

Cómputo Científico

Tarea 7

MCMC: Metrópolis-Hastings II

Iván Irving Rosas Domínguez

27 de diciembre de 2023

Con el algoritmo Metrópolis-Hastings (MH), simular lo siguiente, contemplando que en cada ejercicio:

- Establece cual es tu distribución inicial.
- Grafica la evolución de la cadena.
- Indica cuál es el Burn-in.
- Comenta qué tan eficiente es la cadena.
- Implementa el algoritmo MH considerando una propuesta diferente.

Todos los ejercicios de esta tarea se encuentran en el script *Cómputo Tarea 7* divididos con comentarios. Asimismo, la semilla utilizada para todos los resultados está dada por `np.random.seed(10)`. Por motivo de brevedad en este documento los detalles sobre la implementación de las funciones se encuentran en los comentarios del código.

Ejercicio 1:

Sean $x_i \sim \Gamma(\alpha, \beta)$; $i \in \{1, \dots, n\}$. Simular datos x_i con $\alpha = 3$ y $\beta = 100$ considerando los casos $n = 4$ y $n = 30$. Con $\alpha \sim U(1, 4)$, $\beta \sim \exp(1)$ distribuciones a priori, se tiene la posterior

$$f(\alpha, \beta | \bar{x}) \propto \frac{\beta^{n\alpha}}{\Gamma^n(\alpha)} r_1^{\alpha-1} e^{-\beta(r_2+1)}, \quad 1 \leq \alpha \leq 4, \quad \beta > 0.$$

con $r_2 = \sum_{i=1}^n x_i$ y $r_1 = \prod_{i=1}^n x_i$.

En ambos casos, grafica los contornos para visualizar dónde está concentrada la posterior. Utilizar la propuesta

$$q\left(\begin{pmatrix} \alpha_p \\ \beta_p \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \end{pmatrix},$$

donde

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}_2\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}\right).$$

Solución:

Para el análisis de esta implementación, así como del resto de los incisos, se construyeron las funciones respectivas para evaluar dos puntos en la posterior, para calcular el cociente de MH y para realizar el algoritmo mismo. Dichas funciones tienen la particularidad de poder cambiar entre la propuesta 1, que contiene la implementación correspondiente al ejercicio en cuestión de la tarea, y la propuesta 2, que contiene la implementación diferente. La implementación del algoritmo utilizando una propuesta diferente se difiere siempre hasta el final de los incisos.

Dicho lo anterior, comenzamos este ejercicio separando los casos $n = 4$ y $n = 30$

Caso n=4

En este caso, se simulan primero 4 datos X_1, \dots, X_4 con distribuciones $\Gamma(3, 100)$. Se guardan las sumas y los productos tal y como indica el ejercicio, y se implementa el algoritmo. Se obtienen los siguientes resultados:

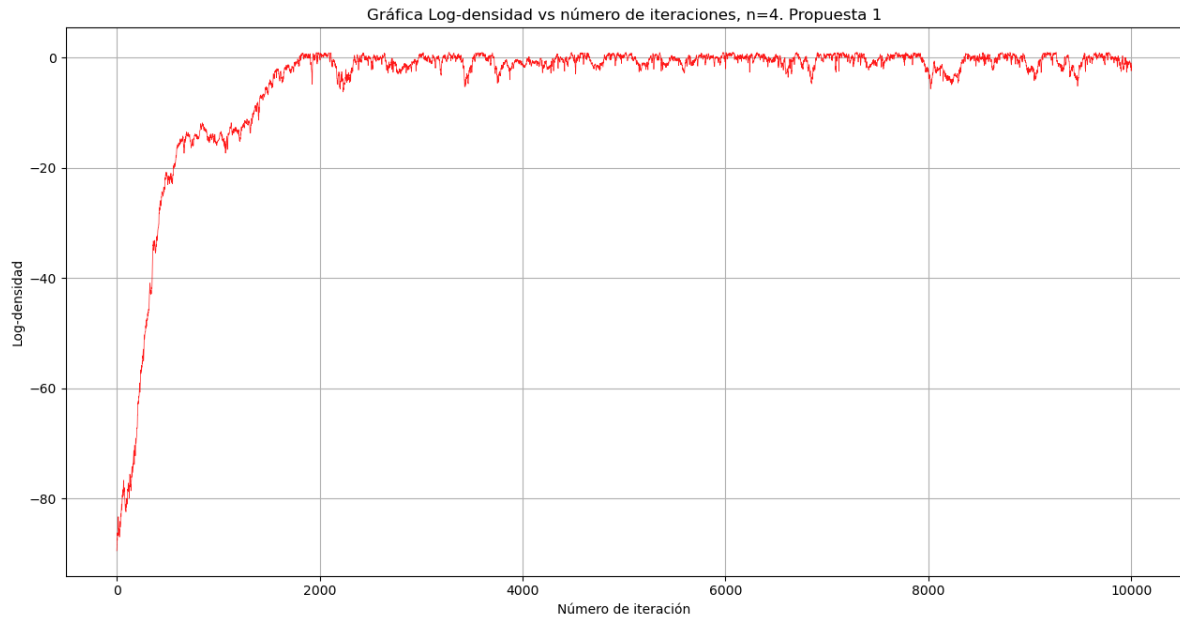


Figura 1:

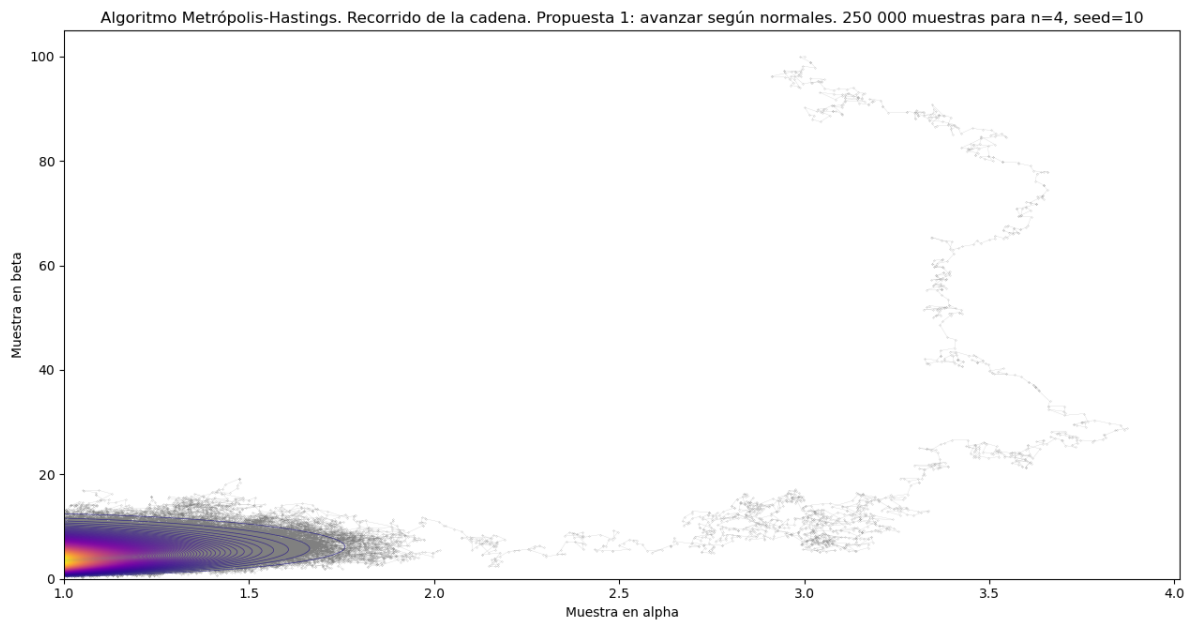


Figura 2:

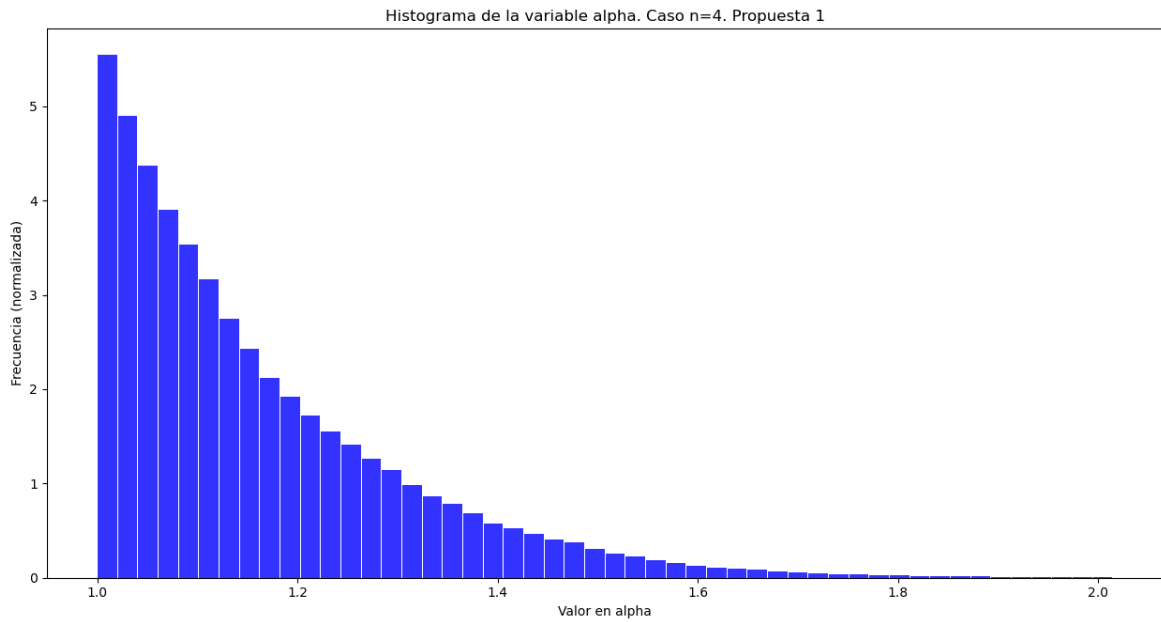


Figura 3:

