El método de Montecarlo

Dados $\mathbf{X}$ un vector aleatorio (con d componentes) y $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ una función medible, nos planteamos el problema de calcular el valor de

$$\mu = \mathbb{E}[g(\mathbf{X})] = \begin{cases} \sum_{\mathbf{x}_i} g\left(\mathbf{x}_i\right) p_i & \text{si } \mathbf{X} \text{ es discreto,} \\ \int_{\mathbb{R}^d} g(\mathbf{x}) f(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} & \text{si } \mathbf{X} \text{ es continuo.} \end{cases}$$

En el caso de que determinar el valor matemático exacto de $\mathbb{E}[g(\mathbf{X})]$ no sea posible o sea muy complicado, podemos obtener una estimación del mismo mediante el *método de Montecarlo*. Este implica realizar lo siguiente:

- Asegurarnos de que $\mathbb{E}[g(\mathbf{X})]$ existe, es decir, que $\mu < +\infty$.
- Generar n valores independientes de $\mathbf{X}$, aplicarles la función g y calcular el promedio de los resultados.

Desde un punto de vista teórico, el método proporciona un valor concreto del estimador

$$\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g\left(\mathbf{X}_i\right)$$

donde $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_n$ son vectores aleatorios independientes y con la misma distribución que $\mathbf{X}$.

Este estimador posee las siguientes propiedades:

- Es un estimador insesgado:

  $$\mathbb{E}\left[\hat{\mu}_n(\mathbf{X})\right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}\left[g\left(\mathbf{X}_i\right)\right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}\left[g(\mathbf{X})\right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mu = \mu$$

  En la práctica, esto quiere decir que las estimaciones proporcionadas por $\hat{\mu}_n(\mathbf{X})$ se distribuyen «centradas» en μ, aunque pueden estar más o menos cerca del valor de la esperanza.

- Es un estimador consistente: la ley fuerte de los grandes números asegura que $\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) \to \mu$ cuando $n \to +\infty$.

  En la práctica, esto quiere decir que cuantos más valores $\mathbf{X}_i$ utilicemos (cuanto mayor sea n), más cerca se encontrará el valor estimado del valor real de la esperanza.

Si denotamos $\sigma^2 = Var\left(g(\mathbf{X})\right)$, entonces la varianza del estimador $\hat{\mu}_n(\mathbf{X})$ se puede calcular como

$$Var\left(\hat{\mu}_n(\mathbf{X})\right) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^{n} Var\left(g(\mathbf{X}_i)\right) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^{n} Var\left(g(\mathbf{X})\right) = \frac{\sigma^2}{n}$$

Asumiendo $0 < \sigma^2 < +\infty$, el teorema central del límite nos permite establecer que la distribución límite de la variable aleatoria

$$Z_n = \frac{\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) - \mu}{\sqrt{\frac{\sigma^2}{n}}} = \frac{\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}$$

es la distribución normal estándar. Esto se puede interpretar como que $\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) \simeq \mu + \frac{\sigma Z}{\sqrt{n}}$, donde $Z \sim \mathrm{N}(0, 1)$.

Esta aproximación tiene varias implicaciones:

1. El *error estándar* $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ del método no depende del número de componentes d del vector aleatorio $\mathbf{X}$.
2. El ratio de convergencia es del orden de $n^{-\frac{1}{2}}$. Esto quiere decir que si queremos aumentar la precisión a un dígito significativo más, entonces debemos aumentar n en un factor de 100.
3. El error cometido en la estimación está distribuido asintóticamente como una normal. Esto sugiere la posibilidad de evaluar la precisión de la estimación mediante intervalos de confianza derivados de la distribución normal.

Dado un n suficientemente grande (para que la aproximación anterior sea válida), para construir un intervalo de confianza con probabilidad de cobertura $1 - \alpha$ basta considerar que

$$\mathbb{P}\left(-z_{1-\frac{\alpha}{2}} \leq Z_n \leq z_{1-\frac{\alpha}{2}}\right) \cong 1 - \alpha$$

donde z_β denota el percentil 100β-ésimo de la distribución $\mathrm{N}(0, 1)$ (es decir, el valor tal que $\mathbb{P}\left(Z \leq z_\beta\right) = \beta$).

