

Comparación de caos polinomial y Monte Carlo para ecuaciones diferenciales ordinarias aleatorias

Comparison of polynomial chaos and Monte Carlo for random ordinary differential equations

Cayama, Jorge y González-Parra, Gilberto*

Grupo de Matemática Multidisciplinar, Facultad de Ingeniería,

Universidad de Los Andes

Mérida 5101, Venezuela

*gcarlos@ula.ve

Resumen

En este artículo aplicamos el caos polinomial a algunas ecuaciones diferenciales aleatorias que surgen en modelos matemáticos que provienen de muchas ramas de las ciencias e ingeniería. Esta aleatoriedad puede venir dada por errores en medidas o incertidumbre intrínseca o ambas. El caos polinomial está basado en el caos de Askey los cuales forman una base completa en el espacio de Hilbert de las funciones cuadráticamente integrables $L_2(\mathcal{C})$. En este trabajo aplicamos el caos polinomial para resolver las ecuaciones diferenciales aleatorias exponencial, logística y una de Riccati. Los polinomios de Hermite son usados debido a su conveniencia cuando se asume que los parámetros aleatorios siguen una distribución gaussiana. Los resultados numéricos muestran los intervalos de confianza y valores esperados para las soluciones. Estos resultados muestran la efectividad y confiabilidad del método. Adicionalmente, comparamos los resultados numéricos del caos polinomial con los del método de Monte Carlo.

Palabras clave: Ecuaciones diferenciales aleatorias, Método de Monte Carlo, caos polinomial, caos de Askey.

Abstract

In this paper we apply polynomial chaos to some random ordinary differential equations that arise in mathematical models from many fields of science and engineering. The randomness may come from errors in measurements, intrinsic variability or both. Polynomial chaoses are based on the Askey chaos that forms a complete basis on the Hilbert Space of square integrable $L_2(\mathcal{C})$ -functions. Here we apply polynomial chaos to the exponential, logistic and Riccati random ordinary differential equations. Hermite orthogonal polynomials are used because these are more convenient when the random inputs are assumed as Gaussian distributions. Numerical results show confidence intervals and expected mean values for the solution. These results show the effectiveness and reliability of polynomial chaoses. In addition, we compare numerical results of the polynomial chaos with the classical Monte Carlo method.

Key words: Random differential equations, Monte Carlo method, polynomial chaos, Askey chaos.

1 Introducción

En la mayoría de las aplicaciones de la ingeniería se intenta resolver los problemas físicos convirtiéndolos en modelos matemáticos determinísticos. Esto se puede considerar como una aproximación un poco tosca de la realidad, debido a que muchos de los parámetros físicos entre los datos de entrada que describen el problema se fijan a lo largo del proceso o conversión, es decir, al considerar coeficientes determinísticos se pasan por alto aspectos como los

errores en los datos observados o medidos, las propiedades del material, la variabilidad de las condiciones y también la incertidumbre o falta de conocimiento. En la realidad, estos parámetros muestran cierta aleatoriedad lo cual en definitiva influye sobre el comportamiento de la solución. Esta aleatoriedad no se toma en cuenta en el modelo determinístico. Con el propósito de incluir esta propiedad de incertidumbre en el modelo matemático, se han desarrollado algunos métodos probabilísticos. Junto a las aproximaciones estadísticas, las cuales utilizan una enorme muestra de nú-

meros (pseudo-) aleatorios y por tanto se convierten en procesos costosos, se ha hecho una fuerte investigación sobre las aproximaciones no estadísticas (determinísticas). Recientemente, se ha estado desarrollando un nuevo método de aproximación no estadístico, llamado caos polinomial (Ghanem y Spanos, 1991). Esta aproximación, basada en el concepto de Wiener del caos homogéneo (Wiener, 1938), ha probado ser muy eficiente en las aplicaciones de ingeniería (Ghanem y Spanos, 1991; Stanescu y Chen-Charpentier, 2009). Aquí, el término caos, propuesto por Wiener, se refiere a la aleatoriedad (como por ejemplo, la que se observa en la teoría estadística de un gas) y no se debe confundir con el concepto de teoría del caos relacionado a los sistemas dinámicos no lineales, en el cual el término caos fue usado por Yorke sólo 37 años después (Li y Yorke, 1975). La base teórica de la aproximación por caos polinomial está basada en las conclusiones de Cameron y Martin (Cameron y Martin, 1947), en la que una expansión del caos polinomial converge en algún funcional $L^2(C)$ en el sentido $L^2(C) (\int (f_n - f)^2 \rightarrow 0)$, donde C es el espacio de funciones reales las cuales son continuas en el intervalo $[0, 1]$ y se anulan en 0. En el contexto de los procesos estocásticos, esto implica que cada proceso estocástico con momento de segundo orden finito se puede representar por una expansión del caos polinomial (infinita). La forma original del caos polinomial es una expansión espectral basada en los polinomios de Hermite ortogonales en términos de variables aleatorias gaussianas y utilizando coeficientes determinísticos. Sin embargo, al utilizar esta forma original, la convergencia óptima se consigue sólo cuando se trabaja con procesos estocásticos gaussianos.

Para obtener una convergencia óptima para procesos estocásticos más generales, Xiu y Karniadakis extendieron esta aproximación en un esquema más amplio llamado el caos polinomial generalizado (Xiu y Karniadakis, 2002). En este esquema se utiliza la conexión cerrada entre las funciones de probabilidad de ciertas variables aleatorias y la función de peso en la relación de ortogonalidad de ciertos polinomios ortogonales para representar los procesos no gaussianos. Con más exactitud, se ha logrado que las expansiones espectrales basadas en los polinomios ortogonales del esquema Askey (Koekoek y Swarttouw, 1998) en términos de la variable aleatoria correspondiente, escogida de acuerdo a la función de peso de los polinomios, puedan ser empleadas eficientemente para representar un amplio rango de distribuciones "estándar". Esto implica que la convergencia óptima se pueda lograr para procesos caracterizados por la distribución uniforme, Gamma y Beta (Mood y cols., 1950).

Las ecuaciones diferenciales con coeficientes aleatorios se utilizan como modelos en muchas aplicaciones. En muchos casos éstas describen de mejor manera el comportamiento real en comparación con las ecuaciones con coeficientes determinísticos.

2 Caos polinomial y el método de Monte Carlo

2.1 Polinomios ortogonales hipergeométricos en el esquema Askey

La teoría de polinomios ortogonales es relativamente sólida y se han dedicado diversos libros a su estudio (Szegő, 1939; Beckmann, 1973; Chihara, 1978). Los trabajos más recientes demuestran que una importante clase de polinomios ortogonales pertenecen al esquema de Askey de los polinomios hipergeométricos (Askey y Wilson, 1985). En esta sección, se hará un breve repaso de la teoría de polinomios ortogonales hipergeométricos.

