

Introducere in metoda Monte Carlo

Introducere

Numere aleatoare

- generatorul de numere aleatoare uniform distribuite
- generarea de numere aleatoare avand diferite functii de distributie

Aplicatie: simulari Monte Carlo pentru modelul Glauber

Alte aplicatii

Introducere

Metoda Monte Carlo realizeaza calculul numeric al unei probleme prin construirea unui proces statistic ai carui parametrii (media, probabilitatea/frecventa de aparitie a unui eveniment) sunt egali cu marimile cautate in respectiva problema.

Este cunoscuta si sub numele de metoda prelevarilor aleatoare (*random sampling*) sau simulare statistica.

Eric W. Weisstein MathWorld-A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/MonteCarloMethod.html>

Metoda Monte Carlo: orice metoda care rezolva o problema prin generarea de numere aleatoare (*random numbers*) si observarea acelei parti dintre numere care satisfac o proprietate sau mai multe.

In multe situatii rezolvarea problemei matematice $\leftrightarrow$ joc de noroc in care probabilitatea de a castiga P este numarul a carui valoare dorim sa o cunoastem:

jucam jocul de $N \rightarrow r$ castiguri $\rightarrow r/N = \text{estimare a lui } P$

Numita astfel de catre matematicianul S. Ulam, 1946; utilizata anterior de catre E. Fermi pentru rezolvarea problemei transportului de neutroni in diferite materiale.

Metoda este utila pentru obtinerea de solutii numerice pentru probleme a caror rezolvare analitica este prea complicata (nu e posibila). Metoda Monte Carlo – experiment statistic, (realizat cu calculatorul) $\rightarrow$ rezultatele cele mai bune se obtin cand aplicam acest procedeu de calcul la fenomene care prin natura lor sunt aleatoare.

O data cu dezvoltarea calculatoarelor, M.C. a cunoscut o dezvoltare foarte mare .
In prezent este utilizata pentru rezolvarea de probleme in multe domenii:

Application areas

- * Graphics, particularly for ray tracing; a version of the Metropolis-Hastings algorithm is also used for ray tracing where it is known as Metropolis light transport
- * Modeling light transport in biological tissue
- * Monte Carlo methods in finance
- * Reliability engineering
- * In simulated annealing for protein structure prediction
- * In semiconductor device research, to model the transport of current carriers
- * Environmental science, dealing with contaminant behavior
- * Search And Rescue and Counter-Pollution. Models used to predict the drift of a life raft or movement of an oil slick at sea.
- * In probabilistic design for simulating and understanding the effects of variability
- * In physical chemistry, particularly for simulations involving atomic clusters
- * In biomolecular simulations
- * In polymer physics
 - o Bond fluctuation model
- * In computer science
 - Monte Carlo algorithm
 - Las Vegas algorithm
 - LURCH
 - Computer go
 - General Game Playing
- * Modeling the movement of impurity atoms (or ions) in plasmas in existing and tokamaks (e.g.: DIVIMP).

Numere aleatoare

generatorul de numere aleatoare uniform distribuite in intervalul [0,1]

$$x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, \quad x_i = \begin{cases} 1, & \text{cu probabilitate } 1/2 \\ 0, & \text{cu probabilitate } 1/2 \end{cases}$$

$$\xi = \sum x_i 2^{-i}$$

$$\xi \quad \text{marime aleatoare uniform distribuita in intervalul [0,1]} \quad \begin{cases} f(x)=1 & 0 \leq x \leq 1 \\ f(x)=0 & x \notin [0,1] \end{cases}$$

Numere aleatoare adevarate: x_i generate folosind o sursa radioactiva oarecare

$$t \text{ timp de masura al particulelor emise de sursa} \quad \begin{cases} \text{numar de particule par} \rightarrow x_i = 1 \\ \text{numar de particule impar} \rightarrow x_i = 0 \end{cases}$$

Numere pseudoaleatoare: generate folosind un algoritm de calcul:

$$\text{Exemplu: } R_{n+1} = (a R_n + c) \bmod m \quad (2)$$

$$R_0, 0 < R_0 < m, \text{ valoarea de start (seed)}$$

Dezavantaje:

$\{R_i\}$ realizatia unei marimi aleatoare $\zeta \neq \xi$ obtinuta pe baza unui algoritm,
unde ξ marime aleatoare adevarata

- f.d. p. a lui ζ se abate de la u.d. In $[0,1]$:

Numere aleatoare adevarate

Numere pseudoaleatoare

Speranta matematica:

$$M[\xi] = \int_0^1 x \, dx = 1/2$$

$$M[\zeta] = 1/2(1 - 1/2^k)$$

Dispersia:

$$D[\xi] = M[\xi^2] - (M[\xi])^2 = 1/12$$

$$D[\zeta] = 1/12(1 - 1/4^k)$$

k-numarul de cifre binare cu care se formeaza $\{R_i\}$

- dupa o anumita perioada sirul de numere pseudoaleatoare $\{R_i\}$ se repeta

Exemplu: generatorul Lehmer $R_{n+1} = k R_n \bmod m$ (obtinut din (2) pentru $c = 0$)

$$k=23, m = 10^8 + 1$$

are perioada de 5 882 352 $\rightarrow$ trebuie calculat numarul total de numere aleatoare
folosite intr-un program de simulare si verificat sa fie mai mic decat perioada

In prezent calculatoarele dotate cu generatoare de numere aleatoare cu perioada mult mai mare

Avantaj: pentru o valoare de start data $\rightarrow$ acelasi sir $\{R_i\}$ de numere pseudoaleatoare
 $\rightarrow$ posibilitate de verificare si corectare a programului de simulare

generarea numerelor aleatoare cu functie de distributie data

- **metoda directa** (metoda inversarii)

x marime aleatoare cu functia de densitate de probabilitate $f(x)$ continua

$$\int_{-\infty}^{x_i} f(y) dy = R_i, \quad R_i \text{ u.d. in } [0,1] \quad \leftarrow \text{teorema}$$

