

Simulación de Monte Carlo en Autómatas Celulares

Oscar Morales Ponce

Escuela Nacional de Estudios Profesionales campus Acatlán Universidad Nacional Autónoma de México

El estudio de los autómatas celulares son computacionalmente difíciles de calcular, por lo que se han creado técnicas para calcularlos, una de estas es la simulación de Monte Carlo. Cada composición de la teoría del campo medio va incrementando su complejidad de forma paulatina, con Monte Carlo es posible calcular cualquier composición.

1. Introducción

El Método de Monte Carlo da solución a una gran variedad de problemas matemáticos haciendo experimentos con muestreos estadísticos en una computadora. El método es aplicable a cualquier tipo de problema, ya sea estocástico o determinístico. A diferencia de los métodos numéricos que se basan en evaluaciones en N puntos en un espacio M -dimensional para producir una solución aproximada, el método de Monte Carlo tiene un error absoluto en la estimación que decrece en $1/\sqrt{N}$ por teorema de límite central, mientras que otros métodos, a falta de una buena estructura, tienen errores que decrecen a lo más en $1/\sqrt[m]{N}$ [1].

2. Historia del método de Monte Carlo

El método fue llamado así por el principado de Mónaco por ser “la capital del juego de azar”, al tomar una ruleta como un generador simple de números aleatorios. El nombre y el desarrollo sistemático de los métodos de Monte Carlo data aproximadamente de 1944 con el desarrollo de la computadora electrónica. Sin embargo hay varias instancias (aisladas y no desarrolladas) en muchas ocasiones anteriores a 1944.

El uso real de los métodos de Monte Carlo como una herramienta de investigación, viene del tra-

bajo de la bomba atómica durante la Segunda Guerra Mundial. Este trabajo involucraba la simulación directa de problemas probabilísticos de hidrodinámica concernientes a la difusión de neutrones aleatorios en material de fusión.

Aún en la primera etapa de estas investigaciones, John von Neumann y Stanislaw Ulam refinaron esta curiosa “Ruleta rusa” y los métodos “de división”. Sin embargo, el desarrollo sistemático de estas ideas tuvo que esperar el trabajo de Harris y Herman Kahn en 1948. Aproximadamente en el mismo año, Fermi, Metropolis y Ulam obtuvieron estimadores para los valores característicos de la ecuación de Schrödinger para la captura de neutrones a nivel nuclear.

3. Simulación de Monte Carlo

La simulación de Monte Carlo fue creada para resolver integrales que no se pueden resolver por métodos analíticos, para resolver estas integrales se usaron números aleatorios. Posteriormente se utilizó para cualquier esquema que emplee números aleatorios, usando variables aleatorias con distribuciones de probabilidad conocidas, el cual es usado para resolver ciertos problemas estocásticos y determinísticos, donde el tiempo no juega un papel importante.

Por lo tanto es un proceso computacional que

utiliza números aleatorios para derivar una salida, por lo que en vez de tener entradas con puntos dados, se asignan distribuciones de probabilidad a alguna o todas las variables de entrada. Esto generará una distribución de probabilidad para una salida después de una corrida de la simulación.

4. Monte Carlo en Autómatas Celulares

4.1. Proceso Bernoulli

Estrictamente hablando, el proceso de Bernoulli debe tener las siguiente propiedades:

- El experimento consiste en n intentos repetidos.
- Los resultados de cada uno de los intentos puede clasificarse como un éxito o un fracaso.
- La probabilidad de éxito, representada por p , permanece constante para todos los intentos.
- Los intentos repetidos son independientes.

4.2. Conceptos básicos

Un autómata celular (k, r) es un sistema dinámico determinista con espacio, tiempo y estados discretos, el espacio se divide en N celdas, cada una contendrá uno de los k estados, generalmente estarán en el rango de 0 a $k - 1$, y un radio r . Su función para la i -ésima celda esta dada por:

$$b_i^{t+1} = f(b_{i-r}^t, b_{i-r+1}^t, \dots, b_i^t, \dots, b_{i+r-1}^t, b_{i+r}^t)$$

Por simplicidad trabajaremos con un autómata celular $(2,1)$.

La densidad es la probabilidad de escoger una celda al azar en algún momento en particular durante la evolución del autómata y encontrarlo en el estado 1.

