

MÉTODO MONTE CARLO

Alejandro Aguayo-Ortiz

aaguayo@astro.unam.mx

Resumen

Estas notas son una traducción, modificación, compendio y material propio de distintos textos sobre el Método Monte Carlo y su aplicación para resolver problemas en física y matemáticas.

Índice

Índice de tablas	3
Índice de figuras	4
1. Introducción a la idea Monte Carlo	5
2. Probabilidad: variables aleatorias	7
2.1. Variables discretas	7
2.2. Variables continuas	8
2.3. Conceptos	8
Bibliografía	11

Índice de tablas

Índice de figuras

1.1.	Estimaciones de pi y distribución aleatoria de los puntos para distintos valores de N .	5
2.1.	Error	7

1. Introducción a la idea Monte Carlo

La técnica **Monte Carlo (MC)** es un método numérico que utiliza números aleatorios para resolver problemas matemáticos que no tienen una solución analítica. El primer artículo al respecto, “*The Monte Carlo Method*” fue publicado por [Metropolis and Ulam \(1949\)](#), aunque la técnica ya era utilizada en problemas de estadística desde años antes. Gracias al uso de computadoras, en los últimos años el método MC ha sido utilizado para resolver muchos tipos de problemas.

El “HOLA MUNDO” en las simulaciones MC es la determinación de π . Supongamos que tenemos un cuarto de círculo de radio $r = 1$ dentro de un cuadrado de lado $l = r = 1$. Si calculamos la razón entre áreas obtenemos que

$$\frac{A_{\text{círculo}}}{A_{\text{cuadrado}}} = \frac{\pi r^2}{4r^2} = \frac{\pi}{4}. \quad (1.1)$$

Utilizando la filosofía del método Monte Carlo podemos estimar el valor de π utilizando la expresión anterior. La técnica consiste en “lanzar” N puntos dentro del cuadrado distribuidos de manera *aleatoria y uniforme*. Cada punto tendrá coordenadas $p_i = (x_i, y_i)$ con $i = 1, \dots, N$. Si la distribución de puntos es uniforme, entonces la densidad superficial es constante, por lo que podemos escribir a un elemento de los puntos como $dn = \Sigma da$, donde $\Sigma = \text{cte.}$ es la densidad superficial de puntos y da es el diferencial de área dentro del cuadrado. De esta forma podemos expresar al total de puntos dentro del cuadrado como $N \approx \Sigma A_{\text{cuadrado}}$. Dado que tenemos la misma densidad superficial dentro del círculo, podemos de la Eq. (1.1) se sigue que

$$\frac{A_{\text{círculo}}}{A_{\text{cuadrado}}} \approx \frac{M}{N}, \quad (1.2)$$

donde M es el número de puntos dentro del círculo, es decir, satisfacen la relación $x_i^2 + y_i^2 \leq 1$. Por lo tanto, podemos aproximar el valor de π como

$$\pi \approx 4 \frac{M}{N}. \quad (1.3)$$

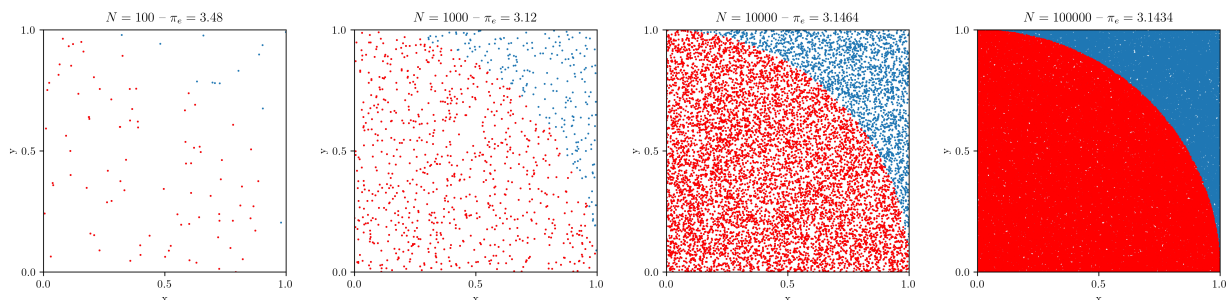


Figura 1.1: Estimaciones de π y distribución aleatoria de los puntos para distintos valores de N .