$F(x_i) = R_i$, $F(x_i)$ - functia de distributie cumulativa a lui x

$$x_i = F^{-1}(R_i) \quad (1)$$

Exemplu: obtinerea de numere aleatoare cu legea de distributie exponentiala

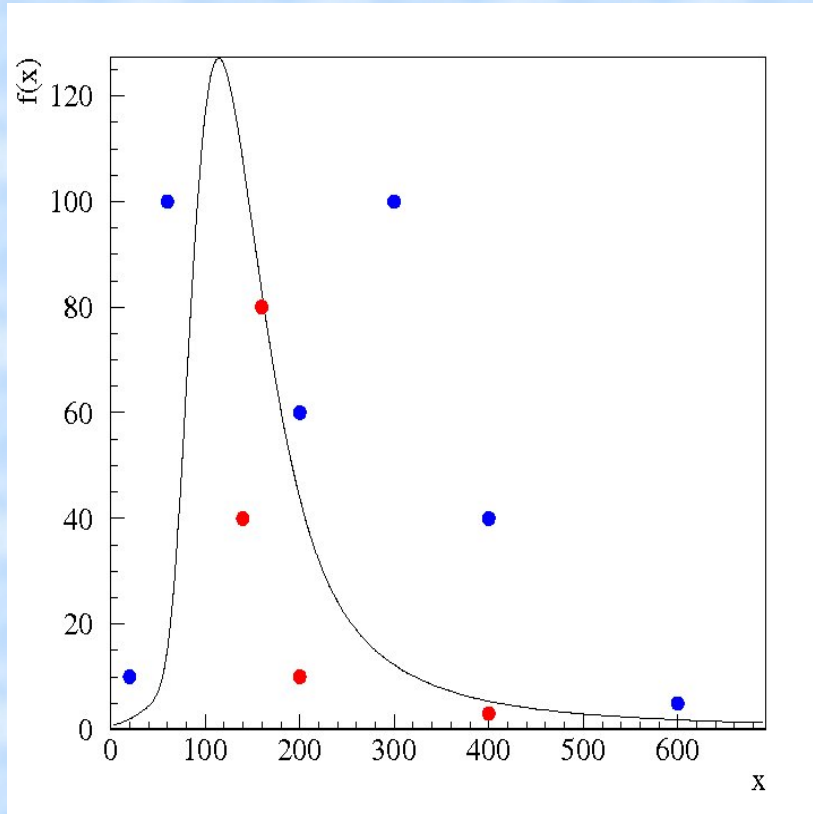
$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x}, \quad x > 0$$

$$\lambda \int_0^{x_i} e^{-\lambda x} dx = R_i$$

$$1 - e^{-\lambda x_i} = R_i$$

$$(1) \rightarrow x_i = -1/\lambda \ln(1 - R_i)$$

- metoda rejectiei



Variabila X care e descrisa de functia de densitate de probabilitate (f.d.p.) $f(x)$

Se genereaza $\{R_i, R_{i+1}\}$

$$x_i = b \cdot R_i, \quad f_i = f(x_i); \quad y_i = \text{Max}[f(x)] \cdot R_{i+1}$$

$y_i < f_i \rightarrow \{x_i, y_i\}$ puncte situate in aria de sub $f(x)$

x_i $\{R_i\}$ se pastreaza

$y_i > f_i \rightarrow \{x_i, y_i\}$ puncte situate in afara aria de sub $f(x)$
perechea R_i, R_{i+1} se rejecteaza

prin repetarea acestui proces se obtin $\{x_i\}$ cu f.d.p. $f(x)$

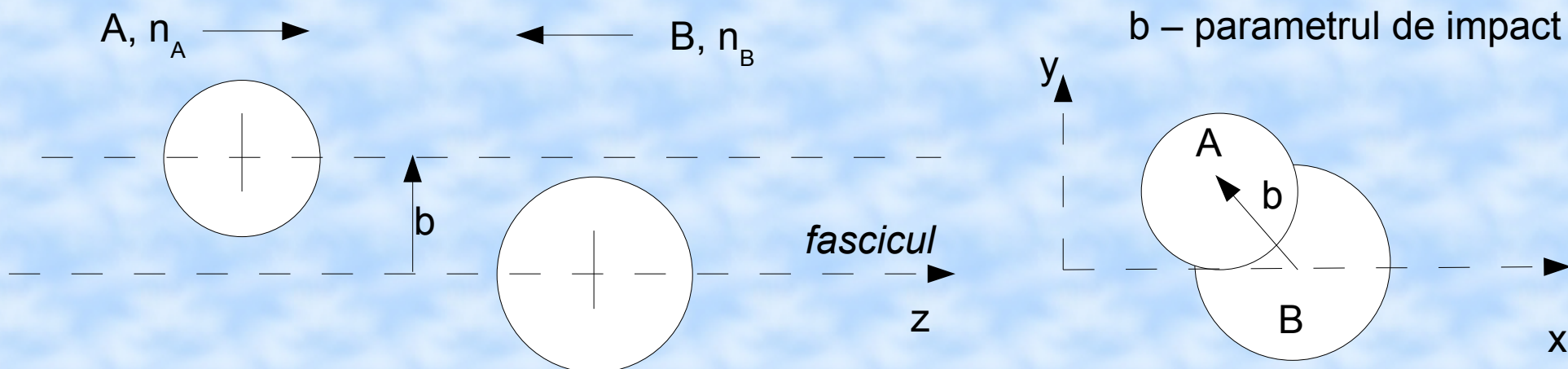
Aplicatie: Calculul integralei lui $f(x)$ $J = \int f(x) dx$

N puncte dintre care N_1 cad in aria de sub $f(x)$

N_1/N estimare a integralei cu eroarea $0.6745 \sqrt{J(1-J)/N}$

ordinul de marime al erorii in metoda M.C. $\sim \sqrt{1/N}$

Aplicatie: simulari Monte Carlo pentru modelul Glauber



In timpul interactiei dintre cele 2 nuclee $\rightarrow$ zona de overlap in care sunt N_{part} nucleoni intre care au loc N_{coll} ciocniri. Modelul Glauber Monte Carlo (modelul nucleonilor raniti – *Nucleons Wounded Model* - **NWM**) permite calculul marimilor “geometrice” N_{part} , N_{coll} pentru b dat.

