

SOLUCION DE ECUACIONES POR METODOS MONTE CARLO

Por Javier Fernández, Guillermo Gómez,
Jefferson King, y Javier Villanueva*

1. UN ESQUEMA GENERAL DE LOS METODOS MONTECARLO

El esquema que utilizaremos para resolver sistemas de ecuaciones algebraicas puede resumirse así:

Supóngase que queremos estimar numéricamente cierta magnitud m , entonces el método Monte Carlo consiste en hallar una variable aleatoria ξ , tal que su valor esperado (esperanza matemática) $E\xi$ sea igual a nuestra incógnita, es decir

$$E\xi = m,$$

y cuya varianza $V\xi$ supondremos sea finita, digamos

$$V\xi = b^2.$$

Ahora bien, el teorema del límite central [1] nos asegura que para N "grande" la distribución de $\sum_{i=1}^N \xi_i$ es aproximadamente una distribución normal con parámetros (a, σ) :

$$(1) \quad a = Nm, \quad \sigma^2 = Nb^2,$$

donde las ξ_i son los valores de N variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas con ξ , o lo que es lo mismo en nuestro caso N valores de la variable aleatoria ξ .

Por otro lado, para una variable aleatoria normal μ y para todo par de reales a y σ , obtenemos de las tablas de la distribución normal que:

* Profesores de carrera de la Facultad de Ciencias, U.N.A.M.

$$P \left\{ \left| \frac{\eta - a}{\sigma} \right| < 3 \right\} = P \{ a - 3\sigma < \eta < a + 3\sigma \} = 0.997$$

donde por (1):

$$a = E\eta = Nm \quad \text{y} \quad \sigma = \sqrt{V\eta} = \sqrt{N} b.$$

Utilizando la relación anterior para $\sum_{i=1}^N \xi_i$, obtenemos mediante el teorema del límite central mencionado arriba:

$$P \left\{ Nm - 3b\sqrt{N} < \sum_{i=1}^N \xi_i < Nm + 3b\sqrt{N} \right\} \approx 0.997,$$

o sea

$$P \left\{ m - \frac{3b}{\sqrt{N}} < \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i < m + \frac{3b}{\sqrt{N}} \right\} \approx 0.997,$$

esto es

$$(2) \quad P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i - m \right| < \frac{3b}{\sqrt{N}} \right\} \approx 0.997,$$

ya que los eventos encerrados en llaves son equivalentes.

La expresión (2) es la clave de este esquema, puesto que nos da el método para calcular la incógnita m y nos estima el valor del error cometido. En efecto, hallamos N valores ξ_i de la va-

riable aleatoria ξ y de (2) tendremos que

$$m \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i,$$

donde el error cometido no sobrepasa a $3\sqrt{\frac{VE}{N}}$, con probabilidad cercana a 1.

2. SOLUCION NUMERICA DE SISTEMAS LINEALES DE ECUACIONES ALGEBRAICAS. (Primer modelo)

Trataremos de construir un modelo estocástico (Von Neumann y Ulam) relacionado con la solución de un sistema de ecuaciones lineales [2], [5].

La clase de matrices a las cuales aplicaremos este primer modelo es una clase muy particular de matrices, a saber la clase de matrices que admiten solución por el método de iteraciones (método de aproximaciones sucesivas) [3].

Este primer modelo es eminentemente teórico y su intención es sólo explicar en forma sencilla el funcionamiento del esquema descrito en el punto 1.

Nuestro problema consiste en resolver numéricamente

$$(3) \quad Ax = b,$$

donde A es una matriz no singular $n \times n$ y

$$(4) \quad A = I - B,$$

donde a su vez I es la matriz identidad y la matriz B es tal que sus valores propios, en módulo son menores que 1, para lo cual es suficiente que alguna de las normas "canónicas" [3] de B sea menor que 1. Estas condiciones equivalen a que (3) pueda ser resuelto por el método iterativo (apéndice 1).

En efecto, es sabido que la solución teórica de (3) está dada por

$$(5) \quad x = A^{-1} b$$

donde A^{-1} es la matriz inversa de A , que por la restricción (4) tiene la forma

$$A^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} B^k, \quad B^0 = I,$$

luego (5) nos queda como:

$$(6) \quad x = \sum_{k=0}^{\infty} B^k b$$

De (6) tenemos que la m -ésima componente del vector incógnita x está dada por:

$$(7) \quad x_m = b_m + \sum_{i_1=1}^n B_{mi_1} b_{i_1} + \sum_{i_1, i_2} B_{mi_1} B_{i_1 i_2} b_{i_2} + \dots +$$

$$+ \dots + \sum_{i_1, \dots, i_r} B_{mi_1} B_{i_1 i_2} \dots B_{i_{r-1} i_r} b_{i_r} + \dots (*)$$

donde las B_{mj} y b_j son las componentes de B y b respectivamente.

Para comodidad del modelo nos restringiremos al caso en que las $B_{mj} \geq 0$ y la suma de los elementos por renglones es 1, esto es

$$\sum_{j=1}^n B_{mj} = 1,$$

es decir, en este caso tenemos $\|B\| = 1$, lo cual implica que la suma infinita (7) puede ser divergente (ver [3] y apéndice 1), sin embargo nos importa en esta primera parte solo ilustrar el modelo probabilístico que a continuación describimos:

Por las restricciones impuestas a las B_{mj} , éstas pueden interpretarse como las probabilidades de un sistema exhaustivo de eventos [1], o sea un sistema de eventos mutuamente excluyentes, tales que su unión es el evento seguro.

