

Die Monte-Carlo-Simulation

O.Büker

04.09.2008

Inhaltsverzeichnis

- 1 Zur Person
- 2 Einführung
- 3 Geschichte
- 4 Beispiele
- 5 Ausblick
- 6 Referenzen

Zu meiner Person

Name: Oliver Büker
Fachbereich: 7.6
Status: Doktorand



Themen: Laser Doppler Velozimetrie (LDV)
und Transfornormalenentwicklung

Was ist Monte-Carlo?

- Die Monte-Carlo-Simulation ist eine empirische Methode zur Bestimmung von Erwartungswerten und ist durch seinen Algorithmus auch für höherdimensionale Probleme geeignet.
- Mit Hilfe von stochastischen Daten werden mit dieser Methode schnelle und ungefähre Ergebnisse herbeigeführt.
- Dabei werden mit Hilfe von Zufallszahlen reale Prozesse simuliert.
- Die Monte-Carlo-Simulation ist ein Werkzeug bei der Messunsicherheitsbestimmung.

Vergleich GUM \leftrightarrow Monte-Carlo

Vor- und Nachteile:

	GUM	Monte-Carlo
Vorteile:	geringe Rechenkapazität	relativ einfach
	beliebige Punkte berechenbar	PDF als Output (k nicht nötig)
		Korrelationen
		Nichtlinearitäten
Nachteile:	hohe Fehleranfälligkeit	hohe Rechenkapazität
	Vorgabe von k nötig	keine Aussagen zum Modell
	Korrelationen	punktuelle Lösung
	Nichtlinearitäten	
	Ergebnis: Normalverteilung	

Tabelle: Vor- und Nachteile GUM \leftrightarrow MC

Geschichte I

- Enrico Fermi benutzte bereits 1930 eine Methode, welche auf Zufallszahlen beruhte, um die Eigenschaften des neuentdeckten Neutrons zu untersuchen.
- Die damaligen Zufallszahlen wurden meist aus Zufallszahlentabellen entnommen.
- Anfang der vierziger Jahre wurde die Monte-Carlo-Methode beim Manhattan-Projekt eingesetzt, um die schwierigen Kernreaktionen zu berechnen.
- Mit der Entwicklung der Computertechnik wurde auch die Monte-Carlo-Methode weiterentwickelt.
- Die erste Publikation [1] über die Monte-Carlo-Methode erfolgte 1949.

Geschichte II

- In den fünfziger Jahren wurden die Monte-Carlo-Simulation bei Los Alamos für Vorarbeiten bezüglich der Entwicklung der Wasserstoffbombe benutzt.
- In dieser Zeit wurde die Entwicklung der Monte-Carlo-Methode besonders auf dem militärischen Gebiet, durch die US-Luftwaffe bzw. die RAND Corporation („Research and Development“), finanziert und vorangetrieben.
- In den späteren Jahren setzte sich die Monte-Carlo-Methode aber auch auf dem zivilen Sektor durch und findet seitdem eine breite Anwendung auf vielen verschiedenen Gebieten.
- Die Verwendung der Monte-Carlo-Methode erfordert eine große Anzahl von Zufallszahlen, deshalb war es vorallem die Monte-Carlo-Methode, die die Entwicklung der Pseudo-Zufallszahlgeneratoren forcierte.

Beispiel 1 : Berechnung von π (1)

Methode zur Bestimmung von π :

- Man zeichnet ein Einheitsquadrat $[0, 1] \times [0, 1]$.
- Als nächstes zeichnet man einen Viertelkreis mit $r = 1$.
- Man läßt zufällige Punkte mit $x = [0, 1]$ und $y = [0, 1]$ auf die Quadratfläche „regnen“.
- Es werden die Punkte bestimmt, die innerhalb und außerhalb des Viertelkreises liegen.
- Der Anteil der innenliegenden Punkte entspricht $\frac{\pi}{4}$.

$$\frac{\text{Fläche Viertelkreis}}{\text{Fläche Quadrat}} = \frac{\frac{\pi}{4} R^2}{R^2} = \frac{\pi}{4}$$