3 ipoteze de baza:

- sectiunea de reactie a nucleonilor in nuclee este σ_{nn} – sectiunea de imprastiere inelastica nucleon-nucleon pentru nucleonii liberi
- energia nucleonilor e foarte mare $\rightarrow$ dupa ce sufera o interactie nucleonul isi continua drumul nedeviat si poate avea o alta interactie cu aceeasi sectiune σ_{nn}
- imprastierea elastica este neglijata intrucat depunerea de energie in urma unei astfel de interactii este foarte mica

$\sigma_{nn} \rightarrow$ dependenta de energie in modelul Glauber

$\sqrt{s}$ (GeV)	19	200	5500
σ_{nn} (mb)	31	42	63

Procesul de simulare: pozitionarea tuturor nucleonilor in cele 2 nuclee

Pasii procesului de simulare:

A – pozitionarea celor n_A nucleoni ai nucleului A contor j_A

generarea coordonatelor sferice (r, θ, φ) ale unui nucleon in nucleul A (*in sist. de coord. al lui A*)

1) generarea variabilei r cu f.d.d. $n(r) = c \cdot 4\pi r^2 \cdot \rho(r)$, unde $\rho(r)$ – functia Fermi care descrie distributia de densitate nucleara

metoda rejectiei: $\{R_1, R_2\}$ u.d. in $[0, 1]$ ($n(r)$ are expresia completa pe slide-ul urmator)

$x_1 = R_{\max}(A) \cdot R_1$; $n(x_1) < R_2$ $r = x_1$
 $n(x_1) > R_2$ generam alta pereche $\{R_1, R_2\}$ u.d. in $[0, 1]$

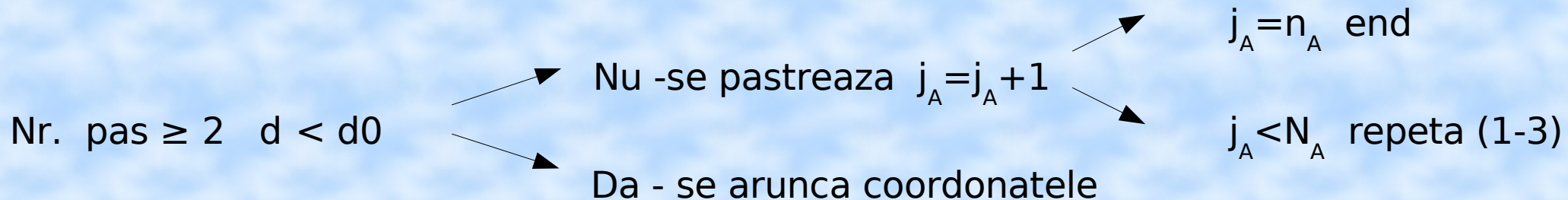
2) generarea unghiului azimutal φ – uniform distribuit in $[0, 2\pi]$: $\varphi = 2\pi R_3$

3) generarea unghiului polar θ – cosinusul lui θ u.d. in $[-1, 1]$: $\cos \theta = -1 + 2 \cdot R_4$

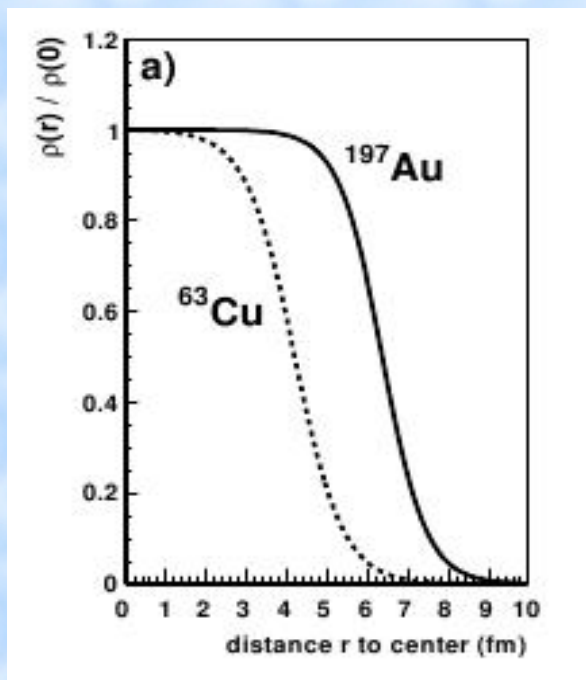
Repetam pasii (1-3)

$d_0 = 0,4$ fm - raza de actiune a fortelor repulsive in interactia nn

d – distanta intre centrele nucleonilor din A



B – pozitionarea celor n_B nucleoni ai nucleului B – ca si pt. nucleul A



distributia de densitate nucleara radiala a numarului de nucleoni:

$$n(r) = c 4\pi r^2 \rho(r); \quad \int n(r) dr = n_A \rightarrow c$$

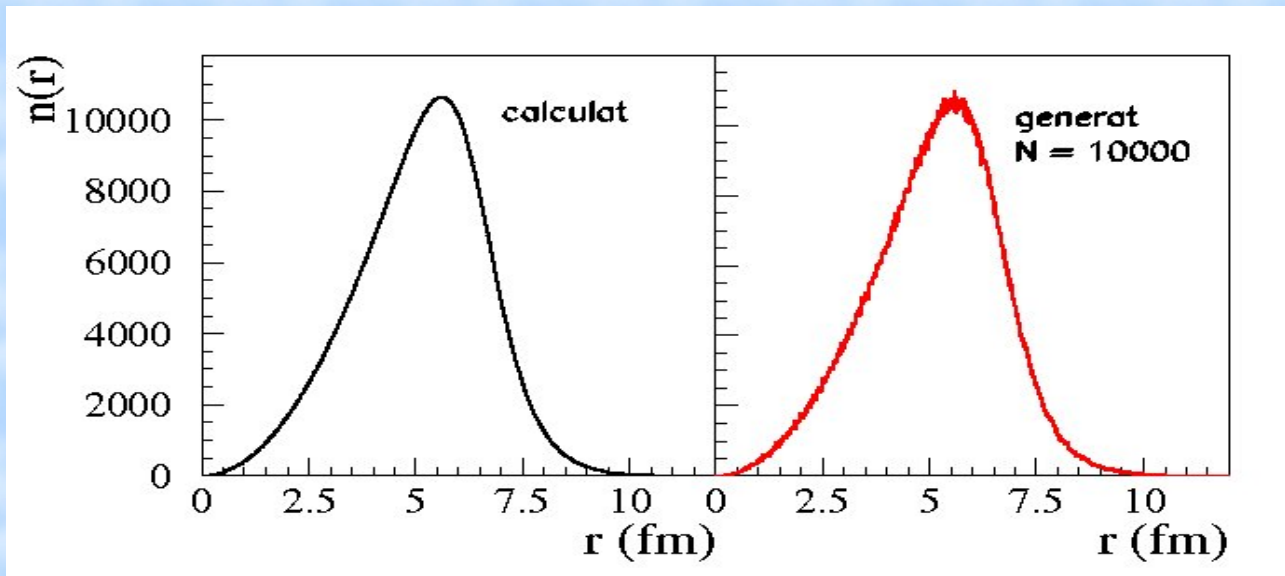
Funcția Fermi:

$$\rho(r) = \rho_0 \cdot \frac{1 + w(r/R)^2}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}$$

W - deviatia formei nucleului de la sfericitate;
pentru nucleul de aur $w=0$

a – grosimea invelisului (“skin”) nucleului $a = 0.53$ fm

R - raza nucleului
 $R = (1.12 A^{1/3} - 0.86 A^{-1/3})$ fm,
 A – masa nucleului in u.a.m.



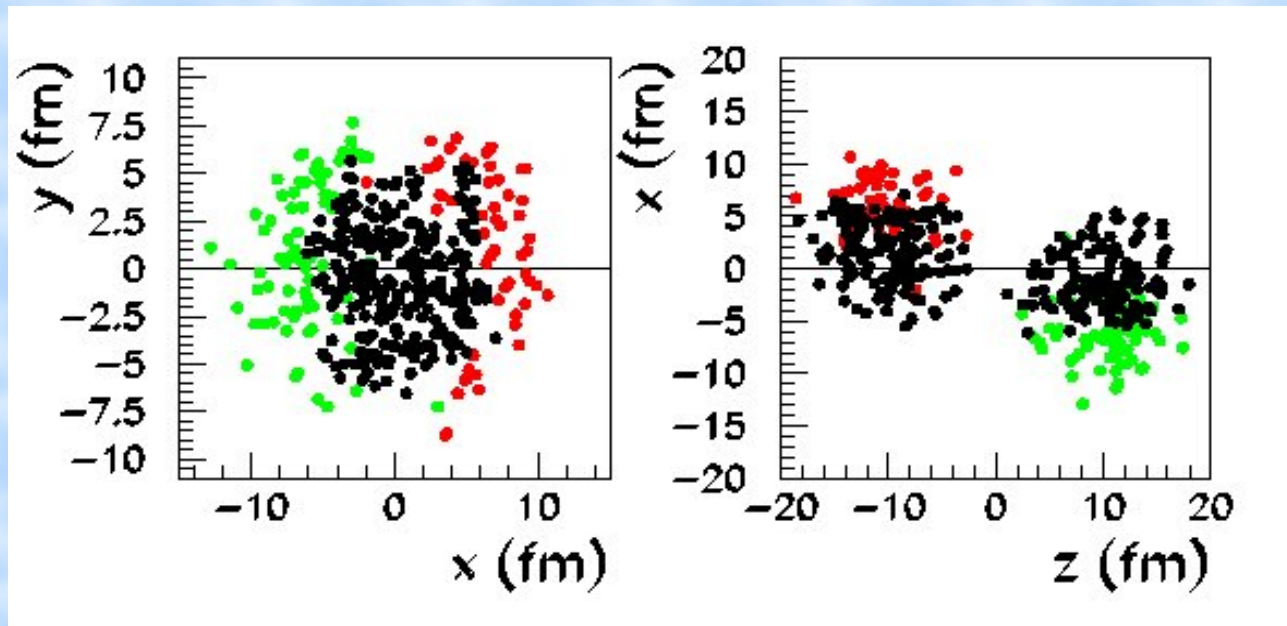
Deteminarea numarului de nucleoni participanti la interactie

Se translateaza cele 2 nuclele incat sa avem intre centrele lor distanta b si se calculeaza D – distanta dintre centrele a 2 nucleoni, unul apartinand lui A, celalalt lui B, in planul ortogonal pe axa fascicului (xOy)

σ_{nn} - sectiunea eficace de imprastiere inelastica

Se considera participanti la interactie toti nucleonii pentru care distanta intre centrele lor in planul xOy (planul ortogonal pe axa fascicului):