Relacionemos estos eventos mediante el siguiente modelo:

Sean n urnas en cada una de las cuales se tienen n bolas de clases diferentes. Sea B_{mi} la probabilidad del evento consistente en sacar al azar una bola de clase i de la m -ésima urna, con reemplazo.

* La pretensión y ventaja de los métodos Monte Carlo aplicados a la resolución de ecuaciones lineales e inversión de matrices consiste en hallar só lo una de las componentes del vector o matriz incognita.

Al sacar una bola de la m -ésima urna definimos la variable aleatoria ξ_m , tal que toma el valor b_i con probabilidad B_{mi} , si la bola sacada es de clase i . Por definición el valor esperado de ξ_m es

$$E\xi_m = \sum_{i=1}^n B_{mi} b_i$$

Hemos pues podido definir una variable aleatoria cuyo valor esperado es el segundo sumando de (7).

El siguiente paso es evidente: definir una variable aleatoria η_m , cuyo valor esperado sea el tercer sumando de (7). Saquemos una bola de la m -ésima urna y supongamos que es de clase i_1 , identifiquemos ahora la urna número i_1 y de ella extraigamos otra bola, sea ésta de clase i_2 . Bajo estas condiciones definimos nuestra variable aleatoria η_m , de suerte que tome el valor b_{i_2} si ocurre lo descrito arriba. Aquí

$$E\eta_m = \sum_{i_1, i_2=1}^n B_{mi_1} B_{i_1 i_2} b_{i_2}$$

que efectivamente coincide con el tercer sumando de (7), donde

$$P\{\eta_m = b_{i_2}\} = \sum_{i_1, i_2} B_{mi_1} B_{i_1 i_2}$$

ya que estamos suponiendo que los eventos "sacar bolas de las urnas" son independientes.

Razonando en forma análoga se intuye la posibilidad de definir una variable aleatoria θ_m , cuyo valor esperado sea la suma infinita (7), esto es

$$(8) \quad E\theta_m = x_m$$

En caso de ser esto posible, restaría obtener N valores de θ_m digamos $\theta_m^1, \theta_m^2, \dots, \theta_m^N$, formar la media aritmética

$$\bar{\theta}_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \theta_m^i$$

que en base a (2):

$$(9) \quad x_m \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \theta_m^i$$

Construyamos pues θ_m , tal que satisfaga (8).

Hagamos las componentes de B y b iguales a

$$(10) \quad B_{mj} = F_{mj} P_{mj}$$

$$(11) \quad b_m = f_m P_m$$

respectivamente, donde $p_m, P_{mj} \in [0,1]$ y

$$p_m + \sum_{j=1}^n P_{mj} = 1$$

La ecuación (7) toma la forma:

$$(7') \quad x_m = f_m p_m + \sum_{i_1} F_{mi_1} f_{i_1} P_{mi_1} P_{i_1} + \dots +$$

$$+ i_1, \dots, i_r F_{mi_1} F_{i_1 i_2} \dots F_{i_{r-1} i_r} f_{i_r} P_{mi_1} P_{i_1 i_2} \dots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r} + \dots +$$

Consideremos ahora n urnas con bolas de $(n+1)$ clases. La probabilidad de sacar de la m -ésima urna una bola de clase $i_1 < n+1$ tomémosla por definición igual a P_{mi_1} y por p_m denotemos la probabilidad de sacar de la m -ésima urna la bola de clase $(n+1)$.

Supóngase que hemos sacado de la m -ésima urna una bola de clase $i_1 \leq n$, acudimos a la urna número i_1 y sacamos otra etcétera. Si la bola escogida en el primer intento es de clase $(n+1)$ se da por terminado el proceso de recurrir a otras urnas, ya que en efecto en nuestro modelo no existe la urna $(n+1)$. En este caso diremos que la variable aleatoria θ_m toma el valor f_m . En el caso general, si la bola de clase $(n+1)$ ha sido sacada de la urna i_r después de haber sacado bolas de las urnas $m, i_1, i_2, \dots, i_{r-1}$, entonces diremos que θ_m toma el valor $F_{mi_1} F_{i_1 i_2} \dots F_{i_{r-1} i_r} f_{i_r}$ y la probabilidad con que lo toma es

$$P \{ \theta_m = F_{mi_1} \dots F_{i_{r-1} i_r} f_{i_r} \} = P_{mi_1} P_{i_1 i_2} \dots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r}$$

La variable aleatoria construida tiene por valor esperado - precisamente

$$E\theta_m = f_{mm} p + \sum_{r=1}^{\infty} \sum_{i_1, \dots, i_r} P_{mi_1} P_{i_1 i_2} \dots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r} F_{mi_1} F_{i_1 i_2} \dots$$

$$\dots F_{i_{r-1} i_r} f_{i_r} \underline{\underline{(7')}} x_m.$$

y en forma aproximada puede obtenerse con (9).

3. SEGUNDO MODELO

En este segundo modelo interpretaremos el problema de hallar la solución numérica del sistema

$$(3) \quad Ax = b$$

como una cadena de Markov y cambiaremos algunas restricciones impuestas a las componentes de B, de suerte que la serie (7) converja y este modelo pueda realizarse en la práctica [5], [6],[7].

Sea pues el sistema (3), con (4): $A=I-B$, es decir

$$(12) \quad x = Bx + b$$

con $\|B\| < 1$ (donde, por ejemplo $\|B\| = \max_i \sum_j |B_{ij}|$, véase [3])

Bajo estas condiciones (12) tiene solución única y puede ser obtenida por el método iterativo [3].