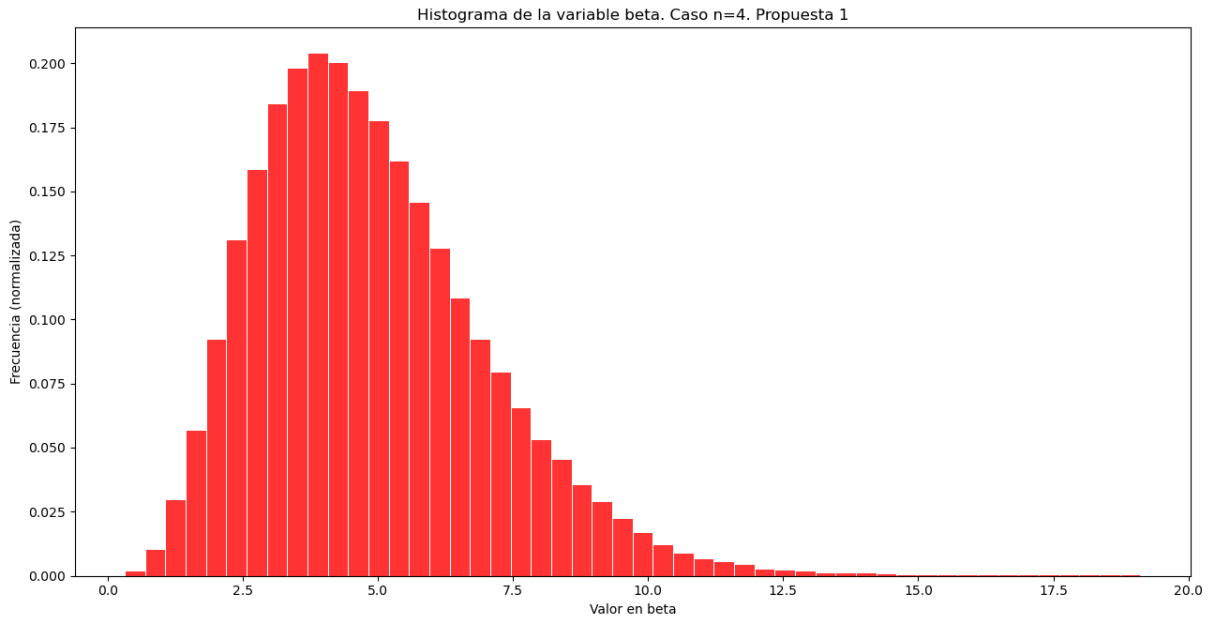


Figura 4:

En particular de la figura 1 se puede deducir que un burn-in adecuado ronda $n = 3000$. En la figura 2 podemos apreciar la convergencia de la cadena hacia la distribución objetivo. Finalmente en las figuras 3 y 4 se aprecian las densidades marginales de lo que serían los parámetros a posteriori α y β . Dichos histogramas ya tienen en cuenta el burn-in. A primera vista tienen forma de exponenciales y gamma respectivamente.

Caso $n=30$

Simulamos ahora $X_1, \dots, X_{30} \sim \Gamma(3, 100)$. Nuevamente se implementan las sumas, el producto, y se ejecuta el algoritmo. Los resultados a continuación: En particular, de la figura 5 nuevamente se puede deducir que un burn-in adecuado ronda

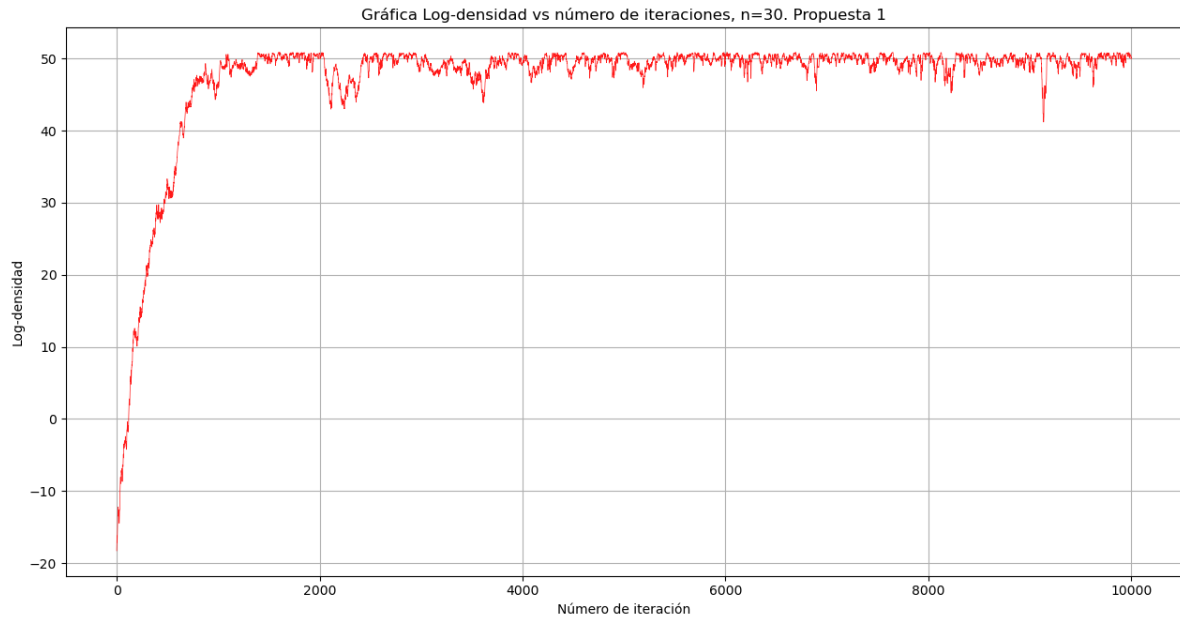


Figura 5:

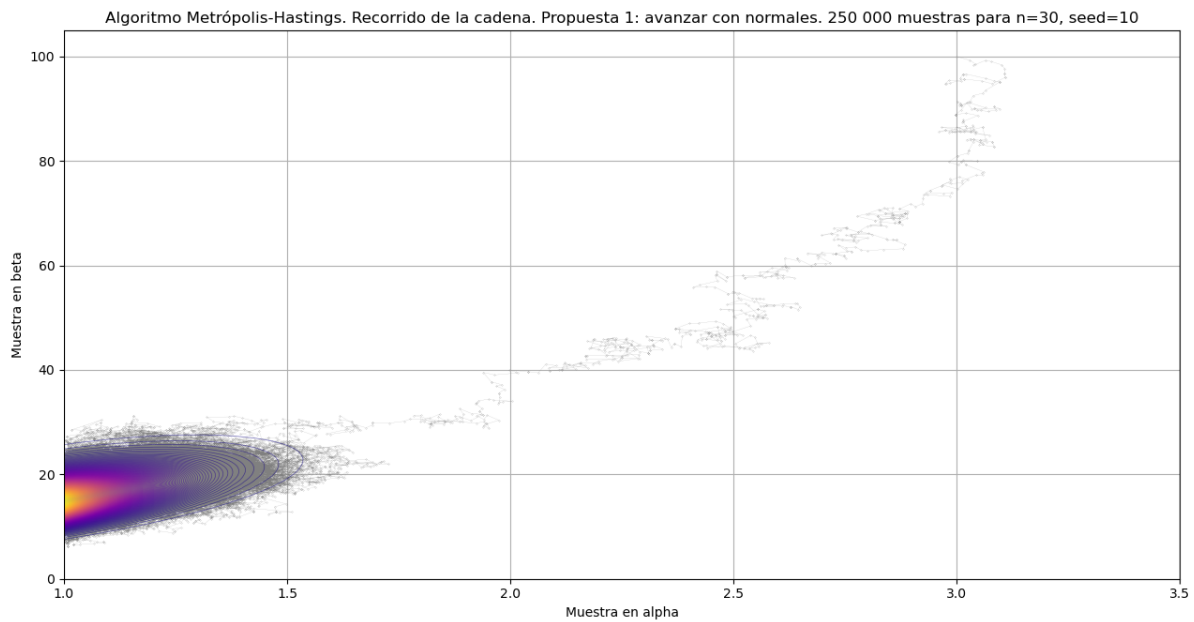


Figura 6:

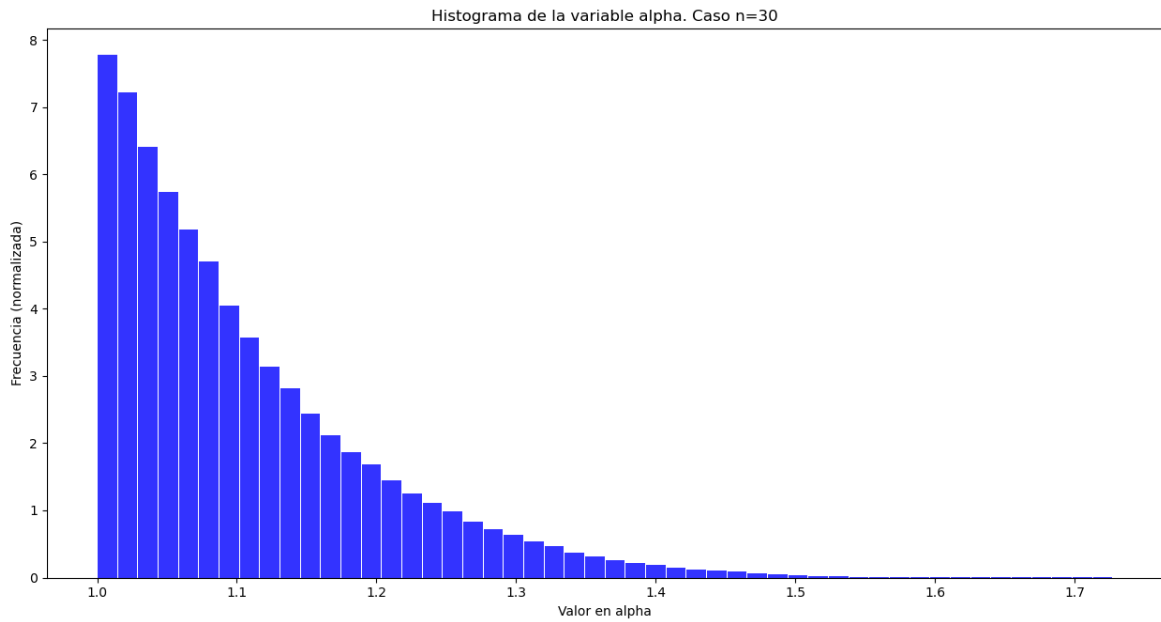


Figura 7:

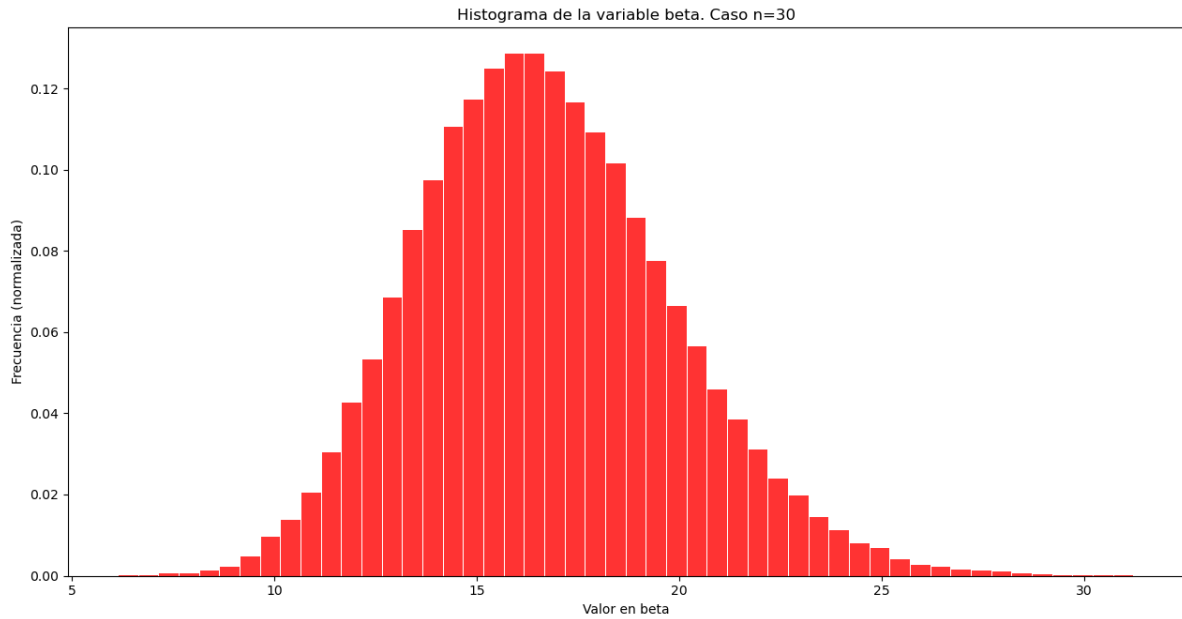


Figura 8:

la iteración 3000. Luego, tal es el valor seleccionado. La figura 6 nos da una idea de la convergencia de la cadena hacia la distribución objetivo. Observamos un mejor comportamiento en cuanto a la 'rapidez' a la que la cadena converge. Esto sin duda tiene que ver con los parámetros σ_1 y σ_2 utilizados en la propuesta. Finalmente, las figuras 7 y 8 son las densidades marginales extraídas de las muestras. Ambas nuevamente presentan un comportamiento exponencial y gamma respectiva-

mente. Los histogramas ya tienen en cuenta el burn-in.