$$\pi D^2 < \sigma_{nn} ; \quad D < \sqrt{\sigma_{nn}}/\pi$$



Au + Au, $\sqrt{s} = 200$ GeV

$$\sigma_{nn} = 42 \text{ fm}^2$$

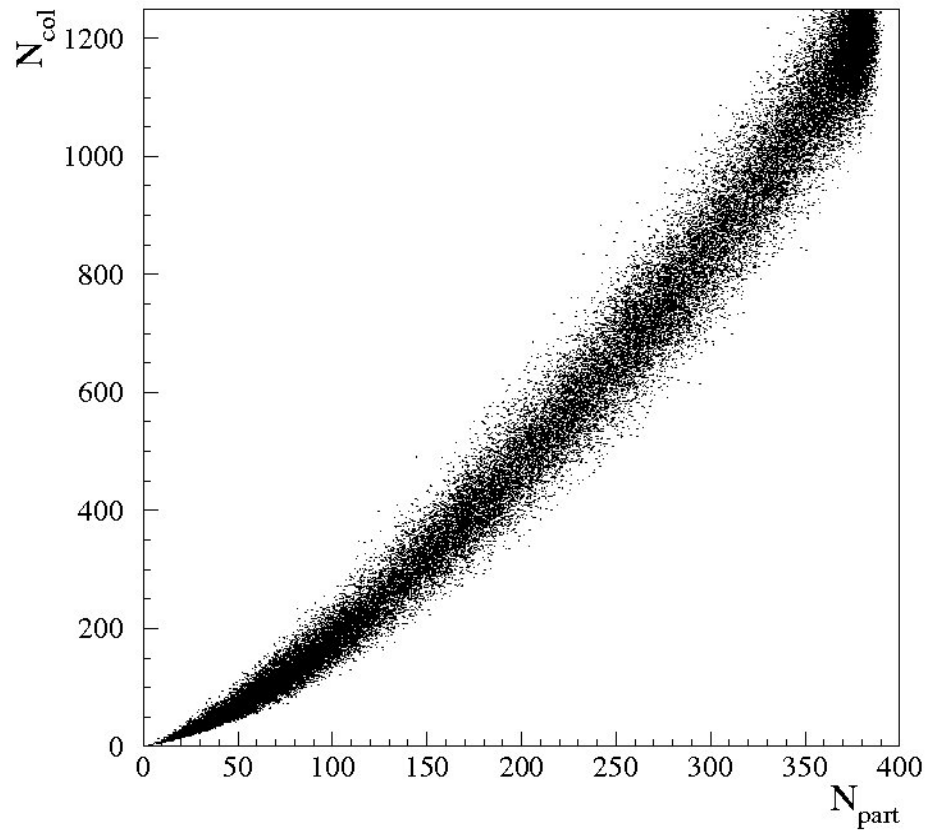
$$D = 1,34 \text{ fm}$$

$$R = 6,38 \text{ fm}, \quad b = 6 \text{ fm}$$

$$d = 0,4 \text{ fm}$$

Se repeta procesul de simulare a interactiei intre 2 nucleele de N ori

$$\overline{N}_{\text{part}} = \sum N_{\text{part}}^i / N \quad \overline{N}_{\text{coll}} = \sum N_{\text{coll}}^i / N$$

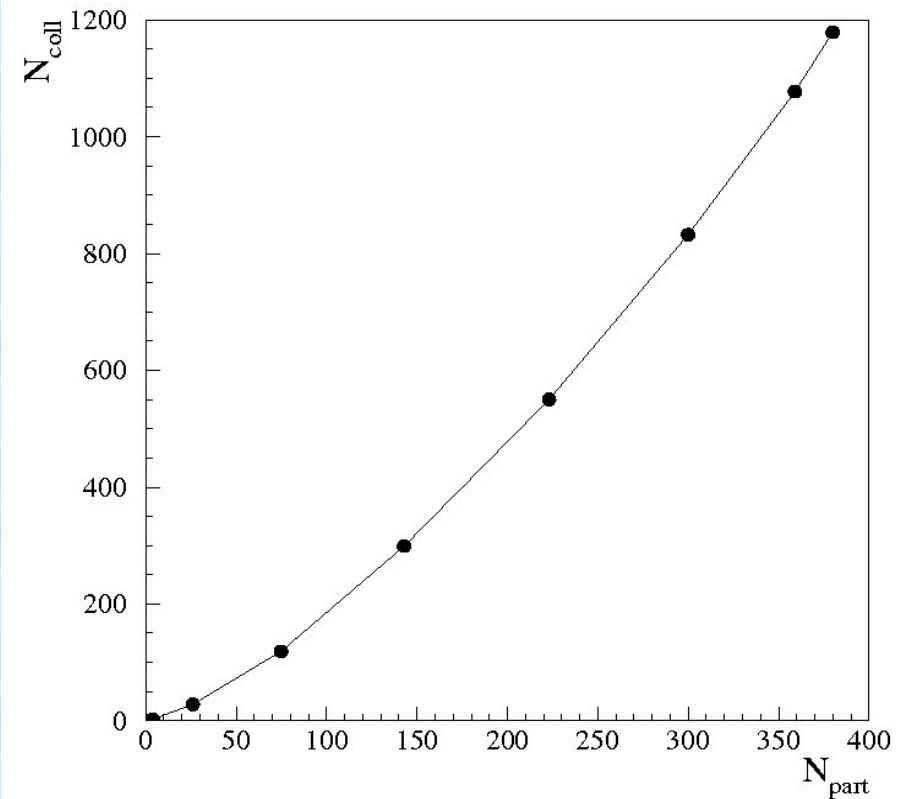


Au + Au $\sqrt{s} = 200$ GeV **b** u.d. in $[0, 12]$ fm

$N = 50\,000$

Au + Au $\sqrt{s} = 200$ GeV

fiecare punct ($N_{\text{coll}}, N_{\text{part}}$) $\rightarrow$
medie pentru $N = 10\,000$



Marimile geometrice b , N_{part} , N_{col} determinate cu ajutorul modelului Glauber nu sunt marimi care se masoara experimental. In experimente se detecteaza particulele incarcate si se obtin distributiile de multiplicitate ale particulelor incarcate N_{ev} vs $N_{\text{ch}} \rightarrow$ elaborate **procedee pentru a gasi relatia lor cu marimi experimentale**