El esquema en este modelo sigue siendo el mismo, a saber definir variables aleatorias cuyo valor esperado sea igual a las componentes del vector x dadas por (7).

Consideremos ahora sólo las componentes de la matriz B como

$$(10) \quad B_{ij} = P_{ij} F_{ij}$$

donde los números F_{ij} los escogemos de suerte que los P_{ij} satisfagan las propiedades:

a) $P_{ij} \geq 0$, con $P_{ij} > 0$, si $B_{ij} \neq 0$ ($i, j=1, 2, \dots, n$)

b) $\sum_{j=1}^n P_{ij} < 1$ (Esta condición es suficiente para que la serie (7) sea convergente)

c) $P_{i, n+1} = 1 - \sum_{j=1}^n P_{ij}$

d) $P_{n+1, i} = 0$

e) $P_{n+1, n+1} = 1$

Piense en una "partícula" con movimiento "aleatorio" que puede tomar un número finito de "estados" (posiciones) independientes:

$$e_1, e_2, \dots, e_n, e_{n+1} = \partial$$

dicha partícula es tal que con probabilidad P_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, n+1$) pasa del estado e_i al e_j independientemente de los estados pasados y con futuro indefinido. El estado "frontera" o "absorbente" $e_{n+1} = \partial$ es especial ya que en él la partícula se para, es decir el paso $e_{n+1} \rightarrow e_i$ ($i=1, \dots, n$) es imposible lo cual se sigue de la condición d).

La situación anteriormente descrita corresponde a una *cadena de Markov*, con un número finito de estados, donde las P_{ij} son las probabilidades de transición de la misma y

$$\Pi = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots & P_{1n} & P_{1,n+1} \\ P_{21} & P_{22} & & P_{2n} & P_{2,n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{n1} & P_{n2} & & P_{nn} & P_{n,n+1} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

su matriz de transición.

Sea e_i un estado fijo diferente del fronterizo ($i < n+1$). Consideremos el movimiento ("caminata") aleatorio de la partícula con estado inicial e_i , que luego de pasar por los estados $e_{i_1} \rightarrow e_{i_2} \rightarrow \dots \rightarrow e_{i_r}$ termina en $e_{n+1} = \partial$.

A la colección de estados $T_i = \{e_i, e_{i_1}, \dots, e_{i_r}, \partial\}$ por comodidad la llamaremos "trayectoria".

Por fin podemos definir la variable aleatoria X_i que depende de la trayectoria aleatoria T_i , tal que en dicha trayectoria toma el valor (que denotaremos por $\xi(T_i)$ y no por $X_i(T_i)$)

$$(13) \quad \xi(T_i) = b_i + F_{i i_1} b_{i_1} + F_{i i_1} F_{i_1 i_2} b_{i_2} + \dots + F_{i i_1} F_{i_1 i_2} \dots F_{i_{r-1} i_r} b_{i_r}$$

con probabilidad

$$P(T_i) = P_{i i_1} P_{i_1 i_2} \dots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r, n+1}$$

Teorema. $EX_i = x_i$, donde x_i es la i -ésima componente del vector incógnita x .

Demostración.

La idea de la demostración es la siguiente: estimar el valor de la variable aleatoria a lo largo de la trayectoria que parte del estado e_i y luego pasa al estado e_j , a través del valor de la misma trayectoria que parte de e_j . Con la anterior estimación se calcula el valor esperado de X_i y finalmente se demuestra que dicho valor esperado es la i -ésima componente de la solución de (12) y por tanto de (3).

La trayectoria T_i al pasar de e_i al siguiente estado puede hacerlo de $(n+1)$ formas, en particular si la partícula recorre la trayectoria

$$T_{ij} = \{e_i, e_j, e_{i_2}, \dots, e_{i_r}, \partial\}$$

que parte de e_i y luego pasa a e_j no importando después que curso siga ($j < n+1$), el valor de la variable aleatoria a lo largo de $T_{i,j}$ será por (13):

$$\begin{aligned}
 (14) \quad \xi(T_{i,j}) &= b_i + F_{ij} b_j + F_{ij} F_{ji_2} b_{i_2} + \dots + F_{ij} F_{ji_2} \dots F_{i_{r-1} i_r} b_{i_r} \\
 &= b_i + F_{ij} (b_j + F_{ji_2} b_{i_2} + \dots + F_{ji_2} \dots F_{i_{r-1} i_r} b_{i_r}) \\
 &= b_i + F_{ij} \xi(T_j)
 \end{aligned}$$

donde T_j es cierta trayectoria con estado inicial e_j .

En el caso en que la partícula pasa directamente de e_i a $e_{n+1} = \emptyset$, es decir para la trayectoria $T_{i,n+1} = \{e_i, \emptyset\}$ por definición tomamos

$$\xi(T_{i,n+1}) = b_i$$

Podemos ya demostrar que EX_i satisface (12). En efecto - por definición

$$(15) \quad EX_i = \sum_{T_i} \xi(T_i) P(T_i) = \sum_{j=1}^{n+1} \sum_{T_{ij}} \xi(T_{ij}) P(T_{ij})$$

