

Monte Carlo Estándar

Definición, Intervalo de Confianza, Error Relativo

Leslie Murray

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura
Universidad Nacional de Rosario
Rosario, Argentina

Mayo, 2024

- Sea X una v.a. en el espacio Ω
 - con fdp $f_X(x)$, $\forall x \in \Omega$, si X es continua,
 - con densidad de masa $\mathbb{P}\{X = x_i\} = p_i$, $\forall x_i \in \Omega$, si X es discreta.
- Sea $\mu = \mathbb{E}\{X\}$.
- Sea $\sigma^2 = \mathbb{V}\{X\} = \mathbb{E}\{(X - \mu)^2\} = \mathbb{E}\{X^2\} - \mu^2$
- Sea $\{X^{(i)}\}_{i=1}^n$ una sucesión de lecturas u observaciones independientes de X .
- Cada $X^{(i)}$ es una v.a. aleatoria en si misma llamada *copia* o *replicación* de X .
- $\{X^{(i)}\}_{i=1}^n$ es, por lo tanto, una sucesión de v.a. *i.i.d.*
- Llamamos $S_n = \sum_{i=1}^n X^{(i)}$.
- De acuerdo a la Ley Débil de los Grandes Números:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left\{ \left| \frac{S_n}{n} - \mu \right| < \varepsilon \right\} = 1 \quad \forall \varepsilon > 0$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left\{ \left| \frac{S_n}{n} - \mu \right| < \varepsilon \right\} = 1 \quad \forall \varepsilon > 0$$

- Si n es “suficientemente grande”, se puede aceptar que:

$$\frac{S_n}{n} \approx \mu$$

- ¿Qué tan grande tiene que ser n para que $\frac{S_n}{n}$ esté cerca de μ ?
- ¿Cuál sería un indicador de cercanía (distancia) entre $\frac{S_n}{n}$ y μ ?
- ¿Cuanto debe valer n para que se garantice una distancia entre $\frac{S_n}{n}$ y μ ?
- O, a la inversa, dado un valor de n , ¿a qué distancia quedan $\frac{S_n}{n}$ y μ ?

Definición. $\hat{\mu} = \frac{S_n}{n}$ es el *estimador estándar* (o *crudo*) de μ .

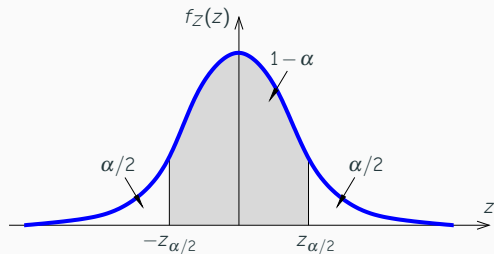
□

- $\hat{\mu}$ es una v.a. en si misma.
- $\mathbb{E}\{\hat{\mu}\} = \mathbb{E}\left\{\frac{S_n}{n}\right\} = \frac{1}{n}\mathbb{E}\{S_n\} = \frac{1}{n}n\mu = \mu \leftarrow \hat{\mu}$ es un estimador sin sesgo de μ
- $\mathbb{V}\{\hat{\mu}\} = \mathbb{V}\left\{\frac{S_n}{n}\right\} = \frac{1}{n^2}\mathbb{V}\{S_n\} = \frac{1}{n^2}n\mathbb{V}\{X\} = \frac{\sigma^2}{n} \leftarrow \hat{\mu}$ es tanto menos disperso cuanto menos lo es X y cuanto mayor es n .

De acuerdo al Teorema Central del Límite (en cualquiera de las siguientes dos formas equivalentes):

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left\{ \frac{S_n - n\mu}{\sigma \sqrt{n}} < z \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-y^2/2} dy$$
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left\{ \frac{\hat{\mu} - \mu}{\sigma} \sqrt{n} < z \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-y^2/2} dy$$

Esto significa que $\frac{\hat{\mu} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim N(0, 1)$, o lo que es lo mismo, $\hat{\mu} \sim N(\mu, \sigma^2/n)$.