2.1.1 Series hipergeométricas generalizadas

Se introduce el símbolo de Pochhammer $(a)_n$ definido por

$$(a)_n = \begin{cases} 1 & \text{si } n = 0, \\ a(a+1) \cdots (a+n-1) & \text{si } n = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (1)$$

En términos de la función Gamma se tiene

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}, \quad n > 0. \quad (2)$$

Las series hipergeométricas generalizadas ${}_rF_s$ se expresan como

$${}_rF_s(a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a_1)_k \cdots (a_r)_k z^k}{(b_1)_k \cdots (b_s)_k k!} \quad (3)$$

donde $b_i \neq 0, -1, -2, \dots$ para $i = 1, \dots, s$ y así se asegura que los denominadores en la serie nunca sean cero. El radio de convergencia ρ de la serie hipergeométrica es

$$\rho = \begin{cases} \infty & \text{si } r < s + 1, \\ 1 & \text{si } r = s + 1, \\ 0 & \text{si } r > s + 1. \end{cases} \quad (4)$$

Algunos casos elementales de las series hipergeométricas son: la serie exponencial ${}_0F_0$ y la serie binomial ${}_1F_0$. Si uno de los parámetros numeradores a_i , $i = 1, \dots, r$, es un entero negativo, digamos $a_i = -n$, la serie hipergeométrica (3) termina en el n -ésimo término y se convierte en un polinomio en z ,

$${}_rF_s(-n, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s; z) = \sum_{k=0}^n \frac{(-n)_k \cdots (a_s)_k z^k}{(b_1)_k \cdots (b_s)_k k!} \quad (5)$$

2.1.2 Algunas propiedades de los polinomios ortogonales

Un sistema de polinomios $\{Q_n(x), n \in \mathcal{N}\}$, donde $Q_n(x)$ es un polinomio de grado exacto n y $\mathcal{N} = 0, 1, 2, \dots$ o $\mathcal{N} = 0, 1, 2, \dots, N$, para un entero finito no negativo N , es un sistema ortogonal de polinomios con respecto a alguna medida positiva real ϕ si se satisfacen las siguientes relaciones de ortogonalidad:

$$\int_S Q_n(x) Q_m(x) d\phi(x) = h_n^2 \delta_{nm}, \quad n, m \in \mathcal{N}, \tag{6}$$

donde S es el soporte de la medida ϕ y cada h_n es una constante no nula. El sistema se llama ortonormal si $h_n = 1$. Usualmente la medida ϕ tiene una densidad $w(x)$ o peso $w(x)$ en un punto x_i en el caso discreto. Así, la relación (6) se convierte en

$$\int_S Q_n(x) Q_m(x) w(x) dx = h_n^2 \delta_{nm}, \quad n, m \in \mathcal{N}, \tag{7}$$

en el caso continuo, o

$$\sum_{i=0}^M Q_n(x_i) Q_m(x_i) w(x_i) = h_n^2 \delta_{nm}, \quad n, m \in \mathcal{N}, \tag{8}$$

en el caso discreto, donde es posible considerar $M = \infty$

2.1.3 El esquema Askey

El esquema Askey, que se representa como una estructura de árbol en la Fig. 1, según (Schoutens, 2000), clasifica los polinomios ortogonales hipergeométricos e indica el límite de las relaciones entre ellos. El “árbol” se inicia con los polinomios de Wilson y los de Racah en la parte superior. Ambos pertenecen a la clase ${}_4F_3$ de los polinomios ortogonales hipergeométricos dados por (5). Los polinomios de Wilson son continuos mientras que los de Racah son discretos. Las líneas que conectan los diferentes polinomios denotan las relaciones de transición límite entre ellos, lo que implica que los polinomios en el extremo inferior de las líneas se pueden obtener tomando el límite de uno de los parámetros de sus contrapartes en el extremo superior. Por ejemplo, la relación límite entre los polinomios de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ y los de Hermite $H_n(x)$ es

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \alpha^{-1/2n} P_n^{(\alpha, \alpha)}\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right) = \frac{H_n(x)}{2^n n!}, \tag{9}$$

y entre y entre los polinomios de Meixner $M_n(x; \beta, c)$ y los de Charlier $C_n(x; \alpha)$ es

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} M_n\left(x; \beta, \frac{\alpha}{\alpha + \beta}\right) = C_n(x; \alpha) \tag{10}$$

Los polinomios ortogonales asociados con el polinomio del caos generalizado, también conocidos como caos de Askey, comprenden los polinomios de Hermite, Laguerre, Jacobi, Charlier Meixner, Krawtchouk and Hahn.

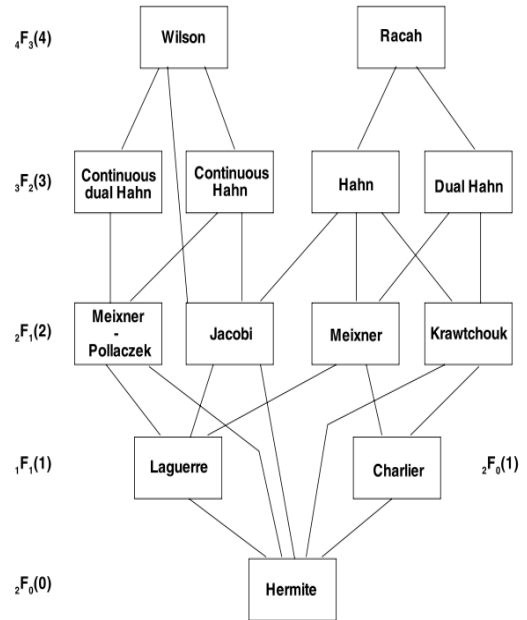


Fig. 1. El esquema Askey de polinomios ortogonales

2.2 El caos polinomial generalizado

En esta sección se introduce el polinomio del caos generalizado a lo largo de la expansión de Karhunen-Loeve (KL), otra técnica clásica para representar procesos aleatorios.