Beispiel 1 – R - Quellcode

```
1  anzahl<-1000000000
2  pi<-0
3  innerhalb<-0
4  gesamt<-0
5  gesamt<-anzahl
6  while (anzahl > 0)
7  {
8  dx<-runif(1)
9  dy<-runif(1)
10 if (dx*dx + dy*dy <= 1) {innerhalb<-innerhalb+1}
11 else {}
12 anzahl<-anzahl-1
13 }
14 pi=4*innerhalb/gesamt
15 pi
```

Beispiel 1 : Berechnung von π (1)

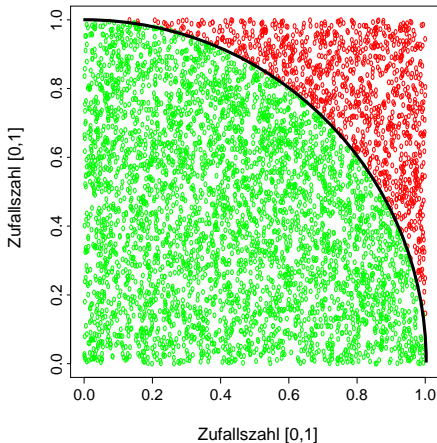


Abbildung: Näherungsverfahren für π

$$\pi \approx 3,141592654$$

Anzahl	Näherung für π
1.000	3.084
10.000	3.1444
100.000	3.13312
1.000.000	3.139532
10.000.000	3.140945
100.000.000	3.141484
1.000.000.000	3.141624

Tabelle: einmaliger Versuch

Beispiel 2 : Berechnung von π (2)

Buffonsches Nadelproblem:

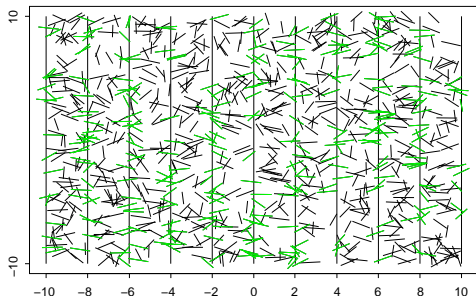
- Methode von Georges-Louis Leclerc de Buffon (1707-1788)
- Buffon warf Stöcke über die Schulter auf einen gekachelten Fußboden.
- Anschließend zählte er, wie oft diese die Fugen trafen.

Umsetzung:

- Eine praktische Variante von Jakow I. Perelman [2] wird im Folgenden vorgestellt.

Beispiel 2 : Berechnung von π (2)

- Man zeichnet auf ein Blatt Papier eine Reihe dünner paralleler Striche im Abstand von $d = 2$ LE.
- Man läßt Nadeln mit $L = 1$ LE sehr häufig aus einer gewissen Höhe auf das Blatt fallen und notiert, ob die Nadel eine Linie schneidet oder nicht.
- Die Division der Gesamtzahl der Nadelwürfe durch die Zahl der Fälle, in denen die Nadel eine Linie geschnitten hat, ergibt im Ergebnis eine Näherung von π .
- Für z.B. 100.000 Nadeln ergibt sich eine Näherung für π von 3,14693.

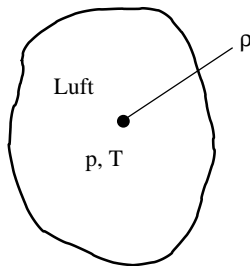


Beispiel 3: ρ -Bestimmung – Vergleich GUM \leftrightarrow MC

Dichtebestimmung aus der idealen Gasgleichung:

$$\rho \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad , \quad n = \frac{m}{M} \quad , \quad \rho = \frac{m}{V}$$

ρ	Druck
V	Volumen
R	universelle Gaskonstante
T	Temperatur
n	Stoffmenge
M	molare Masse
m	Masse
ρ	Dichte



$$\rho = \frac{p \cdot M}{R \cdot T}$$

Beispiel 3: ρ -Bestimmung – Vergleich GUM \leftrightarrow MC

Messgröße	Einheit	μ	Verteilung	Charakteristik	Varianz
p	hPa	101500	Δ	$a_1 = 500$	$u^2(p) = \frac{a_1^2}{6} = 41666,67$
M	$\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$	0,0289635	\square	$a_2 = 2 \cdot 10^{-4}$	$u^2(M) = \frac{a_2^2}{12} = 3.333 \cdot 10^{-9}$
R	$\frac{\text{J}}{\text{mol K}}$	8,3145101	\square	$a_3 = 4 \cdot 10^{-7}$	$u^2(R) = \frac{a_3^2}{12} = 1.333 \cdot 10^{-14}$
T	K	293,15	Normal	$\sigma = 0,5$	$u^2(T) = \sigma^2 = 0,25$

