

UNIVERSIDAD DE
GUANAJUATO



UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

Métodos Numéricos (MAT-251)

Métodos de Integración Monte Carlo

Autor:

Roberto Vásquez Martínez

Profesor:

Dr. Joaquín Peña Acevedo

Noviembre 2019

ÍNDICE GENERAL

Índice general	2
1. Introducción	1
2. Fundamentos Teóricos	2
2.1. El estimador Monte Carlo	2
2.2. Valores Esperados y convergencia	3
3. Integración Monte Carlo	5
3.1. Error en la estimación	5
3.2. Métodos de reducción de varianza	6
3.2.1. Muestreo por importancia	6
3.2.2. Muestreo Estratificado	8
4. PLANE Monte Carlo vs Algoritmo VEGAS	10
5. Conclusiones	12
Bibliografía	16

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

Los métodos Monte Carlo son técnicas numéricas las cuales se basan en muestreos aleatorios para aproximar sus resultados. En este reporte discutiremos como se pueden aplicar estas técnicas para la estimación numérica de integrales definidas.

El término “Monte Carlo” se origina en *Los Alamos National Laboratory* a finales de la década de 1940's durante el desarrollo de la bomba atómica. No es de sorprender que el desarrollo de este tipo de métodos también se corresponden con la invención de los primeros dispositivos electrónicos los cuales aceleraron el cálculo de diferentes tareas de índole numérica.

A lo largo de este breve reporte también explicaremos sobre la justificación teórica de por que estos métodos funcionan enunciando algunos de los resultados de Probabilidad y Estadística en las que se basan. Asimismo evaluaremos las ventajas y desventajas de estos métodos para resolver integrales y esto la haremos desde el punto de vista probabilístico y comparandolo con otros métodos de esta índole.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1. El estimador Monte Carlo

El estimador básico. La integración Monte Carlo sea basa en usar una muestra aleatoria de una función para apartir de esta estimar el valor de su integral sobre una región.

Supongamos que queremos integrar la función de una variable $f(x)$ sobre el intervalo $[a, b]$:

$$F = \int_a^b f(x)dx. \quad (2.1)$$

Podemos aproximar esta integral a través del promedio de muestras de la función f generadas através de puntos en $[a, b]$ con distribución uniforme, formalizaremos un poco esto a continuación.

Sea $\{X_n\} \subset [a, b]$ una colección de variables aleatorias independientes y distribuidas de manera uniforme en el intervalo $[a, b]$, el estimador F_n construido a partir de estas variables aleatorias lo definimos de la siguiente forma

$$F_n = (b - a) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) \quad (2.2)$$

Notemos que las variables aleatorias X_i las podemos apartir de variables aleatorias ψ_i en $(0, 1)$ de la siguiente forma

$$X_i = a + \psi_i(b - a).$$

Observemos que en esencia F_n es una variable aleatoria pues es función de variables aleatorias, afirmamos F_n converge a F , por lo que hemos generado un

método iterativo basado en la generación de variables aleatorias con distribución uniforme para calcular el valor de la integral en (2.1).

2.2. Valores Esperados y convergencia

Notemos que el valor esperado de F_n es en efecto F . De la *Ley Fuerte de los grades números* se tiene que

$$P[\lim_{n \rightarrow \infty} F_n = F] = 1,$$

por lo que en el límite podemos garantizar que tenemos el resultado correcto.

En la práctica estamos interesados en que tan rápido converge este estimador F_n a F obteniendo una solución lo suficientemente precisa. Esto lo podemos analizar determinando la tasa de convergencia de estos estimadores, podemos probar que la desviación estándar de estos estimadores es proporcional a

$$\sigma[F_n] \propto \frac{1}{\sqrt{n}}. \quad (2.3)$$

Desafortunadamente, esto significa que debemos cuadruplicar la muestra para reducir el error a la mitad.

De la observación anterior podemos ver que existen mejores técnicas de integración numérica para funciones de una variable que convergen mucho más rápido, sin embargo estas técnicas sufren cuando tratamos de generalizarlas para calcular integrales de varias variables, donde la convergencia se vuelve exponencialmente mala cuando van creciendo las dimensiones. El estimador de Monte Carlo anterior se puede generalizar fácilmente a integrales multidimensionales y en contraste a las reglas de cuadratura, la tasa de convergencia de

los métodos Monte Carlo es independiente de la dimensión de la región donde estamos integrando. Esto hace a las técnicas de integración Monte Carlo una técnica muy práctica para el cálculo de integrales en altas dimensiones.