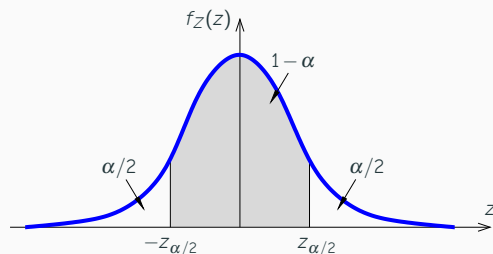
$$z = \frac{\hat{\mu} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim N(0,1)$$

$$\mathbb{P}\left\{-z_{\alpha/2} \leq z \leq z_{\alpha/2}\right\} = 1 - \alpha$$

$$\mathbb{P}\left\{-z_{\alpha/2} \leq \frac{\hat{\mu} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \leq z_{\alpha/2}\right\} = 1 - \alpha$$

$$\mathbb{P}\left\{-z_{\alpha/2} \sigma/\sqrt{n} \leq \hat{\mu} - \mu \leq z_{\alpha/2} \sigma/\sqrt{n}\right\} = 1 - \alpha$$

$$\mathbb{P}\left\{\hat{\mu} - z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \hat{\mu} + z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right\} = 1 - \alpha$$



$$z = \frac{\hat{\mu} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim N(0,1)$$

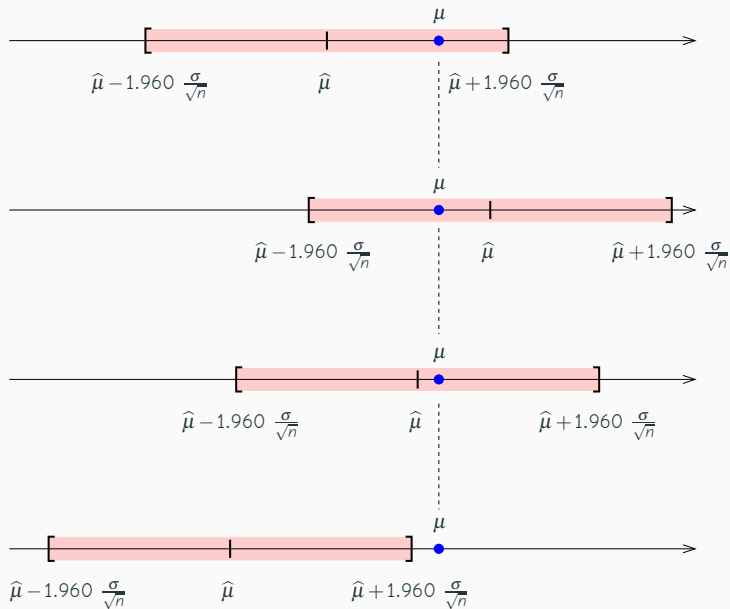
$$\mathbb{P} \left\{ \hat{\mu} - 2.576 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \hat{\mu} + 2.576 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right\} = 99.00\%$$

$$\mathbb{P} \left\{ \hat{\mu} - 1.960 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \hat{\mu} + 1.960 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right\} = 95.00\%$$

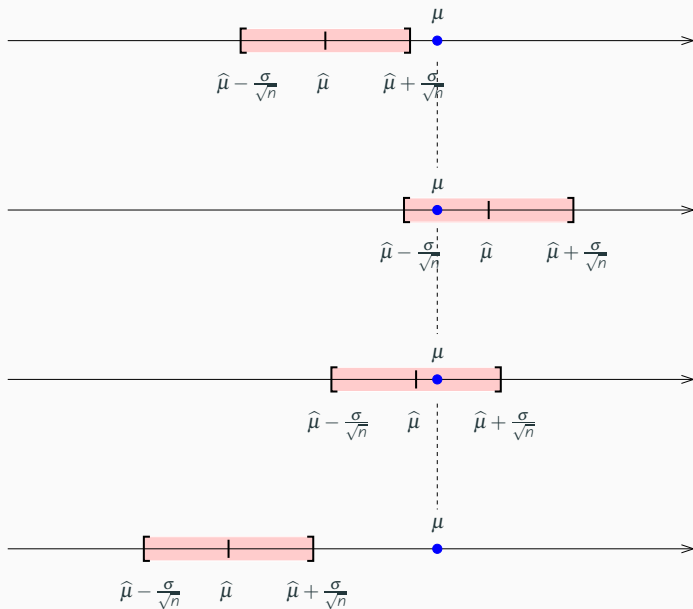
$$\mathbb{P} \left\{ \hat{\mu} - 1.645 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \hat{\mu} + 1.645 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right\} = 90.00\%$$

$$\mathbb{P} \left\{ \hat{\mu} - 1.000 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \hat{\mu} + 1.000 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right\} = 68.26\%$$