2.2.1 El caos polinomial de Wiener: caos de Hermite

El polinomio original del caos, también llamado como caos homogéneo, fue propuesto primordialmente en (Wiener, 1938), allí se emplearon los polinomios de Hermite en términos de variables gaussianas aleatorias. De acuerdo al teorema de Cameron y Martin propuesto en (Cameron y Martin, 1947), se puede aproximar a algún funcional en $L_2(C)$ y converge en $L_2(C)$, donde C es el espacio de funciones reales las cuales son continuas en el intervalo $[0,1]$ y se anulan en 0. Por lo tanto, el caos polinomial proporciona una manera de expandir procesos aleatorios de segundo orden en términos de los polinomios de Hermite. Los procesos aleatorios de segundo orden son procesos con varianza finita y se aplican a la mayoría de procesos físicos. Así, un proceso aleatorio general de segundo orden $\chi(\theta)$, visto co-

mo una función de θ , es decir, un evento aleatorio, se puede expresar en la forma

$$\begin{aligned} \chi(\theta) = & \chi_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} \chi_{i_1} \Gamma_1(\xi_{i_1}(\theta)) + \\ & \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \chi_{i_1} \chi_{i_2} \Gamma_2(\xi_{i_1}(\theta), \xi_{i_2}(\theta)) + \\ & \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} \chi_{i_1} \chi_{i_2} \chi_{i_3} \Gamma_3(\xi_{i_1}(\theta), \xi_{i_2}(\theta), \xi_{i_3}(\theta)) + \dots, \end{aligned} \quad (11)$$

donde $\Gamma_n(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$ denota los polinomios de Hermite de orden n en término de n variables aleatorias gaussianas independientes multidimensionales $\xi = (\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$ con media cero y varianza unitaria. La ecuación anterior es la versión original del polinomio del caos de Wiener, en la cual las integrales continuas se reemplazan por sumatorias. La expresión general del polinomio de Hermite es dada por:

$$\Gamma_n(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n}) = e^{1/2 \xi^T \xi} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \xi_{i_1} \dots \partial \xi_{i_n}} e^{-1/2 \xi^T \xi} \quad (12)$$

El número total de términos N_t en una expansión de orden total p que involucra n variables aleatorias viene dado por

$$N_t = 1 + P = 1 + \sum_{s=1}^p \frac{1}{s!} \prod_{r=0}^{s-1} (n+r) = \frac{(n+p)!}{n! p!} \quad (13)$$

Por conveniencia en la notación, la ecuación (11) se puede escribir de nuevo como

$$\chi(\theta) = \sum_{j=0}^{\infty} \chi_j \Phi_j(\xi), \quad (14)$$

donde existe una correspondencia uno a uno entre las funciones $\Gamma_n(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$ y $\Phi_j(\xi)$, también entre los coeficientes χ_j y $\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n}$. La sumatoria de la ecuación (11) se lleva a cabo de acuerdo al orden del polinomio de Hermite, mientras que en la ecuación (14) se hace un recuento iniciando con los polinomios de orden bajo. Para mayor claridad, se muestra la expansión en dos dimensiones según (11)

$$\begin{aligned} \chi(\theta) = & \chi_0 \Gamma_0 + \chi_{11} \Gamma_1(\xi_1) + \chi_{21} \Gamma_1(\xi_2) + \\ & \chi_{111} \Gamma_2(\xi_1, \xi_1) + \chi_{112} \Gamma_2(\xi_2, \xi_1) + \chi_{222} \Gamma_2(\xi_2, \xi_2) + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

y según la forma simplificada (14)

$$\begin{aligned} \chi(\theta) = & \chi_0 \Phi_0(\xi) + \chi_1 \Phi_1(\xi) + \\ & \Phi_2(\xi) + \chi_3 \Phi_3(\xi) + \dots \\ = & \chi_0 + \chi_1 \xi_1 + \chi_2 \xi_2 + \chi_3 (\xi_1^2 - 1) + \\ & \chi_4 (\xi_1 \xi_2) + \chi_5 (\xi_2^2 - 1) + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

Por ejemplo, los primeros seis polinomios de Hermite en una dimensión son:

$$\begin{aligned} \Phi_0(\xi) &= 1, \\ \Phi_1(\xi) &= \xi, \\ \Phi_2(\xi) &= \xi^2 - 1, \\ \Phi_3(\xi) &= \xi^3 - 3\xi, \\ \Phi_4(\xi) &= \xi^4 - 6\xi^2 + 3, \\ \Phi_5(\xi) &= \xi^5 - 10\xi^3 + 15\xi, \end{aligned}$$

y para una expansión de segundo orden, los primeros seis polinomios de Hermite en dos dimensiones son:

$$\begin{aligned} \Phi_0(\xi) &= \phi_0(\xi_1) \phi_0(\xi_2) = 1, \\ \Phi_1(\xi) &= \phi_1(\xi_1) \phi_0(\xi_2) = \xi_1, \\ \Phi_2(\xi) &= \phi_0(\xi_1) \phi_1(\xi_2) = \xi_2, \\ \Phi_3(\xi) &= \phi_2(\xi_1) \phi_0(\xi_2) = \xi_1^2 - 1, \\ \Phi_4(\xi) &= \phi_1(\xi_1) \phi_1(\xi_2) = \xi_1 \xi_2, \\ \Phi_5(\xi) &= \phi_0(\xi_1) \phi_2(\xi_2) = \xi_2^2 - 1. \end{aligned}$$

El polinomio del caos forma una base ortogonal completa en el espacio de las variables aleatorias gaussianas $L_2(C)$, es decir,

$$\langle \Phi_i, \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i^2 \rangle \delta_{ij} \quad (17)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es la media del conjunto, este es el producto interno en el espacio de Hilbert de las variables aleatorias gaussianas

$$\langle f(\xi), g(\xi) \rangle = \int f(\xi) g(\xi) W(\xi) d\xi \quad (18)$$

La función de peso es

$$W(\xi) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} e^{-1/2 \xi^T \xi}, \quad (19)$$

donde n es la dimensión de ξ . Lo que distingue la expansión de Wiener-Hermite de otro posible conjunto de expansiones es que estos polinomios son ortogonales con respecto a la función de peso $W(\xi)$ la cual tiene la forma de distribución de probabilidad gaussiana independiente multidimensional con varianza unitaria. Se utilizará el término caos de Hermite de ahora en adelante para denotar los polinomios del caos de Wiener.