Para puntualizar lo dicho antes:

- **Distribución inicial:** tomamos el vector $X_0 = (3, 100)$ como propuesta. Dicho punto inicial está dentro de las simulaciones $\alpha \sim U(1, 4)$ y $\beta \sim \exp(1)$
- **Grafica la evolución de la cadena:** ver figuras arriba
- **Burn-in:** para ambos casos, se toma un burn-in=3000. Su justificación está en las figuras anteriormente citadas.
- **¿Qué tan eficiente es la cadena?:** una manera de medir la eficacia de la cadena es observar la gráfica de la log-densidad evaluada en las muestras. Si dicha gráfica es tal que se deshace de los valores 'atípicos' en pocas iteraciones, podremos decir que la cadena ha llegado a la distribución objetivo y se mantiene cerca de esta en esas pocas iteraciones, por lo que la cadena es eficiente.

En el caso $n = 4$, se maneja un burn-in de 3000 justificado en las gráficas de la log-densidad vs el número de iteraciones. Se puede concluir que esta cadena es más eficiente que la cadena que utiliza una propuesta diferente (ver debajo). Los parámetros de la cadena están fijados en $\sigma_1 = 0,0005$ y $\sigma_2 = 0,5$ respectivamente, esto nos indica que se avanza en la variable α (midiendo las cosas en la varianza de la normal propuesta) 1000 veces más en tamaño que lo que se avanza en el parámetro β . Esto se justifica pues β tiene soporte en toda la recta real, mientras que α solo en $(1, 4)$.

- **Implementa el algoritmo MH considerando una propuesta diferente.** En este caso, se decide implementar la propuesta $y \sim U([-0,03, 0,03] \times [-0,5, 0,5])$. Esto es, a cada paso, se simula una uniforme con centro en el punto actual de la cadena, donde la variable uniforme (un cuadradito) tiene de ancho 0.06 y alto 1. Se calcula el cociente de Metrópolis-Hastings y se rechaza o acepta según tal número. Esto nos produce los siguientes resultados. Separamos nuevamente los dos casos anteriores.

Caso n=4

Obtenemos los siguientes resultados: De la figura 9 se puede deducir que un burn-in adecuado ronda la iteración 7000.

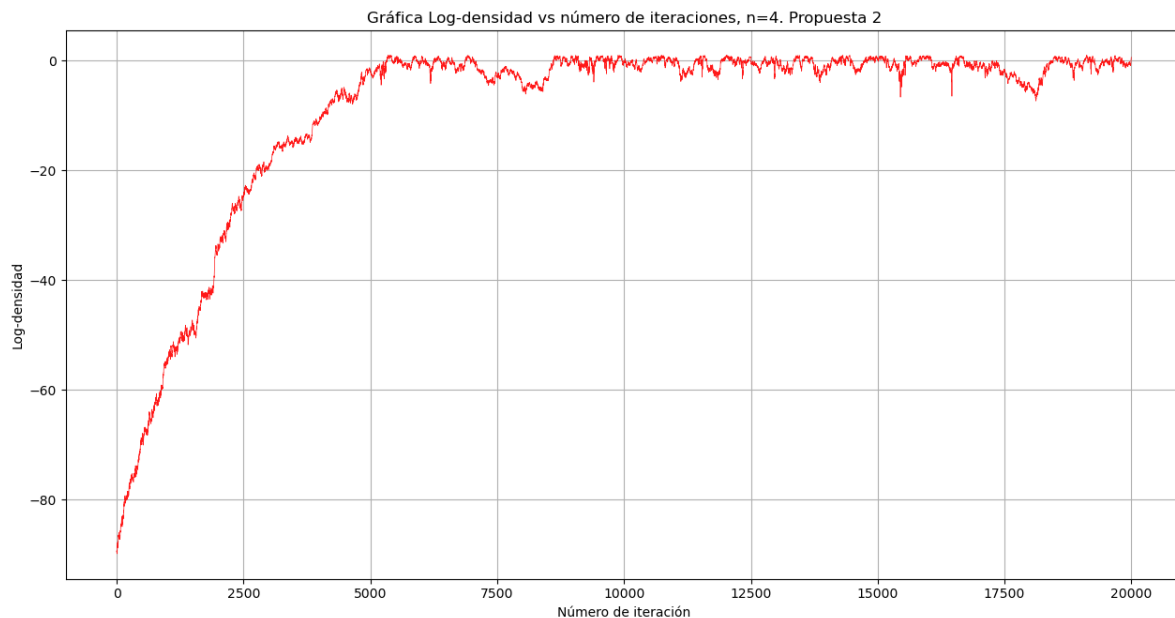


Figura 9:

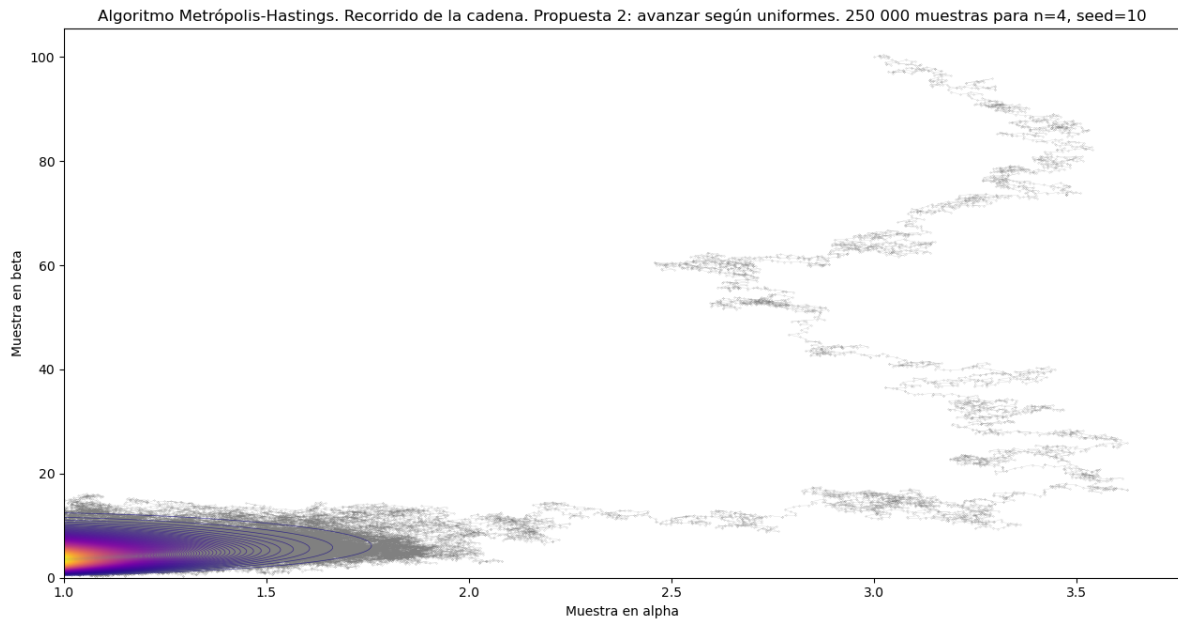


Figura 10:

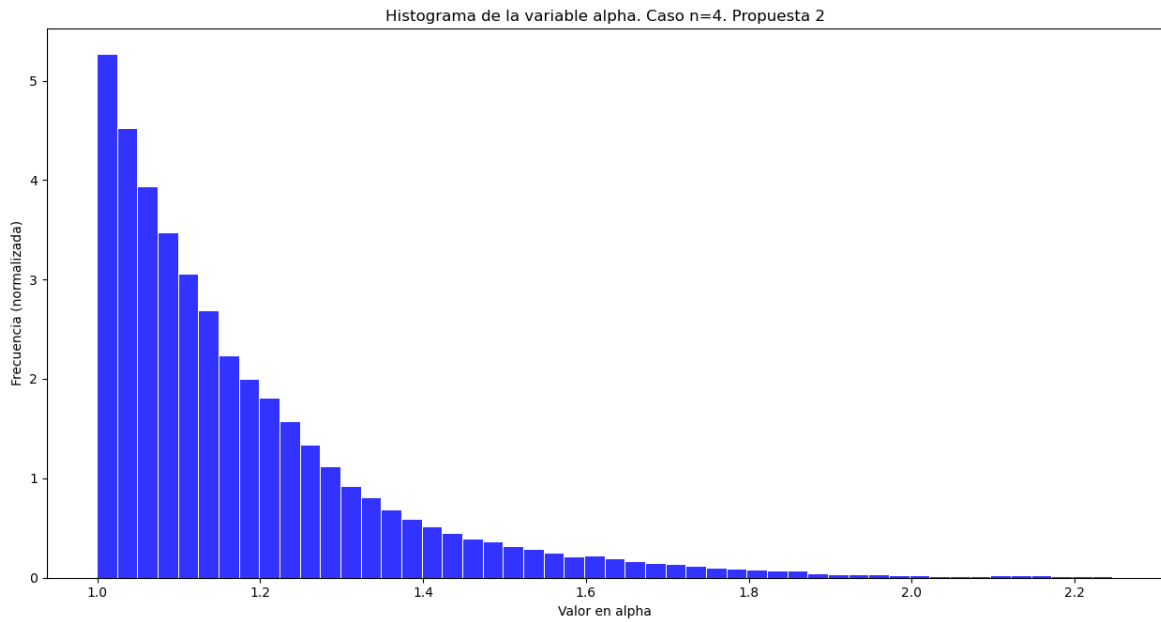


Figura 11:

El avance de la cadena se puede ver en la figura 10, mientras que en la figura 11 y 12 se ven los histogramas que aproximan las densidades de α y β . Los histogramas ya contemplan burn-in. Su comportamiento es muy similar a los de las figuras 3 y 4 con la propuesta 1.