Ejemplo – Intervalo de Confianza 95%



Ejemplo – Intervalo de Confianza 68.26%



Si se quiere estimar la esperanza μ de una variable X con distribución conocida:

- 1 Sortear n valores, $X^{(i)}$, $i = 1, \dots, n$, de la distribución de X .
- 2 Calcular la suma $S_n = \sum_{i=1}^n X^{(i)}$.
- 3 Determinar el valor del estimador $\hat{\mu} = \frac{S_n}{n}$

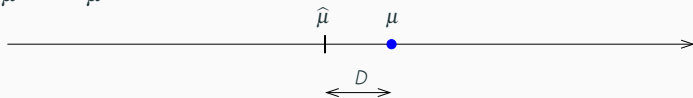
Luego es posible asegurar, por ejemplo, que:

- μ está en el intervalo $\left[\hat{\mu} - 2.576 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \hat{\mu} + 2.576 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right]$ con probabilidad 99.00%
- μ está en el intervalo $\left[\hat{\mu} - 1.960 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \hat{\mu} + 1.960 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right]$ con probabilidad 95.00%
- μ está en el intervalo $\left[\hat{\mu} - 1.645 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \hat{\mu} + 1.645 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right]$ con probabilidad 90.00%
- μ está en el intervalo $\left[\hat{\mu} - 1.000 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \hat{\mu} + 1.000 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right]$ con probabilidad 68.26%

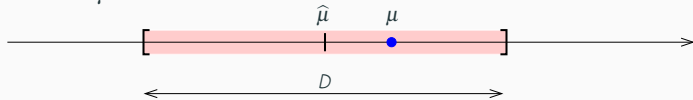
El ancho total de cualquier Intervalo de Confianza es proporcional a $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$

Intervalo de Confianza – Error Relativo

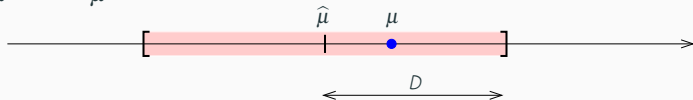
- $ER_c = \frac{D}{\mu} = \frac{|\mu - \hat{\mu}|}{\mu}$ ← Error Relativo clásico



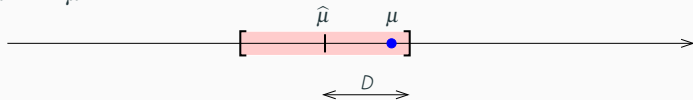
- $ER = \frac{D}{\mu} = \frac{2z_{\alpha/2}\sigma/\sqrt{n}}{\mu}$ ← Intervalo de Confianza Relativo, Nivel $1 - \alpha\%$



- $ER = \frac{D}{\mu} = \frac{z_{\alpha/2}\sigma/\sqrt{n}}{\mu}$ ← Medio Intervalo de Confianza Relativo, Nivel $1 - \alpha\%$



- $ER = \frac{D}{\mu} = \frac{\sigma/\sqrt{n}}{\mu}$ ← Medio Intervalo de Confianza Relativo, Nivel 68.26%



La relación entre medio ancho del intervalo de confianza de nivel 68.26% y el valor estimado, es una medida que expresa una forma de Error Relativo:

$$ER = \frac{\sigma/\sqrt{n}}{\mu} = \frac{\sqrt{V\{\hat{\mu}\}}}{E\{\hat{\mu}\}} = \frac{\sqrt{V\{X\}}}{\sqrt{n} E\{X\}}$$

Tenemos entonces dos formas de indicar la calidad del estimador $\hat{\mu}$:

- μ está dentro del intervalo $[I_1, I_2]$ con probabilidad $1 - \alpha$,
 - $I_1 = \hat{\mu} - z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$
 - $I_2 = \hat{\mu} + z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$
- El Error Relativo del estimador $\hat{\mu}$ es del orden de ER (o de $100 \times ER\%$),
 - $ER = \frac{\sigma/\sqrt{n}}{\mu}$

La relación entre medio ancho del intervalo de confianza de nivel 68.26% y el valor estimado, es una medida que expresa una forma de Error Relativo:

$$ER = \frac{\sigma/\sqrt{n}}{\mu} = \frac{\sqrt{V\{\hat{\mu}\}}}{E\{\hat{\mu}\}} = \frac{\sqrt{V\{X\}}}{\sqrt{n} E\{X\}}$$