La concentración en el tiempo t esta dada por:

$$C^{t+1} = \frac{\sum_{i=0}^{M-1} b_i}{M}$$

donde M es el tamaño de la red y b_i el estado de la i -ésima celda asignando valores de 0 y 1.

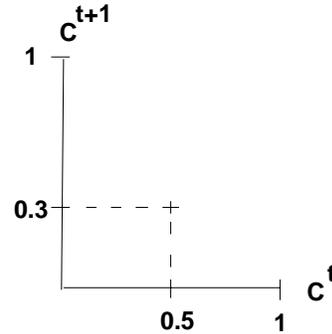


Fig. 1. Explicación gráfica de la teoría de campo medio. Dada una densidad $C^t = 0.5$ en el tiempo t obtenemos una densidad $C^{t+1} = 0.3$ en el tiempo $t+1$

Teoría del campo medio es una aproximación que usa las reglas del autómata, el cual nos indica la concentración C^{t+1} a partir de una concentración C^t . Gráficamente la concentración C^t será el eje de las X y C^{t+1} será el eje de las Y, existen otro tipo de gráficas como las series de tiempo, en donde el tiempo será el eje de las X y las concentraciones el eje de las Y.

La simulación de Monte Carlo al igual que la teoría del campo medio nos indica la concentración C^{t+1} a partir de una concentración C^t . Su diferencia con la teoría del campo medio es que Monte Carlo ocupa los datos reales, por lo que es posible calcular su aproximación en cualquier generación. La gráfica resultante se puede comparar con la de teoría del campo medio.

4.3. Cálculo de la Simulación de Monte Carlo

El proceso de como se calcula la simulación de Monte Carlo en autómatas celulares se estudió en base a el código de NxLcau [4]. Este proceso se explica a continuación, así como su algoritmo.

Primero creamos una configuración inicial por medio de una simulación de un proceso Bernoulli de la siguiente manera:

Para cada célula b_i para $i = 0, 1, \dots, M - 1$ entero y M finito tenemos

$$b_i = \begin{cases} 0 & \text{si } x < q \\ 1 & \text{de otra forma} \end{cases}$$

donde $q=1-p$, x es un número aleatorio y p es la densidad que queremos en la configuración inicial, por lo que q varía de 0 a 1, y corresponde a uno y sólo un punto del eje de las X .

Por lo tanto dividiremos el eje de las X en N puntos y p estará dado por $p = j/(N - 1)$ para $j = 0, 1, \dots, N - 1$.

Para cada configuración inicial aplicamos la regla del autómata hasta la R -ésima generación que deseamos conocer su densidad. Obtenemos la concentración de la R -ésima generación y la normalizamos dividiendo entre el tamaño de la red M de la forma $y = C^{t+l}/M$ y graficamos este valor en las cordenadas (p, y) actualizamos p y repetimos el proceso hasta terminar.

4.4. Algoritmos

Algoritmo de Monte Carlo:

N : número de puntos en el eje de las X que se deseen graficar.

R : Generación la cual se quiere conocer las densidades.

M : Tamaño de la red.

- Paso 1: Para $i = 0$ hasta $N - 1$, hacer
- Paso 2: Se obtiene la probabilidad de p y q de la siguiente manera $p = i/N$ y $q = 1 - p$
- Paso 3: Generar configuración inicial por *Simulación* con argumentos p (se explica abajo)
- Paso 4: Aplicar la regla del autómata R veces
- Paso 5: Encontrar la concentración de la R -ésima generación C^R . Vecinos
- Paso 6: Graficar el Punto en las cordenadas (p, C^R)
- Paso 7: Regresar al paso 1

Salir.

Algoritmo de Simulación(p):

p : Probabilidad de que ocurra un 0

M : Tamaño de la red.

