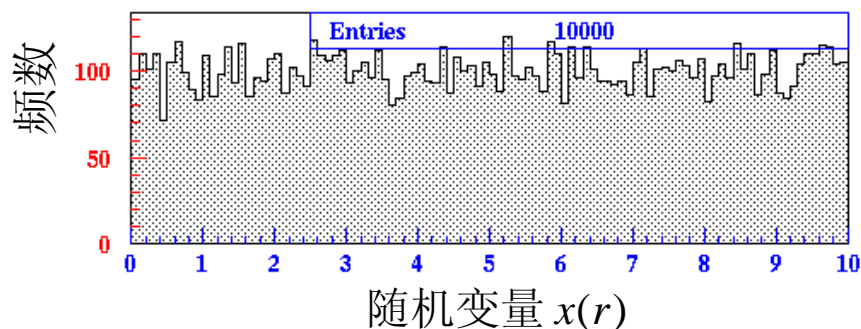
找 $f(x)$ 的最大值

```
PAW > call acc_rej.f
```

```
PAW > zone 1 3; h/pl 10; h/pl 20; h/pl 30
```

```
if(z.gt.fmax)then
  fmax=z*1.2
  write(6,*)'z greater than fmax'
end if
call hfill(10,r,0.,1.0)
call ranmar(rvec,1)
u=rvec(1)*fmax
if(u.lt.z)then
  call hfill(20,r,0.,1.0)
  call hfill(30,r,u,1.0)
  ntot=ntot+1
end if
end do
write(6,*)'ntot=',ntot
return
end
```

舍选法举例(续)



舍选法存在效率问题。

边缘分布



函数变换法与舍选法

函数变换法

优点：100%的抽样效率

缺点：函数须解析可积

舍选法

优点：方法简单，可用于非常复杂的函数

缺点：需要估计函数最大值，而且抽样效率低

粒子物理与核物理中，对常用的概率密度函数有各种建议采用的方法(见<http://pdg.lbl.gov/2005/reviews/monterpp.pdf>)。除此之外，舍选法最为常用。

蒙特卡罗方法中的精度问题

采用蒙特卡罗方法(MC)计算积分与传统的梯形法相比有如下特点

一维积分:

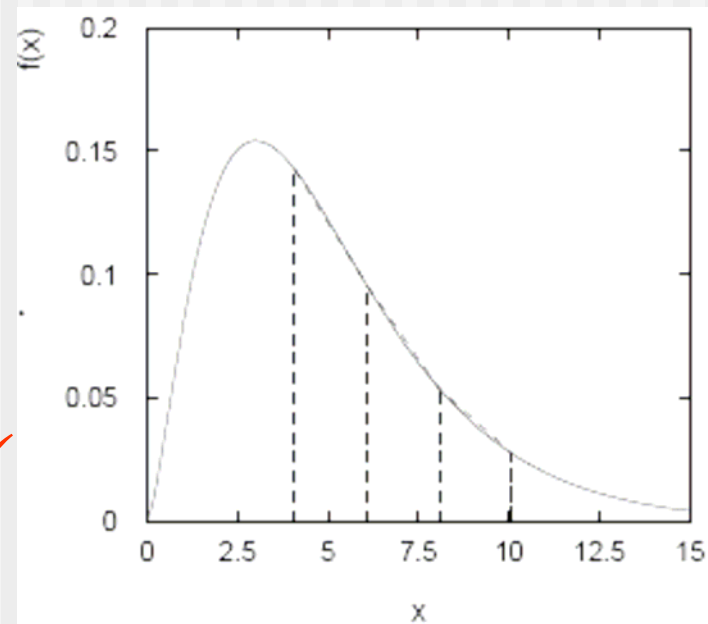
MC 精度: $\propto 1/\sqrt{n}$, (n 为产生的随机数)

梯形法精度: $\propto 1/n^2$, (n 为子区间的数目) ✓

多维积分:

MC 精度: $\propto 1/\sqrt{n}$ 且与维数无关, (n 为产生的随机数) ✓

梯形法精度: $\propto 1/n^{2/\text{维数}}$, (n 为子区间的数目)