Tabelle: Messwerte und Unsicherheiten

$$\frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{M}{R \cdot T}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial M} = \frac{p}{R \cdot T}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial R} = -\frac{p \cdot M}{R^2 \cdot T}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} = -\frac{p \cdot M}{T^2 \cdot R}$$

Beispiel 3: ρ -Bestimmung – Vergleich GUM \leftrightarrow MC

Ausgangsgrößen:

$$\rho = \frac{101500 \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}^2} \cdot 0,00289635 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{8,3145101 \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2 \cdot \text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293,15\text{K}} = 1,20624 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$u^2(\rho) = \frac{M^2}{R^2 \cdot T^2} \cdot u^2(p) + \frac{p^2}{R^2 \cdot T^2} \cdot u^2(M) + \frac{p^2 \cdot M^2}{R^4 \cdot T^2} \cdot u^2(R) + \frac{p^2 \cdot M^2}{T^4 \cdot R^2} \cdot u^2(T)$$

Bei Korrelation, z.B. zwischen p und T ergibt sich ein zusätzlicher Term der Form [3]:

$$2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right) \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \cdot u(p, T) \quad \text{mit:} \quad r(p, T) = \frac{u(p, T)}{u(p) \cdot u(T)} = 0,5^1$$

¹Der Korrelationskoeffizient $r(p, T)$ muß vorher bestimmt werden.

Beispiel 3: ρ -Bestimmung – Vergleich GUM \leftrightarrow MC

Für den Term $u(p, T)$ ergibt sich:

$$u(p, T) = r(p, T) \cdot u(p) \cdot u(T)$$

Damit ergibt sich für den Korrelationsanteil:

$$2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right) \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \cdot r(p, T) \cdot u(p) \cdot u(T) = -\frac{M^2 \cdot p}{T^3 \cdot R^2} \cdot u(p) \cdot u(T)$$

Für die Varianz $u^2(\rho)$ bzw. Messunsicherheit $u(\rho)$ ergibt sich:

$$u^2(\rho) = 1,0906008 \cdot 10^{-5} \quad u(\rho) = 0,0033 \quad U(\rho) = 0,0066 \quad 2U(\rho) = 0,0132$$

Beispiel 3: ρ -Bestimmung – Vergleich GUM \leftrightarrow MC

Monte-Carlo-Simulation bei Korrelation:

Cholesky-Faktorisierung

- Nötig ist eine Transformation der unabhängigen Zufallszahlen in korrelierte Zufallszahlen.
- Die Kovarianzmatrix wird mit Hilfe der Cholesky-Zerlegung in eine Dreiecksmatrix umgewandelt.
- Anschließend erfolgt die Multiplikation der Dreiecksmatrix mit einem Zufallszahlenvektor.
- Ergebnis: Zufallszahlen die entsprechend der Kovarianzmatrix korreliert sind.

Iman-Conover-Methode

- weitere Methode um Korrelationen zu berücksichtigen

Beispiel 3: ρ -Bestimmung – Vergleich GUM \leftrightarrow MC

Ergebnisse mit der kommerziellen Software Crystal Ball[®]:

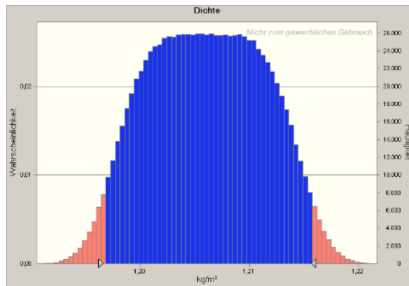


Abbildung: Histogramm der Monte-Carlo-Simulation, erzeugt mit dem Excel PlugIn der Firma Oracle – Crystal Ball[®]

Statistik	Prognosewerte
Versuche	1.000.000
Mittelwert	1,20611112
Mittlerer Wert	1,20610076
Modus	—
Standardabweichung	0,00530082
Varianz	0,00002810
Schiefe	0,00651988
Wölbung	2,18629280
Koeff. der Veränderlichkeit	0,00439497
Minimum	1,18969573
Maximum	1,22371037
Bereichsbreite	0,03401464
Mittelwert Std. Fehler	0,00000530

Tabelle: Ergebnisse der MC-Simulation mit Crystal Ball[®]

Berechnung eines KCRV in Ringvergleichen

Bilden eines KCRV² aus den Messdaten von N Teilnehmern.

