El método de Monte Carlo

El **método de Monte Carlo** es un procedimiento general para seleccionar muestras aleatorias de una población utilizando números aleatorios.

La denominación Monte Carlo fue popularizado por los científicos Stanislaw Ulam, Enrico Fermi, John von Neumann, y Nicholas Metropolis, entre otros, quienes ya trabajaban sobre **muestreo estadístico**. Su nombre hace referencia al Casino de Montecarlo en Mónaco.

1. Aplicación en cálculos matemáticos

Este método se utiliza para calcular numéricamente expresiones matemáticamente complejas y difíciles de evaluar con exactitud, o que no pueden resolverse analíticamente. En esta clase analizaremos el cálculo o estimación de integrales definidas, y aproximaciones al valor de π.

El método de Monte Carlo se basa en dos resultados fundamentales de la Teoría de la Probabilidad:

1. La **Ley de los Grandes Números:** Si $X_1, X_2, \ldots, X_n, \ldots$ son variables aleatorias independientes, idénticamente distribuidas, con media μ, entonces:

$$P\left(\lim_{n\to\infty} \frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n} = \mu\right) = 1. \tag{1}$$

   Equivalentemente se suele decir que, con probabilidad 1,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n} = \mu.$$

2. Si X es una variable aleatoria absolutamente continua, con función de densidad f, y $g : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ es una función, entonces $g \circ X$ es una variable aleatoria y su valor esperado está dado por

$$E[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\, f(x)\, dx.$$

Supongamos que se quiere determinar un cierto número θ, desconocido, y que se sabe que este valor puede calcularse como

$$\theta = E[g(X)]$$

para cierta variable aleatoria X que posee una distribución $\mathcal{F}$ (por ejemplo, con distribución uniforme en $(0,1)$).

En algunos casos puede ocurrir que, por la naturaleza de la función g, o de la función de densidad de X, resulta muy difícil o imposible determinar $E[g(X)]$.

El método de Monte Carlo propone encontrar un **valor estimado** de θ, donde *estimado* significa que hay una alta probabilidad de obtener un valor muy cercano a la verdadera solución. Aclaremos este punto.

El método de Monte Carlo considera una secuencia $X_1, X_2, \ldots$ de variables aleatorias, independientes, todas con la misma distribución de X, es decir, $X_i \sim \mathcal{F}$ para todo $i \geq 1$. Entonces $g(X_1)$, $g(X_2)$, $\ldots g(X_n), \ldots$ son todas variables aleatorias independientes, con media igual $\theta = E[g(X)]$, y por lo tanto:

$$\theta = \lim_{n\to\infty} \frac{g(X_1) + g(X_2) + \cdots + g(X_n)}{n},$$

con probabilidad 1.

Notemos que el lado izquierdo de la igualdad es un número, mientras que lo que está a la derecha es una variable aleatoria. Por ello es importante la aclaración ”con probabilidad 1”, porque indica que la probabilidad del evento donde ese límite es igual a θ es 1.

Es importante aclarar: la Ley de los Grandes Números no determina que existe una cota para el error

$$|\theta - \frac{g(x_1) + g(x_2) + \cdots + g(x_n)}{n}|$$

para cualquier realización de las X_i:

$$X_1 = x_1, \quad X_2 = x_2, \quad X_3 = x_3, \quad \ldots \quad X_n = x_n,$$

y un n suficientemente grande; sino que establece que para **casi** todas las realizaciones ocurre que

$$\lim_{x\to\infty} \frac{g(x_1) + g(x_2) + \cdots + g(x_n)}{n} = \mu.$$

Dicho de una manera más coloquial, es prácticamente improbable que una realización de las X_i's no cumpla que el límite de sus promedios

$$\frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n}$$

se aproxime a θ a medida que n tiende a infinito.

2. Estimación de integrales definidas

2.1. Integración sobre $(0,1)$

Una de las aplicaciones del método de Monte Carlo es facilitar el cálculo de integrales definidas. En realidad no se determina el valor exacto, sino que se **estima** el valor de la integral.

Veamos primero el caso en que se desee calcular una integral de la forma

$$\int_0^1 g(x)\,dx.$$

Recordamos que la aplicación del método de Monte Carlo tiene sentido cuando no es posible o es muy complicado determinar la integral de forma analítica.

Denotamos con θ a este valor desconocido:

$$\theta = \int_0^1 g(x)\,dx.$$

Si ahora consideramos una variable aleatoria uniforme U, $U \sim \mathcal{U}(0,1)$, entonces la función de densidad de U es

$$f(x) = I_{(0,1)}(x) = \begin{cases} 1 & 0 < x < 1 \\ 0 & c.c \end{cases},$$

y por lo tanto se cumple que:

$$\theta = \int_0^1 g(x)\,f(x)\,dx = E[g(U)].$$

Por lo tanto, si $U_1,\ U_2,\ldots$ son v.a. uniformes en $(0,1)$, independientes, por la Ley Fuerte de los grandes números se tiene que:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(U_i) = \theta$$

con probabilidad 1.

Consideramos entonces una muestra de tamaño N de $U_1, U_2, \ldots U_n, \ldots$, y **estimamos** el valor de θ con un promedio simple de esta muestra. Por ejemplo, podemos estimar el valor de la integral

$$\int_0^1 (1-x^2)^{3/2}\,dx \sim \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(1-u_i^2)^{3/2},$$

donde $u_1, u_2, \ldots, u_n$ es una realización de las v.a. $U_1, U_2, \ldots U_N$.

El valor exacto de esta integral es $\frac{3\pi}{16}$, aproximadamente 0.5890486226. (Ver Figura 1 y Cuadro 1).

# Simulaciones	Valor estimado
1000	0.5788611891947463
10000	0.5863982284155244
100000	0.5906798799945882
1000000	0.5882139637408895

Cuadro 1: Estimaciones de $\int_0^1 (1-x^2)^{3/2}\,dx$

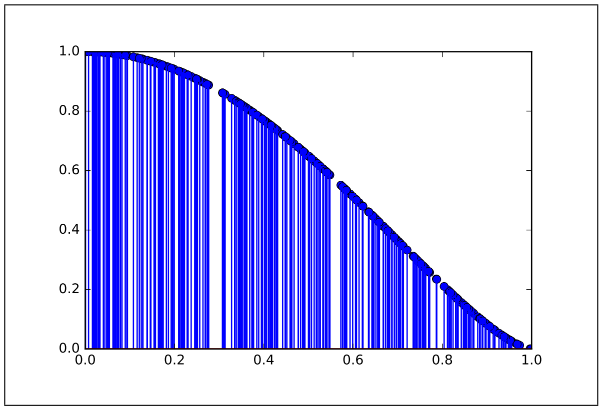

Figura 1: $N = 300$, Valor estimado=0.6067846103

2.2. Integración sobre un intervalo (a, b)

Para estimar el valor de una integral definida, sobre un intervalo (a, b), con a y b reales, se aplica un cambio de variables para transformarla en una integral entre 0 y 1. Esto es, si

$$\theta = \int_a^b g(x)\, dx,$$

con $a < b$, entonces definimos la variable y:

$$y = \frac{x-a}{b-a}, \qquad dy = \frac{1}{b-a}\, dx$$

y así el valor de θ puede calcularse como:

$$\int_a^b g(x)\, dx = \int_0^1 g(a + (b-a)y)(b-a)\, dy = \int_0^1 h(y)\, dy.$$

donde

$$h(y) = g(a + (b-a)y)(b-a), \qquad y \in (0, 1).$$

Ejemplo 2.1. Para estimar el valor de la integral

$$\int_{-1}^1 e^{x+x^2}\, dx,$$

realizamos un cambio de variable:

$$y = \frac{x+1}{2}, \qquad dy = \frac{1}{2} dx.$$

Luego

$$\int_{-1}^1 e^{x+x^2}\, dx = \int_0^1 e^{(2y-1)+(2y-1)^2} 2\, dy = .$$

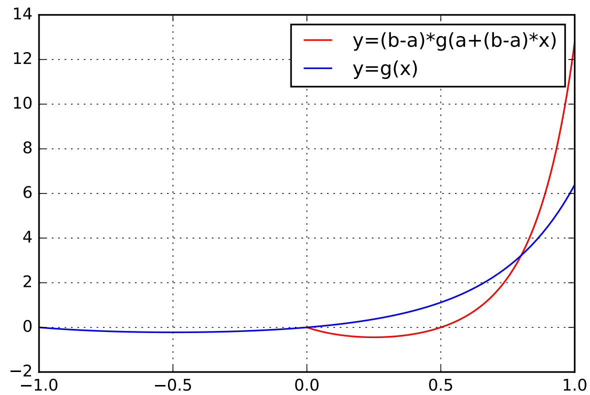

Figura 2: Estimaciones de la integral y gráfico de $g(x) = e^{x+x^2}\,dx$

Una estimación con N simulaciones estará dada por el valor de una expresión:

$$\frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} e^{(2u_i-1)+(2u_i-1)^2},$$

donde $u_1, u_2, \ldots, u_n$ es una realización de las v.a. $U_1, U_2, \ldots U_N$, todas uniformes en $(0, 1)$ e independientes entre sí.

Notar que si $U \sim U(0, 1)$, entonces $2U - 1 \sim U(-1, 1)$.

# simulaciones	valor estimado
1000	3.60200514128
10000	3.59901204683
100000	3.56130047278
1000000	3.59370623674
10000000	3.58717156846

2.3. Integración sobre $(0, \infty)$

En el caso de la estimación de una integral en el intervalo $(0, \infty)$:

$$\theta = \int_0^\infty g(x)\,dx,$$

también se aplica un cambio de variables, transformando biyectivamente el intervalo $(0, \infty)$ en $(0, 1)$. El cambio de variables es el siguiente:

$$y = \frac{1}{x+1}, \qquad\qquad dy = -\frac{1}{(x+1)^2}\,dx = -y^2\,dx.$$

Luego se tiene que:

$$\int_0^{\infty} g(x)\,dx = -\int_1^0 \frac{g(\frac{1}{y}-1)}{y^2}\,dy = \int_0^1 \frac{g(\frac{1}{y}-1)}{y^2}\,dy = \int_0^1 h(y)\,dy,$$

con

$$h(y) = \frac{1}{y^2} g(\frac{1}{y}-1).$$

Ejemplo 2.2. Para estimar la siguiente integral:

$$\int_0^{\infty} \cos(x)\,e^{-x}\,dx$$

se aplica el método de Monte Carlo para la estimación de

$$\int_0^1 \frac{\cos(\frac{1}{x}-1)\,e^{-(\frac{1}{x}-1)}}{x^2}\,dx.$$

$$\theta \sim \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{\cos(\frac{1}{u_i}-1)\,e^{-(\frac{1}{u_i}-1)}}{u_i^2}.$$

3. Estimación de integrales múltiples

El método de Monte Carlo para el cálculo de integrales en una variable no es muy eficiente, comparado con otros métodos numéricos que convergen más rápidamente al valor de la integral. Sin embargo, para la estimación de integrales múltiples este método cobra mayor importancia ya que computacionalmente es menos costoso.

Nuevamente, una integral múltiple de una función en varias variables definida en un hipercubo de lado 1 puede estimarse con el método de Monte Carlo.

Para calcular la cantidad

$$\theta = \int_0^1 \cdots \int_0^1 g(x_1,\ldots,x_l)\,dx_1\ldots dx_l$$

utilizamos el hecho que

$$\theta = E[g(U_1,\ldots,U_l)]$$

con $U_1,\ldots,U_l$ independientes y uniformes en $(0,1)$. Esto es así porque su distribución conjunta está dada por:

$$f(x_1,x_2,\ldots,x_l) = \mathbb{I}_{(0,1)\times(0,1)\times\cdots\times(0,1)}(x_1,x_2,\ldots,x_l),$$

y entonces

$$\theta = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} g(x_1, \dots, x_l)\, f(x_1, \dots, x_l)\, dx_1 \dots dx_l.$$

Si se tienen N muestras independientes de estas l variables,

$$U_1^1, \dots, U_l^1$$

$$U_1^2, \dots, U_l^2$$

$$\vdots$$

$$U_1^N, \dots, U_l^N$$

podemos estimar el valor de θ como

$$\theta \sim \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(U_1^i, \dots, U_l^i)$$

3.1. Estimación del valor de π

Una aplicación de Monte Carlo en su uso para la estimación de integrales múltiples, es el cálculo estimado del valor de π. Recordemos que el área de un círculo de radio r es $\pi \cdot r^2$. Si tomamos $r = 1$, entonces π está dado por el valor de una integral:

$$\pi = \int_{-1}^{1} \mathbb{I}_{\{x^2+y^2<1\}}(x, y) dx dy.$$

Si X e Y son v.a. indendientes, uniformes en $(-1, 1)$, ambas con densidad

$$f_X(x) = f_Y(x) = \frac{1}{2} \cdot \mathbb{I}_{(-1,1)}(x),$$

entonces su densidad conjunta es igual al producto de sus densidades:

$$f(x, y) = f_X(x) \cdot f_Y(y) = \frac{1}{4} \cdot \mathbb{I}_{(-1,1)\times(-1,1)}(x, y).$$

En particular, (X, Y) resulta un vector aleatorio con distribución uniforme en $(-1, 1) \times (-1, 1)$, y tenemos que

$$\pi = \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} \mathbb{I}_{\{x^2+y^2<1\}}(x, y)\, dx\, dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} 4 \cdot \mathbb{I}_{\{x^2+y^2<1\}}(x, y)\, f(x, y)\, dx\, dy.$$

Entonces

$$\frac{\pi}{4} = E[g(X, Y)],$$

donde

$$g(x, y) = I_{\{x^2+y^2<1\}}(x, y).$$

Así, para estimar π podemos generar secuencias de pares (X_i, Y_i), $i \geq 1$, donde X_i e Y_i son variables aleatorias uniformes en $(-1, 1)$, y luego estimar el valor de π como:

$$4 \cdot \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \mathbb{I}_{x^2+y^2\leq 1}(x_i, y_i).$$

En otras palabras, π será estimado por la proporción de pares (X, Y) que caigan dentro del círculo de radio 1, multiplicado por 4.

Notemos que si $U_1, U_2 \sim U(0, 1)$, entonces

$$X = 2U_1 - 1 \qquad Y = 2U_2 - 1$$

verifican $X,\ Y \sim U(-1, 1)$.

```
def valorPi(Nsim):
    enCirculo=0
    for i in range(Nsim):
        u=2*random()-1
        v=2*random()-1
        if u**2+v**2<=1:
            enCirculo+=1
    return 4*enCirculo/Nsim

valorPi(Nsim)
```

# Simulaciones	Valor estimado
1000	3.16
10000	3.1216
100000	3.14292
1000000	3.141056
10000000	3.1420524

Cuadro 2: Estimaciones de π