Por tanto, se deduce que

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\left(\mu \in \left[\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) - \frac{\sigma}{\sqrt{n}} z_{1-\frac{\alpha}{2}}, \hat{\mu}_n(\mathbf{X}) + \frac{\sigma}{\sqrt{n}} z_{1-\frac{\alpha}{2}}\right]\right) = \\ &\mathbb{P}\left(\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) - \frac{\sigma}{\sqrt{n}} z_{1-\frac{\alpha}{2}} \leq \mu \leq \hat{\mu}_n(\mathbf{X}) + \frac{\sigma}{\sqrt{n}} z_{1-\frac{\alpha}{2}}\right) = \\ &\mathbb{P}\left(-z_{1-\frac{\alpha}{2}} \leq \frac{\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \leq z_{1-\frac{\alpha}{2}}\right) = \\ &\mathbb{P}\left(-z_{1-\frac{\alpha}{2}} \leq Z_n \leq z_{1-\frac{\alpha}{2}}\right) \cong \\ &1 - \alpha \end{aligned}$$

En la práctica, σ^2 no se conoce y hay que estimarlo. Un estimador insesgado es

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(g(\mathbf{x}_i) - \hat{\mu}_n(\mathbf{X})\right)^2}{n - 1}$$

Como s/σ converge en probabilidad a 1, por el teorema de Slutsky se tiene que

$$\frac{Z_n}{\frac{s}{\sigma}} = \frac{\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) - \mu}{\frac{s}{\sqrt{n}}}$$

también converge en distribución a $\mathrm{N}(0, 1)$.

En consecuencia, un intervalo (aproximado) de confianza para μ con probabilidad de cobertura $1 - \alpha$ es

$$\left[\hat{\mu}_n(\mathbf{X}) - \frac{s}{\sqrt{n}} z_{1-\frac{\alpha}{2}}, \hat{\mu}_n(\mathbf{X}) + \frac{s}{\sqrt{n}} z_{1-\frac{\alpha}{2}}\right]$$

Ejemplo: modelo de tráfico de Nagel-Schreckenberg

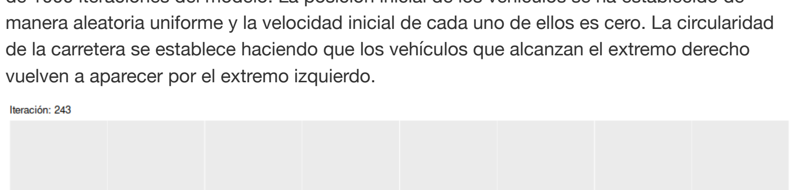
El modelo de Nagel-Schreckenberg es un modelo de tráfico extremadamente simple, pero que aún así es capaz de capturar algunas propiedades importantes del tráfico real.

Este modelo considera una carretera circular, de un solo carril, dividida en M zonas distintas, en cada una de las cuales puede haber a lo sumo un vehículo. En la carretera hay N vehículos en total, que se desplazan hacia adelante recorriendo más o menos zonas en función de su velocidad, que no puede superar una velocidad máxima $v_{\text{máx}}$, y de la distancia a la que se encuentren los vehículos que tienen delante.

El tiempo transcurre en pasos discretos y, en cada iteración, para cada vehículo se aplican en paralelo las siguientes cuatro reglas:

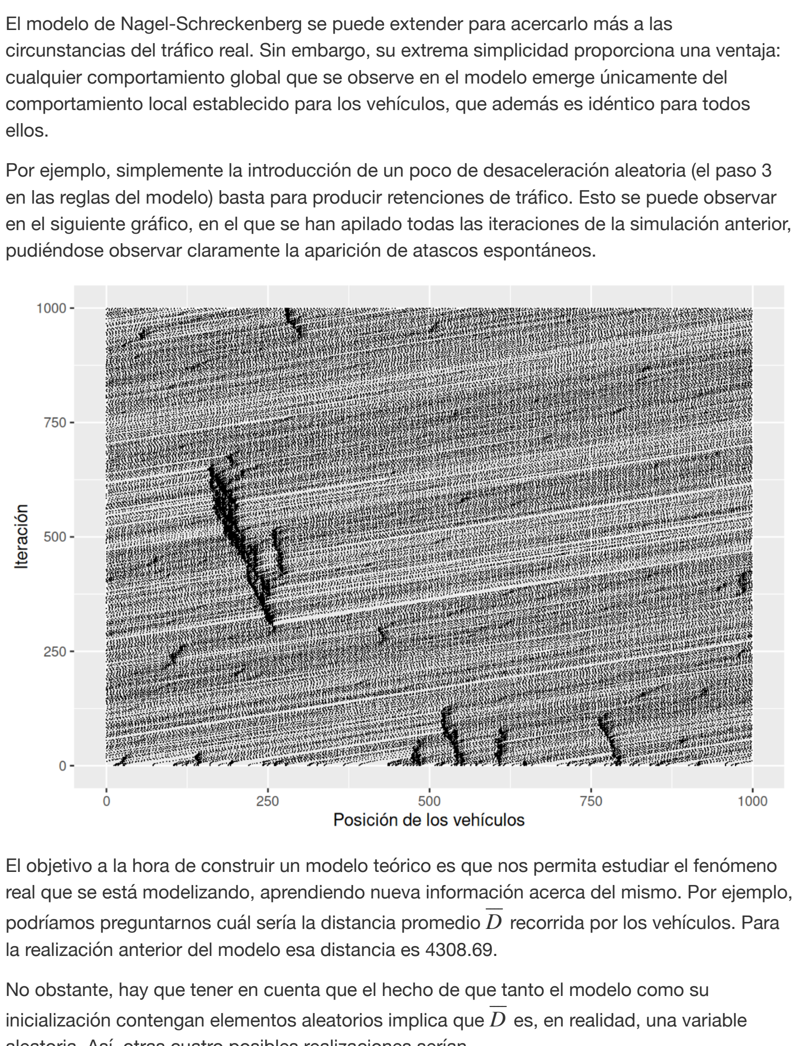
1. Si la velocidad v del vehículo está por debajo de la velocidad máxima, entonces aumenta su velocidad en una unidad. Esto representa que los conductores quieren avanzar lo más rápido posible.
2. Si la velocidad v del vehículo es mayor o igual que la distancia d al vehículo que tiene delante, entonces reduce su velocidad a $d - 1$. Esto representa que los conductores deben frenar para evitar colisiones.
3. Si la velocidad v del vehículo es positiva, entonces con probabilidad p reduce su velocidad en una unidad. Esto representa el comportamiento aleatorio de los conductores (es el único elemento aleatorio del modelo).
4. El vehículo avanza v zonas hacia adelante.

Como ejemplo concreto consideremos un modelo de Nagel-Schreckenberg en el que $M = 1000, N = 100, v_{\text{máx}} = 5$ y $p = 0.33$. La siguiente animación muestra una realización de 1000 iteraciones del modelo. La posición inicial de los vehículos se ha establecido de manera aleatoria uniforme y la velocidad inicial de cada uno de ellos es cero. La circularidad de la carretera se establece haciendo que los vehículos que alcanzan el extremo derecho vuelven a aparecer por el extremo izquierdo.



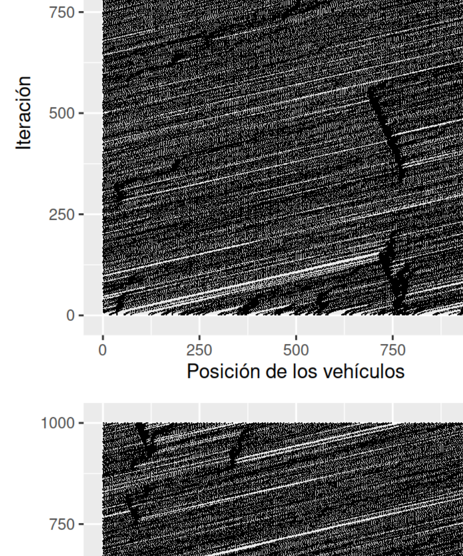
El modelo de Nagel-Schreckenberg se puede extender para acercarlo más a las circunstancias del tráfico real. Sin embargo, su extrema simplicidad proporciona una ventaja: cualquier comportamiento global que se observe en el modelo emerge únicamente del comportamiento local establecido para los vehículos, que además es idéntico para todos ellos.

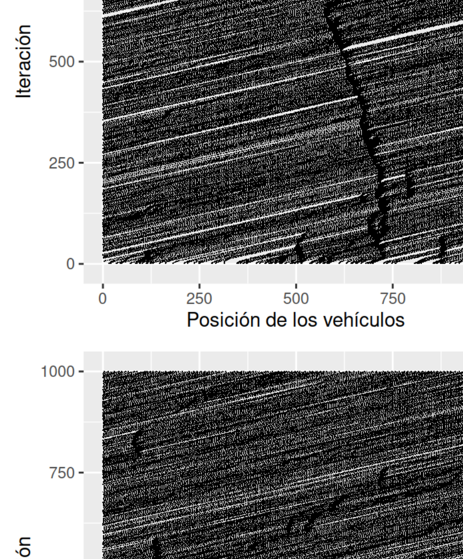
Por ejemplo, simplemente la introducción de un poco de desaceleración aleatoria (el paso 3 en las reglas del modelo) basta para producir retenciones de tráfico. Esto se puede observar en el siguiente gráfico, en el que se han apilado todas las iteraciones de la simulación anterior, pudiéndose observar claramente la aparición de atascos espontáneos.