Nr.	x_i	$u(x_i)$		Nr.	x_i	$u(x_i)$		Nr.	x_i	$u(x_i)$		Nr.	x_i	$U(x_i)$
1	-0,07	0,04		11	-0,11	0,02		21	-0,25	0,20		31	-0,11	0,17
2	-0,12	0,12		12	-0,17	0,03		22	-0,08	0,22		32	-0,21	0,11
3	-0,16	0,04		13	-0,05	0,06		23	-0,13	0,14		33	-0,03	0,12
4	-0,08	0,20		14	-0,13	0,10		24	-0,18	0,12		34	-0,12	0,20
5	-0,15	0,10		15	-0,23	0,30		25	-0,03	0,08		35	-0,26	0,01
6	-0,18	0,11		16	-0,09	0,25		26	-0,23	0,04		36	-0,28	0,20
7	-0,09	0,06		17	-0,01	0,20		27	-0,19	0,25		37	-0,22	0,30
8	-0,24	0,17		18	-0,17	0,05		28	-0,11	0,09		38	0,05	0,12
9	-0,12	0,06		19	-0,22	0,08		29	-0,07	0,04		39	-0,12	0,15
10	-0,20	0,08		20	-0,02	0,15		30	-0,04	0,15		40	-0,20	0,15

Tabelle: ungeordnete Messwerte x_i und Standardabweichungen $u(x_i)$ der $N = 40$ Teilnehmer eines Ringvergleichs (fiktives Beispiel)

Mögliche Referenzwerte:

Mittelwert = $-0,136$ gewichteter Mittelwert = $-0,134$ Median = $-0,130$

²ohne Berechnung der zugehörigen Standardabweichung

Alternative nach Cox

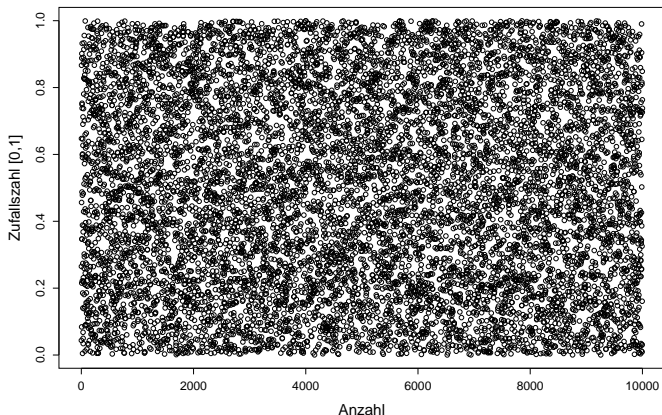
Alternative nach Cox [4] – Prozedur B: Monte-Carlo-Simulation:

- 1 Erzeugung von gleichverteilten Zufallszahlen $[0,1]$.
- 2 Quantilfunktion³ mit N -gleichverteilten Zufallszahlen, jeweils mit den Mittelwerten und Standardabweichungen der N Teilnehmer.
- 3 Durch die Wiederholung des letzten Punktes M -mal wird eine Z-Matrix der Dimension $N \times M$ erzeugt.
- 4 Mit den jeweiligen Medianen der N -Zeilen der Z-Matrix wird ein q-Vektor der Länge M gebildet.
- 5 Der KCRV ergibt sich dann aus dem Mittelwert des q-Vektors.
- 6 Die Standardabweichung ergibt sich dementsprechend aus der Standardabweichung des q-Vektors.

³Die Quantilfunktion ist die Inverse der CDF.

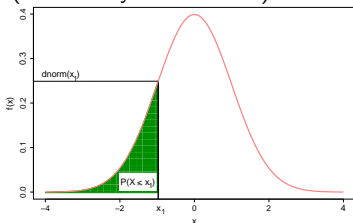
Pseudo-Zufallszahlen

Die Qualität der Ergebnisse hängt im Wesentlichen von der Güte der verwendeten Zufallszahlen ab.