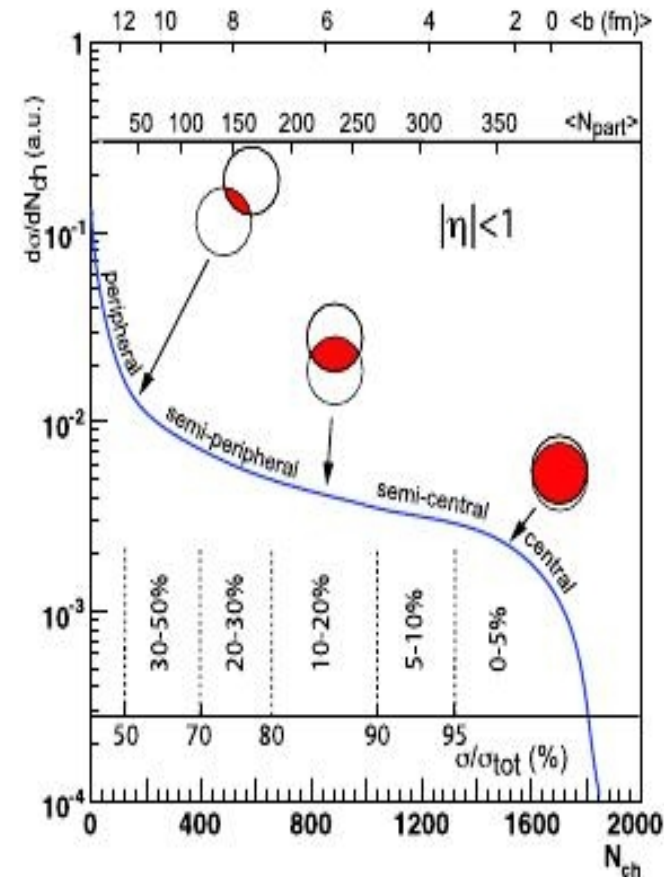
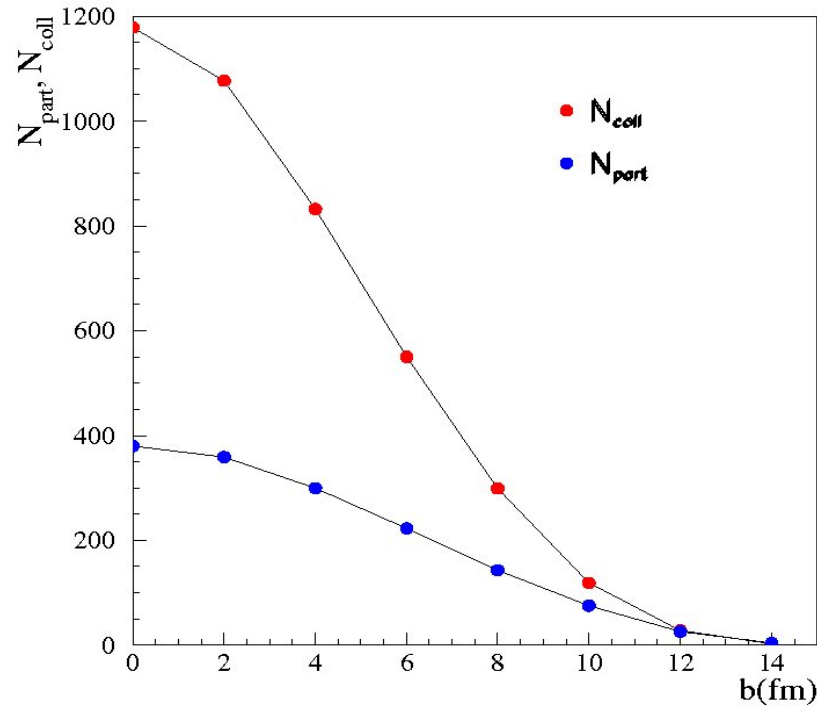
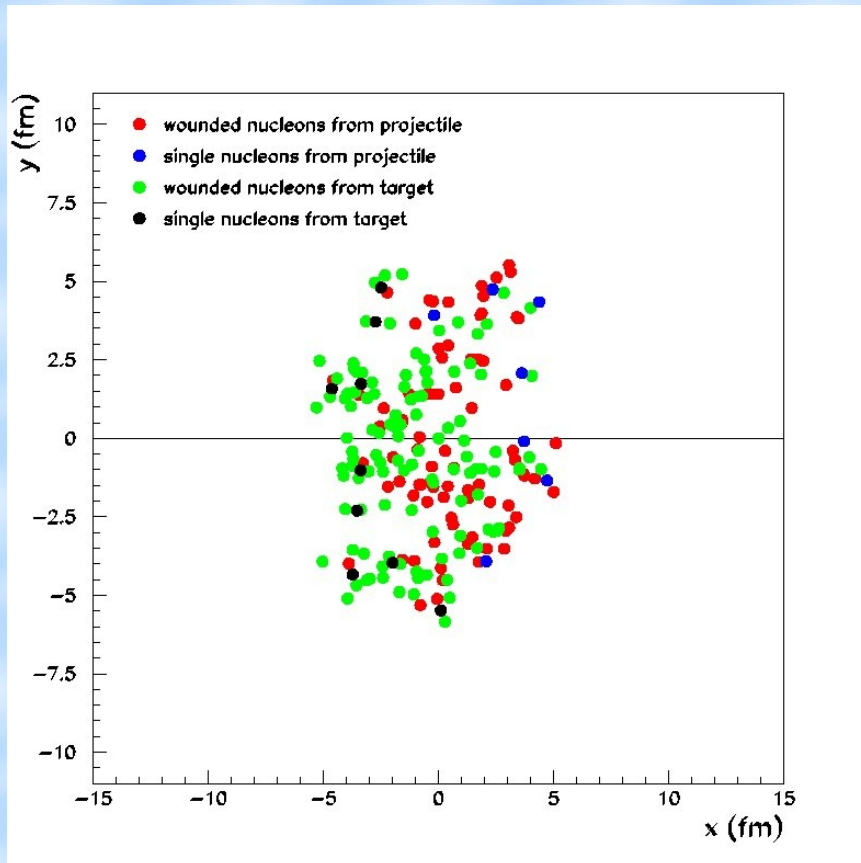


Figure 8: A cartoon example of the correlation of the final state observable N_{ch} with Glauber calculated quantities (b , N_{part}). The plotted distribution and various values are illustrative and not actual measurements (T. Ullrich, private communication).