Tenemos entonces dos formas de indicar la calidad del estimador $\hat{\mu}$:

- μ está dentro del intervalo $[I_1, I_2]$ con probabilidad $1 - \alpha$,
 - $I_1 = \hat{\mu} - z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$
 - $I_2 = \hat{\mu} + z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$
- El Error Relativo del estimador $\hat{\mu}$ es del orden de ER (o de $100 \times ER\%$),
 - $ER = \frac{\sigma/\sqrt{n}}{\mu}$ ← VAMOS A TRABAJAR CON ESTE ERROR RELATIVO

En general la simulación tiene por objetivo estimar los parámetros de una v.a. X cuya distribución se desconoce \rightarrow **será necesario reemplazar σ y μ por estimadores.**

Reemplazando σ^2 por s^2 y μ por $\hat{\mu}$, resulta:

$$\text{ER} \approx \frac{s/\sqrt{n}}{\hat{\mu}}$$

donde,

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X^{(i)} \quad s^2 = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n (X^{(i)} - \hat{\mu})^2$$

son, respectivamente, estimadores sin sesgo de μ y de σ^2 .

Trabajando un poco la expresión de s^2 se llega a la siguiente forma equivalente:

$$s^2 = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n (X^{(i)})^2 - \frac{n}{(n-1)} \hat{\mu}^2$$

útil para evitar guardar todos los valores $\{X^{(i)}\}_{i=1}^n$ hasta el final de la simulación.

Supóngase que X es una v.a. de Bernoulli:

$$X = \begin{cases} 1 & \text{con probabilidad } p \\ 0 & \text{con probabilidad } q = 1 - p \end{cases}$$

- $\mu = \mathbb{E}\{X\} = 1 \times p + 0 \times q = p$

El estimador estándar sigue siendo $\hat{\mu} = \frac{S_n}{n}$, donde $S_n = \sum_{i=1}^n X^{(i)}$, siendo cada $X^{(i)}$, 0 o 1.

- $\sigma^2 = \mathbb{V}\{X\} = \mathbb{E}\{X^2\} - \mathbb{E}\{X\}^2 = p - p^2 = p(1 - p)$

Es simple probar que

$$\frac{S_n/n(1 - S_n/n)}{n - 1}$$

es un estimador sin sesgo de $\frac{\sigma^2}{n}$, es decir, un estimador sin sesgo de la varianza de $\hat{\mu}$.

Estimación tipo Monte Carlo estándar de la media, μ , de una v.a. X c/distribución f_X .

Entradas:

n : el número de replicaciones

$G(f_X)$: un generador de números aleatorios con distribución f_X

Salidas:

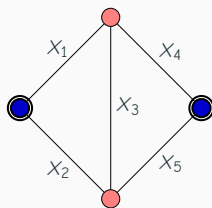
M : media, $\hat{\mu}$

V : varianza, s^2/n

Algoritmo:

1. $M = 0$
2. $V = 0$
3. **hacer n veces**
4. **sortear X de $G(f_X)$**
5. $M \leftarrow M + X$
6. $V \leftarrow V + X^2$
7. $M \leftarrow M/n$
8. $V \leftarrow V/n(n-1) - M^2/(n-1)$

El error relativo de la estimación es: $ER = \frac{\sqrt{V}}{M}$.



- El estado de la red es el vector de v.a. de Bernoulli, $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3, X_4, X_5)$.
- La función de masa de probabilidad de \mathbf{X} es:

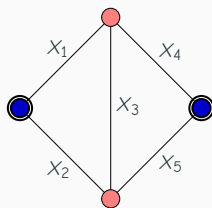
$$\begin{cases} \mathbb{P}\{X_i = 1\} = r_i & \text{confiabilidad del } i\text{-ésimo enlace,} \\ \mathbb{P}\{X_i = 0\} = q_i & \text{anti-confiabilidad del } i\text{-ésimo enlace,} \end{cases} \quad i = 1, \dots, 5$$

- La *función de estructura* es:

$$\phi(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{X} \text{ garantiza la conexión entre los nodos terminales,} \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

- La confiabilidad de la red es:

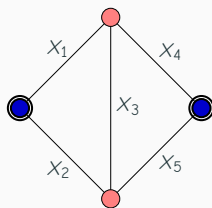
$$\zeta = \mathbb{P}\{\phi(\mathbf{X}) = 1\} = \mathbb{E}\{\phi(\mathbf{X})\}$$



