

## Capítulo 7

# Monte Carlo vía Cadenas de Markov

En este capítulo presentamos una herramienta de simulación genérica, conocida como Monte Carlo vía cadenas de Markov (MCMC), la cuál permite generar muestras (aproximadas) de cualquier distribución. Las técnicas de Monte Carlo vía cadenas de Markov permiten generar, de manera iterativa, observaciones de distribuciones multivariadas que difícilmente podrían simularse utilizando métodos como los estudiados hasta ahora. La idea básica es construir una cadena de Markov que sea fácil de simular y cuya distribución estacionaria corresponda a la distribución objetivo que nos interesa.

Las ideas de esta técnica han tenido su desarrollo histórico desde diferentes ramas de las matemáticas: de la probabilidad, de la mecánica estadística y de la estadística bayesiana. Cada enfoque tiene su utilidad conceptual y de implementación, y se enriquecen entre ellos. Es por ello que presentaremos una introducción a estos diferentes enfoques en el capítulo.

Antes de presentar los algoritmos, presentaremos el resultado que motiva y fundamenta matemáticamente el uso de los algoritmos MCMC.

Tenemos el siguiente resultado fundamental para Cadenas de Markov.

**Proposición 7.1.** *Sea  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  una cadena de Markov homogénea, irreducible y aperiódica con espacio de estados  $E$  y distribución estacionaria  $\pi$ , se tiene que cuando  $n \rightarrow \infty$  ocurre que*

$$X_n \xrightarrow{d} X$$

donde  $X$  tiene distribución  $\pi$  y

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(X_i) \xrightarrow{c.s.} E(g(X)).$$

La primera afirmación del resultado es el teorema clásico de convergencia de cadenas de Markov. Sin embargo, la segunda afirmación requiere un estudio más detallado. En la teoría de sistemas dinámicos, se prueba que para ciertos sistemas ocurre que los promedios temporales son iguales a los promedios espaciales. Este resultado nos permitirá tomar promedios de valores temporales en una cadena de Markov que son claramente dependientes pero que al promediarlos se comportan como si fuesen independientes; de forma similar a la ley fuerte de los grandes números. Este resultado es conocido como el teorema ergódico para Cadenas de Markov.

## 7.1. Metropolis-Hastings

En esta sección estudiaremos el principal algoritmo de Monte Carlo vías cadenas de Markov. La idea de este algoritmo, como se mencionó anteriormente, es simular una cadena de Markov tal que su distribución estacionaria coincida con la distribución a simular.

Como motivación para el desarrollo este algoritmo, supongamos que queremos generar valores de una variable aleatoria  $X$  con soporte en  $E = \{1, \dots, N\}$  y distribución  $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_N)$ , donde  $\pi_i = b_i/C$ ,  $i \in E$ ,  $N$  es grande y  $C$  es la constante de normalización (difícil de calcular). Construiremos un método que solucione el problema.

Construimos una cadena de Markov  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  con espacio de estados  $E$ , cuya evolución depende de la matriz de transición  $Q = \{q_{ij}\}$  de otra cadena de Markov irreducible. Dicha evolución está definida de la siguiente manera:

1. Cuando  $X_n = i$ , generamos una variable aleatoria  $Y$  tal que

$$P(Y = j) = q_{ij}$$

para todo  $i, j \in E$ .

2. Si  $Y = j$ , hacemos

$$X_{n+1} = \begin{cases} j & \text{con probabilidad } \alpha_{ij} \\ i & \text{con probabilidad } 1 - \alpha_{ij} \end{cases}$$

donde

$$\alpha_{ij} = \min \left\{ \frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}}, 1 \right\} = \min \left\{ \frac{b_j q_{ji}}{b_i q_{ij}}, 1 \right\}.$$

La evolución anterior se traduce en que el proceso  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  tiene como matriz de transición a  $P = \{p_{ij}\}_{i,j \in E}$  donde

$$p_{ij} = \begin{cases} q_{ij} \alpha_{ij} & \text{si } i \neq j \\ q_{ii} + \sum_{k \neq i} q_{ik} (1 - \alpha_{ik}) = 1 - \sum_{k \neq i} q_{ik} \alpha_{ik} & \text{si } i = j. \end{cases}$$

A  $\alpha_{ij}$  se le conoce como la **probabilidad de aceptación**.

El siguiente resultado prueba la eficacia de la construcción. Presentamos la prueba por ser simple.

**Proposición 7.2.** *La cadena de Markov  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  tiene como distribución estacionaria a  $\pi$ .*

*Demostración.* Demostraremos que la cadena de Markov con matriz de transición  $P = \{p_{ij}\}_{i,j \in E}$  es reversible (con respecto al tiempo) y tiene como distribución estacionaria a  $\pi$ . Para ello basta verificar que se satisfacen las ecuaciones de balance local:

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji},$$

para toda  $i, j \in E$ . Esto es equivalente a que se cumpla:

$$\pi_i q_{ij} \alpha_{ij} = \pi_j q_{ji} \alpha_{ji}.$$

Para verificar esta última igualdad basta notar que si

$$\alpha_{ij} = \frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}}$$

entonces  $\alpha_{ji} = 1$  y viceversa.  $\square$

**Corolario 7.1.** *Si la cadena de Markov  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  es irreducible y aperiódica, entonces  $\pi$  es la distribución límite.*

Este resultado es inmediato de los resultados de convergencia de cadenas de Markov. Las hipótesis de irreducibilidad y aperiodicidad se siguen directamente de que la matriz  $Q$  es irreducible y de la construcción de  $P$ .