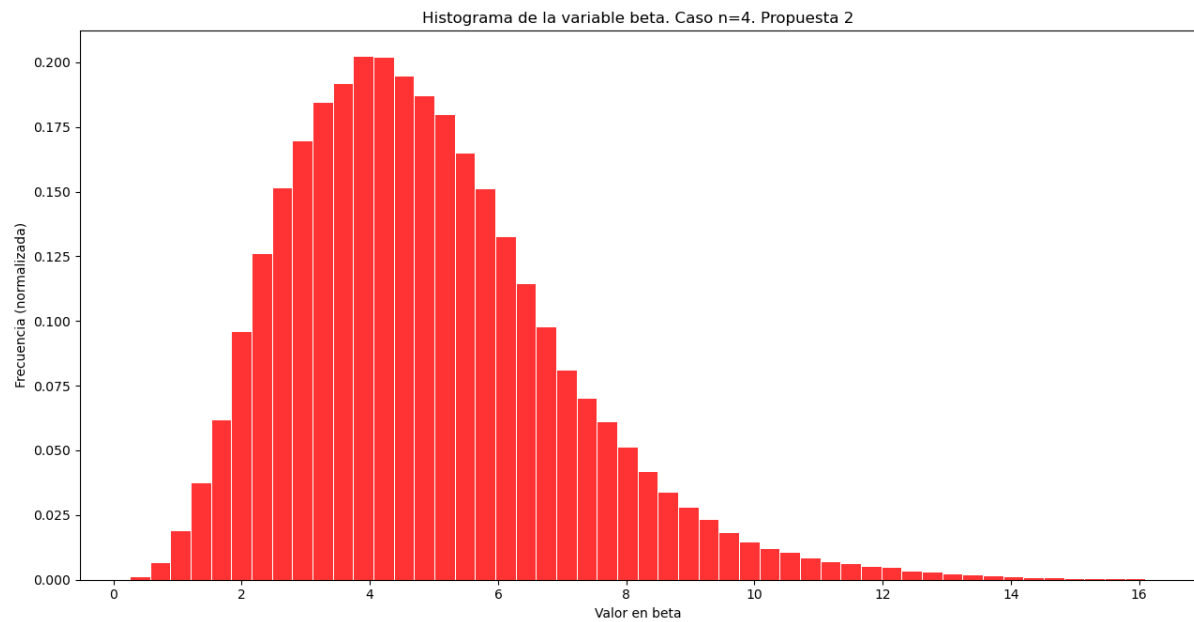


Figura 12:

Caso n=30

Finalmente tenemos este caso, en donde los resultados son los siguientes:

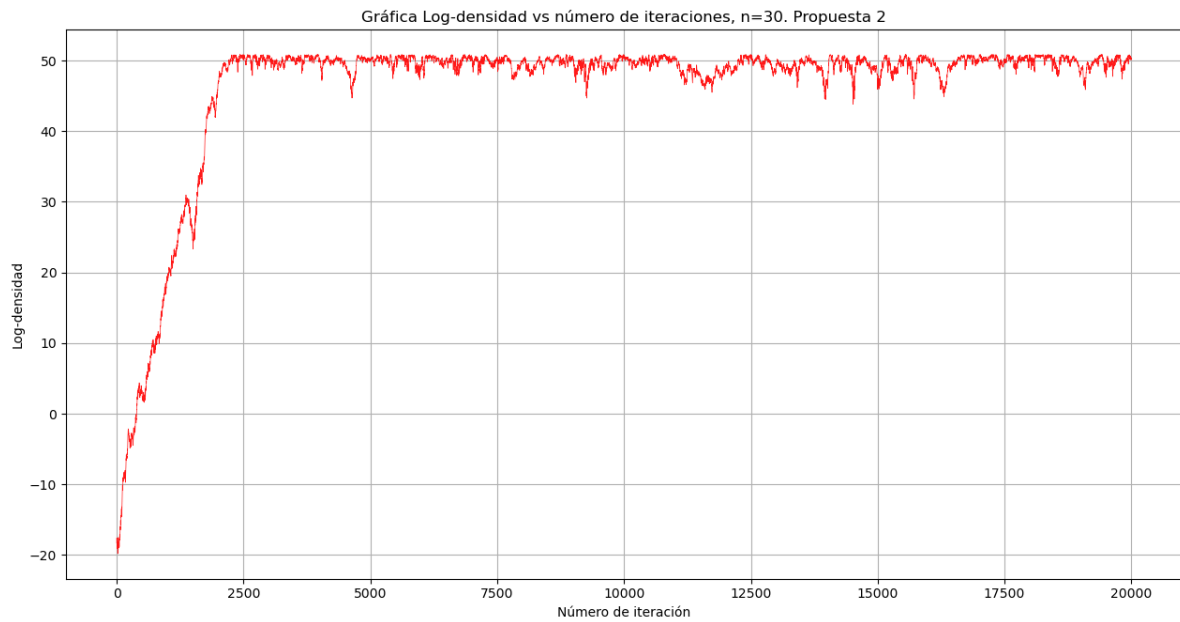


Figura 13:

De nueva cuenta en la figura 13 se puede apreciar que un valor adecuado para burn-in es de 7000. El recorrido es impreso

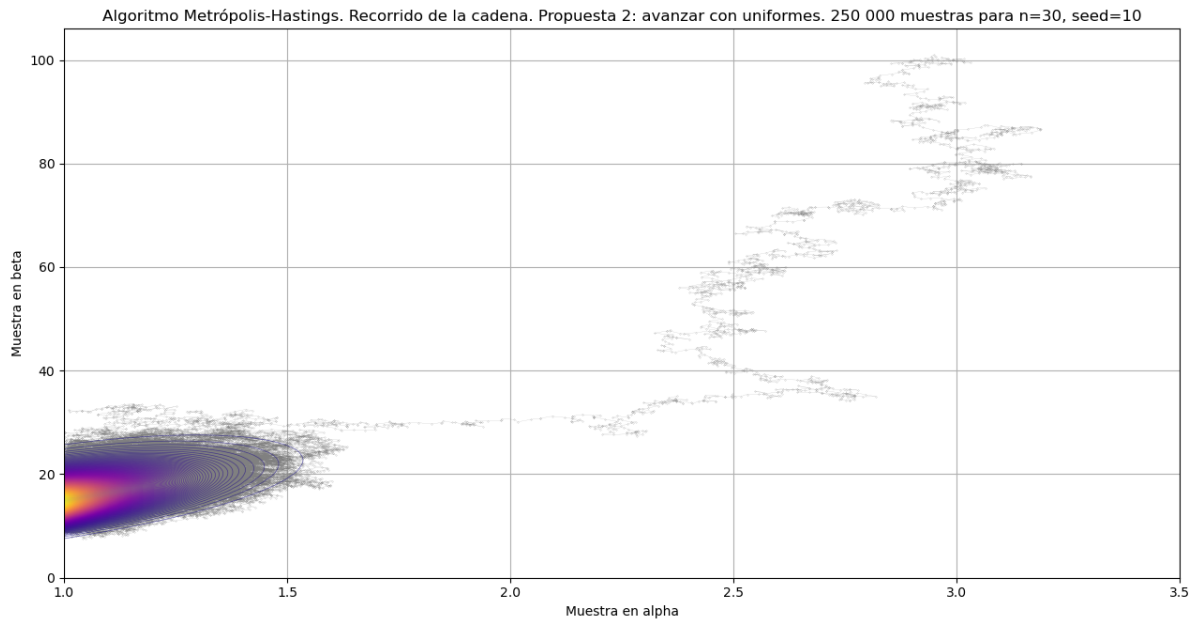


Figura 14:

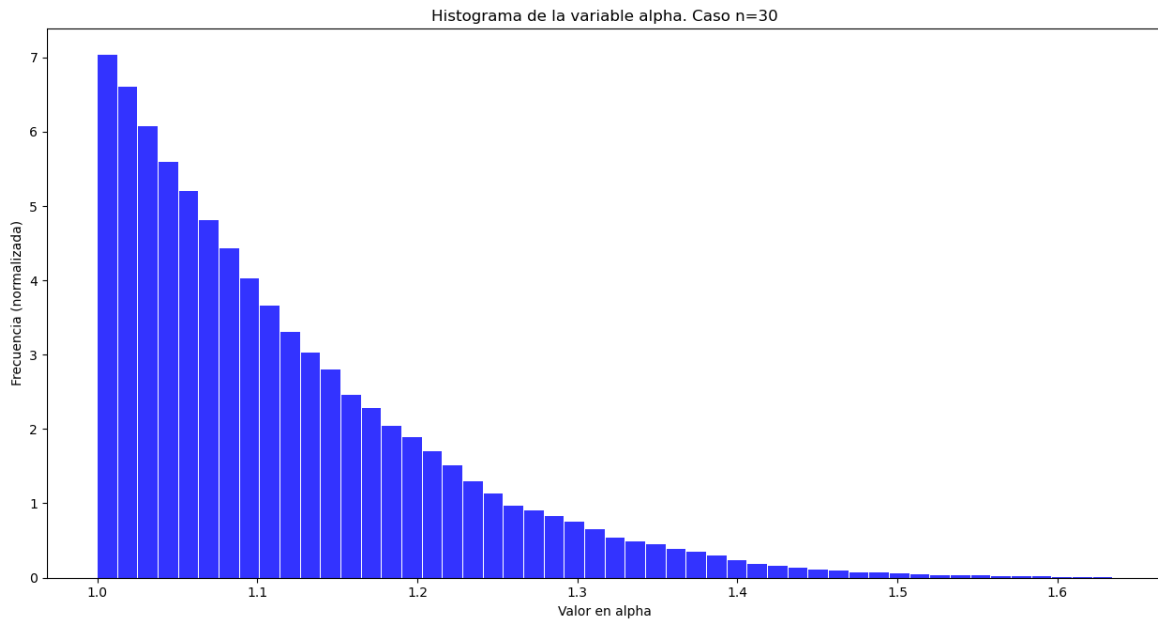


Figura 15:

en la figura 14, mientras que las figuras 15 y 16 muestran los histogramas de las densidades marginales. Se puede observar un ligero mejor comportamiento de los histogramas en las figuras 7 y 8 que usan la propuesta normal, aún cuando ya se contempla el burn-in en estos.