- El estimador estándar de $\zeta = \mathbb{E}\{\phi(\mathbf{X})\}$ es $\rightarrow \hat{\zeta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi(\mathbf{X})^{(i)}$
- Las replicaciones tienen la siguiente forma:

$$\phi(\mathbf{X})^{(i)} = \phi(\mathbf{X}^{(i)}) = \phi(X_1^{(i)}, X_2^{(i)}, X_3^{(i)}, X_4^{(i)}, X_5^{(i)}), \quad i = 1, \dots, n$$

- Se sortea un valor valor $\mathbf{X}^{(i)}$: un juego de valores 1 o 0 para cada enlace.
- Se eliminan del grafo los enlaces para los que resulte un valor 0.
- Sobre el grafo resultante se aplica un algoritmo, por ejemplo DFS (*Depth First Search*), para determinar si $\phi(\mathbf{X})^{(i)} = 1$, o $\phi(\mathbf{X})^{(i)} = 0$.



- El estado de la red es el vector de v.a. de Bernoulli, $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3, X_4, X_5)$.
- La función de masa de probabilidad de \mathbf{X} es:

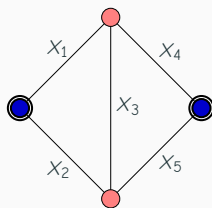
$$\begin{cases} \mathbb{P}\{X_i = 1\} = r_i & \text{confiabilidad del } i\text{-ésimo enlace,} \\ \mathbb{P}\{X_i = 0\} = q_i & \text{anti-confiabilidad del } i\text{-ésimo enlace,} \end{cases} \quad i = 1, \dots, 5$$

- La *función de estructura* es:

$$\phi(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{X} \text{ garantiza la conexión entre los nodos terminales,} \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

- La anti-confiabilidad de la red es:

$$1 - \zeta = 1 - \mathbb{P}\{\phi(\mathbf{X}) = 1\} = 1 - \mathbb{E}\{\phi(\mathbf{X})\}$$



- El estimador estándar de $1 - \zeta = 1 - \mathbb{E}\{\phi(\mathbf{X})\}$ es $\rightarrow 1 - \hat{\zeta} = 1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi(\mathbf{X})^{(i)}$
- Las replicaciones tienen la siguiente forma:

$$\phi(\mathbf{X})^{(i)} = \phi(\mathbf{X}^{(i)}) = \phi(X_1^{(i)}, X_2^{(i)}, X_3^{(i)}, X_4^{(i)}, X_5^{(i)}), \quad i = 1, \dots, n$$

- Se sortea un valor valor $\mathbf{X}^{(i)}$: un juego de valores 1 o 0 para cada enlace.
- Se eliminan del grafo los enlaces para los que resulte un valor 0.
- Sobre el grafo resultante se aplica un algoritmo, por ejemplo DFS (*Depth First Search*), para determinar si $\phi(\mathbf{X})^{(i)} = 1$, o $\phi(\mathbf{X})^{(i)} = 0$.

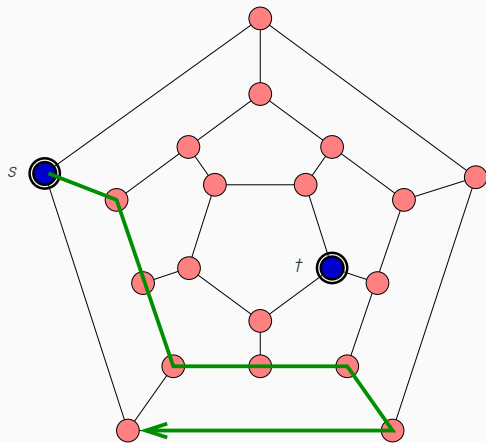
MODELO: estático de red.

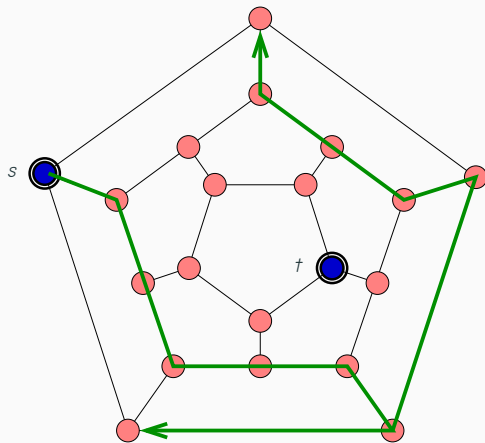
OBJETIVO: determinar si existe o no conexión entre dos nodos s y t , dada la topología del grafo.

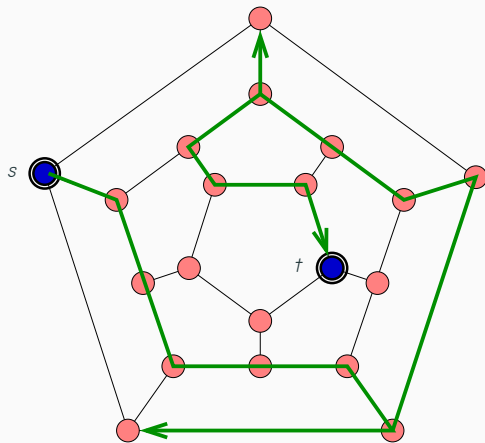
MÉTODO:

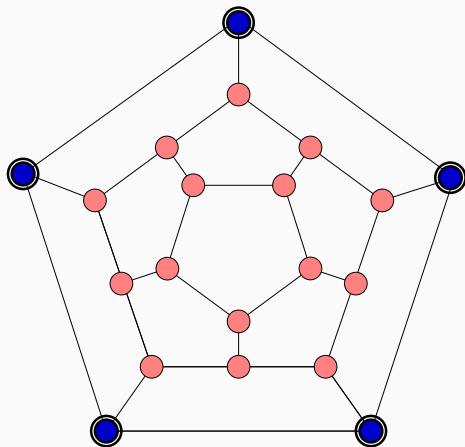
- 1 Arrancar desde s y avanzar por algún camino, visitando los nodos no visitados del mismo, hasta llegar a algún nodo que no tenga vecinos para visitar.
- 2 Volver hacia atrás (*back-track*) por el camino recorrido hasta algún nodo con vecinos para visitar y avanzar por un nuevo camino hasta algún nodo que no tenga vecinos para visitar.
- 3 Repetir el proceso hasta visitar t , en cuyo caso concluir que s y t están conectados y terminar, o hasta que ya no queden nodos con vecinos por visitar (no habiendo sido visitado t) en cuyo caso concluir que s y t no están conectados y terminar.

Algoritmo de Búsqueda en Profundidad (DFS) – Ejemplo



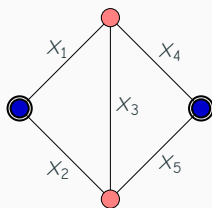






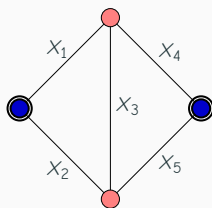
Cada ejecución del DFS arrancará desde algún nodo terminal e intentará “tocar” todos los demás, para cada configuración sorteada de la red.

EJEMPLO:



$$r_i = r, i = 1, \dots, 5$$

n	r	$1 - \zeta$	$1 - \hat{\zeta}$	$\mathbb{V}\{1 - \hat{\zeta}\}$	ER
1E+08	0.9	2.1520E-02	2.1514E-02	2.11E-10	0.07%
1E+08	0.99	2.0195E-04	2.0214E-04	2.02E-12	0.70%
1E+08	0.999	2.0020E-06	2.0200E-06	2.00E-14	7.07%
1E+08	0.9999	2.0002E-08	3.0000E-08	2.00E-16	70.71%
1E+08	0.99999	2.0000E-10	—	2.00E-18	707.10%



$$r_i = r, i = 1, \dots, 5$$

n	r	$1 - \zeta$	$1 - \hat{\zeta}$	$\mathbb{V}\{1 - \hat{\zeta}\}$	$I_1(99\%)$	$I_2(99\%)$
1E+08	0.9	2.1520E-02	2.1514E-02	2.11E-10	2.1503026E-02	2.1503034E-02
1E+08	0.99	2.0195E-04	2.0214E-04	2.02E-12	2.0095963E-04	2.0096037E-04
1E+08	0.999	2.0020E-06	2.0200E-06	2.00E-14	2.0399636E-06	2.0400364E-06
1E+08	0.9999	2.0002E-08	3.0000E-08	2.00E-16	1.9996357E-08	2.0003643E-08
1E+08	0.99999	2.0000E-10	—	2.00E-18	—	—

□

Confiabilidad $\hat{\zeta}$ vs. Anti-confiabilidad $1 - \hat{\zeta}$



- La confiabilidad de una red, ζ , es la probabilidad de que la misma cumpla con un objetivo (satisfaga un criterio de conectividad).
- La anti-confiabilidad, $1 - \zeta$, es el complemento de esa probabilidad, en definitiva la probabilidad de falla de la red.
- Si la red es altamente confiable, $\zeta \approx 1$ y, consecuentemente, $1 - \zeta \approx 0$.

Si la red es de gran tamaño \rightarrow simulación en lugar de cálculo exacto,
si además es altamente confiable \rightarrow métodos de reducción de varianza.

- Asumiendo que vamos a hacer estimaciones y no cálculos exactos,

¿Conviene estimar ζ o $1 - \zeta$?

Confiability $\hat{\zeta}$ vs. Anti-confiability $1 - \hat{\zeta}$



$$ER(\hat{\zeta}) = \frac{\sqrt{V\{\hat{\zeta}\}}}{\zeta} = \frac{\sqrt{\zeta(1-\zeta)/n}}{\zeta} = \sqrt{\frac{1-\zeta}{n\zeta}}$$

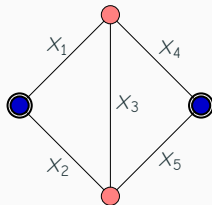
$$ER(1-\hat{\zeta}) = \frac{\sqrt{V\{1-\hat{\zeta}\}}}{1-\zeta} = \frac{\sqrt{(1-\zeta)\zeta/n}}{1-\zeta} = \sqrt{\frac{\zeta}{n(1-\zeta)}}$$

$$ER(1-\hat{\zeta}) = ER(\hat{\zeta}) \frac{\zeta}{1-\zeta} \quad \rightarrow \quad ER(1-\hat{\zeta}) \gg ER(\hat{\zeta})$$

Conclusión

Si mediante un método de simulación se determina $1 - \hat{\zeta}$ con una cierta precisión, entonces quedará automáticamente determinado $\hat{\zeta}$ con una precisión mucho mayor.

Confiabilidad $\hat{\zeta}$ vs. Anti-confiabilidad $1 - \hat{\zeta}$



$$r_i = r, i = 1, \dots, 5$$

n	r	ζ	$\hat{\zeta}$	$V\{\hat{\zeta}\}$	ER
1E+08	0.9	0.9784800000	0.9784969700	2.11E-10	0.00148301%
1E+08	0.99	0.9997980498	0.9997990400	2.02E-12	0.00014212%
1E+08	0.999	0.9999979980	0.9999979600	2.00E-14	0.00001415%
1E+08	0.9999	0.9999999800	0.9999999800	2.00E-16	0.00000141%
1E+08	0.99999	0.9999999998	1.0000000000	2.00E-18	0.00000014%

n	r	$1 - \zeta$	$1 - \hat{\zeta}$	$V\{1 - \hat{\zeta}\}$	ER
1E+08	0.9	2.152000E-02	2.150303E-02	2.11E-10	0.07%
1E+08	0.99	2.019502E-04	2.009600E-04	2.02E-12	0.70%
1E+08	0.999	2.001995E-06	2.040000E-06	2.00E-14	7.07%
1E+08	0.9999	2.000200E-08	3.000000E-08	2.00E-16	70.71%
1E+08	0.99999	2.000020E-10	—	2.00E-18	707.10%



- Los estimadores de ζ y de $1 - \zeta$ están, ambos, a la misma distancia del valor real.
- Si el objetivo es conocer la confiabilidad en forma aproximada, da lo mismo estimar ζ o $1 - \zeta$ y, luego, calcular el complementario.
- Pero si el objetivo es **evaluar la calidad de un método de estimación**, lo más apropiado (y lo más cómodo) es:
 - trabajar sobre $1 - \zeta$,
 - ajustar el método hasta obtener un error relativo satisfactorio,
 - saber que el error relativo sobre el ζ resultante será **muchísimo** menor.

Todos los trabajos científicos publicados se concentran en desarrollar y mejorar los métodos de simulación para estimar $1 - \zeta$ con un error relativo lo más bajo posible.



G. S. Fishman. *Monte Carlo: Concepts, Algorithms, and Applications*. Springer Series in Operations Research. New York: Springer-Verlag, 1996.