Métodos de Monte Carlo

Camarena Perez, Victor Daniel

IMCA-UNI

09 de agosto del 2019

Contenido

Un problema que enfrenta cualquiera que compile tal lista es definir qué se entiende por "algoritmo". ¿Dónde se traza la línea entre un algoritmo y una técnica? Para un ejemplo simple,

¿poner una función racional en forma de fracción parcial es un algoritmo?

El algoritmo de Newton: Se pide hallar el cero de una función

$$x\colon f(x) = 0.$$

Fije $a < x_0 < b$, para cada $n \geq 0$ calcule

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Lista según el número de localizadores en el índice del libro **The Princeton Companion to Applied Mathematics (PCAM)**.

1. **Newton and quasi-Newton methods**
2. Matrix factorizations (LU, Cholesky, QR)
3. Singular value decomposition, QR and QZ algorithms
4. **Monte-Carlo methods**
5. Fast Fourier transform
6. Krylov subspace methods
7. JPEG
8. PageRank
9. Simplex algorithm
10. Kalman filter

Historia de los métodos de Monte Carlo

1946: John von Neumann, Stan Ulam y Nick Metropolis, todos en el Laboratorio Científico de Los Alamos, elaboran el algoritmo Metropolis, también conocido como el método Monte Carlo. El algoritmo Metropolis tiene como objetivo obtener soluciones aproximadas a problemas numéricos con muchos grados de libertad inmanejables y a problemas combinatorios de tamaño factorial, imitando un proceso aleatorio.

El **método congruencial mixto** empieza en una semilla x_0 y luego calcula de manera recursiva x_n, $n \geq 1$:

$$x_n = (a x_{n-1} + c) \mod m, \tag{1}$$

donde a y m son enteros positivos prefijados.
La cantidad x_n/m es llamada **número pseudoaleatorio** y se considera una aproximación de una variable aleatoria uniforme $]0, 1[$.

Generación de números pseudoaleatorios

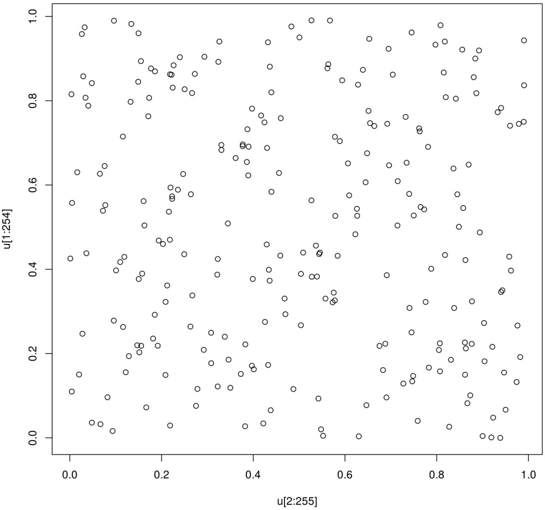


Figura : El método congruencial mixto con parametros $a = 137$, $c = 0$, $m = 256$.

Determinando si una moneda es justa:

Fije

$$p = Pr(cara)$$

Sean los lanzamientos

$$X_1, X_2, \dots, X_N \sim Ber(p)$$

Calcule la fracción de éxitos

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i \quad \to \quad p,$$

lo cual es la definición frecuentista de la probabilidad.

Sea

$$\theta = \int_0^1 f(x)dx$$

Esto se reescribe

$$\theta = \mathbb{E}(f(X))$$

donde $X \sim Unif([0,1])$

Estimador del parámetro:

$$\hat{\theta} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(X_i)$$

donde los $X_i \sim Unif([0,1])$

Integral $\int_{-2}^{2} e^{x} dx$ con un número de iteraciones $k = 1000$:

$$\int_{-2}^{2} e^{x} dx = \mathbb{E}\left[e^{U}\right] \quad \text{donde} \quad U \sim unif(-2, 2).$$

Código en R.

```
% k <- 1000; s <- c(rep(0,each=k));  x <- 1:k
% s[1] = exp(runif(1,-2,2))
% for (i in 2:k)
%       s[i] <- s[i-1]+exp(runif(1,-2,2));
% plot(x,s/x)
%
```

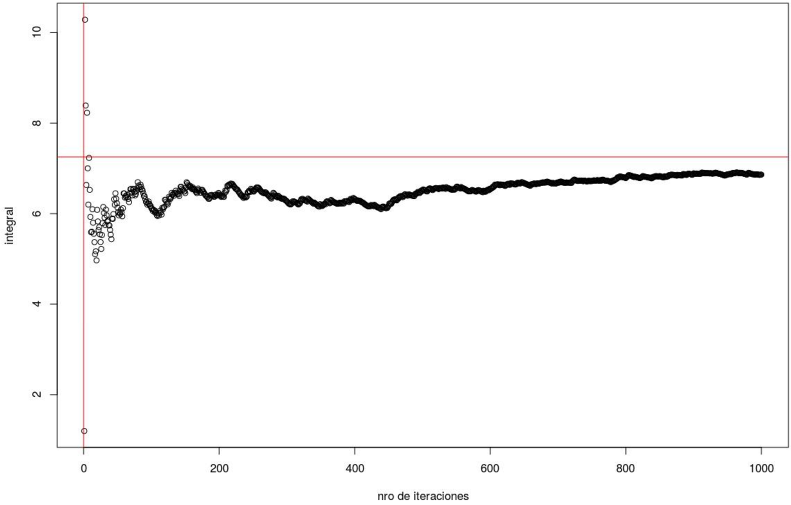


Figura : Integral $\int_{-2}^{2} e^x dx$. Número de iteraciones $k = 1000$.

Algoritmo rechazo

1. Use μ para seleccionar una muestra, x.
2. Evalue $\nu(x)$. Esto debe ser fácil, una vez que se tiene x.
3. Genere una variable aleatoria uniforme $u \sim U[0, 1)$.
   si $u \leq c\frac{\nu(x)}{\mu(x)}$
   entonces acepte x
   sino pruebe con otro x
   Aquí se elije c de modo que $c\frac{\nu(x)}{\mu(x)} < 1$ para todo x.

La probabilidad de seleccionar y luego aceptar algún x es

$$c\frac{\nu(x)}{\mu(x)} \cdot \mu(x) = c\nu(x).$$

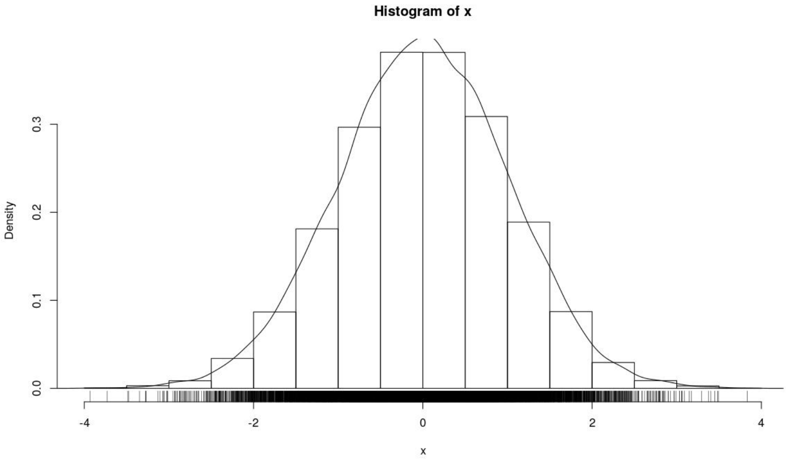


Figura : Simulación de una variable aleatoria normal por el método de Rechazo. Número de iteraciones $n = 1000$.

Se desarrolló a principios del siglo XX como modelo de magnetización y fenómenos relacionados.

Cada configuración σ tiene una **energía** asociada

$$E(\sigma) = \sum_{i \sim j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - B \sum_k \sigma_k.$$

La media $\langle f \rangle$ de un observable f es

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z(T)} \sum_\sigma f(\sigma) \exp\left(-\frac{E(\sigma)}{\kappa T}\right).$$

La **función partición**

$$Z(T) = \sum_\sigma \exp\left(-\frac{E(\sigma)}{\kappa T}\right),$$

aquí T es la temperatura y κ es la constante de Boltzmann.

Un enfoque de muestreo por importancia natural podría ser seleccionar configuraciones según la distribución

$$\mu(\sigma) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E(\sigma)}{\kappa T}\right)$$

de modo que la media muestral, de M muestras,

$$\overline{f} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^{M} f(\sigma^k)$$

converja rápidamente a la media del observable, $\langle f \rangle$.

¡El problema es encontrar una forma de muestrear según μ!

Construcción de una **cadena de Markov simétrica aperiódica** que converja a la distribución límite μ. Las probabilidades de transición son tales que

$$\mu(\sigma) = \sum_{\xi} \mu(\xi) p_{\xi,\sigma}.$$

La suma es sobre todas las configuraciones ξ que difieren de σ por un spin, y

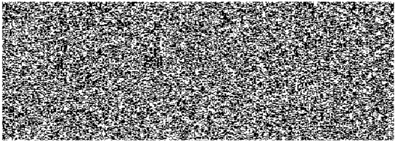
$$p_{\xi,\sigma} = \begin{cases} \frac{\mu(\sigma)}{\mu(\xi)} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) & \text{si} \Delta E > 0 \\ 1 & \text{si} \Delta E < 0 \end{cases}$$

Dinámica de Metropolis:

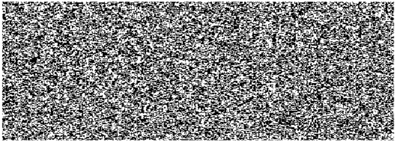
1. Seleccione un sitio de manera uniforme
2. Acepte el cambio con probabilidad

$$\text{mín}\left\{\exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), 1\right\}$$

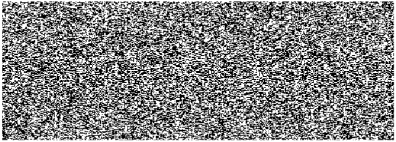
No magnetización: temperatura alta ($T = 4{,}0$)



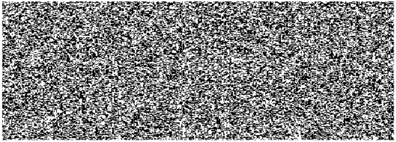
i=500000



i=1000000

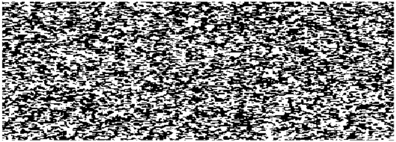


i=1500000

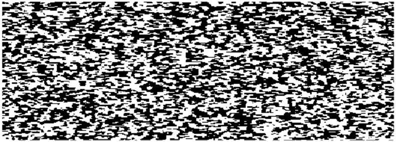


i=2000000

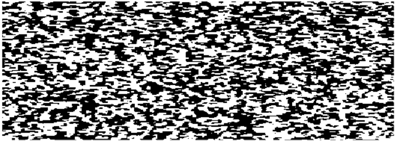
Magnetización: temperatura baja ($T = 0{,}4$)



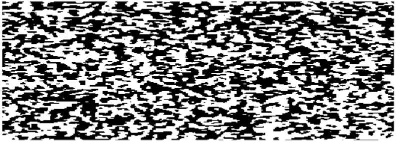
i=500000



i=1000000



i=1500000



i=2000000

Hoy en día la metodología Monte Carlo se ha extendido en muchas direcciones en parte por la demanda que tiene. Así lo muestra la siguiente lista tentativa:

- Reversible Jump MCMC
- Optimal Proposal Distributions and Adaptive MCMC
- MCMC Using Hamiltonian Dynamics
- Spatial Point Processes
- Importance Sampling, Simulated Tempering, and Umbrella Sampling
- Likelihood-Free MCMC

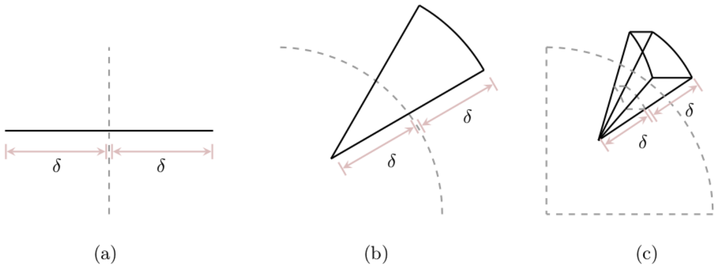


Figura : El problema de la dimensionalidad.

- The top 10 algorithms in applied mathematics.
  `https://nickhigham.wordpress.com/2016/03/29/the-top-10-algorithms-in-applied-mathematics/`.
  Accessed: 2018-09-10.

- Barry A Cipra.
  The best of the 20th century: Editors name top 10 algorithms.
  SIAM news, 33(4):1–2, 2000.

- Christian P Robert and George Casella.
  Introducing monte carlo methods with r, volume 18.
  Springer, 2010.

- Ronald W Shonkwiler and Franklin Mendivil.
  Explorations in Monte Carlo Methods.
  Springer Science & Business Media, 2009.