Curso: Métodos de Monte Carlo. Unidad 1, Sesión 1: Introducción

Departamento de Investigación Operativa Instituto de Computación, Facultad de Ingeniería Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

dictado semestre 1 - 2016

Contenido:

- 1. Modalidad del curso.
- 2. Equipo docente.
- 3. Bibliografía.
- 4. Introducción a los Métodos de Monte Carlo.

Modalidad del curso:

- Material organizado en 5 Unidades y 15 Sesiones (siguiendo el esquema general del contenido disponible en el programa del curso); a través del EVA fing, siguiendo el avance programado del curso (dos sesiones por semana).
- Cada sesión implica aprox. 2 hs 30 de lectura y estudio.
- Ejercicios a entregar (laboratorio), trabajo estimado: 60 hs. Algunos ejercicios serán de elaboración individual; otros deben realizarse en grupos de 2 a 4 personas. Los estudiantes de posgrado pueden tener reglas de evaluación diferenciadas.
- Se espera unas 10 hs adicionales (a lo largo del curso) de interacción por los foros del EVA del curso. La participación activa (enviar posts, ya sea consultas, comentarios, o respuestas a otros estudiantes) se evalúa y

es parte de la nota del curso. Algunos posts en los foros requiere respuesta obligatoria de todos los estudiantes; los mismos estarán marcados con una etiqueta [RO].

- Prueba escrita.
- Evaluación en base a entregas, participación en los foros, prueba escrita final y trabajo final.

Equipo docente 2016:

- Responsable: Héctor Cancela.
- Otros docentes: María E. Urquhart.

Bibliografía

- Material indispensable: el publicado en las páginas del curso (basado en parte de los capítulos 1, 2, 3, 4 y 7 del libro siguiente: Fishman, George S. "Monte Carlo: concepts, algorithms, and applications". Springer, 1996. ISBN: 0-387-94527-X).
- Material de apoyo: otros libros sobre Monte Carlo, por ejemplo
 - Binder, K.; Heermann, D.W. "Monte Carlo simulation in statistical physics". Springer, 1988. ISBN: 3-540-19107-0
 - Hammersley, J.M.; Handscomb, D.C. "Monte Carlo methods".
 Methuen, 1964.
 - Sóbol, I.M. "Método de Monte Carlo". Mir, 1976.
 - Niederreiter, Harald. "Random number generation and quasi-Monte Carlo methods". SIAM, 1992. ISBN: 0-89871-295-5

Introducción

El modo Monte Carlo permite encontrar soluciones aproximadas a una variedad de problemas matemáticos a través de la realización de experimentos de muestreo estadístico en una computadora.

De manera un tanto sorprendente a primera vista, el método es aplicable a problemas que no tienen absolutamente ningún contenido probabilístico, tanto como a otros cuya estructura es inherentemente estocástica.

En general, los métodos numéricos que se basan en el empleo de evaluar n puntos en el seno de un espacio m-dimensional para producir una solución aproximada tienen un error que decrece con orden $n^{-1/m}$ en el mejor caso, lo que los convierte en extremadamente ineficientes cuando m es alto (fenómenos conocido como "maldición de la dimensionalidad", del que puede escaparse solamente en los casos en que es posible explotar estructura adicional del problema específico).

En cambio, los métodos de Monte Carlo obtienen estimaciones con un error absoluto del orden $n^{-1/2}$, independientemente de m. Este punto se

convierte en la ventaja fundamental del método, que en muchos casos es el único aplicable.

Bases históricas

El desarrollo de los métodos de Monte Carlo está basado en tres desarrollos matemáticos distintos, pero relacionados:

- 1. El desarrollo de las probabilidades a partir del siglo XVII. A partir del estudio de los juegos de azar, el desarrollo de la noción de variable aleatoria y de secuencia de resultados sucesivos del juego como una secuencia de eventos aleatorios. Posteriormente (S. XIX y XX) el reconocimiento de que la esperanza de una función de variables aleatorias continuas se expresa como una integral llevó a entender que es posible sortear de manera aleatoria números, transformarlos de acuerdo a las reglas prescritas, y de esta forma obtener una solución aproximada al cálculo de una integral en un problema que no tiene ningún contenido probabilístico (como por ejemplo el cálculo aproximado de π).
- 2. A fines del S. XIX, el estudio de caminatas aleatorias (random walks) permitió conectar las mismas con la solución de ecuaciones diferenciales

y ecuaciones integro-diferenciales. En ese momento, la aplicación discutida fue la solución analítica de dichas ecuaciones como forma de obtener soluciones (exactas o aproximadas) a los problemas planteados en términos de las caminatas aleatorias.