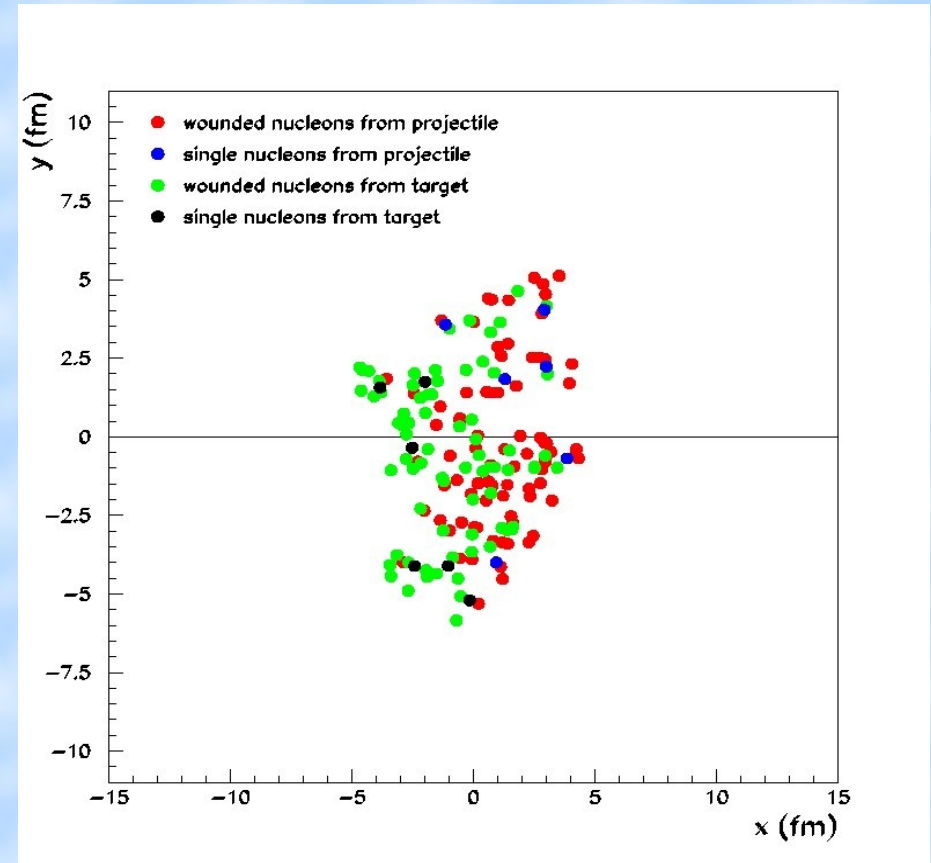
Utilitatea informatiei obtinute din modelul Glauber - determinarea influentei geometriei initiale a procesului de interactie asupra observabilelor masurate experimental pentru a intelege mai bine fenomenele nucleare

Au + Au $\sqrt{s} = 200$ GeV

$b = 6$ fm



$b = 8$ fm



Forma fireball-ului diferita de la o interactie la alta

- Influenta fluctuatiei formei fireball-ului asupra diferitelor marimi masurate experimental, de exemplu asupra distributiei azimutale a particulelor produse in interactie

- Scalarea multiplicitatii totale particulelor incarcate in interactia nucleu-nucleu la multiplicitatea totala din interactia nucleon-nucleon

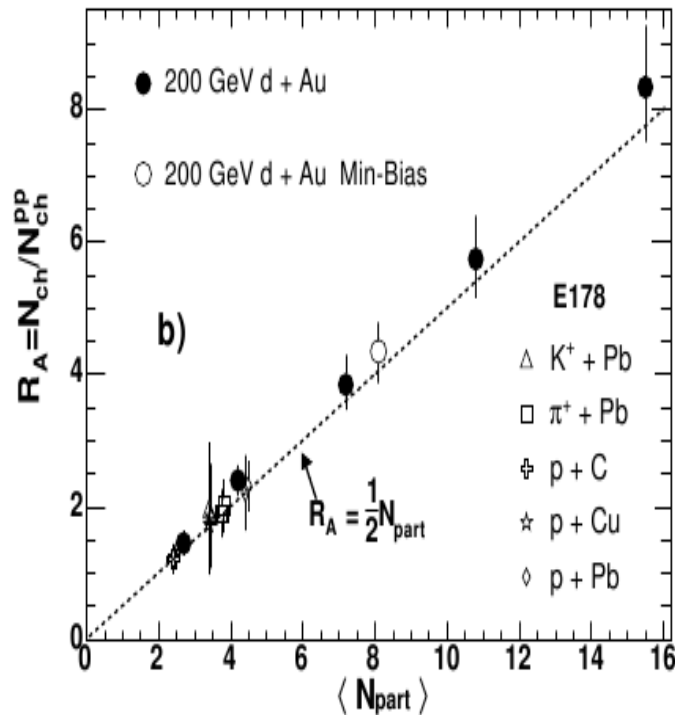


Fig. 2. The ratio of the total charged particle multiplicity in hadron-nucleus and deuteron-nucleus collisions to that in hadron-proton collisions at the same energy, as a function of the number of participants, Ref. [4].

In interactiile pA, hA si dA la energii inalte s-a observat experimental o scalare a raportului R_A cu $N_{part} \rightarrow$ a stimulat introducerea marimii N_{part} , elaborarea Monte Carlo pentru Glauber (NWM) pentru calculul ei.

A. Bialas et al.,
Nucl.Phys. B111, 461 (1976)
Wounded Nucleon Model

Pe baza scalarii observate experimental NWM afirma: productia de particule intr-o interactie nucleara este o superpozitie de contributii independente (ale productiei de particule) de la nucleonii wounded din tinta. $\rightarrow$ suficient sa masori productia de particule in ciocniri elementare si sa numeri nucleonii participantii din tinta pentru a obtine multiplicitatea in interactia hadron-nucleu.

In interactia nucleu-nucleu se mentine propotionalitatea $N_{ch}/(N_{part}/2)$ cu N_{part} , insa valoarea corespunzatoare pentru interactia pp este mult mai jos.

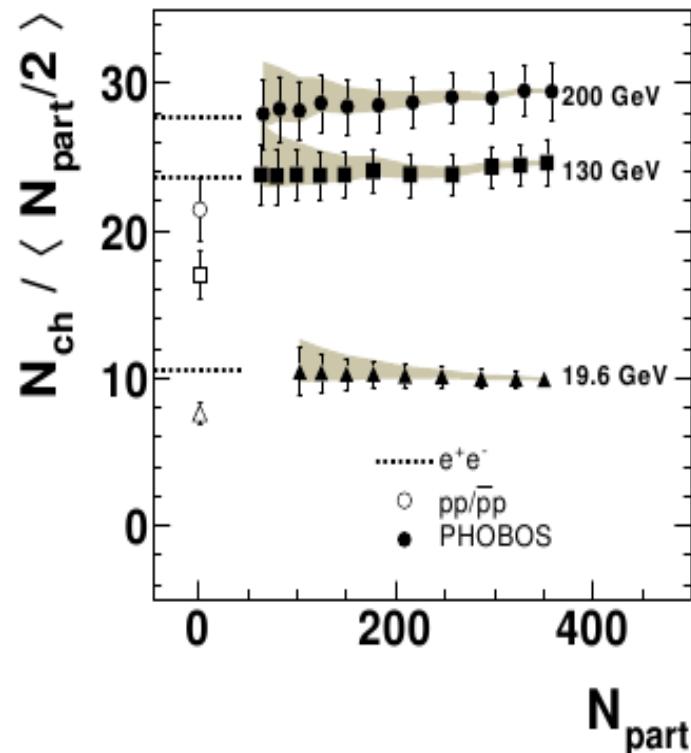


Fig. 6. Total charged particle multiplicity per participant pair for Au–Au collisions at four RHIC energies, *vs* the number of nucleon participants. Notice the *p–p* points lying systematically lower, Ref. [13].

In prezent multe studii in care se cauta raspunsul la aceasta comportare:

- sectiunea de interactie a nucleonilor in nuclee este sectiunea de interactie a nucleonilor liberi?
- rezultate bune in unele cazuri daca se scaleaza N_{ch} la N_{part}^q

H. Bialkowska, Acta Phys. Pol. B37, 3415,2006

S. Eremin, S. Voloshin, Phys. Rec. C 67, 064905, 2003

Alte aplicatii

determinarea factorilor de unghi solid si de autoabsortie a radiatiei gamma

determinarea corectiilor de evaporare pentru procesele profund inelastice din interactia ionilor grei usori

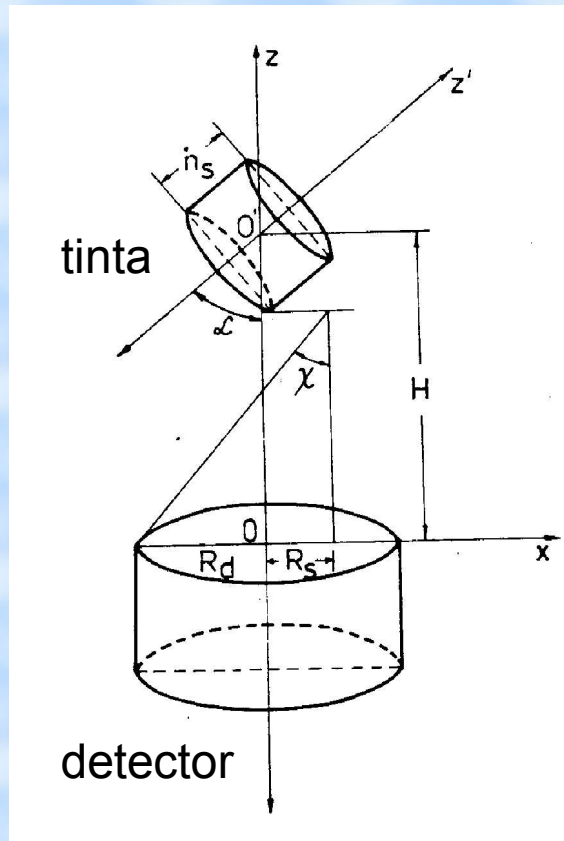
determinarea geometriei optime pentru experiment de coincidenta fragment-fragment cu aranjamentul experimental DRACULA

determinarea numarului de straturi TRD pentru care se obtine o putere de separare a electronului de pion sub 0.1% folosind distributiile in amplitudine ale electronului si pionului determinate experimental cu un TRD cu singur strat de radiator

determinarea factorilor de unghi solid si de autoabsortie a radiatiei gamma

Se considera ca radiatia este izotropa si punctele de emisie ale radiatiei sunt u.d. in tinta
Dorim sa aflam:

- numarul de γ care cade pe suprafata detectorului $\rightarrow$ clasa de evenimente N_1
- numarul de γ , dintre cele N_1 , care e absorbit in tinta $\rightarrow$ clasa de evenimente N_2



Pasi:

- generarea coordonatelor punctului de emisie in interiorul tinte
- generarea izotropa in 4π a radiatiei γ
- calculul intersectiei traiectoriei cu planul $z = 0$: (x_R, y_R)
- $x_R^2 + y_R^2 < R_d^2 \rightarrow$ evenimentul apartine clasei N_1
- pentru evenimentele N_1 se determina parcursul l al radiatiei in tinta
- se genereaza un parcurs liber mijlociu x in tinta, despre care se stie ca este o marime aleatoare cu f.d.p exponentiala $f(x) = e^{-\mu x}$, unde μ este coeficientul de absorbtie total al tinte: $L = -(\ln R_1)/\mu$
- $l < L$ evenimentul apartine clasei N_2

Se repeta pasii de N ori

factorul de unghi solid $f_\Omega = N_1/N$; factorul de autoabsortie $f_A = N_2/N_1$

Nuclear and particle physics codes using the Monte Carlo method:

- * GEANT — CERN's simulation of high energy particles interacting with a detector.
 - * FLUKA — INFN and CERN's simulation package for the interaction and transport of particles and nuclei in matter
 - * SRIM, a code to calculate the penetration and energy deposition of ions in matter
 - * CompHEP, PYTHIA — Monte-Carlo generators of particle collisions
 - * MCNP(X) - LANL's radiation transport codes
 - * MCU: universal computer code for simulation of particle transport (neutrons, photons, electrons) in three-dimensional systems by means of the Monte Carlo method
- etc

http://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_method