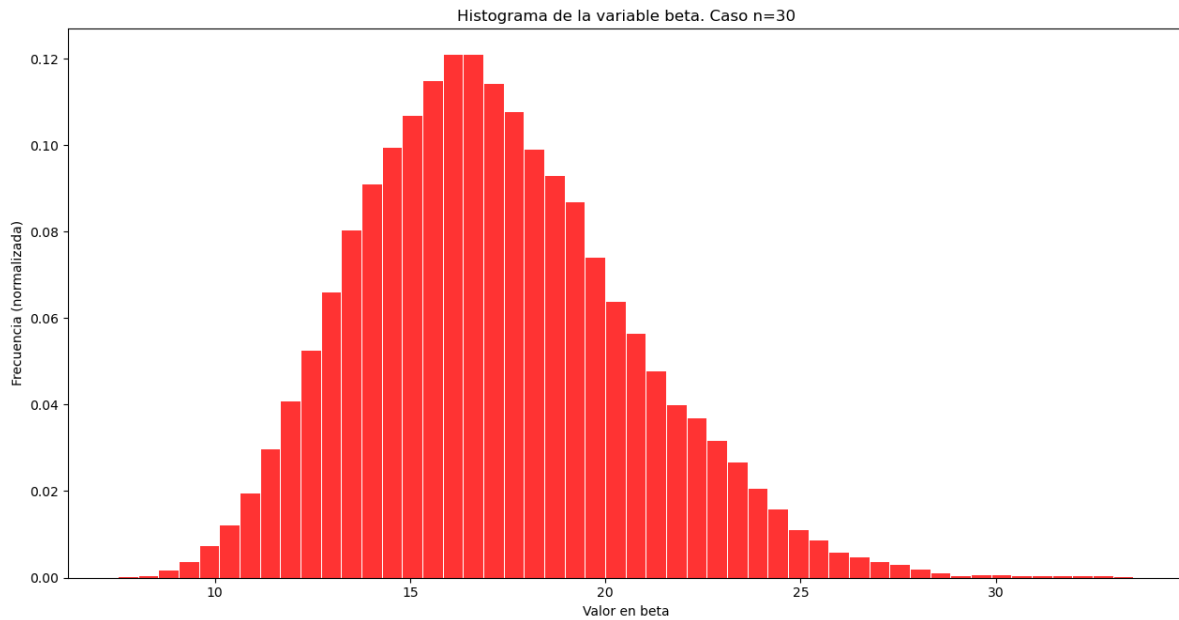


Figura 16:

Para concluir, se detalla lo pedido:

- **Distribución inicial:** tomamos el vector $X_0 = (3, 100)$ como propuesta inicial nuevamente.
- **Grafica la evolución de la cadena:** ver figuras arriba.
- **Burn-in:** para ambos casos, se toma un burn-in=7000.
- **¿Qué tan eficiente es la cadena?:** tomando en cuenta el desempeño hecho con la propuesta 1, esta cadena presenta un desempeño menor que el logrado con la otra propuesta. Esto se puede ver también en las gráficas de la log-densidad, donde se está llegando a una 'estabilidad' alrededor de la iteración 7000 mientras que en la propuesta 1 se lograba alrededor de la iteración 3000.

Ejercicio 2

Simular de la distribución $\Gamma(\alpha, 1)$ con la propuesta $\Gamma(\lfloor \alpha \rfloor, 1)$, donde $\lfloor \alpha \rfloor$ denota la parte entera de α .

Además, realizar el siguiente experimento: poner como punto inicial $x_0 = 900$ y graficar la evolución de la cadena, es decir, $f(X_t)$ vs t .

Solución:

Para este ejercicio, buscamos muestrear de una variable $\Gamma(\alpha, 1)$ a partir de una propuesta $\Gamma(n, 1)$, donde $n = \lfloor \alpha \rfloor$. La idea es que se puede muestrear de una variable *Gamma* con parámetro de forma no natural, a partir de Gammas de parámetro natural, las cuales en última instancia son sumas de variables exponenciales, en este caso de parámetro 1.

Se implementa el algoritmo, y se obtienen los siguientes resultados. De la figura 17, se puede deducir que no hay un valor de burn-in que sea mejor a primera vista, por lo que se decide tomar un burn-in genérico de 1000. En la figura 18 se puede apreciar que rápidamente se llega a muestreos cercanos a la distribución objetivo. El histograma ya contempla el burn-in. Se

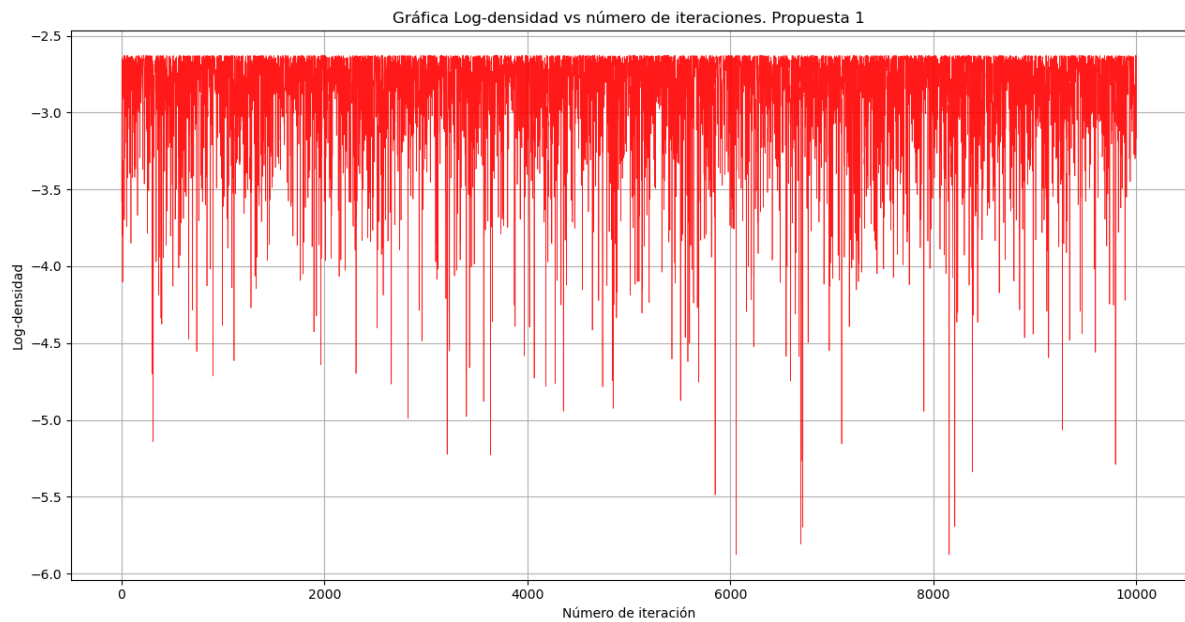


Figura 17:

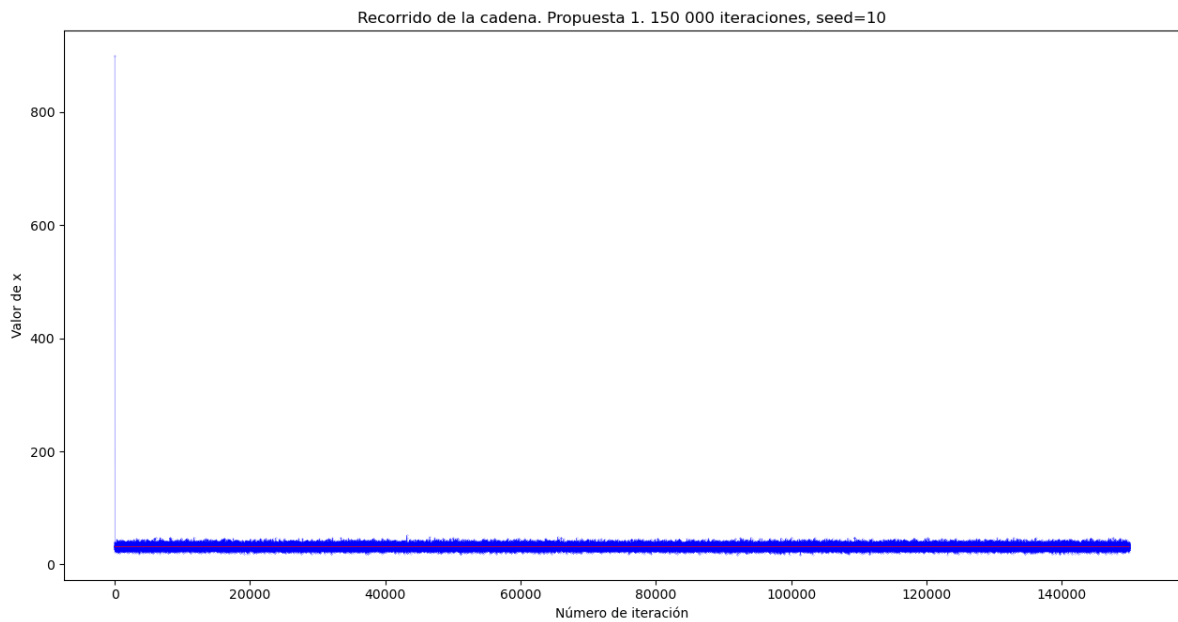


Figura 18:

puede apreciar una forma de densidad gamma con media en aproximadamente 31.415.

Finalmente, se extrae la media de esta implementación, la cual se espera que esté próxima a $10\pi \approx 31,415926535$. La media extraída es de 31.59511788242531, que forma un valor bastante cercano al real.

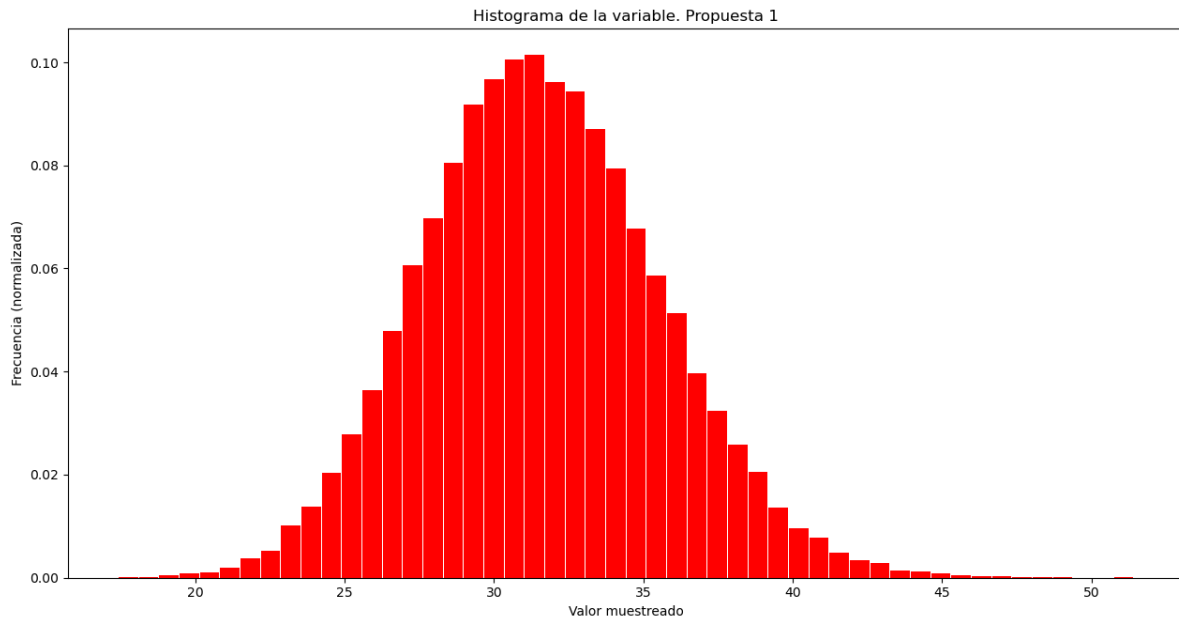


Figura 19:

Ahora bien, para el caso en el que se da otra propuesta, se selecciona a la propuesta $\Gamma(x, 1)$, donde x es el valor del punto actual de la cadena. Es decir, es una propuesta que depende del punto en el que encontramos, a diferencia de la propuesta anterior en donde sin importar el punto inicial de la cadena, nuestra propuesta directamente era el piso de α , propuesta que directamente nos lleva tan solo en 1 paso (si hay aceptación a la primera) muy cerca de la distribución objetivo $\Gamma(\alpha, 1)$.