3. En el S. XX, y particularmente vinculado al desarrollo de la energía atómica en la segunda mitad del siglo, apareció la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales e integrales parciales en espacios de dimensiones muy altas, que escapaba a las herramientas numéricas existentes. La propuesta que surgió fue el revertir el razonamiento previo, y en lugar de emplear la solución de las ecuaciones diferenciales como aproximación de un sistema estocástico, desarrollar modelos de caminatas aleatorias de las ecuaciones a resolver, y emplear una computadora para realizar muestras repetidas del modelo aleatorio y de esta forma obtener soluciones aproximadas al problema original. Esta propuesta fue la que recibió el nombre de Método de Monte Carlo, y está en la base del desarrollo posterior de la temática.

4. Un cuarto elemento, que apareció posteriormente, fue el desarrollo de la teoría de complejidad (computacional) a partir de los años 1970. Esta teoría dio una base solida para identificar clases de problemas donde el cálculo exacto (o aproximado) insumía tiempos que crecían de manera exponencial; en algunos de estos, la propia teoría ha servido para demostrar que empleando Monte Carlo es posible en tiempos polinomiales encontrar resultados dentro de los errores de aproximación deseados.

Objetivos del curso

- Presentar las bases de los métodos de Monte Carlo como herramientas para la resolución numérica aproximada de problemas de cálculo, y particularmente de estimación de integrales y de estimación de conteos.
- Proporcionar los conceptos más importantes y las herramientas prácticas para diseñar e implementar un algoritmo Monte Carlo básico incluyendo manejo de la generación y determinación del tamaño de las muestras, y análisis de las salidas para determinar los errores de aproximación esperados.
- Para cubrir estos objetivos, las unidades 1, 2 y 3 presentan los conceptos básicos de Monte Carlo, así como su aplicación en problemas de estimación de integrales y de estimación de conteos.
- Dentro de este enfoque, hay dos preguntas que resultan centrales:

- Dada una precisión que se desea obtener, ¿cuántas observaciones deben realizarse?
- Recíprocamente, dado un conjunto de n observaciones, ¿que precisión tiene la solución estimada a partir de las mismas?
- Un problema básico para los métodos de Monte Carlo es la obtención de números aleatorios (o que se comporten equivalentemente) como base para la realización de las muestras computacionales. La Unidad 4 está dedicada a este tema.
- Por último, la Unidad 5 está dedicada a un conjunto de temas que surgen cuando se desea aumentar la eficiencia computacional (o equivalentemente la precisión con los mismos recursos de cálculo), así como a otros temas ligados a la estimación del error y la determinación del tamaño de la muestra en casos distintos al básico.

Lecturas obligatorias adicionales

Comentario: En caso de que el vínculo no esté vigente, buscar otro equivalente para suplirlo. Compartirlo en el foro.

- Elementos sobre la historia de MMC http://stud2.tuwien.ac.at/~e9527412/history.html
- Artículo sobre "Monte Carlo method" en Wolfram MathWorld: http://mathworld.wolfram.com/MonteCarloMethod.html (último acceso 2016-02-16).
- Artículo sobre "Monte Carlo integration" en Wolfram MathWorld: http://mathworld.wolfram.com/MonteCarloIntegration.html (último acceso 2016-02-16).
- Wikipedia:

http://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_method(último acceso 2016-02-16).

- Discusión sobre impacto: http://www.csm.ornl.gov/ssi-expo/MChist.html (último acceso 2016-02-16).
- (lectura opcional:) Artículo sobre "Monte Carlo method" en Encyclopedia of Mathematics: https: //www.encyclopediaofmath.org/index.php/Monte-Carlo_method (último acceso 2016-02-16).

Preguntas para resumen de lectura (ayuda para el estudio y la autoevaluación de lo aprendido; no es parte de la evaluación formal del curso ni es necesario entregar las respuestas)

- ¿Cuáles fueron los principales desarrollos matemáticos que permitieron el surgimiento de los Métodos de Monte Carlo?
- ¿Quiénes fueron las personas que desarrollaron el método en su forma moderna y le dieron su nombre?
- ¿Qué es la "aguja de Buffon"? Explicar cómo se aplica el método de Monte Carlo en ese caso, y qué medida se estima con este experimento.
- ¿En qué tipos de aplicaciones se suele usar métodos de Monte Carlo?