- Paso 1: Para $i = 0$ hasta $M - 1$, hacer
- Paso 2: Generar un número aleatorio $x \in [0-1]$

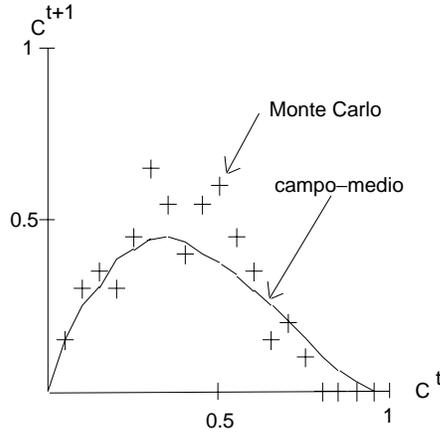


Fig. 2. Gráfica de Monte Carlo y la teoría del campo medio de un autómata (2,1) con la regla 22 de Wolfram con una red de tamaño 20

- Paso 3: Si $x < p$ entonces $b_i = 0$ de otra forma $b_i = 1$.
- Paso 4: Regresar al paso 1

Salir.

Es decir, la densidad de las configuraciones corresponden a cada punto del eje de las x en el rango de 0 a 1, aplicamos la regla del autómata y una vez que tengamos la generación deseada obtenemos su densidad y graficamos.

Al tener una red de tamaño más grande, nuestra muestra será mejor, pues de acuerdo a la ley de los grandes números se reduce su dispersión (*desviación estandar*).

R se determina en base a la generación que deseamos observar su comportamiento.

5. Ejemplo de Monte Carlo en Autómatas Celulares

5.1. Ejemplo con una red de tamaño 20

Tomaremos un autómata (2,1) con la regla 22 de Wolfram esta es:

```
000 0
001 1
010 1
011 0
```

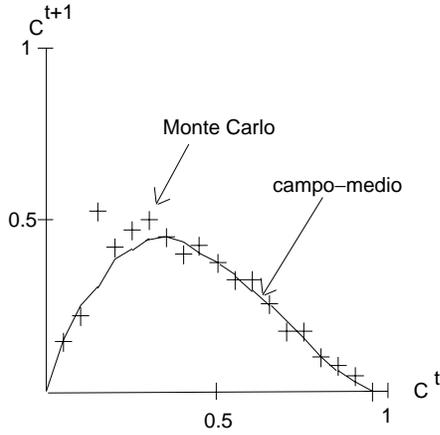


Fig. 3. Gráfica de Monte Carlo y la teoría del campo medio de un autómata (2,1) con la regla 22 de Wolfram con una red de tamaño 40

100 1
 101 0
 110 0
 111 0

Dividiremos el eje de las X en 20.

Por medio de números aleatorios determinamos las configuraciones iniciales y empezamos a darle valor a p . Para $p = 0$ tendremos únicamente ceros en la configuración, después aplicamos la regla una vez y tendremos nuestra primera generación, en ésta obtenemos su densidad y graficamos. Incrementando p en 0.05 esperamos obtener un 1 en la configuración (tamaño de la red por la densidad) $20 \times 0.05 = 1$, aplicamos la regla y obtenemos su densidad. De esta manera continuamos hasta que $p = 1$.

Las configuraciones iniciales y la primera generación se muestran en la figura 4 y 5, la gráfica de Monte Carlo y de la teoría del campo medio se muestra en la figura 2, Monte Carlo se graficó con los valores de p en el eje de las X y C^{t+1} para el eje de las Y.

5.2. Ejemplo de tamaño 40

Al igual que en el ejemplo anterior tomamos la regla 22 de Wolfram y dividimos el eje de las X en

20, los resultados se muestran a continuación y la gráfica en la figura 3.

C^t	C^{t+1}
0.00	0.000
0.05	0.150
0.10	0.225
0.15	0.525
0.20	0.425
0.25	0.475
0.30	0.500
0.35	0.450
0.40	0.400
0.45	0.425
0.50	0.375
0.55	0.325
0.60	0.325
0.65	0.250
0.70	0.175
0.75	0.175
0.80	0.100
0.85	0.075
0.90	0.050
0.95	0.00
1.00	0.00

La gráfica se suaviza cuando el tamaño de red y divisiones del eje crecen, como se mostro en los ejemplos.