Con esta propuesta, se obtienen los siguientes resultados: De la figura 20, se observa que un valor adecuado de burn-in ronda los 200. Sin embargo, aprovechando el tamaño de muestra, se toma el valor 1000 como burn-in. Como podemos observar de las figuras 21 y 22, la cadena avanza rápidamente a la distribución buscada, del histograma se deduce que la muestra es buena. Finalmente se obtienen la media de los datos utilizando esta observación. Dicho valor es de 30,788501638194965, que ciertamente se aleja más que el valor obtenido con la propuesta 1, pero no demasiado.

Los detalles pedidos en esta implementación se resumen a continuación:

- **Distribución inicial:** tomamos el punto $X_0 = 900$ como propuesta inicial. Es sencillo tomar en este caso esa propuesta inicial lo cual nos ahora de paso el experimento que se pide en el ejercicio.
- **Grafica la evolución de la cadena:** ver figuras arriba.
- **Burn-in:** para ambos casos, se toma un burn-in=1000.
- **¿Qué tan eficiente es la cadena?:** sin duda la propuesta 1 tiene mejor desempeño, puesto que dicha propuesta es independiente del punto en el que la cadena se encuentre. De hecho, el muestreo del valor siguiente se da de manera independiente, por lo que es esperable que esta propuesta a diferencia de la propuesta 2, tenga mejores resultados.

Una manera de cuantificar esto es con la gráfica de la log-densidad vs iteración. En la propuesta 1 no hay evidencia de un burn-in, como se esperaría, mientras que en la propuesta 2 claro que la hay, ya que la cadena debe avanzar desde el punto $\alpha = 900$ hasta el punto $\alpha = 31,41592....$

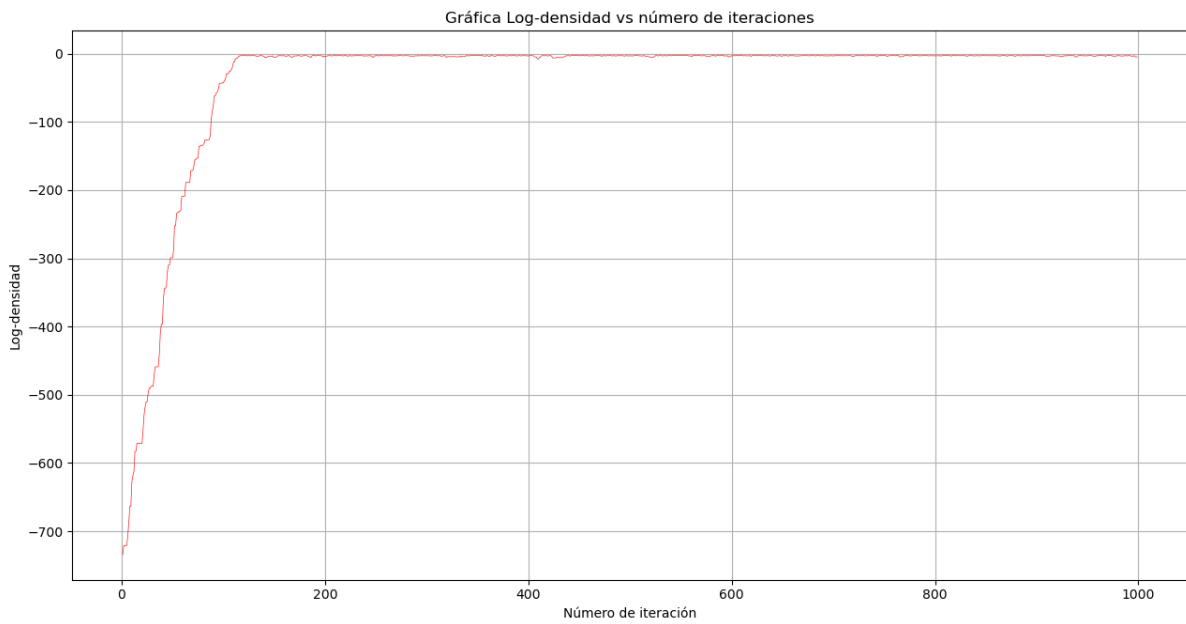


Figura 20:

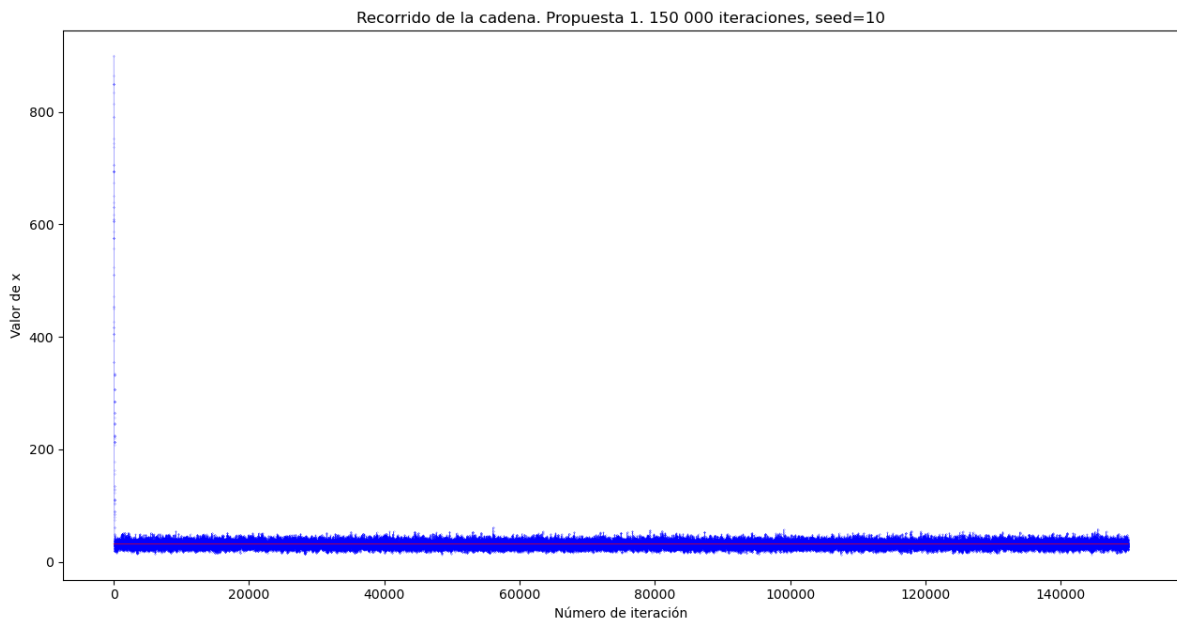


Figura 21:

Ejercicio 3:

Implementar Random Walk Metrópolis Hastings (RWMH) donde la distribución objetivo es $\mathcal{N}_2(\mu, \Sigma)$, con

$$\mu = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} 1 & 0,9 \\ 0,9 & 1 \end{pmatrix}.$$

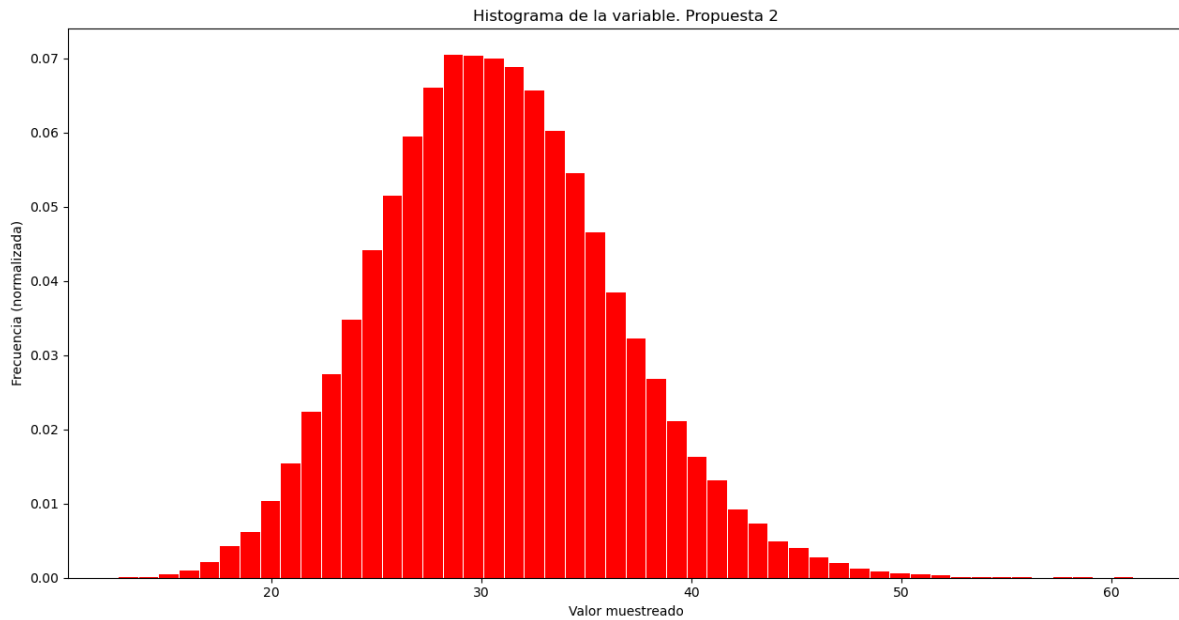


Figura 22:

Utilizar como propuesta $\varepsilon_t \sim \mathcal{N}_2(\mathbf{0}, \sigma I)$. ¿Cómo elegir σ para que la cadena sea eficiente? ¿Qué consecuencias tiene la elección de σ ?

Como experimento, elige como punto inicial $x_0 = \begin{pmatrix} 1000 \\ 1 \end{pmatrix}$ y comenta los resultados.

Solución:

Aquí realizamos la implementación de la cadena, primero con la propuesta de la tarea. Esto nos arroja los siguientes resultados: De la figura 23, apreciamos un valor de burn-in adecuado dado por 250. Sin embargo aprovechando el tamaño del muestreo, decidimos tomar un burn-in de tamaño 2000. En la figura 24 se aprecia el camino desde el punto inicial, que en este caso se selecciona como (35, 35), hacia la distribución objetivo. Las figuras 25 y 26 nos arrojan un histograma de variables que se parecen a las densidades de dos normales centradas en 3 y 5, respectivamente, y varianza 1. Tal y como se espera.