CAPÍTULO 3

INTEGRACIÓN MONTE CARLO

3.1. Error en la estimación

En la sección anterior hemos considerado el cálculo de la integral generando una muestra de variables aleatorias con distribución uniforme.

Esta idea la podemos generalizar de la siguiente forma tratando de calcular la integral

$$G = \int_{\Omega} g(x)f(x)dx, \text{ con } f(x) \geq 0, \int_{\Omega} f(x)dx = 1, \quad (3.1)$$

generando n variables aleatorias X_1, \dots, X_n con la distribución con densidad f y considerando el estimador

$$G_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(X_i). \quad (3.2)$$

De la ley de los Grandes Números se sigue que

$$P(\lim_{n \rightarrow \infty} G_n - G) = 1,$$

Si $\sigma^2 = \text{Var}(g(X))$ entonces por el Teorema Central del Límite para un nivel de confianza de $\delta = N\sigma$ se tiene que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left(-N \frac{\sigma}{\sqrt{n}} < G_n - G < N \frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right) = \int_{-N}^N \frac{e^{-\frac{1}{2}t^2}}{\sqrt{2\pi}}$$

Tomando una desviación estándar, es decir, $N = 1$ tenemos que el error en la estimación es

$$|G_n - G| \approx \frac{\sigma}{\sqrt{n}}.$$

A pesar de que la aproximación de este estimador mejora considerando n suficientemente grande el factor $\frac{1}{\sqrt{n}}$ no puede ser del todo satisfactorio, podemos

realizar mejoras a este método logrando una reducción de el factor σ^2 , es decir, una *reducción de varianza*.

3.2. Métodos de reducción de varianza

3.2.1. Muestreo por importancia

Consideremos el cambio de variable

$$\int f dV = \int \frac{f}{g} g dV = \int h g dV,$$

donde $h = \frac{f}{g}$. Notemos que podemos integrar f aplicando el método usual Monte Carlo discutido anteriormente integrando la función h considerando una muestra obtenida a partir de la densidad g , es decir, lo que sugerimos es en lugar de generar una colección de variables aleatorias con distribución uniforme es generar estas variables aleatorias a partir de una densidad g más apropiada.

Por lo tanto, podemos generalizar el método usual Monte Carlo considerando una distribución que no es la uniforme. Supongamos $\{x_i\}_{i=1}^N$ es una sucesión de variables aleatorias en la región V distribuidas con densidad p que satisface

$$\int p dV = 1. \quad (3.3)$$

Luego, se cumple que el estimador general respecto a la muestra $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ viene dado por

$$\int f dV = \int \frac{f}{p} p dV \approx S_{f/p} \pm \frac{\sigma_{f/p}}{\sqrt{N}}, \quad (3.4)$$

donde

$$S_{f/p} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{p(x_i)},$$

y

$$\sigma_{f/p} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{f(x_i)}{p(x_i)} \right)^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{p(x_i)} \right)^2}$$

¿Cuál es la elección apropiada para la densidad p ?

Los terminos en la expresión anterior son en esencia estimadores de algun integrando en el Método Monte Carlo, por lo que

$$\sigma_{f/p}^2 \approx \int \frac{f^2}{p^2} p dV - \left[\int \frac{f}{p} p dV \right]^2 = \int \frac{f^2}{p} dV - \left[\int f dV \right]^2$$

Luego queremos hallar la p tal que minimiza la varianza anterior, considerando el multiplicador de Lagrange con la restricción (3.3) se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial p} \left[\int \frac{f^2}{p} dV - \left[\int f dV \right]^2 - \lambda \int p dV \right] = 0$$

Como el término central no depende de p tenemos que

$$-\frac{f^2}{p^2} + \lambda = 0,$$

por lo que la densidad óptima p es

$$p = \frac{|f|}{\sqrt{\lambda}} = \frac{|f|}{\int |f| dV}$$

De lo anterior tenemos que la densidad $p \propto |f|$, por lo que para la implementación numérica se hace esta consideración para poder aproximar el p ideal, pues para obtener el p óptimo necesitamos conocer la integral que queremos calcular lo que resulta ridículo.