对于维数大于4的积分, 用蒙特卡罗方计算积分总是最好。

蒙特卡罗事例产生子

目的：

将理论用于某种物理过程的事例产生

输出量：

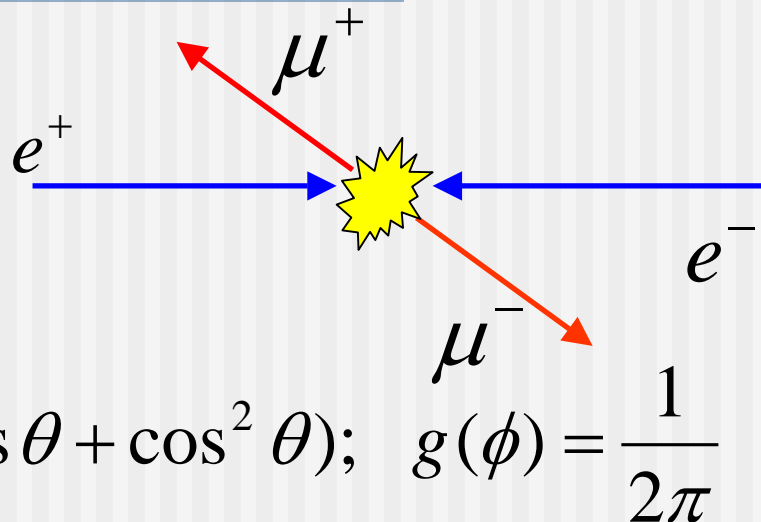
为对应某一物理过程的事例。对于每个事例，给出过程产生的末态粒子和对应的动量

在粒子物理与核物理实验数据分析中，为了验证某一理论或模型，常常需要理论家提供蒙特卡罗产生子。

蒙特卡罗事例产生子(续)

简单情形

$$e^+ e^- \rightarrow \mu^+ \mu^-$$



产生 θ 与 ϕ

$$f(\cos \theta; A_{FB}) \propto (1 + \frac{8}{3} A_{FB} \cos \theta + \cos^2 \theta); \quad g(\phi) = \frac{1}{2\pi}$$

粒子物理与核物理中常用的较复杂产生子

$$e^+ e^- \rightarrow \text{强子}$$

$$pp \rightarrow \text{强子}$$

$$e^+ e^- \rightarrow W^+ W^-$$

JETSET(PYTHIA)
HERWIG
ARIADNE

ISAJET
PYTHIA
HERWIG

KORALW
EXCALIBUR
ERATO

蒙特卡罗探测器模拟

从产生子中输入粒子种类与动量

模拟探测器响应

多重库仑散射(产生散射角)
粒子衰变(产生寿命)
电离能损(产生能损)
电磁与强子簇射
产生信号, 电子学响应
...

输出量 = 模拟的数据  输入重建分析软件

用途: 预测“产生子层面上”给定的假设在“探测器层面上”应该观测到的响应。

通用软件包: **GEANT3(FORTRAN)**, **GEANT4(C++)**

CERN的蒙特卡罗模拟程序包

GEANT4 是模拟粒子经过物质时所发生的相互作用的一个软件包。它的应用范围包括：

粒子物理，核物理和加速器物理

空间科学



医学物理

<http://geant4.web.cern.ch/geant4>

蒙特卡罗方法应用举例

如何确定在实验条件下，理论的概率密度函数

贝叶斯定理：
$$P(\text{理论} | \text{实验}) = \frac{P(\text{实验} | \text{理论})}{P(\text{实验})} P(\text{理论})$$

例如：一质量为 m 共振宽度为 Γ 的共振态在实验上观察到的概率密度函数是什么形式？

布莱格-魏格纳
分布

$$BW(M; m_0, \Gamma_0)$$



探测器
分辨率

$$R(M' | M)$$



探测
效率

$$p(\varepsilon = 100\% | M)$$

应用举例(续一)

也就是说，对应于真实的 M ，实际的 M' 应该是怎样一个分布

$$BW(M'; m_0, \Gamma_0) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} BW(M; m_0, \Gamma_0) R(M'|M) p(\varepsilon = 100\% | M) dM}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} BW(M; m_0, \Gamma_0) R(M'|M) p(\varepsilon = 100\% | M) dM dM'}$$