Si $j < n+1$ la trayectoria T_{ij} pasa de e_i a e_j y luego sigue una trayectoria de tipo T_j , por tanto

$$(16) \quad P(T_{ij}) = P_{ij} P(T_j)$$

Si $j = n + 1$:

$$(17) \quad P(T_{i,n+1}) = P_{i,n+1}$$

Por otro lado a cada trayectoria T_{ij} ($j < n+1$) le corresponde una trayectoria T_j y viceversa, por lo cual la suma respecto a T_{ij} podemos sustituirla por una suma respecto a T_j . Sustituyendo (14), (16) y (17) en (15) obtenemos:

$$\begin{aligned} EX_i &= \sum_{j=1}^n \sum_{T_j} [b_i + F_{ij} \xi(T_j)] P_{ij} P(T_j) + b_i P_{i,n+1} \\ &= \sum_{j=1}^n P_{ij} F_{ij} \sum_{T_k} \xi(T_j) P(T_j) + b_i \left[\sum_{j=1}^n P_{ij} \sum_{T_j} P(T_j) + P_{i,n+1} \right], \end{aligned}$$

pero

$$\sum_{T_j} \xi(T_j) P(T_j) = EX_j,$$

$$\sum_{T_j} P(T_j) = 1,$$

y por tanto

$$\sum_{j=1}^n (P_{ij} + P_{i,n+1}) = \sum_{j=1}^{n+1} P_{ij} = 1,$$

luego

$$EX_i = \sum_{j=1}^n B_{ij} EX_j + b_i$$

L.Q.Q.D.

Obsérvese que en esta demostración se supone la existencia del valor esperado EX_i , sin embargo puede demostrarse que la condición $\|B\| < 1$ implica que EX_i es finita.

Finalmente la determinación experimental de las soluciones de (3) se realiza de la manera siguiente:

Se organizan N caminatas aleatorias con las trayectorias aleatorias $T_i^{(k)}$ ($k=1, 2, \dots, N$) y cada vez se registra el valor de la variable aleatoria $\xi(T_i^{(k)})$ dado por (13). Obsérvese que todas las trayectorias $T_i^{(k)}$ tienen a e_i por estado inicial.

Suponiendo que los experimentos son independientes entre sí y el valor de X_i tiene varianza finita, tendremos que para toda $\epsilon > 0$ por el teorema de los grandes números (Jinchin) [1], con probabilidad casi 1 se cumple

$$(18) \quad \left| EX_i - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \xi(T_i^{(k)}) \right| < \epsilon$$

donde ϵ es la tolerancia permitida, o sea que las raíces de (1) pueden ser obtenidas como

$$(19) \quad x_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \xi(T_i^{(k)}).$$

Para obtener el valor de N que garantice el error permitido ϵ podemos actuar así:

De (2) y (18) pretendemos que el error del método sea igual al error permitido, o sea

$$\epsilon = 3 \frac{\sqrt{VX_i}}{N}$$

luego

$$(20) \quad N = 9 \frac{VX_i}{\epsilon^2}$$

pero a priori es difícil estimar el valor de la varianza VX_i , por lo cual se recurre a estimaciones estadísticas de la misma, por ejemplo:

$$(21) \quad \hat{V}X_i = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N \left[\xi(T_i^{(k)}) - \bar{\xi} \right]^2 = \frac{1}{N-1} \left[\sum_{k=1}^N \xi^2(T_i^{(k)}) - 2\bar{\xi} \sum_{i=1}^N \xi(T_i^{(k)}) + N\bar{\xi}^2 \right]$$

$$= \frac{1}{N-1} \left[\sum_{i=1}^N \xi^2(T_i^{(k)}) - N\bar{\xi}^2 \right]$$

$$\bar{\xi} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \xi(T_i^{(k)}),$$

teniéndose que tanto $\xi(T_i^{(k)})$ como $\bar{\xi}$ pueden obtenerse sólo en el proceso mismo de simular los valores de la variable aleatoria.

Esto último significa que la exactitud del método sólo puede ser estimada en el proceso de resolución del problema.

Este hecho es semejante al que ocurre con la exactitud en muchos experimentos físicos a saber: su exactitud puede ser estimada con cierta "garantía" sólo por los resultados del mismo experimento.

Como nuestra finalidad es obtener N , pero en (21) la varianza queda estimada en función de N , entonces asignamos un valor tentativo N_0 y a partir de los resultados obtenidos con los N_0 esperimentos, calculamos (21), o sea

$$\hat{V}X_i \approx \frac{1}{N_0 - 1} \sum_{k=1}^{N_0} \left[\xi(T_i^{(k)}) - \bar{\xi} \right]^2$$

con lo cual hallamos en (20) un valor aproximado de N .

Si resulta que $N > N_0$ se impone realizar experimentos complementarios hasta obtener que N es menor o igual que el N_0 correspondiente.

La organización de las "caminatas aleatorias", conocidas las probabilidades de transición P_{ij} puede hacerse así:

Consideremos por comodidad que

$$P_{ij} = \frac{t_{ij}}{10^5} \quad (i=1, \dots, n; j=1, \dots, n+1),$$

donde s y t_{ij} son enteros, tales que

$$\sum_{j=1}^{n+1} t_{ij} = 10^s$$

Consideremos a su vez la "partícula aleatoria" con estado inicial e_i y sea γ un número aleatorio uniformemente distribuido en $[0,1]$.

Si

$$0 < \gamma < \frac{t_{i1}}{10^s}$$

diremos que la partícula pasa del estado e_i al e_1

Si

$$\frac{t_{i1}}{10^s} \leq \gamma < \frac{t_{i1} + t_{i2}}{10^s}$$

diremos que la partícula pasa de e_i a e_2

Análogamente si

$$\frac{1}{10^s} \sum_{k=1}^n t_{ik} \leq \gamma < \frac{1}{10^s} \sum_{k=1}^{n+1} t_{ik} = 1$$

entonces diremos que la partícula pasa directamente de e_i al estado absorbente $e_{n+1} = \theta$, con lo cual termina una "caminata aleatoria".