3.2.2. Muestreo Estratificado

En primer lugar, consideremos la siguiente notación

$$I(f) = \frac{1}{V} \int f dV \quad \text{y} \quad \langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

Notemos que la varianza del estimador esta relacionada con la de f de la manera siguiente

$$\text{Var}(\langle f \rangle) = \frac{\text{Var}(f)}{N} \quad (3.5)$$

Además si mostramos $N/2$ puntos en una región a y los restantes en la región b se tiene que el estimador de la integral es el siguiente

$$\langle f \rangle' = \frac{1}{2}[\langle f \rangle_a + \langle f \rangle_b]$$

Por lo cual

$$\begin{aligned} \text{Var}(\langle f \rangle') &= \frac{1}{4} \left[\frac{\text{Var}_a(f)}{N/2} + \frac{\text{Var}_b(f)}{N/2} \right] \\ &= \frac{1}{2N} [\text{Var}_a(f) + \text{Var}_b(f)] \end{aligned}$$

Por otro lado, notemos que

$$\text{Var}(f) = \frac{1}{2}[\text{Var}_a(f) + \text{Var}_b(f)] + \frac{1}{4}(I(f)_a - I(f)_b)^2,$$

donde $I(f)_a$ representa el valor de la integral en la región a y $I(f)_b$ en la región b .

De las dos últimas igualdades y considerando (3.5) se tiene que al hacer esta subdivisión la varianza del estimador es menor o igual a la varianza original.

Ahora supongamos que dividimos la región de integración en dos regiones a y b , en las que mostramos N_a y N_b puntos, respectivamente, en donde la cantidad de puntos muestrados en cada región no necesariamente es la misma.

Consideremos el siguiente estimador para la integral

$$\langle f \rangle' = \frac{1}{2}[\langle f \rangle_a + \langle f \rangle_b]$$

Luego la varianza de este estimador viene dada por

$$\text{Var}(\langle f \rangle') = \frac{1}{4} \left[\frac{\text{Var}_a(f)}{N_a} + \frac{\text{Var}_b(f)}{N - N_a} \right].$$

Si consideramos σ_a y σ_b las desviaciones en esas regiones se tiene que la varianza anterior se minimiza cuando

$$\frac{N_a}{N} = \frac{\sigma_a}{\sigma_a + \sigma_b}.$$

Si N_a satisface la ecuación anterior entonces tenemos que

$$\text{Var}(\langle f \rangle') = \frac{(\sigma_a + \sigma_b)^2}{4N}.$$

La expresión resulta ser igual a (3.5) cuando $\text{Var}(f) = \text{Var}_a(f) = \text{Var}_b(f)$, en otro caso hemos reducido la varianza del estimador

CAPÍTULO 4

PLANE MONTE CARLO VS ALGORITMO VEGAS

En este proyecto además de proponer una implementación del Método Monte Carlo usual para integración en varias variables se propone también una implementación del Algoritmo VEGAS para integración de una variable.

El algoritmo VEGAS fue propuesto por Peter Lepage en 1976. Este algoritmo puede ser generalizado a varias variables aunque en este caso implementamos la versión para una variable.

VEGAS se combina muestreo por importancia y muestreo estratificado para así reducir notablemente la varianza.

La versión de VEGAS que implementamos lo que hace para calcular $\int_a^b f(x)dx$ es primer lugar es dividir en K intervalos la región de integración $[a, b]$ y en cada región calculamos el estimador de la integral con T elementos, esta es la parte de muestreo estratificado.

Después definimos en base a estos estimadores una función de probabilidades proporcional a $|f(x)|$ y en base a esta distribución calculamos el valor de la integral a través de muestro por importancia como vimos anteriormente.

En conclusión VEGAS combina estos dos métodos de reducción de varianza para concentrar la estimación de la integral en las zonas en los que hay mayor aporte para así mejorar la estimación final.

El código de la implementación de este programa se encuentra en `MonteCarloVEGAS.cpp`.

Por otro lado, también hemos implementado el método PLANE Monte Carlo que es el método Monte Carlo usual que ya hemos discutido anteriormente. Este método lo que hace es mostrar de manera uniforme puntos en la región de integración para estimar mediante (3.2) y también calcular el error de estimación que es proporcional como ya vimos a $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$.

El código donde se encuentra la implementación de este método se encuentra en `MonteCarlo.cpp`.

En lo siguiente, nos enfocaremos en mostrar como probamos estos algoritmos para identificar sus ventajas y desventajas así como dar las conclusiones finales.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

En primer lugar, probamos el algoritmo Monte Carlo usual para calcular al volumen de la esfera unitario y el toro de radio mayor 2 y radio menor 1.

El volumen de la esfera unitaria es: 4.19437

El error es: 0.00399527

El volumen del toro de radio mayor 2 y radio menor 1 es: 39.4824

El error es: 0.0834826.

Denotemos por $|S^2|$ y $|\mathbb{T}^2|$ al volumen de la esfera unitaria y el toro.

Notemos que

$$|S^2| = \frac{4\pi}{3} \approx 4.1887902047863905,$$

y

$$|\mathbb{T}^2| = 4\pi^2 \approx 39.47841760435743.$$

Podemos ver que los resultados que obtuvimos anteriores son consistentes, sin embargo para obtener un error de $O(10^{-3})$ tuvimos que mostrar 10^6 puntos, lo que hace que este método necesite de una cantidad considerable de muestreos para obtener resultados aceptables.

Ahora compararemos el método usual Monte Carlo con el algoritmo VEGAS descrito anteriormente.

Para ello integraremos las siguiente funciones

$$f_1(x) = \sqrt{1 - x^2},$$

$$f_2(x) = \frac{1}{x},$$

$$f_3(x) = \tan x,$$

en los intervalos $[-1, 1]$, $[1, e]$ y $[0, \frac{\pi}{4}]$, respectivamente.

Sabemos que los valores reales en cada caso son

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 f_1(x) &= \sqrt{1 - x^2} = \frac{\pi}{2} \approx 1.57079, \\ \int_1^e f_2(x) &= 1, \\ \int_0^{\pi/4} f_3(x) &= \frac{\log(2)}{2} \approx 0.346573,\end{aligned}$$

Los resultados que obtuvimos a partir del método PLANE Monte Carlo fueron

```
El valor de pi/2 es: 1.56965
El error en la estimacion es: 0.00115055
El valor de ln(e) es: 1.00264
El error en la estimacion es: 0.00263956
El valor de ln(2)/2 es: 0.346916
El error en la estimacion fue de: 0.000342268
```

Por otra parte los resultados que obtuvimos a partir de nuestra implementación del algoritmo VEGAS fueron

```
El valor de pi/2: 1.5708
El error en la estimación fue:1.0673e-06
```

El valor de $\ln(e)$ es: 0.99999

El error en la estimación fue: 5.2191e-06

El valor de $\ln(2)/2$ es: 0.34658

El error en la estimación fue: 5.291e-06

Cabe mencionar que se redujo en magnitud el número de estimaciones que se hicieron para calcular la integral en PLANE Monte Carlo usamos 10^6 estimaciones mientras que en VEGAS utilizamos 10^5 y la estimación mejoró notablemente.

En conclusión las técnicas de reducción de varianza mejoran considerablemente la estimación del Método Monte Carlo y reducen el número de evaluaciones. Aunque existen mejores método de integración para funciones de una variable, como ya vimos en el capítulo 3 las técnicas tipo Monte Carlo se pueden generalizar para hacer integración en más variables y el error sólo depende de la varianza del estimador y no de la dimensión, mientras que en otras técnicas como las reglas de cuadratura o el método de Romberg si se pretende generalizar estas técnicas a más variables el error crece de manera exponencial respecto a la dimensión de el integrando, lo que hace a las técnicas Monte Carlo una opción práctica para integración multivariable.

Por otro lado, la precisión de las técnicas Monte Carlo está sujeto a la varianza del estimador, por lo que la precisión de la estimación depende mucho de las características de la función, en algunos casos las estimación puede ser bastante buena cuando las técnicas de reducción de varianza tiene éxito mientras que en otros casos el resultado puede llegar a ser el mismo que el que se obtiene con PLANE Monte Carlo, que como ya vimos no suele ser una estimación aceptable.

Por último, cabe resaltar que el método Monte Carlo hace la suposición implícita de que la esperanza de $\mathbb{E}[f(X)]$ existe, sin embargo puede suceder que no exista este primer momento pero si el valor de la integral, por lo que en este caso el Método Monte Carlo resulta ser inútil.

Concluimos así que el método Monte Carlo tiene sus puntos fuertes en que es un método en el que el error no depende de la dimensión del integrando y puede ser así generalizado de manera práctica, sin embargo es necesario una cantidad considerable de muestreos para obtener un resultado aceptable y su precisión depende en gran medida de la distribución que estemos utilizando así como de las características del integrando.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] G.P. Lepage. "New Algorithm for Adaptive Multidimensional Integration". *Journal of Computational Physics*, vol.27:pp 192–203, 1978.
- [2] Art B. Owen. *Monte Carlo theory, methods and examples*. 2013.
- [3] Teukolsky S. Press W. *Numerical Recipes in C*. Cambridge Press, 2007.