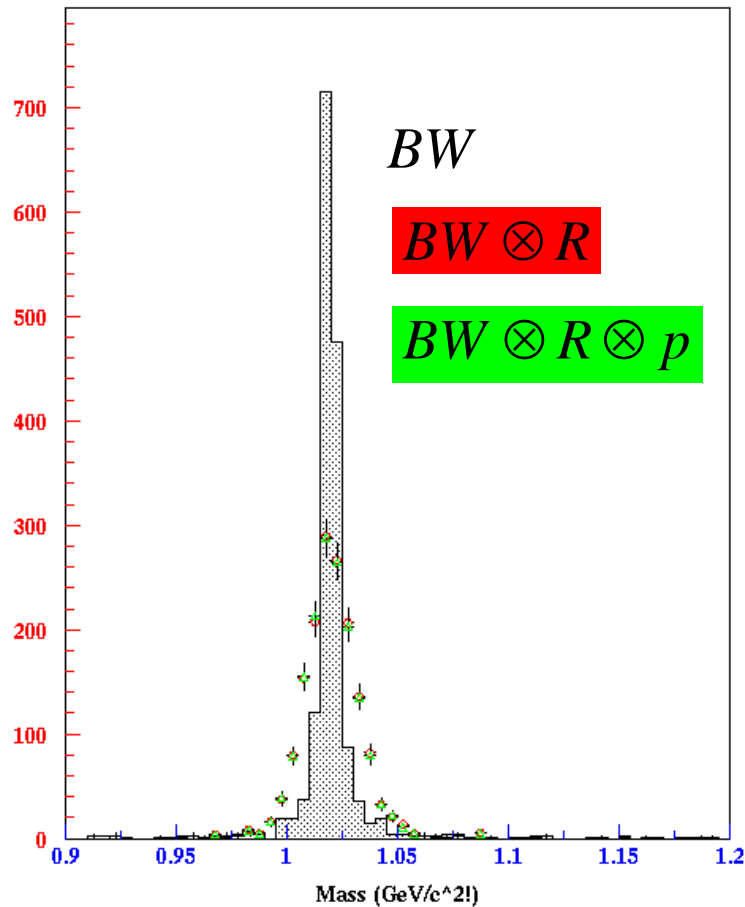
如果假设

$$m_0 = 1.19456 \text{ GeV}/c^2; \Gamma_0 = 0.00426 \text{ GeV}/c^2$$

$$R(M'|M) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(M'-M)^2}{2\sigma^2}\right), \sigma = 0.01 \text{ GeV}/c^2$$

$$p(\varepsilon = 100\% | M) = 0.9(1 - 0.1M^2)$$

应用举例(续二)



真实物理的图像在实验观测中会发生变化。如果探测器的影响可以用函数来表达，有时积分可积。但大多数数情况下，不能用函数表示时，蒙特卡罗方法可以给出最好的近似。

应用举例 (续三)

应用蒙特卡罗方法的步骤:

步骤一: 写出布莱格-魏格纳产生子

输出末态粒子的四动量

步骤二: 输入末态粒子四动量, 模拟粒子在探测器的响应

输出各子探测器响应

步骤三: 输入各子探测器响应, 重建探测粒子的四动量

输出探测粒子四动量

步骤四: 输入探测粒子四动量, 计算不变质量分布



实验条件下预期的布莱格-魏格纳分布

小结

- 蒙特卡罗方法

利用随机数对概率或与概率有关的数值计算

- 随机数产生子

[0, 1]均匀分布 r , 相互独立, 长周期(伪随机数)

- 函数变换法

$$r = \int_{-\infty}^x f(x') dx' = F(x) \rightarrow x = F^{-1}(r)$$

- 舍选法

$r_1 \rightarrow x$; $y = r_2 f_{\max}$; $f(x) < y \rightarrow f(x) = x$ 的边缘分布

- 蒙特卡罗方法的精度问题

精度总是 $\propto 1/\sqrt{n}$

- 在粒子与核物理中的应用

事例产生子与探测器模拟