Finalmente, para la propuesta distinta, se selecciona una propuesta similar a la normal: una distribución t de student 2-variada. De dicha implementación se obtiene lo siguiente:

De la figura 27, el burn-in adecuado parece estar cerca del valor 250. Pero por simplicidad, nuevamente aprovechamos el tamaño grande de la muestra y utilizamos burn-in=1000. En la figura 28 se aprecia el recorrido de la cadena. A diferencia de lo que sucede con la propuesta normal, el avance con la propuesta t de student multivariada, es más rápido en ciertos momentos que con el de la normal. Los histogramas de las figuras 29 y 30 nuevamente presentan un buen comportamiento. Son similares a las normales de media 3 y varianza 1, y de media 5 y varianza 1, respectivamente en cada coordenada.

Se detalla a continuación lo pedido:

- **Distribución inicial:** tomamos el vector $X_0 = (35, 35)$ como propuesta inicial en ambos casos.
- **Grafica la evolución de la cadena:** ver figuras arriba.
- **Burn-in:** para ambos casos, se toma un burn-in=1000.
- **¿Qué tan eficiente es la cadena?:** a simple vista el desempeño de la cadena parece ser bueno. El burn-in en ambos es pequeño, del orden de 250, similar en ambos casos, por lo que parece ser que ambas propuestas son buenas.

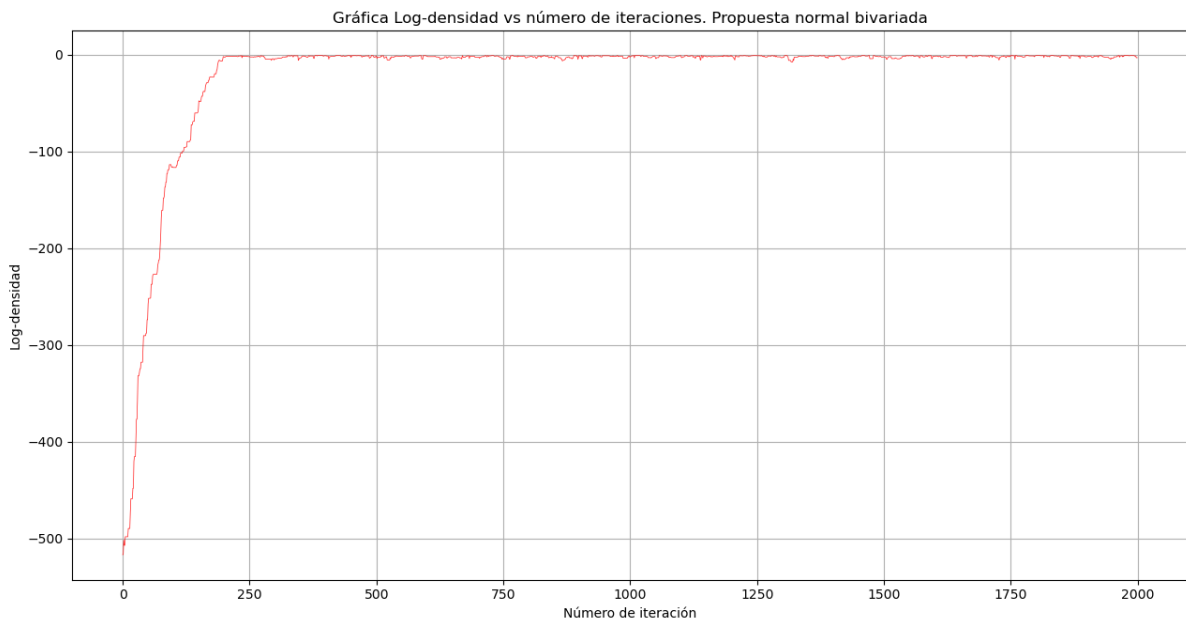


Figura 23:

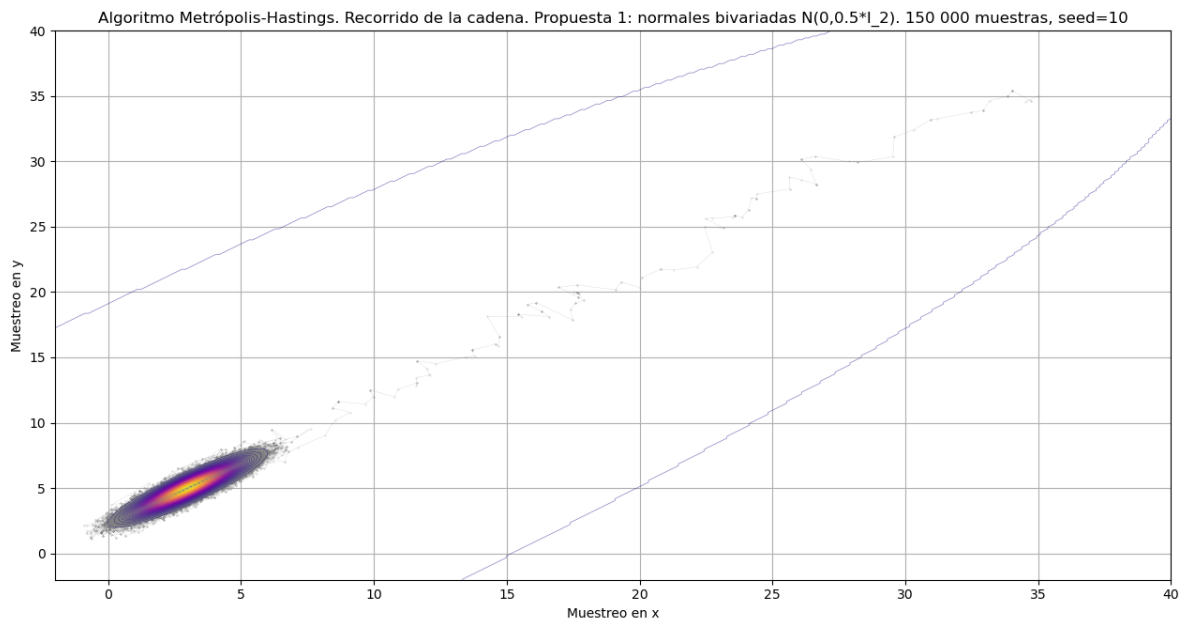


Figura 24:

Cabe mencionar que la matriz de covarianzas, así como el parámetro de escala para la t 2-variada, están dadas por

$$\begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix},$$

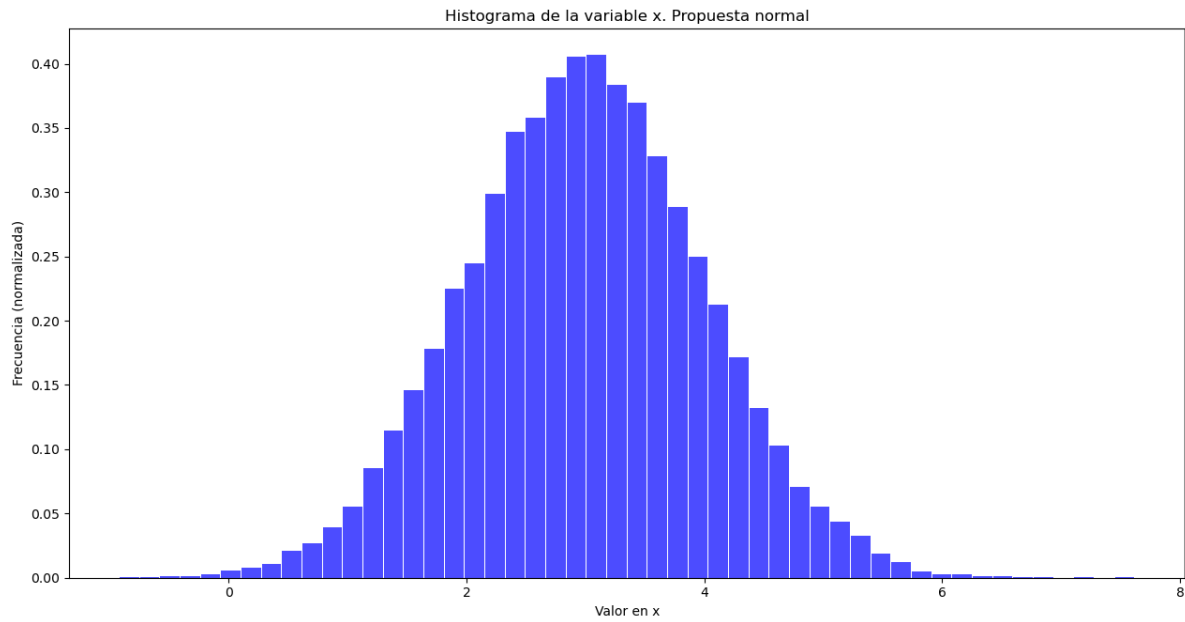


Figura 25:

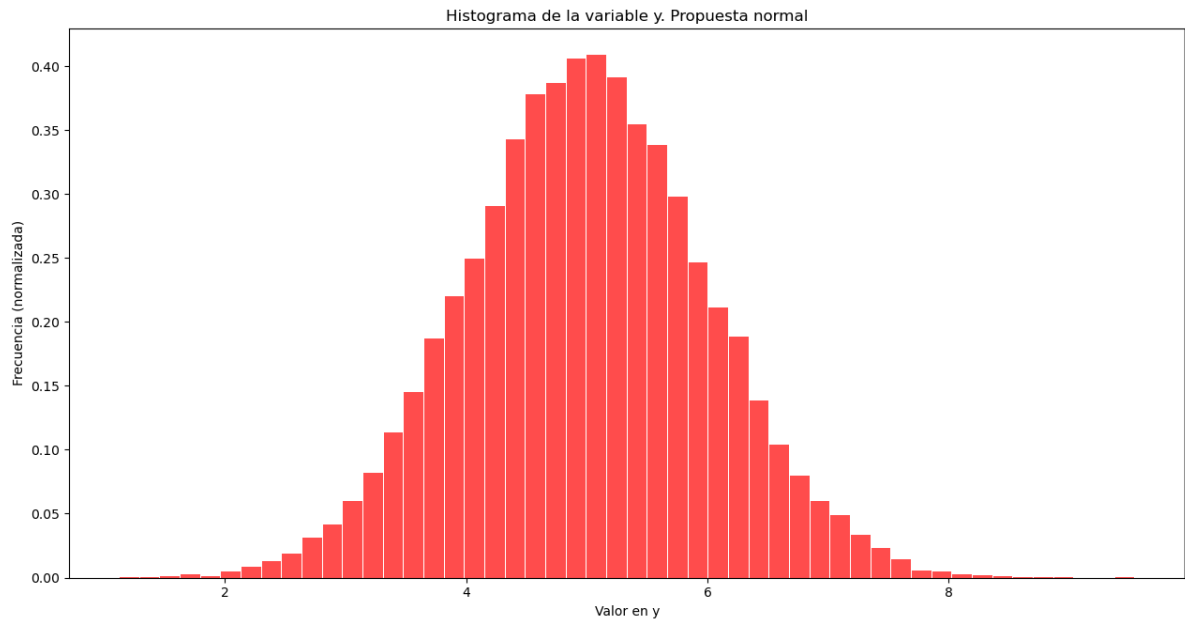


Figura 26:

esto es, $\sigma = 0,5$ es el parámetro usado.