6. Conclusiones

La simulación de Monte Carlo en autómatas celulares es un método preciso, pues a diferencia de la teoría de campo medio que ocupa un polinomio construido con las probabilidades teóricas las cuales tienen un error alto por asumir que las células son independientes y en verdad no lo son, Monte Carlo con los datos reales crea la gráfica, la cual se aproxima mejor al comportamiento del autómata. Entre más grande sea la red mejor aproximación tendremos. El costo computacional es bajo, a diferencia de la teoría de campo medio, en el cual el orden m del polinomio se eleva a la n -ésima composición es decir, O^n

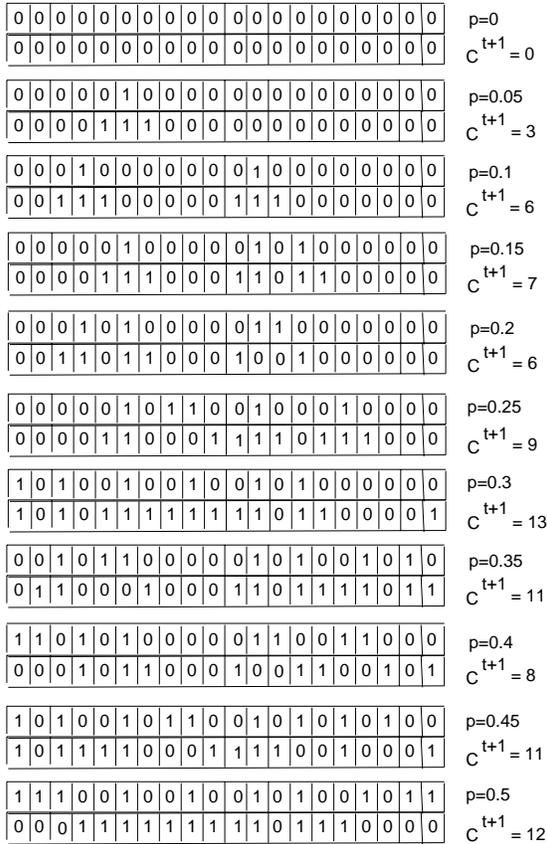


Fig. 4. Ejemplo de una simulación de Monte Carlo de un autómata (21) con la regla 22 de Wolfram con una red de 20 celdas para $p = 0, 0.05, 0.1, \dots, 0.5$

Reconocimientos

Quiero agradecer a mi familia y mis amigos; muy en especial a Neridia por su apoyo brindado.

Referencias

- [1] Averill M. Law, W. David Keltan, "Simulation modeling and analysis," McGraw-Hill Tucson Arizona, 1991.
- [2] Walpole Myers, "Probabilidad y estadística," McGraw-Hill México.
- [3] Howard A. Gutowitz, Statistical Properties of Cellular Automata in the Context of Learning and Recognition

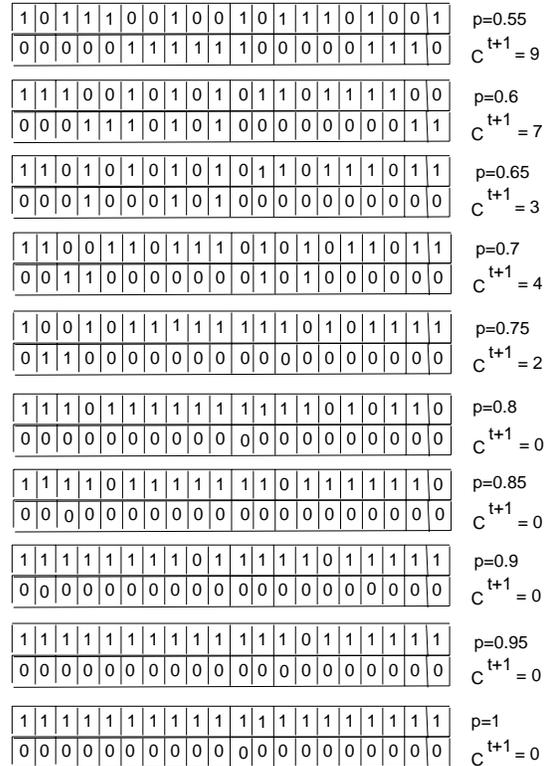


Fig. 5. Ejemplo de una simulación de Monte Carlo de un autómata (2,1) con la regla 22 de Wolfram con una red de 20 celdas para $p = 0.55, 0.6, 0.6.5, \dots, 1$

- [4] Harold V. MacIntoch, NxLcau es un sistema desarrollado en el Instituto de aplicación de microcomputadoras para el estudio de autómatas celulares