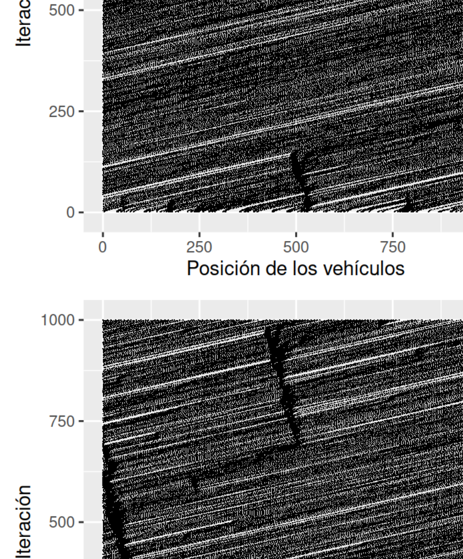


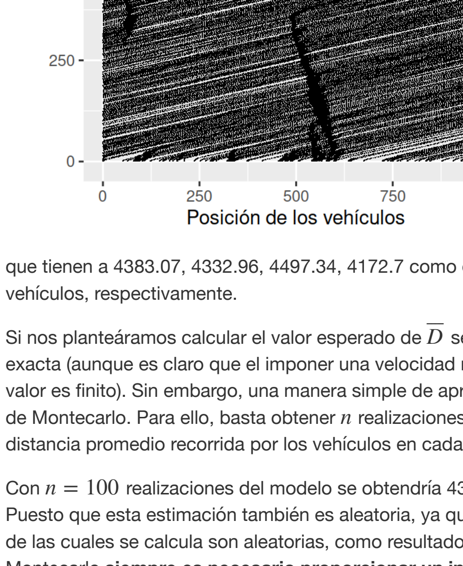
El objetivo a la hora de construir un modelo teórico es que nos permita estudiar el fenómeno real que se está modelizando, aprendiendo nueva información acerca del mismo. Por ejemplo, podríamos preguntarnos cuál sería la distancia promedio $\overline{D}$ recorrida por los vehículos. Para la realización anterior del modelo esa distancia es 4308.69.

No obstante, hay que tener en cuenta que el hecho de que tanto el modelo como su inicialización contengan elementos aleatorios implica que $\overline{D}$ es, en realidad, una variable aleatoria. Así, otras cuatro posibles realizaciones serían









que tienen a 4383.07, 4332.96, 4497.34, 4172.7 como distancia promedio recorrida por los vehículos, respectivamente.

Si nos planteáramos calcular el valor esperado de $\overline{D}$ sería complicado hacerlo de manera exacta (aunque es claro que el imponer una velocidad máxima a los vehículos implica que ese valor es finito). Sin embargo, una manera simple de aproximar ese valor es aplicar el método de Montecarlo. Para ello, basta obtener n realizaciones del modelo y calcular la media de la distancia promedio recorrida por los vehículos en cada una de ellas.

Con $n = 100$ realizaciones del modelo se obtendría 4382.41 como estimación de $\mathbb{E}[\overline{D}]$. Puesto que esta estimación también es aleatoria, ya que las realizaciones del modelo a partir de las cuales se calcula son aleatorias, como resultado de la aplicación del método de Montecarlo **siempre es necesario proporcionar un intervalo de confianza**, en lugar de un único valor.

La siguiente tabla muestra distintos intervalos de confianza obtenidos mediante el método del teorema central del límite. Obsérvese la relación directa existente entre la probabilidad de cobertura y la longitud del intervalo. En la práctica se suelen proporcionar intervalos con probabilidad de cobertura 0.95 o 0.99.

Extremo izquierdo	Extremo derecho	Probabilidad de cobertura	Longitud del intervalo
4376.58	4388.24	0.50	11.65
4373.46	4391.36	0.70	17.90
4371.34	4393.48	0.80	22.14
4365.48	4399.34	0.95	33.86
4360.16	4404.66	0.99	44.50