2.2.2 El caos polinomial generalizado: caos de Askey

Para trabajar con más variables aleatorias, se introduce la expansión del caos polinomial generalizado, el caos de Askey, como una generalización de la expansión original del caos de Wiener-Hermite. La base de la expansión del caos de Askey se forma con el conjunto de polinomios ortogonales del esquema Askey. Así como en la Sección 2.2.1, se representa el proceso aleatorio de segundo orden $\chi(\theta)$ como

$$\begin{aligned} \chi(\theta) = & c_0 I_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} c_{i_1} I_1(\zeta_{i_1}(\theta)) + \\ & \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} c_{i_1} c_{i_2} I_2(\zeta_{i_1}(\theta), \zeta_{i_2}(\theta)) + \\ & \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} c_{i_1} c_{i_2} c_{i_3} I_3(\zeta_{i_1}(\theta), \zeta_{i_2}(\theta), \zeta_{i_3}(\theta)) + \dots, \end{aligned} \tag{20}$$

donde $I_n(\zeta_{i_1}, \dots, \zeta_{i_n})$ denota los caos de Askey de orden n en términos de las variables aleatorias multidimensionales $\zeta = (\zeta_{i_1}, \dots, \zeta_{i_n})$. En la expansión del caos de Askey, los polinomios I_n no están restringidos a los polinomios de Hermite pero en cambio pueden ser cualquier miembro del esquema de Askey, como se muestra en la Fig. 1. Nuevamente, por conveniencia en la notación, se escribe (20) como:

$$\chi(\theta) = \sum_{j=0}^{\infty} \hat{c}_j \Psi_j(\zeta), \tag{21}$$

donde existe una correspondencia uno a uno entre las funciones $I_n(\zeta_{i_1}, \dots, \zeta_{i_n})$ y $\Psi_j(\zeta)$, y entre sus coeficientes \hat{c}_j y c_{i_1}, \dots, c_{i_n} . Como los polinomios del esquema Askey forman una base completa en el espacio de Hilbert dotado de sus soportes correspondientes, se puede esperar que cada caos de Askey converge a algún funcional $L_2(C)$ en $L_2(C)$ en un espacio funcional de Hilbert correspondiente como un resultado generalizado del teorema de Cameron-Martin (Cameron y Martin, 1947; Ogura, 1972). La relación de ortogonalidad de los polinomios del caos del caos de Askey toma la forma

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \langle \Psi_i^2 \rangle \delta_{ij}, \tag{22}$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota la media del conjunto que es el producto interno en el espacio de Hilbert de las variables ζ

$$\langle f(\zeta), g(\zeta) \rangle = \int f(\zeta) g(\zeta) W(\zeta) d\zeta \tag{23}$$

o

$$\langle f(\zeta), g(\zeta) \rangle = \sum_{\zeta} f(\zeta) g(\zeta) W(\zeta) \tag{24}$$

en el caso discreto. Acá $W(\zeta)$ es la función de peso correspondiente a la base de los polinomios del caos de Askey Ψ_i (Xiu y Karniadakis, 2003). Algunos tipos de polinomios ortogonales del esquema Askey tienen funciones de peso de la misma forma que la función de probabilidad de ciertos tipos de distribuciones aleatorias. En la práctica se escoge el tipo de variable independiente ζ en los polinomios $\Psi_j(\zeta)$ de acuerdo a los tipos de distribución aleatoria que se muestran en la Tabla 1. Los polinomios del caos de Wiener corresponden al caos de Hermite y es un conjunto del caos de Askey. Los caos de Hermite, Laguerre y Jacobi son caos continuos, mientras que los caos de Charlier, Meixner, Krawtchouk y Hahn son caos discretos. En la Tabla 2 se presenta la definición de algunos de los polinomios ya mencionados.

Tabla 1. Correspondencia entre los polinomios del caos del tipo Wiener-Askey y los tipos de variables aleatorias ($N \geq 0$ es un entero finito)

	Variable aleatoria	Caos Wiener-Askey	Soporte
Continua	Gaussiana	Caos Hermite	$(-\infty, \infty)$
	Gamma	Caos Laguerre	$[0, \infty)$
	Beta	Caos Jacobi	$[a, b]$
	Uniforme	Caos Legendre	$[a, b]$
Discreta	Poisson	Caos Charlier	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Binomial	Caos Krawtchouk	$\{0, 1, 2, \dots, N\}$
	Binomial Negativa	Caos Meixner	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Hipergeométrica	Caos Hahn	$\{0, 1, 2, \dots, N\}$

Tabla 2. Definiciones y propiedades de algunos polinomios ortogonales importantes del esquema Askey

Polinomio	Definición
Hermite	$H_n(x) = (2x)^n {}_2F_0\left(-\frac{n}{2}, -\frac{n-1}{2}; -\frac{1}{x^2}\right)$
Laguerre	$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(\alpha+1)_n}{n!} {}_2F_1(n; \alpha+1; x)$
Jacobi	$P_n^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{(\alpha+1)_n}{n!} {}_2F_1(-n, n+\alpha+\beta+1; \alpha+1; \frac{1-x}{2})$
Charlier	$C_n(x; a) = {}_2F_0(-n, -x; -\frac{1}{a})$
Meixner	$M_n(x; \beta, c) = {}_2F_1(-n, -x; \beta; 1-\frac{1}{c})$
Krawtchouk	$K_n(x; p, N) = {}_2F_1(-n, -x; -N; \frac{x}{p}), \quad n = 0, 1, \dots, N$

2.3 Método de Monte Carlo

Con el nombre de una famosa ciudad de los casinos y juegos de azar, el método de Monte Carlo (MC) debe su nombre a los números aleatorios que se utilizan para des-

cribir los posibles resultados de las trayectorias de las partículas. El método de Monte Carlo es la técnica clásica y más usada para la aproximación de valores esperados de cantidades de interés que dependen de la solución de ecuaciones diferenciales con entradas aleatorias. Este algoritmo aproxima la esperanza deseada a través de un promedio de muestras de realizaciones independientes idénticamente distribuidas. Cuando se resuelven ecuaciones diferenciales con variables de entradas aleatorias, este método supone hallar la solución de una ecuación diferencial determinística para cada realización de los parámetros de entrada. Esto hace que el método sea fácil de implementar, el código es reusable y sencillo de paralelizar. Su error numérico es aproximadamente $\mathcal{O}(1/\sqrt{M})$, donde M es el número de realizaciones. La ventaja de utilizar esta aproximación es que la tasa de error mostrada previamente no se ve afectada con respecto al número de variables aleatorias en el problema, haciendo al método bastante atractivo a la hora de resolver problemas con entradas aleatorias de dimensiones grandes.

El uso más común de los métodos de Monte Carlo es en la evaluación de integrales multidimensionales. Considere la primera aproximación de una integral obtenida de la regla trapezoidal.

$$\int_a^b f(\xi) d\xi = \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i) \frac{b-a}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right), x_i = a + \frac{b-a}{N-1} i \quad (25)$$

En lugar de un muestreo uniforme, imagine una evaluación donde las posiciones $\{x_i\}$ son números aleatorios uniformemente distribuidos en el intervalo $[a, b]$, lo que produce una integración de Monte Carlo

$$\int_a^b f(\xi) d\xi = \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i) \frac{b-a}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right), x_i \in \mathcal{U}(a, b). \quad (26)$$

La tasa de convergencia es menor que la de un muestreo uniforme; sin embargo la fuerza aparece para las integrales en las dimensiones superiores $d > 2$, donde las escalas de error de Monte Carlo como $N^{-1/2}$ es independientemente del número de dimensiones, al contrario de la escala $N^{-1/d}$ para cuando se utilizan mallas uniformes

3 El polinomio del caos aplicado a tres ecuaciones diferenciales ordinarias

3.1 Un modelo de crecimiento de bacterias con coeficientes aleatorios

Sea $y(t)$ la población de una especie determinada en el tiempo (t) , entonces un modelo simple para el crecimiento o decadencia de la población consiste en que la tasa de cambio es proporcional al tamaño de la población. Este modelo fue propuesto por Thomas Malthus en 1798 (Malthus, 1999). La ecuación diferencial para este modelo es

$$\frac{dy}{dt} = ry(t) \quad (27)$$

donde r es la tasa de crecimiento. La solución para un valor inicial de la población $y(0) = y_0$ es $y(t) = y_0 e^{rt}$. Por ejemplo para un experimento de nueve días, las bacterias tienen un crecimiento que parece exponencial (Stanescu y Chen-Charpentier, 2009). Pero, como la población se mantiene en crecimiento dentro de las probetas, comienza una competencia por los recursos limitados, principalmente por la luz y CO_2 . En 1838, Verhulst (Verhulst, 1838) propuso que la tasa de crecimiento debería disminuir con el tamaño de la población. Esto conduce a la ecuación logística

$$\frac{dy}{dt} = r \left(1 - \frac{y}{K}\right) y \quad (28)$$

Aquí r sigue siendo la tasa de crecimiento y K es el valor de equilibrio o capacidad de carga del sistema. La solución, sujeta a la condición inicial $y(0) = y_0$, es

$$y(t) = \frac{y_0 K}{y_0 + (K - y_0) e^{-rt}} \quad (29)$$

3.2 Solución de la ecuación diferencial aleatoria del crecimiento exponencial utilizando caos polinomial

Para un crecimiento exponencial se considera la siguiente ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{dy(t; \omega)}{dt} = r(\omega)y, \quad y(0; \omega) = y_0(\omega) \quad (30)$$

donde la tasa de crecimiento $r(\omega)$, así como la variable dependiente $y(t; \omega)$, para un tiempo t , se suponen como variables aleatorias que resultan de un experimento ω que toma valores del conjunto de todos los resultados Ω . Esta última se supone que está debidamente equipada con una σ -álgebra \mathcal{F} y una medida de probabilidad P tal que la tripleta (Ω, \mathcal{F}, P) forma un espacio de probabilidad (Ross, 2002). Más aún, la condición inicial $y_0(\omega)$ y la tasa de crecimiento son variables aleatorias independientes. Para desarrollar una metodología más general para la solución numérica de otras ecuaciones se sigue la aproximación del caos polinomial propuesta en (Ghanem y Spanos, 1991; Xiu y Karniadakis,

2002) utilizando la expansión del caos de Wiener-Hermite. En este contexto, una cantidad aleatoria $\chi(\omega)$ se proyecta en el espacio del polinomio del caos dado por (11). El polinomio del caos se puede organizar en una secuencia $\Phi_i(\xi(\omega))$, detallada en (14), de tal manera que la expansión de las variables aleatorias y del proceso estocástico que aparecen en (30) se expresan como

$$r(\omega) = \sum_{j=0}^{\infty} r_j \Phi_j(\xi(\omega)),$$

$$y(t; \omega) = \sum_{i=0}^{\infty} y_i(t) \Phi_i(\xi(\omega)), \tag{31}$$

donde los Φ_i 's son funciones de base polinomiales escogidas apropiadamente (ver sección 2.2) del vector aleatorio ξ . Una proyección de Galerkin utilizando la propiedad (17), junto con el truncamiento de la serie infinita a $P + 1$ términos permite obtener un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que rigen la evolución en el tiempo de los coeficientes del caos de la solución

$$\frac{dy_m}{dt} = \frac{1}{\langle \Phi_m, \Phi_m \rangle} \sum_{i=0}^P \sum_{j=0}^P a_{ijm} r_j y_i(t) \tag{32}$$

donde $a_{ijm} = \langle \Phi_m, \Phi_j \Phi_i \rangle$. Este sistema se integra en el tiempo utilizando métodos numéricos apropiados, y por tanto se pueden utilizar los coeficientes del caos obtenidos para calcular las cantidades de interés. Por ejemplo, la media de y es el valor del primer coeficiente $y_0(t)$, es decir, $\bar{y}(t) = y_0(t)$, mientras que la varianza es $\mathcal{V}[y] = \sum_{i=0}^P y_i^2(t) \langle \Phi_i, \Phi_i \rangle$.

Dado que $y_0(\omega)$ y $r(\omega)$ son independientes, de la solución exacta de la ecuación (27) se tiene

$$\bar{y}(t) = \bar{y}_0 \mathcal{E}[e^{rt}] = \bar{y}_0 \int e^{xt} f_r(x) dx \tag{33}$$

donde \bar{y}_0 es la media de $y_0(\omega)$, $f_r(x)$ es la función de densidad de probabilidad para la tasa de crecimiento, y la integración se debe realizar sobre el soporte de f_r

3.3 Solución de la ecuación diferencial aleatoria de crecimiento logístico

En la ecuación de crecimiento logístico (28), la tasa de crecimiento r y el valor de equilibrio (o saturación) κ se consideran como variables aleatorias. Como se quiere lograr una proyección de Galerkin de la solución $y(t)$ sobre

los polinomios del caos, y tomando en cuenta el hecho de que el valor de saturación κ es necesariamente positivo, es útil introducir $\kappa(\omega) = 1/K(\omega)$. Al expandir esta cantidad en la base del caos polinomial, de manera similar como en (31), truncando las series e introduciendo las expresiones correspondientes en la ecuación (28), se tiene:

$$\sum_{i=0}^P \frac{dy_i(t)}{dt} \Phi_i = \sum_{i=0}^P \sum_{j=0}^P r_j y_i(t) \Phi_j \Phi_i \left[1 - \sum_{i=0}^P \sum_{j=0}^P \kappa_k y_i(t) \Phi_k \Phi_i \right]. \tag{34}$$

Tomando nuevamente el producto interno con las funciones bases Φ_m , se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para los coeficientes dependientes del tiempo en la solución:

$$\frac{dy_m(t)}{dt} = \frac{1}{\langle \Phi_m, \Phi_m \rangle} \left(\sum_{i,j=0}^P r_j y_i(t) a_{ijm} - \sum_{i,j,k,l=0}^P y_i(t) r_j \kappa_k y_l(t) b_{ijklm} \right), \tag{35}$$

donde $m = 0, 1, \dots, P$, $a_{ijm} = \langle \Phi_m, \Phi_i \Phi_j \rangle$ y $b_{ijklm} = \langle \Phi_m, \Phi_i \Phi_j \Phi_k \Phi_l \rangle$.

3.4 Solución de la ecuación diferencial aleatoria de una ecuación diferencial de Riccati

En esta sección aplicaremos el caos polinomial a una ecuación diferencial de Riccati. Considere la siguiente ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{dy(t)}{dt} = a(\omega)y(t) - b(\omega)y^2(t) + 1, \quad y_0 = y(0) \tag{36}$$

la cual se puede ver como una ecuación diferencial estocástica si se consideran los siguientes coeficientes aleatorios $a = a(\omega)$ y $b = b(\omega)$. Por lo tanto, la solución $y(t)$ de la ecuación (36) se convierte en un proceso estocástico $y(t; \omega)$. Se asume que los procesos estocásticos y las variables aleatorias de este problema se pueden parametrizar por una sola variable aleatoria ω . Esto implica que el problema modelado por la ecuación (36) se resume en encontrar a $y(t; \omega)$ tal que satisfaga:

$$\frac{dy(t; \omega)}{dt} = a(\omega)y(t; \omega) - b(\omega)y^2(t; \omega) + 1, \quad \text{en } D = T \times S, \tag{37}$$

y la condición inicial $y(t = 0) = y_0$. El dominio D consiste en el producto del dominio temporal $T = [0, t_{final}]$ y el dominio S , siendo el soporte de la variable ω . Ahora, para

encontrar una solución numérica a través de la expansión del caos polinomial, siguiendo el enfoque de Wiener-Hermite, se toma en cuenta nuevamente que dicha expansión se puede organizar en una secuencia $\Phi_i(\xi(\omega))$, de tal manera que la expansión de los procesos aleatorios que aparecen en la ecuación (37) toma la forma:

$$\begin{aligned} a(\omega) &= \sum_{j=0}^{\infty} a_j \Phi_j(\xi(\omega)), \\ b(\omega) &= \sum_{j=0}^{\infty} b_j \Phi_j(\xi(\omega)), \\ y(t; \omega) &= \sum_{i=0}^{\infty} y_i(t) \Phi_i(\xi(\omega)), \end{aligned} \tag{38}$$

donde los Φ_i 's son funciones de base polinomiales escogidas apropiadamente (ver sección 2.2) del vector aleatorio ξ , y los coeficientes dependientes del tiempo $y_i(t)$ son desconocidos, y se deben determinar. Al sustituir las expansiones (38) en la ecuación (37) se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^P y_i' \Phi_i &= \sum_{j=0}^P \sum_{i=0}^P a_j y_i(t) \Phi_j \Phi_i - \\ &\sum_{k=0}^P \sum_{j=0}^P \sum_{i=0}^P b_k y_j(t) y_i(t) \Phi_k \Phi_j \Phi_i + 1. \end{aligned} \tag{39}$$

Al realizar una proyección de Galerkin, utilizando la propiedad (17), junto con el truncamiento de la serie infinita a $P + 1$ términos, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que rigen la evolución del tiempo de los coeficientes del caos de la solución:

$$\begin{aligned} \frac{dy_m}{dt} &= \frac{1}{\langle \Phi_{m'}, \Phi_m \rangle} \left[\sum_{j=0}^P \sum_{i=0}^P a_j y_i(t) r_{ijm} \right] - \\ &\frac{1}{\langle \Phi_{m'}, \Phi_m \rangle} \left[\sum_{k=0}^P \sum_{j=0}^P \sum_{i=0}^P b_k y_j(t) y_i(t) s_{ijkm} + 1 \right], \end{aligned} \tag{40}$$

donde $r_{ijm} = \langle \Phi_{m'}, \Phi_j \Phi_i \rangle$, y $s_{ijkm} = \langle \Phi_{m'}, \Phi_k \Phi_j \Phi_i \rangle$.

4 Simulaciones numéricas utilizando caos polinomial

En esta Sección se muestran los resultados numéricos de aplicar el caos polinomial para resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias del crecimiento exponencial, la logística y una de Riccati. En las situaciones más prácticas,

un subconjunto de coeficientes aleatorios en el modelo debe satisfacer las restricciones inherentes del modelo mismo. Por ejemplo, para el modelo de crecimiento exponencial, la población inicial $y_0(\omega)$ tiene que ser positiva; no se requiere alguna condición para $r(\omega)$, aunque si se toma negativa conducirá a un decaimiento del tamaño de la población en el tiempo.

4.1 Caos polinomial aplicado a la ecuación diferencial aleatoria del crecimiento exponencial

Aquí resolveremos la siguiente ecuación diferencial del crecimiento exponencial:

$$\frac{dy}{dt} = ry(t), \tag{41}$$

donde r es la tasa de crecimiento y valor inicial $y(0) = y_0$. La solución determinística (sin considerar r aleatoria) para esta ecuación es $y(t) = y_0 e^{rt}$. En la Fig. 2 se puede observar la evolución de la media, la solución del problema determinístico asociado y el intervalo de confianza para las soluciones de la ecuación diferencial aleatoria (41) suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(2.0, 2.0/16)$ para el parámetro r y un valor inicial $y(0) = 1.0$. Estas soluciones se calcularon utilizando el caos polinomial en conjunto con los polinomios de Hermite debido a su conveniencia para parámetros que siguen una distribución gaussiana. Es importante resaltar la precisión de la solución esperada a pesar de solo estar usando solo dos dimensiones de caos en las expansiones de caos polinomial. La solución del polinomio del caos se muestra para la media (línea de color azul) junto a dos curvas límites que representan el intervalo de confianza $[\bar{y}(t) - 2S(t), \bar{y}(t) + 2S(t)]$,

donde $S(t) = \sqrt{\mathcal{V}[y(t)]}$ es la desviación estándar en la solución. Es importante resaltar que al introducir valores pequeños de aleatoriedad en el modelo permite una representación más fiel de la evolución en el tiempo de la población.

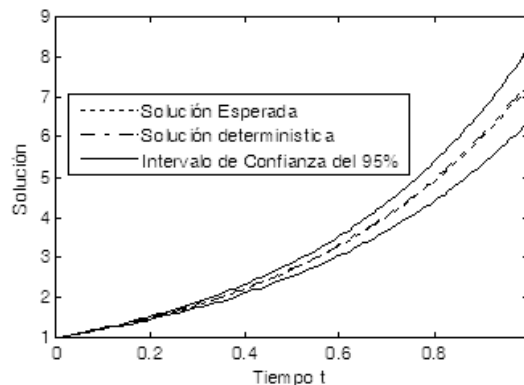


Fig. 2. Evolución de la media y del intervalo de confianza de la población en el modelo (41) en comparación con su solución determinística.

4.2 Caos polinomial aplicado a la ecuación diferencial aleatoria logística

Aquí resolveremos la ecuación diferencial logística que surge cuando los recursos son limitados. La ecuación diferencial logística aleatoria a resolver es:

$$\frac{dy}{dt} = r \left(1 - \frac{y}{K}\right) y \tag{42}$$

Aquí r sigue siendo la tasa de crecimiento y K es el valor de equilibrio. La solución, sujeta a la condición inicial $y(0) = y_0$, es

$$y(t) = \frac{y_0 K}{y_0 + (K - y_0)e^{-rt}} \tag{43}$$

En la Fig. 3 se puede observar la evolución de la media, la solución del problema determinístico asociado y el intervalo de confianza para las soluciones de la ecuación diferencial aleatoria (42) suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(0.6157, 0.04)$ para el parámetro r , una distribución gaussiana $\mathcal{N}(5.56, 0.00)$ para el parámetro K y un valor inicial $y(0) = 0.1244$. Como se puede observar en la Fig. 3 el caos polinomial genera soluciones con buena precisión usando solo dos dimensiones de caos en las expansiones de caos polinomial. Por otra parte, en la Fig. 4 se asume una distribución gaussiana $\mathcal{N}(0.6157, 0.00)$ para el parámetro r una distribución gaussiana $\mathcal{N}(5.56, 0.01)$ para el parámetro K .

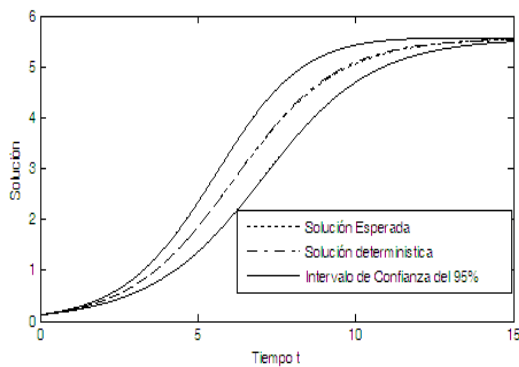


Fig. 3. Evolución de la media y del intervalo de confianza de la población en el modelo (42) en comparación con su solución exacta suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(0.6157, 0.04)$ para el parámetro r .

Es importante resaltar las diferencias entre las Figs. 3 y 4, donde se puede observar que la aleatoriedad del parámetro K afecta el punto de equilibrio del modelo logístico. Este último hecho puede ser fundamental en el análisis de mode-

los logísticos del mundo real donde la incertidumbre en el valor K puede resultar en diversidad de conclusiones. Por último, se debe mencionar que estas soluciones se calcularon utilizando el caos polinomial con los polinomios de Hermite.

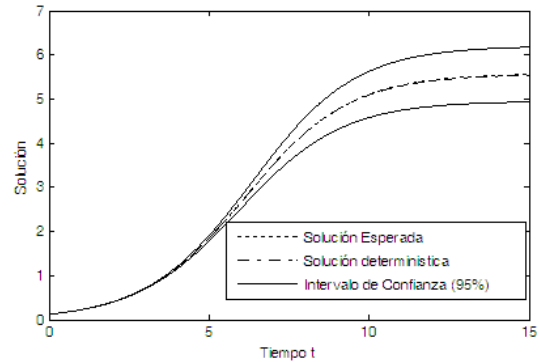


Fig. 4. Evolución de la media y del intervalo de confianza de la población en el modelo (42) en comparación con su solución exacta suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(5.56, 0.01)$ para el parámetro K .

Se utilizó el método de Euler tanto implícito y explícito con distintos tamaños de paso en el tiempo ($\Delta t < 0.01$) para resolver las ecuaciones diferenciales luego de aplicar el caos polinomial pero no hubo diferencias significativas.

4.3 Caos polinomial aplicado a una ecuación diferencial de Riccati

Aquí resolveremos la siguiente ecuación diferencial de Riccati:

$$\frac{dy(t)}{dt} = a(\omega)y(t) - b(\omega)y^2(t) + 1, \quad y_0 = y_0 \tag{44}$$

Los parámetros a y b se asumen como variables aleatorias con distribuciones gaussianas $\mathcal{N}(2, 0.0125)$ y $\mathcal{N}(1, 0.00625)$ respectivamente. La solución de la ecuación diferencial determinística asociada, sujeta a la condición inicial $y(0) = y_0$, es

$$y(t) = \frac{1}{2b} \left(a + \tanh \left(\frac{1}{2} t \sqrt{a^2 + 4b} - \operatorname{arctanh} \left(\frac{-2y_0 b + a}{\sqrt{a^2 + 4b}} \right) \right) \sqrt{a^2 + 4b} \right) \tag{45}$$

En la Fig. 5 se puede observar la evolución de la media, la solución del problema determinístico asociado y el intervalo de confianza para las soluciones de la ecuación diferencial aleatoria de Riccati (44) asumiendo que los parámetros a y b son variables aleatorias con distribuciones gaussianas $\mathcal{N}(2, 0.0125)$ y $\mathcal{N}(1, 0.00625)$ respectivamente y un valor inicial $y(0) = 0.1$. Como se puede observar en la Fig. 5 el caos polinomial genera soluciones con

buena precisión usando solo dos dimensiones de caos en las expansiones de caos polinomial.

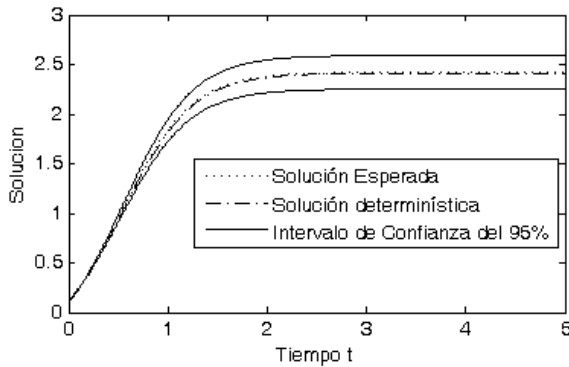


Fig. 5. Evolución de la media y el intervalo de confianza de la solución de la ecuación de Riccati (44) en comparación con su solución exacta.

5 Comparación del caos polinomial y el método de Monte Carlo.

En la Fig. 6 se puede observar como mejora la precisión del método de Monte Carlo para la ecuación diferencial logística (42) al utilizar mayor número de realizaciones. En la Fig. 7 también se puede observar como la precisión del método de Monte Carlo con 1000 realizaciones no es igual al método de caos polinomial, el cual muestra exactitud. El método de Monte Carlo muestra efectividad pero necesita de muchas realizaciones. De esta forma podemos sugerir que para las ecuaciones diferenciales ordinarias aleatorias es recomendable utilizar el caos polinomial.

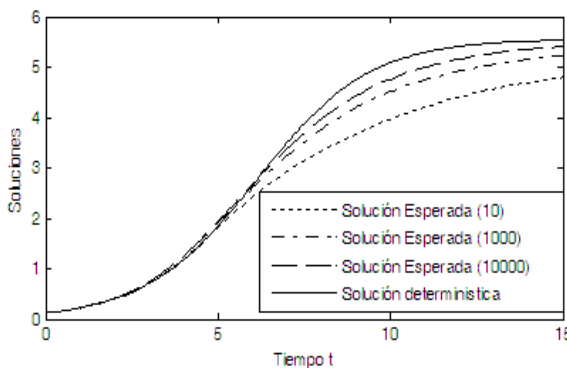


Fig. 6. Comparación del método de Monte Carlo para distintas realizaciones en la ecuación de crecimiento logístico suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(0.6157, 0.04)$ para el parámetro r .

6 Análisis y conclusiones

En este artículo aplicamos el caos polinomial para resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias aleatorias exponencial, logística y una de Riccati. Estas ecuaciones di-

ferenciales ordinarias aleatorias surgen en modelos matemáticos que provienen de muchas ramas de las ciencias e ingeniería. La base teórica de la aproximación por caos polinomial está basada en que una expansión del caos polinomial converge en algún funcional $L^2(C)$ en el sentido

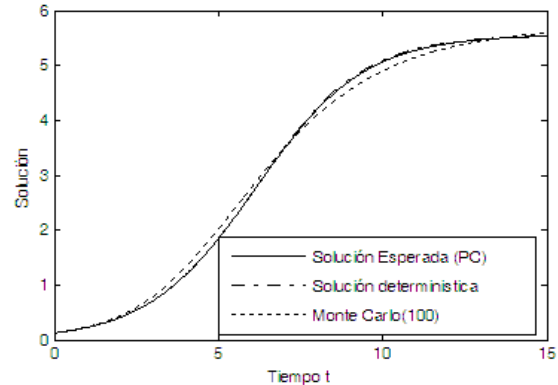


Fig. 7. Comparación del método de Monte Carlo (utilizando 1000 realizaciones) y del caos polinomial en la ecuación de crecimiento logístico suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(0.6157, 0.04)$ para el parámetro r .

$L^2(C)$. En el contexto de los procesos estocásticos, esto implica que cada proceso estocástico con momento de segundo orden finito se puede representar por una expansión del caos polinomial (infinita).

Para obtener los resultados numéricos hemos utilizado los polinomios de Hermite debido a su conveniencia cuando los parámetros aleatorios siguen una distribución gaussiana. Los resultados numéricos muestran los intervalos de confianza y valores esperados para las soluciones. Los resultados encontrados aquí muestran la efectividad y confiabilidad del método. Adicionalmente, las comparaciones de los resultados numéricos con los del método de Monte Carlo muestran la rapidez y exactitud del método solo utilizando pocas dimensiones del caos. De esta forma podemos sugerir que para las ecuaciones diferenciales ordinarias aleatorias es recomendable utilizar el caos polinomial.

Futuras líneas de investigación consisten en extrapolar este trabajo para las ecuaciones diferenciales parciales aleatorias y adicionalmente considerar otro tipo de distribuciones distintas a las gaussianas. Para estos casos será conveniente explorar otro tipo de polinomios como el de Laguerre o Charlier. Adicionalmente, se desea aplicar esta técnica a modelos con datos reales con cierto grado de incertidumbre en sus parámetros.

Referencias

Askey R. y Wilson J, 1985, Some basic hypergeometric polynomials that generalize Jacobi polynomials, *Memoirs of the American Mathematical Society*, AMS, Providence, RI, pp. 319.

- Beckmann P, 1973, Orthogonal Polynomials for Engineers and Physicists, Golem Press.
- Cameron R H y Martin W T, 1947, The orthogonal development of nonlinear functionals in series of Fourier– Hermite functionals, Ann. Math. Vol. 48, pp. 385.
- Chihara T S, 1978, An Introduction to Orthogonal Polynomials, Gordon and Breach Science Publishers.
- Ghanem R, Spanos P D, 1991, Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach, Dover Publications, Mineola, NJ.
- Koekoek R y Swarttouw R F, 1998, The Askey-scheme of hypergeometric orthogonal polynomials and its q-analogue, Technical Report 98-17, Department of Technical Mathematics and Informatics, Delft University of Technology.
- Li T.Y. y Yorke J A, 1975, Period three implies chaos, Amer. Math. Monthly, Vol. 82, pp. 985-992.
- Malthus T R, 1999, An Essay on the Principal of Population, Oxford World's Classics Paperbacks, Oxford University Press, Oxford.
- Mood A M, Graybill F A y Boes D C, 1950, Introduction to the theory of statistics, 3rd Ed., McGraw-Hill.
- Ogura H., 1972, Orthogonal functionals of the Poisson process, IEEE Trans. Info., Theory 18, pp. 473–481.
- Ross S, 2002, A First Course in Probability, Prentice Hall, New Jersey.
- Schoutens W, 2000, Stochastic Processes and Orthogonal Polynomials, Springer, New York.
- Stanescu D, Chen-Charpentier B, 2009, Random coefficient differential equation models for Monod kinetics, Discrete and continuous dynamical systems, pp. 719-728.
- Szegő G, 1939, Orthogonal Polynomials, AMS, Providence, RI.
- Verhulst P F, 1838, Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement, Corr. Math et Phys., No. 10, pp. 113–121.
- Wiener N, 1938, The homogeneous chaos, Am. J. Math. Vol. 60, pp. 897–936.
- Xiu D y Karniadakis G.E, 2002, The Wiener–Askey polynomial chaos for stochastic differential equations, SIAM J. Sci. Comput. Vol. 24, pp. 619–664.
- Xiu D, Karniadakis G E, 2003, Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos, Journal of Computational Physics, vol. 187, pp. 137-167.

Recibido: 22 de febrero de 2011

Revisado: 09 de noviembre de 2011