Tomando, con esta convención, una sucesión de números aleatorios con

torios con s cifras significativas y probabilidades de transición dadas obtenemos una "caminata aleatoria" de la partícula - con estado inicial fijo (e_i).

Ejemplo. Resolver por el método descrito el sistema:

$$x_1 = 0.3x_1 + 0.5x_2 + 0.2$$

$$x_2 = 0.1x_1 + 0.3x_2 + 1.2$$

Solución. Hagamos en (10):

$$F_{11} = F_{12} = F_{21} = 1$$

$$F_{22} = -1$$

La matriz de transición será:

$$\begin{vmatrix} 0.3 & 0.5 & 0.2 \\ 0.1 & 0.3 & 0.6 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

ya que

$$P_{11} = \frac{B_{11}}{F_{11}} = \frac{0.3}{1} = 0.3 \quad (\text{probabilidad de pasar de } e_1 \text{ a } e_1 : P(e_1 \rightarrow e_1))$$

$$P_{12} = \frac{B_{12}}{F_{12}} = 0.5 \quad (P(e_1 \rightarrow e_2)), \text{ etc.}$$

Debido a que los elementos de la matriz de transición son múltiplos de 0.1 podemos utilizar números aleatorios γ con una cifra significativa, los cuales pueden obtenerse por ejemplo de una urna (con reemplazo) conteniendo los números del 0 al 9.

El número aleatorio γ asegura las transiciones según la convención ($s=0, t_{11} = 0.3, t_{12} = 0.5; t_{21} = 0.1, t_{22} = 0.3$):

Si la partícula se encuentra en el estado e_1 y

- a) $0 \leq \gamma < 0.3$, entonces e_1 pasa a e_1 ($e_1 \rightarrow e_1$)
- b) $0.3 \leq \gamma < 0.8$, entonces $e_1 \rightarrow e_2$
- c) $0.8 \leq \gamma < 1$, entonces $e_1 \rightarrow e_3 = \emptyset$

Si la partícula esta en el estado e_2 y

- a') $0 \leq \gamma < 0.1$, entonces $e_2 \rightarrow e_1$
- b') $0.1 \leq \gamma < 0.4$, entonces $e_2 \rightarrow e_2$
- c') $0.4 \leq \gamma < 1$, entonces $e_2 \rightarrow \emptyset$

Los resultados para 20 caminatas aleatorias con estado inicial e_1 aparecen en la siguiente tabla:

CAMINATA Nº	γ	"caminata aleatoria" $\xi(T_1^{(k)})$, de (13)
1	0.9	$e_1 \rightarrow \partial$ 0.2
2	0.4 0.3 0.7	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.4
3	0.7 0.5	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.4
4	0.7 0.8	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.4
5	0.0 0.2 0.5 0.2 0.4	$e_1 \rightarrow e_1 \rightarrow e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.6
6	0.5 0.2 0.4	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 0.2
7	0.2 0.4 0.9	$e_1 \rightarrow e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.6
8	0.9	$e_1 \rightarrow \partial$ 0.2
9	0.3 0.3 0.3 0.4	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_2 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ -1.0
10	0.6 0.8	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.4
11	0.2 0.7 0.5	$e_1 \rightarrow e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.6
12	0.0 0.5 0.9	$e_1 \rightarrow e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$ 1.6

CAMINATA Nº K	γ	"caminata aleatoria"	$\xi(T_1^{(k)}), \text{ de (13)}$
13	0.2 0.6 0.6	$e_1 \rightarrow e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$	1.6
14	0.6 0.2 0.8	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$	0.2
15	0.9	$e_1 \rightarrow \partial$	0.2
16	0.3 0.5	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$	1.4
17	0.4 0.8	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$	1.4
18	0.3 0.0 0.9	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_1 \rightarrow \partial$	1.6
19	0.3 0.9	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow \partial$	1.6
20	0.3 0.0 0.9	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_1 \rightarrow \partial$	1.6
			$\Sigma = 18.6$

Por tanto de (19):

$$x_1 = \frac{21}{20} = 1.05$$

mientras que la solución exacta es $x_1 = x_2 = 1$. En forma análoga se obtiene x_2 .

Nota.

Del ejemplo se ve que explicando pertinentemente ciertas "reglas", un estudiante a nivel de secundaria, puede resolver experimentalmente problemas que lleven a sistemas de ecuaciones tipo -- (1). La finalidad es que intuya el papel que juega lo "aleatorio" (probabilístico) en la resolución de problemas determinísticos. - Obsérvese también que el ejemplo es meramente ilustrativo del método.

Hay que tomar en cuenta que el teorema de la convergencia del proceso de aproximaciones sucesivas impone fuertes restricciones a los elementos de la matriz A , a saber:

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad (i=1,2,\dots,n),$$

(ver[3]y apéndice 1). Sin embargo si det $A \neq 0$, basta realizar cierto número de transformaciones elementales sobre las ecuaciones - de

(1) $Ax = b$

para obtener un sistema equivalente

$$x = Cx + \beta$$

donde se cumpla la restricción mencionada (ver [3] y apéndice 2)

En forma práctica puede actuarse así [véase apéndice 2]:

Del sistema dado se escogen las ecuaciones con coeficientes cuyo módulo sea mayor que la suma de los módulos de los restantes elementos. Cada ecuación escogida se escribe en aquel renglón cuyo máximo coeficiente, en módulo resulte diagonal.