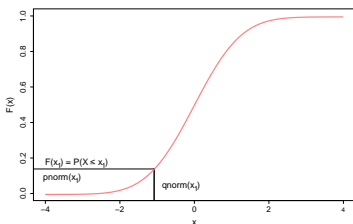
PDF und CDF

PDF (Probability Distribution) und CDF (Cumulative Distribution Function)



Normal-PDF
(Wahrscheinlichkeitsfunktion)

- Dichtefunktion z.B.
 $\text{pnorm}(-1) = 0,24$



Normal-CDF
(Verteilungsfunktion)

- Verteilungsfunktion
z.B. $\text{pnorm}(-1) = 0,16$
- Quantilfunktion z.B.
 $\text{qnorm}(0,16) = -1$

KCRV mit Monte-Carlo-Simulation – R - Quellcode

```
1  rm(list = ls(all = TRUE))
2  # Einlesen der Daten:
3  Daten <- read.table("E:/diesdas/x.csv", header=TRUE)
4  x<-Daten$x ; y<-Daten$y
5  N<-length(x)
6  # Vorgabe der Monte-Carlo-Versuche:
7  M<-1000000
8  v<-vector(mode="numeric", length=N)
9  q<-vector(mode="numeric", length=M)
10 # Berechnung der Matrix Z
11 Z<-c(0) ; Z<-matrix(Z, nrow=N, ncol=M)
12 r<-0 ; i<-0
13 for (r in 1:M) {for (i in 1:N)
14 { Z[i,r]<-qnorm(runif(1),x[i],y[i])} }
15 #Berechnung des Vektors q:
16 r<-0 ; for (r in 1:M) {q[r]<-median(Z[,r])}
17 # Berechnung von x_ref und sd:
18 xref<-mean(q) ; sd<-sd(q)
```

KCRV mit Monte-Carlo-Simulation

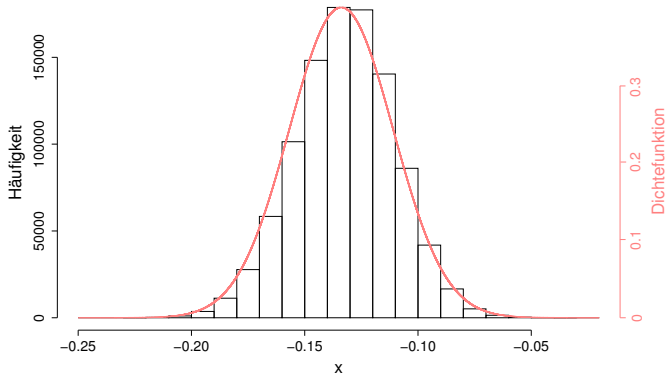






Abbildung: Monte-Carlo-Simulation für $M=1.000.000$

Mittelwert: $-0,132$

Literatur

-  Metropolis, N.; Ulam, S.: *The Monte Carlo method*. Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, 1949, pp. 335-341
-  Perelman, J.I.: *Unterhaltsame Geometrie. Eine Sammlung allgemeinverständlicher geometrischer Aufgaben zur Unterhaltung und Übung*. Verlag Volk und Wissen, Berlin, 1954/1963
-  Adunka, F.: *Meßunsicherheiten - Theorie und Praxis*. Vulkan-Verlag, 3. Auflage, Essen, 2007
-  Cox, M.G.: *The evaluation of key comparison data*. Metrologia, Vol. 39, 2002, pp. 589-595.

weiterführende Literatur



Siebert, B.R.L.; Sommer, K.-D.: *Grundlagen der Monte-Carlo-Methode für die Unsicherheitsberechnung*. VDI/VDE-GMA – Workshop „Neue Entwicklungen in der Messunsicherheitsermittlung“, Ilmenau, April 2006



Cox, M.G; Siebert, B.R.L: *The use of a Monte Carlo method for evaluating uncertainty and expanded uncertainty*. Metrologia, Vol. 43, 2006, pp. 178-188

Anmerkung: Alle im Vortrag gezeigten Programme dienen der Illustration und sind nicht optimiert.