Tenemos dos observaciones importantes:

- La elección de la cadena  $Q$  es arbitraria, siempre que satisfaga la condición de irreducibilidad.
- No fue necesario calcular a la constante  $C$  para definir a la cadena de Markov  $\{X_n\}_{n \geq 0}$ .

La idea anterior (y su prueba) es suficientemente robusta y se puede extender a cadenas de Markov con espacio de valores continuos (por ejemplo  $\mathbb{R}$  o  $\mathbb{R}^n$ ) bajo algunas condiciones generales (que involucran la interpretación de irreducibilidad y convergencia de Cadenas de Markov en espacios de valores continuos). Por supuesto, hay muchos detalles técnicos involucrados, por lo cuál no abordaremos la teoría correspondiente y simplemente daremos como efectiva la construcción análoga de la cadena de Markov  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  con valores continuos.

A partir de ahora cuando escribamos a  $x$  y  $y$  como estados en  $E$ , estaremos pensando que  $x$  y  $y$  son números reales o vectores. Imaginemos que queremos generar una muestra de una función de densidad (que podría ser multidimensional) objetivo  $f(x)$ .

El algoritmo siguiente usa una construcción análoga a la de la cadena de Markov en espacio de estados discreto, y se denomina algoritmo **Metropolis-Hastings**.

Se define la evolución de la cadena a continuación, dado que la cadena se encuentra en el estado  $X_n$ :

---

**Algoritmo 48 : Metropolis-Hastings**

---

- 1: Generar  $Y \sim q(X_n, y)$ , es decir generamos  $Y$  con el kernel de transición a un valor  $y$  dado que estamos en el valor  $X_n$  (la función de densidad de  $y$  al siguiente paso dado el valor anterior).
- 2: Generar  $U \sim U(0, 1)$  y hacemos

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y & \text{si } U \leq \alpha(X_n, Y), \\ X_n & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde

$$\alpha(x, y) = \min \left\{ \frac{f(y)q(y, x)}{f(x)q(x, y)}, 1 \right\}.$$


---

De esta forma tenemos que, repitiendo los pasos del algoritmo anterior, obtenemos una sucesión de variables aleatorias dependientes  $X_1, X_2, \dots, X_n$ , donde  $X_m$  tiene aproximadamente la función de densidad

$f(x)$ , para toda  $m$  suficientemente grande.

Observemos que en el fondo, este es un algoritmo dinámico de aceptación y rechazo. La eficiencia del algoritmo dependerá de la probabilidad de aceptación  $\alpha(x, y)$ .

Una cuestión importante en este algoritmo es la selección de matriz de transición  $Q$ . Existen diferentes alternativas para esta matriz, que dependen del problema a resolver. Las más usadas son:

- **Simetría:** Consiste en elegir  $q$  tal que  $q(x, y) = q(y, x)$ . En este caso tendríamos que la probabilidad de aceptación es:

$$\alpha(x, y) = \min \left\{ \frac{f(y)}{f(x)}, 1 \right\},$$

es decir, solamente depende de la función de densidad de la variable aleatoria a simular, entonces tenemos un método de aceptación-rechazo similar al método original de aceptación-rechazo.

- **Independencia:** Podemos elegir  $q$  tal que  $q(x, y) = g(y)$ , para alguna función de densidad  $g$ . Esto quiere decir que la transición no está dependiendo del estado actual, por lo que en cada paso de la evolución simplemente estamos sorteando un candidato (con densidad  $g$ ) independiente. El candidato generado será aceptado con probabilidad

$$\alpha(x, y) = \min \left\{ \frac{f(y)g(x)}{f(x)g(y)}, 1 \right\}.$$

Este método es muy parecido al de aceptación-rechazo original por lo que es importante que la densidad propuesta  $g$  esté cercana a  $f$ . Una observación importante es que a diferencia del método de aceptación-rechazo original, éste produce muestras dependientes (por ejemplo si se rechaza una vez, tendremos dos variables consecutivas generadas con valores idénticos).

- **Caminata aleatoria:** Bajo esta elección, el candidato es obtenido con la siguiente expresión:  $y = x + Z$ , donde  $Z$  es una variable con densidad  $g$  simulable y simétrica (alrededor del origen). Así, la transición está dada por  $q(x, y) = g(y - x)$ , y la probabilidad de aceptación es:

$$\alpha(x, y) = \min \left\{ \frac{f(y)}{f(x)}, 1 \right\}.$$

Ahora veremos algunos ejemplos del uso del algoritmo para la simulación de vectores aleatorios dependientes.

**Ejemplo 7.1.1.** Sea  $(X, Y)$  un vector aleatorio cuya densidad es

$$f(x, y) = c * \exp(-(xy)^2 + x^2 + y^2 - 8x - 8y)/2),$$

para  $x$  e  $y$  reales.

Imaginemos que queremos estimar  $\lambda = \mathbb{E}(X)$  por medio del estimador de Monte Carlo

$$\hat{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^M X_i}{M},$$