Finalmente, se realiza el experimento mencionado. Seleccionamos el punto $X_0 = (1000, 1)$ como punto inicial. Nótese que la cadena no salta con un punto inicial tan lejano, como se puede ver en la siguiente figura 31.

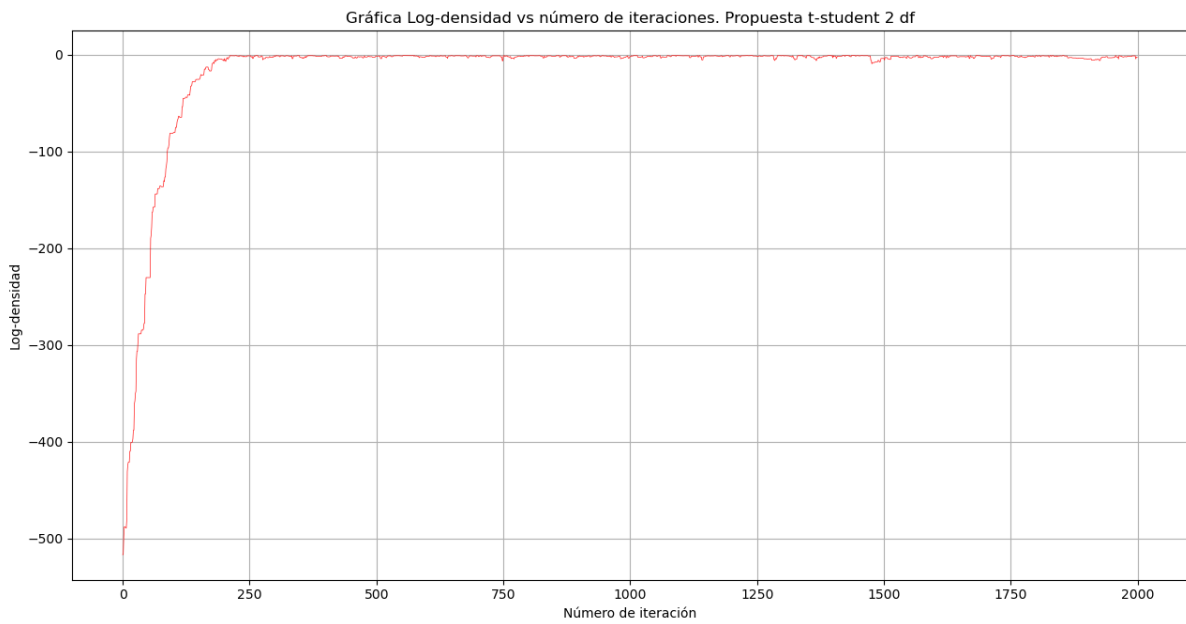


Figura 27:

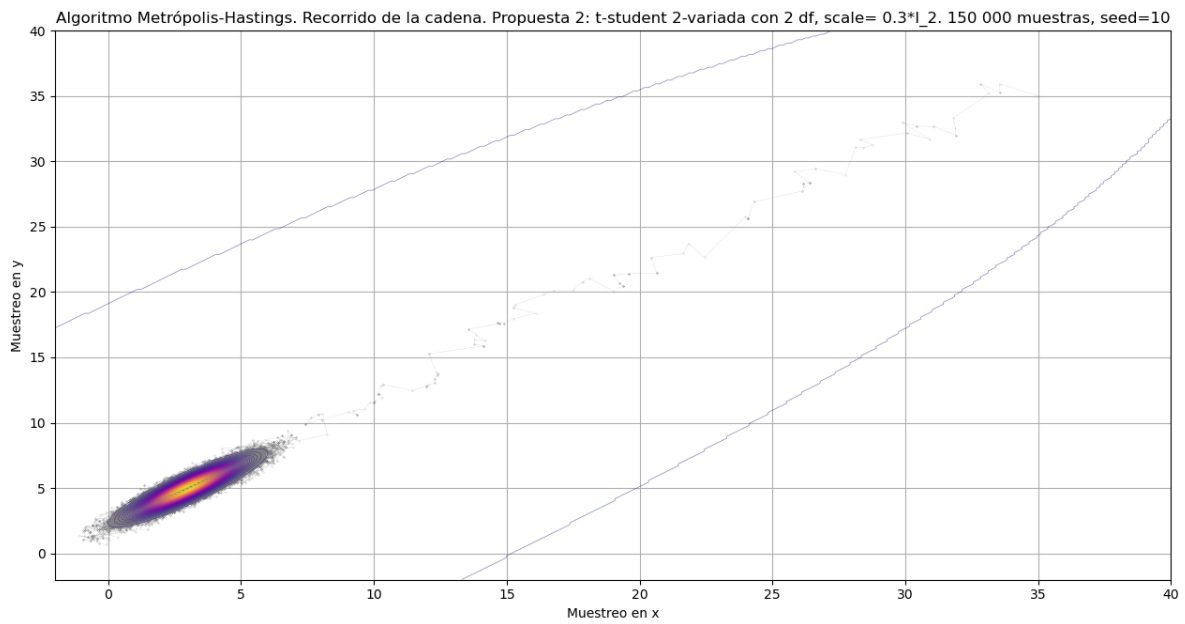


Figura 28:

Esto nos recuerda que la selección de un punto adecuado de inicio es importante también para el correcto muestreo de la distribución objetivo usando Metropolis-Hastings.

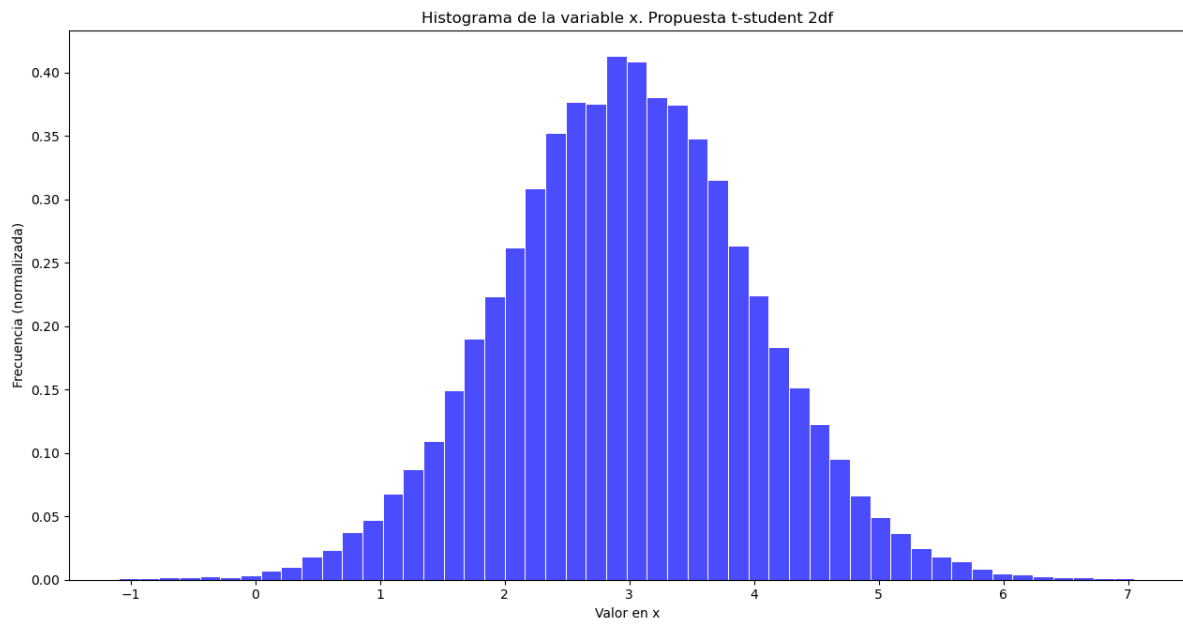


Figura 29:

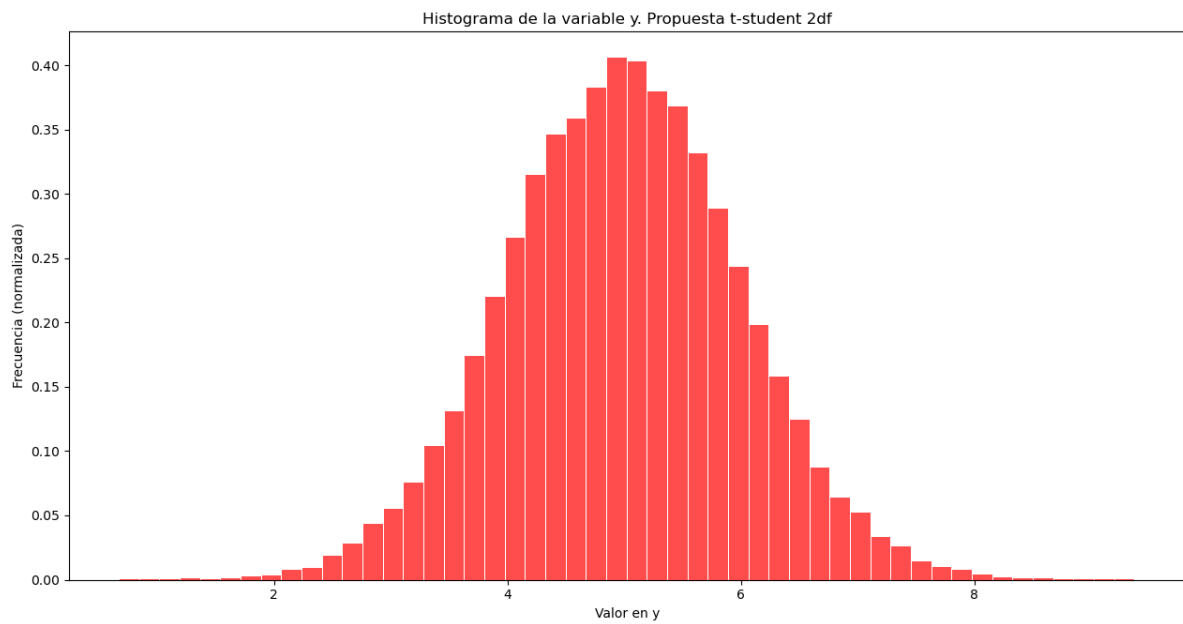


Figura 30:

```

>>> """ -----Experimento. Propuesta 1: avanzamos según una normal bivariada. Punto inicial (1000,1)----- """
' -----Experimento. Propuesta 1: avanzamos según una normal bivariada. Punto inicial (1000,1)----- '
>>> m_2=np.array([1000,1],dtype=float)
>>> R3_3=m_hast_ej3(10_000,m_2,0.5,'prop1')          #Con un punto inicial demasiado alejado, la cadena no puede salir del mismo.
>>> R3_3
array([[1000.,  1.],
       [1000.,  1.],
       [1000.,  1.],
       ...,
       [1000.,  1.],
       [1000.,  1.],
       [1000.,  1.]])
>>> 

```

Figura 31: