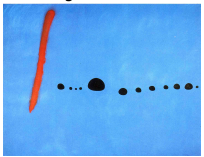
Simulación

Generación de números pseudoaleatorios
Generadores lineales congruenciales

Jorge de la Vega Góngora

Departamento de Estadística
Instituto Tecnológico Autónomo de México



Semana 2

ITAM

Generación de números pseudoaleatorios.

Un poco de historia I

- Los métodos de Monte Carlo surgieron durante el proceso de investigación de la bomba atómica en la Segunda Guerra Mundial.
- Este trabajo involucró una simulación directa de los problemas probabilísticos asociados con la difusión aleatoria de neutrones en materiales fisionables.
- También se utilizó para criptografía, en donde se requiere de una fuente confiable de números aleatorios.

Von Neumann, Feynman y Ulam

John Von Neumann y Stanislaw Ulam aplicaron y refinaron las técnicas de simulación directa con técnicas de reducción de varianza. Además, propusieron métodos para la generación de números *pseudo-aleatorios*.

Un poco de historia II

Actualmente, la mayoría de los programas computacionales incluyen rutinas o funciones para generar sucesiones de números pseudoaleatorios, aunque no describen con detalle los algoritmos con las que son generadas esas sucesiones.

Problema:

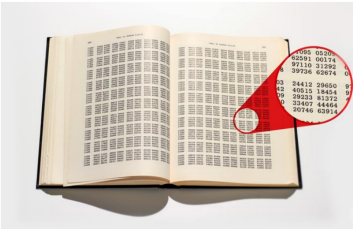
Generar una muestra aleatoria (es decir: independiente e idénticamente distribuida) de tamaño n de una distribución $\mathcal{U}(0,1)$.

El problema no es fácil, hay que considerar:

- La distribución uniforme es continua. Sin embargo, cualquier mecanismo numérico obtiene sólo números racionales. $\mathbb{Q}$ es denso en los reales y aún así forman un conjunto de medida 0.
- Las observaciones generadas tienen que ser independientes.
- Cualquier método computacional se basa en un *algoritmo* determinístico, y por lo tanto los números no son estrictamente aleatorios.

Otro poco de historia...

- Primeros mecanismos para generar números aleatorios: lanzamiento de dados, extracción de cartas, urnas.
- Maurice Kendall & Babington Smith (1938) usan un disco giratorio para generar una tabla de 100,000 dígitos.
- Rand Corporation (1955): utiliza la primera computadora, ERNIE (*Electronic Random Number Indicator Equipment*) para generar una tabla con un millón de dígitos.



- En los 40's y 50's, se buscó generar números con métodos numéricos o aritméticos, como **el método del cuadrado medio**.

Algoritmos generadores: Método del cuadrado medio

Este método genera una sucesión de números usando el siguiente algoritmo:

1. Toma un número inicial de 4 dígitos (o 5 o 6 o etc), e.g. $Z_0 = 7182$.
2. Elevar al cuadrado para obtener 8 dígitos, $Z_0^2 = 51581124$
3. Tomar los dígitos centrales para generar un nuevo número: $Z_1 = 5811$
4. El siguiente número aleatorio es $u_1 = Z_1/1000 = 0.5811$
5. Repetir con Z_1 los pasos anteriores.

Método del cuadrado medio

i	Z_i	u_i	Z_i^2
0	7,182	0.7182	51,581,124
1	5,811	0.5811	33,767,721
2	7,677	0.7677	58,936,329
3	9,363	0.9363	87,665,769
4	6,657	0.6657	44,315,649
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

- El problema con este método es que no importa cuál sea el valor inicial, degenera rápidamente a 0 o bien, comienza a repetir un ciclo.
- Nicolás Metropolis hizo pruebas con números en el sistema binario y demostró que con números de 20 bits hay 13 diferentes ciclos en los que las sucesiones degeneran, de las cuáles la más larga tiene periodo 142.
- *"Anyone, who considers arithmetical methods of producing random digits is of course, in a state of sin."* Von Neumann (1951).
- Por esta razón, se requiere poner condiciones adecuadas sobre los generadores, para que el pecado sea el menor posible.

Decimales de π y e

- Antes de 1950, también se comenzaron a usar decimales de números trascendentes o irracionales, π, e, ϕ, etc. para imitar sucesiones aleatorias.
- Metropolis, et al. (1950) calculó 2,000 decimales de π y e para este propósito y las sucesiones pasaron las pruebas estadísticas.
- Pathria (1962) los hizo para 10,000 decimales de π
- Esmenjaud-Bonnardel (1965) lo hizo para 10,000 decimales.
- El record mundial en 2016 fue de 22,459,157,718,361 dígitos decimales de π
- El problema de usar estos dígitos es su lentitud y almacenaje.

Generadores físicos

- Mecanismos físicos y electrónicos:
  - contadores de eventos aleatorios y muestreos periódicos de ruido eléctrico
  - Hay cerca de 2,000 patentes en 70 años para la generación de números aleatorios físicos.
  - Hotbits: a través de decaimiento radioactivo
  - IDQ: fuentes de entropía cuántica.
- Los más frecuentes están basados en circuitos eléctricos dotados de una fuente de ruido (una resistencia o un diodo semiconductor), que es amplificada, muestreada y comparada con una señal de referencia para producir secuencias de bits. Por ejemplo, si el ruido es menor que la referencia se produce un 0 y si es mayor un 1.
- a partir de cadenas de 0's y 1's se generan bytes de información que se traducen a números.
- Generadores de intel (1999-2008): utilizados para encriptar información de tarjetas de crédito en línea.
- Los instrumentos comerciales producen cerca de 3 Gbits por segundo.
- Relación entre RNG's y Blockchain/Bitcoin.

Propiedades de los buenos generadores

Los números pseudoaleatorios o sus generadores *deben*:

- Pasar las pruebas estadísticas de aleatoriedad e independencia. Esto es, al menos, *parecer* distribuirse con una distribución dada y mantenerse de manera estable en esa distribución.
- Tener un soporte teórico sólido: estar basados en principios matemáticos que permitan un análisis riguroso.
- Ser reproducibles: los generadores deben ser capaces de reproducir secuencias (*streams*) muy largas sin necesidad de ser almacenados en memoria.
- Ser muy rápidos y eficientes de generar (ya que en la práctica se requieren grandes cantidades de números),
- Poder generar más de una secuencia.
- Tener periodo largo (en el sentido que se verá más adelante).

Propiedades de los buenos generadores

> *Choosing a good random generator y like choosing a new car: for some people or applications is preferred, while for others robustness and reliability are more important.*
> *Pierre L'Ecuyer*

Usualmente los mejores generadores son funciones f de la forma:

$$x_i = f(x_{i-1}, \ldots, x_{i-k})$$

donde k es el *órden* del generador, y los k valores iniciales son la *semilla*. La longitud de la secuencia que no se repite es el *periodo* del generador.

Generadores lineales congruenciales.

GLC's: Generadores lineales congruenciales (Lehmer, 1951)

D. H. Lehmer en 1948 introdujo los *generadores lineales congruenciales*, que simulan una especie de ruleta, y que cumplen con los requerimientos mencionados anteriormente, bajo ciertas condiciones.

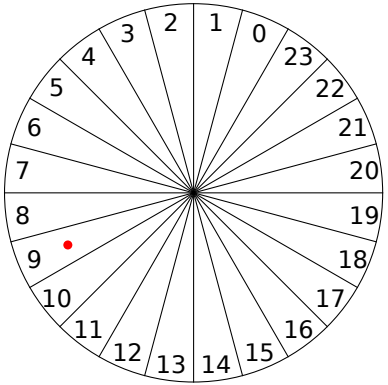
- Requieren cuatro parámetros (enteros no negativos):
  - Z_0: una semilla o valor inicial
  - m: el módulo o divisor
  - a: un multiplicador, y
  - c: el incremento (fue introducido en 1960 por Rothenberg)
- Se genera una sucesión de valores con la siguiente ecuación:

$$Z_i \equiv (aZ_{i-1} + c) \quad \text{mód } m$$

- De la ecuación anterior, $0 \leq Z_i \leq m - 1$ para cada i, y la serie de números pseudoaleatorios es $u_i = Z_i/m$.
- Cuando $c = 0$, se le llama *generador congruencial multiplicativo*.

Generadores lineales congruenciales

$$m = 24$$
$$Z_i = (3Z_{i-1} + 2) \mod 24$$



$Z_0 = 9$

- Los números generados con los GLC's tienen una fórmula explícita para Z_i en términos de Z_0, a, c y m:

$$Z_i \equiv \left(a^i Z_0 + \frac{c(a^i - 1)}{a - 1} \right) \quad \text{mód } m$$

- La calidad del generador depende de la selección de valores a, Z_0, c y m.
- Cuando se repita un valor de Z_j por primera vez, la sucesión de valores después de ese número se repite. La longitud de valores diferentes generados antes de una repetición se llama ciclo o periodo. El ciclo siempre es menor o igual a m.
- Usualmente, se eligen valores de m del orden de 10^9 o mucho más mayores.

Ejemplo: $m = 16$, $a = 5$, $c = 3$, $Z_0 = 7$.

Este generador tiene periodo igual que m=16.

$$Z_i \equiv (5Z_{i-1} + 3) \quad \text{mód } 16$$

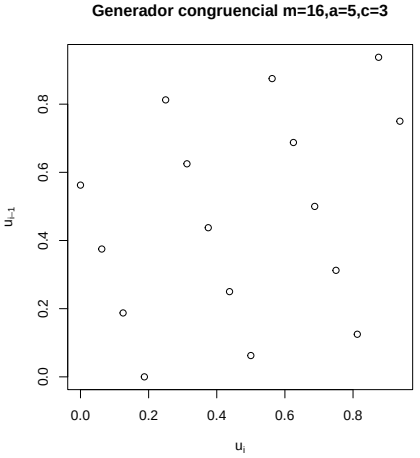
i	Z_i	U_i
0	7	0.438
1	6	0.375
2	1	0.063
3	8	0.500
4	11	0.688
5	10	0.625
6	5	0.313
7	12	0.750
8	15	0.938
9	14	0.875
10	9	0.563
11	0	0.000
12	3	0.188
13	2	0.125
14	13	0.813
15	4	0.250
16	7	0.438
17	6	0.375
18	1	0.063
19	8	0.500

Problemas de calidad en un GLC

La calidad de un GLC puede ser vista desde varios ángulos:

- Longitud del periodo del GLC: ¿Hay alguna manera de elegir a, c y m para hacer que el periodo sea lo más largo posible?
- Distribución de las muestras: ¿qué distribución de probabilidad tienen los valores generados?
- Independencia de las muestras: las muestras pueden mostrar cierto nivel de dependencia serial, en particular autocorrelación.

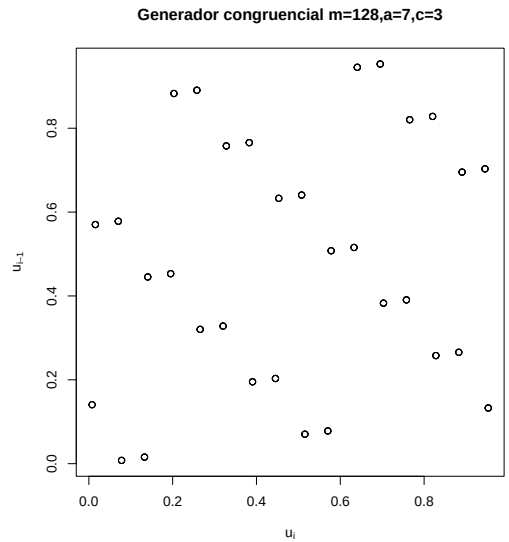
Ejemplo: $m = 16$, $a = 5$, $c = 3$, $Z_0 = 7$.

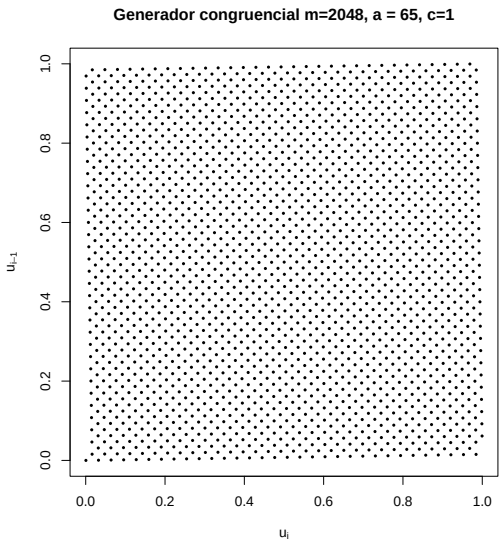



```
lgc  <- function(m=16,a=5,c=3,z0=7){
                z <- z0
                i <- 1
                repeat {
                        i <- i+1
                        z[i] <- (a*z[i-1]+c) %% m
                        if(i>m) break
                }
                return(z/m)
                }

z <- lgc()
par(pty="s")
plot(z[2:17], z[1:16],
     xlab = expression(u[i]),
     ylab = expression(u[i-1]),
     main = "Generador congruencial m=16,a=5,c=3")
```

Otros ejemplos





Elección adecuada de parámetros

- Si los datos fueran realmente una muestra aleatoria, tendrían que distribuírse uniformemente sobre el cuadro unitario.
- Las gráficas anteriores muestran que es importante hacer una elección adecuada de los parámetros para que el generador tenga características adecuadas.
- Si se ignora el orden secuencial de un GLC de periodo completo, los números parecerán uniformes.
- Sin embargo, la estructura de una secuencia de números del GLC es muy regular, y esto puede afectar la correlación serial de los números generados.
- Marsaglia (1968) mostró que cuando se grafican d-tuplas que se traslapan. $(U_1, U_2, \ldots, U_d)$, $(U_2, U_3, \ldots, U_{d+1})$ de un GLC con módulo m, esas d-tuplas o puntos caerán en un número pequeño de hiperplanos paralelos de dimensión $d-1$ dentro del hipercubo $[0,1]^d$. Las gráficas que mostramos corresponden a $d = 2$.

- ¿Cómo se puede garantizar un periodo completo? El siguiente teorema da la respuesta:

Teorema de periodo completo (Hull & Dobell, 1962)

Un GLC $Z_i \equiv (aZ_{i-1} + c)$ mód m tiene periodo completo si y sólo si se cumplen las siguientes tres condiciones:

1. c y m son primos relativos (el $mcd(m, c) = 1$).
2. Si q es un número primo que divide a m, entonces q también divide $a - 1$ ($a \equiv 1$ mod q, para cada factor primo q de m.)
3. Si 4 divide a m, entonces 4 divide $a - 1$. ($a \equiv 1$ mód 4, si 4 divide a m).

- Noten que si $c = 0$, no se puede conseguir periodo completo (¿porqué?). Por lo tanto, el periodo máximo de un generador lineal multiplicativo (GLM) es $m - 1$.
- No fácil de verificar para los valores relevantes de m, a, c, etc.
- La prueba del teorema es muy elaborada y basada en varios lemas de teoría de números (Ver: SIAM Review **4** (1962) 230-254).

Ejemplo Hull & Dobell

- $m = 16$, $a = 5$, $c = 3$, $Z_0 = 7$
- $m = 10^{10}$, $a = 3141592621$, $c = 2718281829$, $Z_0 = 5772156648$
- Hay que tener cuidado con la aritmética de enteros grandes en la computadora. Algunos paquetes de `R` permiten manejar números grandes:
  - `numbers`: funciones de Teoría de Números. En particular las funciones `primeFactors(), Primes()`

```
library(numbers)
Primes(1,100)
 [1]  2  3  5  7 11 13 17 19 23 29 31 37 41 43 47 53 59 61 67 71 73 79 83 89 97
primeFactors(2718281829)
[1]       3     157 5771299
```

  - `gmp`: Multiple precision arithmethic. Permite hacer operaciones con números grandes.

```
suppressMessages(library(gmp))
factorize(3141592621)
Big Integer ('bigz') object of length 3:
[1] 137   239   95947
```

Ventajas de los GLC's

- Los GLC's son rápidos para generar
- Bajo costo de almacenamiento (no es necesario guardar los números, ya vimos que hay una formula recursiva)
- Son reproducibles (basta conocer la semilla Z_0)
- Se puede reiniciar a la mitad (recordando la última Z_i, y usando Z_0 la siguiente ocasión)
- Se pueden generar múltiples sucesiones (salvando semillas separadas)
- Buenas propiedades estadísticas (dependiendo de la elección de los parámetros)

Elección de parámetros desde el punto de vista computacional

- Para lograr una alta densidad en el intervalo $[0, 1]$ los valores de m tienen que ser muy grandes.
- Desde el punto de vista computacional, m puede elegirse de la forma $m = 2^k$ donde k es del tamaño del procesador (en máquinas actuales $k = 64$, y pronto $k = 128$; antes se tomaba $k = 8, 16, 32$)
- Un truco computacional es aprovechar el desbordamiento numérico para evitar la división numérica por m y hacer más eficientes los cálculos. En una máquina de $k = 64$ bits, el máximo entero que se puede representar es de la forma $2^k - 1$.
- Para representar un entero mayor H, que ocuparía $h > k$ dígitos binarios, se perderían los $h - k$ dígitos binarios más a la izquierda, y los k dígitos que quedan corresponden precisamente a H mód 2^k .

Ejemplo

Para $Z_n \equiv 5Z_{n-1} + 3$ mód 16, con $Z_0 = 7$, notar que $5Z_9 + 3 = 73$, que en binario es 1001001. Con 4 bits, se pierden los tres primeros dígitos, quedando 1001 que es la representación binaria de $Z_{10} = 9$.

Consideraciones para módulos con forma $m = 2^k$

Cuando m es de la forma 2^k, algunos resultados se simplifican, como se puede ver en el siguiente teorema.

Teorema

Un GLC con $m = 2^k \geq 4$ tiene periodo completo sí y sólo si c es impar y $a \equiv 1 \mod 4$

Ejemplo

Consideren $m = 32$ y $c = 3$, $a_1 = 3$ y $a_2 = 5$. Determinar si este generador tiene periodo completo.

Consideraciones con $m = 2^k$

En el caso de los GLC's multiplicativos o GLM's $(c = 0)$, aún se puede obtener un periodo muy grande aunque incompleto eligiendo bien m y a:

Teorema

El periodo máximo de un GLM con $m = 2^k \geq 16$ es 2^{k-2}. Dicho periodo maximal se alcanza si y sólo si Z_0 es impar y $3 = a$ mód 8 o $5 = a$ mód 8.

El hecho de que el periodo se reduzca a un cuarto de m puede introducir gaps en las sucesiones.

Ejemplo

- Un ejemplo de un mal generador de números aleatorios es RANDU: $m = 2^{31}$, $a = 2^{16} + 3$. Este generador se usó mucho tiempo pero se probó en un momento que tiene propiedades estadísticas muy malas.
- Los generadores multiplicativos más famosos utilizados por IBM tomaban $m = 2^{31} - 1$ y $a_1 = 7^5$ o $a_2 = 630360016$.

Ejemplo: generador RANDU

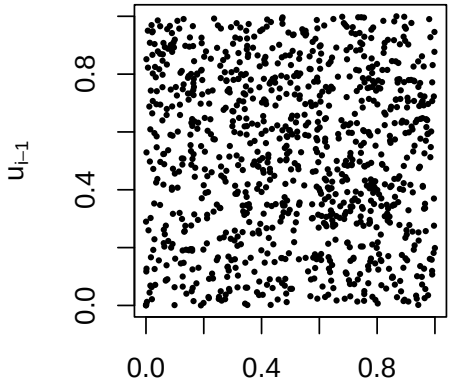
```r
options(scipen=9) # evita la notación científica hasta cierto punto
seed <- as.double(1)
RANDU <- function() {
        seed <<- ((2^16 + 3) * seed) %% (2^31) #cambia la semilla globalmente
        seed/(2^31)
}
randu0 <- NULL
for(i in 1:1000) randu0[i] <- RANDU()
head(randu0,20)
```

```
 [1] 0.00003051898 0.00018310966 0.00082398718 0.00329593616 0.01235973230
 [6] 0.04449496837 0.15573221957 0.53393860208 0.80204163631 0.00680239918
[11] 0.82243966823 0.87341641681 0.83854148677 0.17050116928 0.47613363480
[16] 0.32229128527 0.64854499837 0.99064842286 0.10698555177 0.72607750492
```

Ejemplo: generador RANDU

Graficamos los primeros 1,000 pares de números (u_{i-1}, u_i). Al parecer no forman una retícula.

```
par(mar=c(2,0.1,0.1,0.1) )
par(pty = "s") # gráfica cuadrada
plot(randu0[1:999], randu0[2:1000],
     xlab = expression(u[i]), ylab = expression(u[i-1]), pch = 16, cex = 0.5)
```



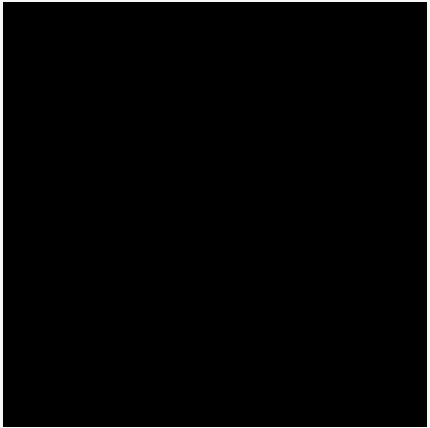
Ejemplo: generador RANDU

Ahora graficamos tripletas de valores consecutivos. Aquí se verá el resultado de Marsaglia:

```
library(rgl)

This build of rgl does not include OpenGL functions.  Use
rglwidget() to display results, e.g. via options(rgl.printRglwidget = TRUE).

par3d(cex=0.5)
seed <- as.double(1)
randu1 <- NULL
for(i in 1:1200) randu1[i] <- RANDU()
plot3d(matrix(randu1, ncol = 3, byrow = T), col = "red", top=F)
```



Algoritmos con ciclo ampliado

En R que hay muchos otros algoritmos con ciclos muy amplios. Los algoritmos congruenciales se pueden combinar para aumentar el periodo del ciclo de generación. Estas combinaciones se basan en los siguientes resultados:

Teorema

Si $U_1, \ldots, U_k$ son variables aleatorias iid $\mathcal{U}(0,1)$, entonces la parte fraccional de $U_1 + \ldots + U_k$ también sigue una distribución $\mathcal{U}(0,1)$

$$U_1 + U_2 + \cdots + U_k - [U_1 + U_2 + \cdots + U_k] \sim \mathcal{U}(0,1)$$

Demostración: tarea (por inducción)

Teorema

Si $u_1, u_2, \ldots, u_k$ están generados por algoritmos congruenciales con ciclos de periodo $c_1, c_2, \ldots, c_k$, respectivamente, entonces la parte fraccional de $u_1 + u_2 + \cdots + u_k$ tiene un ciclo de periodo el m.c.m.$(c_1, c_2, \ldots, c_k)$.

Algoritmo combinado de Wichmann y Hill (1982,1984)

Tiene un periodo de orden 10^{12}. El generador se construye a partir de los GLC's:

$$\begin{aligned} x_i &\equiv 171 x_{i-1} \quad \text{mód } 30269 \\ y_i &\equiv 172 y_{i-1} \quad \text{mód } 30307 \\ z_i &\equiv 170 z_{i-1} \quad \text{mód } 30323 \end{aligned}$$

En este caso se toma

$$u_i = \left(\frac{x_i}{30269} + \frac{y_i}{30307} + \frac{z_i}{30323} \right) - \left[\frac{x_i}{30269} + \frac{y_i}{30307} + \frac{z_i}{30323} \right]$$

Este era el algoritmo por default de python 2.3.

Números aleatorios en R

- `R` contiene muchas funciones para generar números aleatorios, basados en los métodos lineales congruenciales, así como en otras familias de generadores.
- El generador por defecto de `R` es está basado en el algoritmo Mersenne-Twister de Matsumoto y Nishimura (1997), cuyo periodo es de $2^{19937} - 1$. El método está basado en un algoritmo mucho más complejo que el de los GLC's que hemos visto. En python 2.4 y Matlab también es el algoritmo por default (Ver `RandStream.list` para la lista de algoritmos disponibles en Matlab).
- Para cambiar el generador en R:

```
>RNGkind("Super") #para el super-duper de Marsaglia
```

- En `R` el paquete `randtoolbox` tiene otros generadores y pruebas estadísticas. Les recomiendo la lectura de su documentación

Otros métodos para generar números aleatorios

- Generadores recursivos múltiples (MRG's):

$$Z_i \equiv (a_1 Z_{i-1} + a_2 Z_{i-2} + \cdots + a_{i-k} Z_{i-k}) \quad \text{mód } m$$

- Generadores rezagados de Fibonacci: se escogen r, s y m cuidadosamente:

$$Z_i \equiv (Z_{i-r} + Z_{i-s}) \quad \text{mód } m$$

- Generador congruencial inversivo (ICG): para m primo y con la convención $0^{-1} = 0$:

$$Z_i \equiv \begin{cases} (a_0 + a_1 Z_{i-1}^{-1}) & \text{mód } m \quad \text{si } Z_{i-1} \neq 0 \\ a_0 & \text{si } Z_{i-1} = 0 \end{cases}$$

- Si m es de la forma 2^k, se conocen como linear feedback shift register (LFSR)
- KISS (Keep it simple Stupid) (Marsaglia y Zaman, 1993) consiste en una combinación de 4 subgeneradores cada uno de 32 bits para alcanzar un periodo de 2^{123}:
  - un GLC mod 2^{32}
  - un generador liner binario
  - dos multiply with carry mod 2^{16}

  NO tiene calidad criptográfica y no se recomienda su uso para cifrar datos.
- La madre de todos los generadores (Marsaglia)