De este problema resulta interesante, más allá de poder estimar el valor de π , el significado de obtener $\pi/4$ de tirar puntos aleatoriamente, para lo cual necesitamos pensar en términos

de probabilidades. Ésto lo atacaremos desde dos perspectivas distintas, que son esencialmente lo mismo pero cuyas matemáticas y conceptos son fundamentalmente diferentes.

Por el momento descubriremos el significado de $\pi/4$, desde una perspectiva muy sencilla. Dada una distribución aleatoria de N puntos dentro de un cuadrado de 1×1 , ¿cuál es la probabilidad de que un punto caiga dentro del cuarto de círculo?

Este problema lo podemos resolver utilizando la *regla de Laplace*, la cuál indica que la probabilidad de ocurrencia de un evento A se calcula como:

$$P(A) = \frac{\text{Número de casos favorables}}{\text{Número de resultados posibles}}. \quad (1.4)$$

En nuestro caso, el evento A corresponde a tener un punto dentro del círculo, el número de casos posibles es el número total de puntos que caen dentro del cuadrado N , finalmente, el número de casos favorables son todos los puntos que cumplen $\sqrt{x_i^2 + y_i^2} \leq 1$, i.e., M . Por lo tanto,

$$P(\text{punto dentro del círculo}) = \frac{M}{N}, \quad (1.5)$$

Pero, como se mostró anteriormente, el número de puntos es proporcional al área, entonces obtenemos que

$$P(\text{Punto dentro del círculo}) = \frac{\Sigma A_{\text{círculo}}}{\Sigma A_{\text{cuadrado}}} = \frac{\pi}{4}. \quad (1.6)$$

Es decir, la probabilidad de que un punto caiga dentro del cuarto de círculo es de $\pi/4 \approx 78.5\%$.

Para el segundo análisis de este resultado es importante recordar algunos conceptos de probabilidad y de variables aleatorias.

2. Probabilidad: variables aleatorias

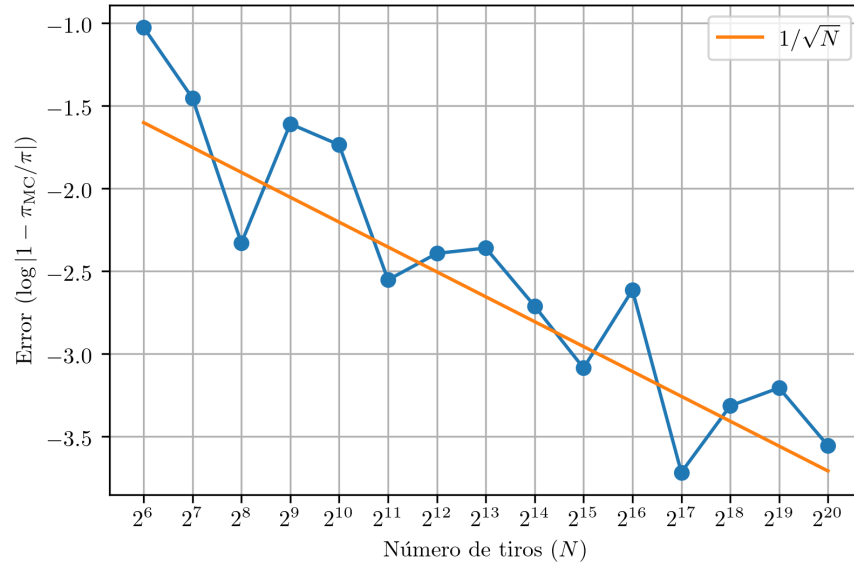


Figura 2.1: Error

El nombre “Monte Carlo” proviene de la ciudad en el Principado de Mónaco, que es famosamente conocida por sus casinos. La rulta es el generador mecánico de número aleatorios más simple que existe.

Una **variable aleatoria**, en su definición más formal, es una función medible $X : \Omega \rightarrow E$ de un conjunto de posibles resultados Ω a un espacio muestral E . Pero como eso es muy matemático, utilizaremos la definición más informal que es: una variable cuyo resultado final medido depende de un fenómeno aleatorio. Sobre la definición de **aleatorio** se podría entrar en un contexto mucho más filosófico, pero lo pensaremos simplemente como algo no-determinista (en el sentido utilizado en física)[†].

Una variable aleatoria, dada la definición anterior, puede obtener cualquier valor posible dada un cierto fenómeno aleatorio que lo genere. A pesar de que no es posible predecir el resultado medido, dada una cierta **distribución probabilidad** previamente conocida, se puede estimar la probabilidad de obtener cierto resultado. Esta variable X puede ser discreta, como los resultados obtenidos al tirar un dado; o continua, como las posiciones de los puntos en la Figura 1.1.

2.1. Variables discretas

Una variable aleatoria discreta, que denotaremos normalmente con el valor X , es un conjunto discreto de resultados posibles, i.e., $X = \{X_1, \dots, X_N\}$, donde tenemos N posibles valores. La distribución de probabilidad $p(X)$ es el conjunto de las probabilidades P_i asociadas

[†] Esta definición es solo para propósitos prácticos de estas notas, pero la idea de *aleatoriedad* es mucho más profunda.

a cada posible valor X_i de X , es decir $P_i = p(X_i)$. La distribución de probabilidad debe cumplir:

$$\sum_{i=1}^N p(X_i) = 1. \quad (2.1)$$

La probabilidad de que X se encuentre entre los valores X_a y X_b se calcula como:

$$P(a \leq X \leq b) = \sum_{i=a}^b p(X_i). \quad (2.2)$$

2.2. Variables continuas

Una variable aleatoria continua, que denotaremos normalmente con el valor $x \in (a, b)$, es una función continua de todos los resultados posibles en dicho intervalo. En este caso, tenemos una función de densidad de probabilidad $p(x)$ asociada, que es igualmente una función continua, aunque puede ser una función continua a trozos. De manera análoga al caso discreto, la densidad de probabilidad debe cumplir:

$$\int_a^b p(x) dx = 1. \quad (2.3)$$

Igualmente, la probabilidad de encontrar a x dentro de cierto intervalo ξ, χ se calcula como:

$$P(\xi \leq x \leq \chi) = \int_{\xi}^{\chi} p(x) dx. \quad (2.4)$$

2.3. Conceptos

$$E[x] = \mu = \int_a^b xp(x) dx \rightarrow \text{Valor esperado de } x, \quad (2.5a)$$

$$E[x^2] = \int_a^b x^2p(x) dx \rightarrow \text{Segundo momento de } x, \quad (2.5b)$$

$$Var[x] = \sigma^2 = E[(x - \mu)^2] = \int_a^b (x - \mu)^2p(x) dx = E[x^2] - \mu^2 \rightarrow \text{Varianza}, \quad (2.5c)$$

donde σ es la desviación estándar.

Consideremos ahora dos variables aleatorias continuas x y y . Se dice que x y y son estadísticamente independiente si la distribución de x no depende y y viceversa. De esta forma, la densidad de probabilidad conjunta de ambas variables se puede escribir como $p_{xy}(x, y) = p_x(x)p_y(y)$. Definamos entonces

$$Cov[x, y] = E[(x - E[x])(y - E[y])] = E[xy] - E[x]E[y] \rightarrow \text{Covarianza, } Corr[x, y] = \frac{Cov[x, y]}{\sqrt{Var[x]Var[y]}} \rightarrow \quad (2.6a)$$

Si x y y no están correlacionadas, entonces su covarianza y su correlación es cero. Es decir, $E[xy] = E[x]E[y]$. Variables estadísticamente independientemente nunca están correlacionadas. Sin embargo, variables que no están correlacionadas podrían ser dependientes unas de otras. Por ejemplo: si x está distribuida uniformemente en el intervalo $[-1, 1]$ y $y = x^2$, las dos variables no están correlacionadas, pero claramente y es dependiente de x .

Utilizando estos conceptos, y para ejemplificar, podemos retomar el problema estudiado en la sección anterior.

Consideremos nuevamente los diagramas presentados en la Figura 1.1. Calculemos la probabilidad de encontrar un punto dentro del círculo. Observemos primero que tenemos dos variables aleatorias continuas $x \in (0, L)$ y $y \in (0, L)$, donde L es el largo de una arista del cuadrado. La distribución de los puntos es uniforme en ambas direcciones por lo que la densidad de probabilidad $p(x)$ y $p(y)$ debe ser constante e igual para ambos casos. Supongamos por un momento que no la conocemos, así que le llamaremos α , a este valor de la densidad de probabilidad. Entonces, por la ecuación (2.3), sabemos que

$$\int_0^L p(x) dx = \int_0^L \alpha dx = 1. \quad (2.7)$$

Por lo tanto, obtenemos que $p(x) = p(y) = 1/L$. Analicemos esto por un momento. Esto significa que si tenemos una variable aleatoria distribuida dentro de un cierto dominio, la densidad de probabilidad es el inverso del tamaño total del dominio. Si lo pensamos con un dado, que es una fenómeno discreto, en este caso también tenemos una distribución de probabilidad uniforme, i.e., la probabilidad de que salga 1, 2, 3, 4, 5 o 6 es la misma para cada uno. En este caso, dicho valor es $1/6$, que se puede pensar como Favorable/Total, o bien como $1/\text{Tamaño del Dominio}$.

Retomando el problema, sabemos entonces que $p(x) = p(y) = 1/L$. Ahora, queremos calcular la probabilidad de que un punto caiga dentro del círculo, en este caso, de radio L , i.e., que punto con coordenadas (x_i, y_i) cumpla $\sqrt{x_i^2 + y_i^2} \leq L$. Dado a que x y y son variables independientes, tenemos que

$$P\left(\sqrt{x_i^2 + y_i^2} \leq L\right) = \int \int_{\sqrt{x_i^2 + y_i^2} \leq L} p_x(x)p_y(y) dx dy = \int \int_{\sqrt{x_i^2 + y_i^2} \leq L} \frac{1}{L^2} dx dy. \quad (2.8)$$

Convirtiendo las integrales a coordenadas polares (r, θ) , obtenemos

$$P(r \leq L) = \int_0^{\pi/2} \int_0^L \frac{1}{L^2} r dr d\theta. \quad (2.9)$$

Antes de resolver la integral anterior, hay un punto importante que vale la pena discutir. Los diferenciales asociados a las nuevas variables aleatorias r y θ son dr y $r d\theta$, respectivamente. Por lo tanto, las densidades de probabilidad, siguiendo la definición de la ecuación (2.4), son $p(r) = 1/L$ y $p(\theta) = r/L$. Aquí podemos notar como la distribución de probabilidad angular ya no es uniforme, sino que depende del radio. Este es un punto de cuidado importante que surge al hablar de distribuciones de probabilidad con diferentes simetrías (cilíndrica, esférica) y que es ampliamente discutido en la literatura (e.g. [Tu and Fischbach, 2002](#)).

Regresando al problema, al resolver la integral es fácil ver que

$$P(r \leq L) = \frac{\pi}{4}, \tag{2.10}$$

que es precisamente el resultado que ya conocíamos, pero calculado utilizando las definiciones formales.

Referencias

- Metropolis, N. and Ulam, S. (1949). The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335–341.
- Tu, S.-J. and Fischbach, E. (2002). Random distance distribution for spherical objects: general theory and applications to physics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(31):6557–6570.