Con las restantes ecuaciones y con las ya escogidas, se forman combinaciones linealmente independientes entre sí, tales que cumplan con la condición arriba mencionada. Explicaremos el procedimiento en el siguiente:

Ejemplo.

Transformar el sistema:

$$(1) \quad 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 + x_4 - 3 = 0$$

$$(2) \quad x_1 - 2x_2 - 5x_3 + x_4 - 2 = 0$$

$$(3) \quad 5x_1 - 3x_2 + x_3 - 4x_4 - 1 = 0$$

$$(4) \quad 10x_1 + 2x_2 - x_3 + 2x_4 + 4 = 0$$

a otro al que pueda aplicarse el método de aproximaciones sucesivas.

Las ecuaciones (2) y (4) cumplen con el procedimiento pro-

$$(1') \quad 10x_1 + 2x_2 - x_3 + 2x_4 + 4 = 0$$

$$(2') \quad \text{-----}$$

$$(3') \quad x_1 - 2x_2 - 5x_3 + x_4 - 2 = 0$$

$$(4') \quad \text{-----}$$

La segunda ecuación (2') la podemos obtener como (1) - (2):

$$(2') \quad x_1 + 5x_2 + x_3 - 1 = 0$$

Para la obtención de (4') puede escogerse $2(1) - (2) + 2(3) - (4)$,
o sea

$$(4) \quad 3x_1 - 9x_4 - 10 = 0$$

Despejando el sistema respecto a los elementos de la diagonal principal, obtenemos:

$$x_1 = -0.2x_2 + 0.1x_3 - 0.2x_4 - 0.4$$

$$x_2 = 0.2x_1 - 0.2x_3 + 0.2$$

$$x_3 = 0.2x_1 - 0.4x_2 + 0.2x_4 - 0.4$$

$$x_4 = 0.333x_1 - 1.111$$

al cual podemos aplicar el método de aproximaciones sucesivas y -
por tanto el segundo modelo.

4. INVERSION DE MATRICES

Para invertir matrices del tipo

$$(4) \quad A = I - B$$

donde $\|B\| < 1$ e $I = (\delta_{ij})$, con $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, i=j \\ 0, i \neq j \end{cases}$, puede aplicarse el segundo modelo [2], [4].

En efecto basta observar que los elementos de la matriz inversa de A:

$$A^{-1} = (x_{ij})$$

son las raíces del sistema de ecuaciones lineales

$$(22) \quad \sum_{k=1}^n (\delta_{ij} - B_{ik}) x_{kj} = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, n)$$

de donde obtenemos que los elementos de cada columna de la matriz A^{-1} :

$$x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{nj},$$

se determinan de los subsistemas lineales:

$$x_{1j} = \sum_{k=1}^n B_{1k} x_{kj} + \delta_{1j}$$

$$(23) \quad x_{2j} = \sum_{k=1}^n B_{2k} x_{kj} + \delta_{2j}$$

$$x_{nj} = \sum_{k=1}^n B_{nk} x_{kj} + \delta_{nj}$$

respectivamente.

En base al segundo modelo, partiendo del estado e_j para una

j fija podemos definir la variable aleatoria X_{ij} que toma en la trayectoria T_i el valor

$$(24) \quad \xi_j(T_i) = \delta_{ij} + F_{ii_1} \delta_{i_1 j} + \dots + F_{ii_1} F_{i_1 i_2} \dots F_{i_{r-1} i_r} \delta_{i_r j}$$

con probabilidad

$$P(T_i) = P_{ii_1} P_{i_1 i_2} \dots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r, n+1}$$

donde $T_i = \{e_i, e_{i_1}, \dots, e_{i_r}, e_{n+1} = \emptyset\}$ y F_{ij} son tales que

$$(10) \quad B_{ij} = P_{ij} F_{ij}$$

donde a su vez P_{ij} representan las probabilidades de transición de e_i a e_j

Finalmente, también tenemos que

$$EX_{ij} = x_{ij}$$

y

$$(25) \quad x_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \xi_j(T_i^{(k)})$$

donde el número de experimentos puede determinarse en la misma forma que en el segundo modelo: (20), (21).

APENDICE 1.Procesos de iteración

El esquema general que describe los principales procesos de iteración aplicados a la resolución de sistemas lineales es el siguiente [3].

Sea

$$(1) \quad Ax = b$$

donde A es una matriz $n \times n$ no singular.

Se construye una sucesión $\{x^{(k)}\}_{k \in \mathbb{N}}$ de vectores mediante la fórmula recurrente.

$$(A) \quad x^{(k)} = x^{(k-1)} + H^{(k)} (b - Ax^{(k-1)}),$$

donde $\{H^{(k)}\}_{k \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de matrices y $x^{(0)}$ la aproximación inicial que puede considerarse un vector arbitrario.

Los diferentes métodos iterativos se obtienen según se escoja la sucesión $\{H^{(k)}\}$ y su propiedad principal consiste en que la solución exacta x^* de (1) resulta ser un punto fijo de cierto operador en cada método.

Inversamente, cualquier proceso iterativo expresado según la fórmula

$$(B) \quad x^{(k)} = C^{(k)} x^{(k-1)} + z^{(k)},$$

donde $\{C^{(k)}\}_{k \in \mathbb{N}}$ y $\{Z^{(k)}\}_{k \in \mathbb{N}}$ son sucesiones de matrices y vectores respectivamente con x^* su punto fijo, puede representarse a través de la fórmula recurrente (A).

En efecto, para x^* se tiene

$$(C) \quad x^* = C^{(k)} x^* + Z^{(k)},$$

luego sustituyendo $Z^{(k)}$ de (C) en (B)

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= C^{(k)} x^{(k-1)} + x^* - C^{(k)} x^* = x^* + C^{(k)} (x^{(k-1)} - x^*) \\ &= x^{(k-1)} + (C^{(k)} - I) (x^{(k-1)} - x^*) = \\ &= x^{(k-1)} + (I - C^{(k)}) A^{-1} A (x^* - x^{(k-1)}) \\ &= x^{(k-1)} + H^{(k)} (Ax^* - Ax^{(k-1)}) \end{aligned}$$

$$(D) \quad x^{(k)} = x^{(k-1)} + H^{(k)} (b - Ax^{(k-1)}),$$

donde I es la matriz identidad y $H^{(k)} = (I - C^{(k)}) A^{-1}$.

L.Q.Q.D.

Para el proceso de iteración (A) pueden darse condiciones - necesarias o suficientes que garanticen la convergencia del insumo a la solución x^* .

Por ejemplo:

$$x^* - x^{(k)} \stackrel{(D)}{=} x^* - x^{(k-1)} - H^{(k)} (Ax^* - Ax^{(k-1)}) =$$

$$(E) \quad x^* - x^{(k)} = (I - H^{(k)} A) (x^* - x^{(k-1)})$$

Aplicando a $(x^* - x^{(k-1)})$ en (E) el mismo razonamiento y así sucesivamente obtenemos:

$$x^* - x^{(k)} = (I - H^{(k)} A) (I - H^{(k-1)} A) \dots (I - H^{(1)} A) (x^* - x^{(0)})$$

Si deseamos que

$$x^* - x^{(k)} \xrightarrow{\hspace{2cm}} 0,$$

para cualquier $x^{(0)}$, entonces es condición necesaria y suficiente que :

$$T^{(k)} = \prod_{i=1}^k (I - H^{(i)} A) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$$

para lo cual, a su vez es suficiente que cualquier norma de la matriz $T^{(k)}$ tienda a cero.

EL METODO DE APROXIMACIONES SUCCESIVAS

El caso particular mas sencillo de los procesos iterativos mencionados es el proceso (método) de aproximaciones sucesivas.

En este método

$$(1) \quad Ax = b$$

se escribe como

$$(12) \quad x = Bx + b$$

o sea que A es representable como:

$$A = I - B$$

y las aproximaciones sucesivas se obtienen según la fórmula:

$$(F) \quad x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + b,$$

donde

$$x^{(k-1)} = x^{(0)} + Bx^{(0)} + \dots + B^{k-1}x^{(0)},$$

donde $x^{(0)}$ es cierta aproximación inicial, que en particular puede tomarse igual al vector b .

Evidentemente, el método de aproximaciones sucesivas se obtiene como caso particular del proceso iterativo (A), haciendo $H = I$.

En efecto de (F)

$$x^{(k)} = (I-A)x^{(k-1)} + b = x^{(k-1)} + (b-Ax^{(k-1)}).$$

Finalmente señalemos que si el proceso de aproximaciones sucesivas converge, entonces converge a la solución del sistema, lo cual es evidente ya que

$$\begin{array}{l} x^{(k)} \longrightarrow x^*, \\ k \longrightarrow \infty \end{array} \text{ implica: } x^* = Bx^* + b \text{ (pasando al límite en (F))}$$

es decir x^* es solución de (1).

Resulta fácil expresar $x^{(k)}$ a través de $x^{(0)}$, a saber

$$(G) \quad x^{(k)} = B^k x^{(0)} + (I + B + \dots + B^{k-1})b$$

la cual se demuestra por inducción en k .

Para demostrar que $x^{(k)} \longrightarrow x^*$, para cualquier $x^{(0)}$, es condición necesaria y suficiente que $|\lambda_i(B)| < 1$, donde $\lambda_i(B)$ son los valores propios de la matriz B ,

Teorema 1.

Para todo valor inicial $x^{(0)}$: $x^{(k)} \longrightarrow x^*$, si y solo si $|\lambda_i(B)| < 1$ para todo i .

Demostración

Si todos los valores propios de B son menores que 1 en módulo, la condición suficiente es inmediata de (G), ya que

$$B^k \longrightarrow 0 \quad (\text{ver Lema 1})$$

y

$$I + B + \dots + B^{k-1} \longrightarrow (I-B)^{-1} = A^{-1}$$

Condición necesaria:

Si $x^{(k)} \longrightarrow x^*$, entonces como se vió arriba x^* es solución de (1) y por (F) tenemos:

$$x^* - x^{(k)} = B(x^* - x^{(k-1)}) = \dots = B^k(x^* - x^{(0)}) \longrightarrow 0$$

y esto debe cumplirse para cualquier $x^{(0)}$, por lo cual es necesaria

rio que $B^k \rightarrow 0$, para que a su vez esto se satisfaga es necesario que todos los valores propios de B sean menores que 1 en módulo (esto se demuestra en seguida).

Lema 1.

$$B^k \rightarrow 0 \quad \text{si y solo si} \quad |\lambda_i(B)| < 1$$

Demostración

Para cualquier matriz no singular C las matrices

$$B^k$$

$$(C^{-1} B C)^k = C^{-1} B^k C$$

tienden o no a la vez a cero, por lo cual es suficiente demostrar el lema para la matriz canónica de Jordan.

Por otro lado, para que una sucesión de matrices cuasidiagonales (matrices cuadradas, a lo largo de cuya diagonal principal, hay bloques cuadrados de elementos diferentes de cero y los restantes iguales a cero) con el mismo tipo de bloques tienda a cero es condición necesaria y suficiente que converja a cero la sucesión de cada bloque. Por tanto basta establecer la convergencia a cero de matrices J^k , donde J es un bloque canónico de Jordan:

$$J = \begin{pmatrix} \lambda & & & \\ 1 & \lambda & & 0 \\ & 1 & \cdot & \\ & & \cdot & \\ 0 & & & 1\lambda \end{pmatrix}$$

y para $k > m-1$:

$$J^k = \begin{pmatrix} \lambda^k & & & & \\ C_k^1 \lambda^{k-1} & & & & \lambda^k \\ \hline C_k^{m-1} \lambda^{k-m+1} & & C_k^{m-2} \lambda^{k-m+2} & \dots & \lambda^k \end{pmatrix}$$

donde m es el orden del bloque y C_k^i las combinaciones de k elementos tomados de i en $i/i = 1, \dots, m-1/$.

Para que $J^k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$ es necesario que $|\lambda| < 1$, ya que los elementos diagonales de J^k son λ^k . Esta condición también es suficiente puesto que:

$$C_k^i \lambda^{k-i} \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$$

Nótese que las condiciones del lema 1, no son susceptibles de comprobación directa, puesto que se necesita conocer los valores propios de B . Debido a esto se utilizan condiciones suficientes mas sencillas como:

Lema 2.

Para que $B^k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$, es suficiente que al menos una de las -

normas* de B sea menor que 1.

Demostración

En efecto

$$||B^k|| = ||B^{k-1}B|| \leq ||B^{k-1}|| ||B|| \leq \dots \leq ||B||^k$$

luego, si

$$||B|| < 1 \Rightarrow ||B^k|| \longrightarrow 0 \Rightarrow B^k \longrightarrow 0$$

Puesto que las condiciones del teorema 1 son difíciles de comprobar, es mejor juzgar sobre la convergencia del proceso de aproximaciones sucesivas, a través de criterios suficientes relacionados directamente con las componentes de la matriz B. Una condición suficiente resulta del Lema 2:

Teorema 2.

Para que el proceso de aproximaciones sucesivas converja es suficiente que cualquier norma de B sea menor que 1.

Demostración

Si $||B|| < 1$ entonces (Lema 2 y 1) $|\lambda_i(B)| < 1$ y por el teorema 1 el proceso de aproximaciones sucesivas converge.

*) Es suficiente considerar las llamadas normas "canónicas":

$$||B|| = \max_i \sum_j |B_{ij}|, \quad ||B|| = \max_j \sum_i |B_{ij}|, \quad ||B|| = \left(\sum_{ij} |B_{ij}|^2 \right)^{1/2}$$

Corolario.

El proceso de aproximaciones sucesivas (F) para el sistema (12) converge si

$$(H) \quad \|B\| = \max_i \sum_{j=1} |B_{ij}| < 1,$$

o bien en términos de los elementos de la matriz original A, si

$$(I) \quad |a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad (i=1,2,\dots,n)$$

ya que (I) implica (H).

APENDICE 2.

Reducción del sistema original a una forma adecuada para la aplicación del método de aproximaciones sucesivas.

La condición (I) para la convergencia del método de aproximaciones sucesivas exige que la matriz A de (1) sea en cierta forma "parecida" a la matriz identidad, ya que (I) significa que los elementos de la diagonal principal de cada ecuación en (1) sean mayores que la suma de los restantes elementos (excepto el término independiente).

Si el sistema dado no cumple con (I), entonces la idea es transformar el sistema original $Ax = b$, a uno equivalente

$$DAx = Db,$$

donde D es cierta matriz no singular que se escoge de suerte que DA sea "cercana" a la matriz identidad, o sea D "cercana" a A^{-1} .

Tomemos en particular $D = A^{-1} - \epsilon$ donde $\epsilon = (\epsilon_{ij})$ es una matriz con elementos adecuadamente "pequeños" en valor absoluto, luego entonces:

$$(A^{-1} - \epsilon) Ax = Db$$

nos lleva a $x = Cx + \beta_1$

donde $\beta = Db$ y $C = \epsilon A,$

para la cual se cumple (H) si $|\epsilon_{ij}|$ son suficientemente "pequeños".

Obsérvese que el multiplicar (1) por D es equivalente a - realizar un cierto número de transformaciones elementales sobre - las ecuaciones del sistema (1), precisamente lo que hicimos en el ejemplo ilustrativo del texto.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Cramer, H., *Métodos Matemáticos de Estadística*, Aguilar, 1963.
- [2] Forsythe, G.E., Leibler R. I., *Matrix Inversión by a Monte-Carlo Method*, MTAC., Vol. 4 (1950), 127-129.
- [3] Fadeeva, V.N., *Computational Methods of Linear Algebra*, -
Dover.
- [4] Oswald, F.J., *Matrix inversion by Monte Carlo Methods; Mathematical methods for digital computers*. Edited by Ralston and Wilf, John Wiley 1960.
- [5] Shreider Yu.A. et al, *Method statistical Testing*, Elsevier, 1964.
- [6] Hammersley, J.M., Handscomb, D.C., *Monte-Carlo Methods*, --
Methuen, 1964.
- [7] Demidovich, B.P., Maron I.A., *Osnovy Vychishtelnoi Matematiki*, Nauka, 1970.