Regresión Avanzada: Reporte de Intro a los Procesos Gaussianos

Joaquín Álvarez Galnares

Abril 2023

Abstract

En este reporte presentamos un análisis de simulaciones de procesos Gaussianos bajo distintas estructuras de covarianza en el espacio como parte de la introducción a los modelos espaciales. El código en R para reproducir las figuras está disponible **aquí**. La teoría asociada corresponde al archivo NotasRA7.pdf del Prof. L.E. Nieto.

Contexto

Consideremos un proceso Gaussiano $\{Y_s\}$ en un espacio unidimensional $[-5, 10] \subset \mathbb{R}$. Utilizamos la notación $Y_s = Y(s)$. Particionamos $[-5, 10]$ en 100 subintervalos igualmente espaciados, $\{s_1, \ldots, s_{100}\} \subset [-5, 10]$. Tomamos $\mu_s = 0 \forall s \in [-5, 10]$ de modo que

$$\begin{pmatrix} Y(s_1) \\ Y(s_2) \\ \vdots \\ Y(s_{100}) \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}_{100}\Big(\mathbf{0}, \Sigma(s,t)\Big)$$

Y lo que vamos a hacer es comparar bajo dos funciones de covarianza: la exponencial y la Gaussiana.

Recordemos que la función de covarianza exponencial está dada por

$$\Sigma(s_i, s_j) \coloneqq \sigma^2 \exp\{-\phi d_{i,j}\},$$

donde $d_{i,j} = ||s_i - s_j||$ es la distancia Euclideana entre s_i y s_j, que al estar trabajando en una dimensión no es otra cosa más que el valor absoluto. Mientras que la función de covarianza Gaussiana está dada por

$$\Sigma(s_i, s_j) \coloneqq \sigma^2 \exp\{-\phi^2 d_{i,j}^2\}$$

Vamos a tomar $\sigma^2 = 1$ y vamos a comparar ambas funciones de covarianza bajo distintos valores de $\phi > 0$, para ver qué diferencias hay entre ambas funciones y estudiar qué rol juega ϕ en el proceso Gaussiano. Esto lo vamos a hacer a través de simulación.

1 Simulaciones y análisis de resultados

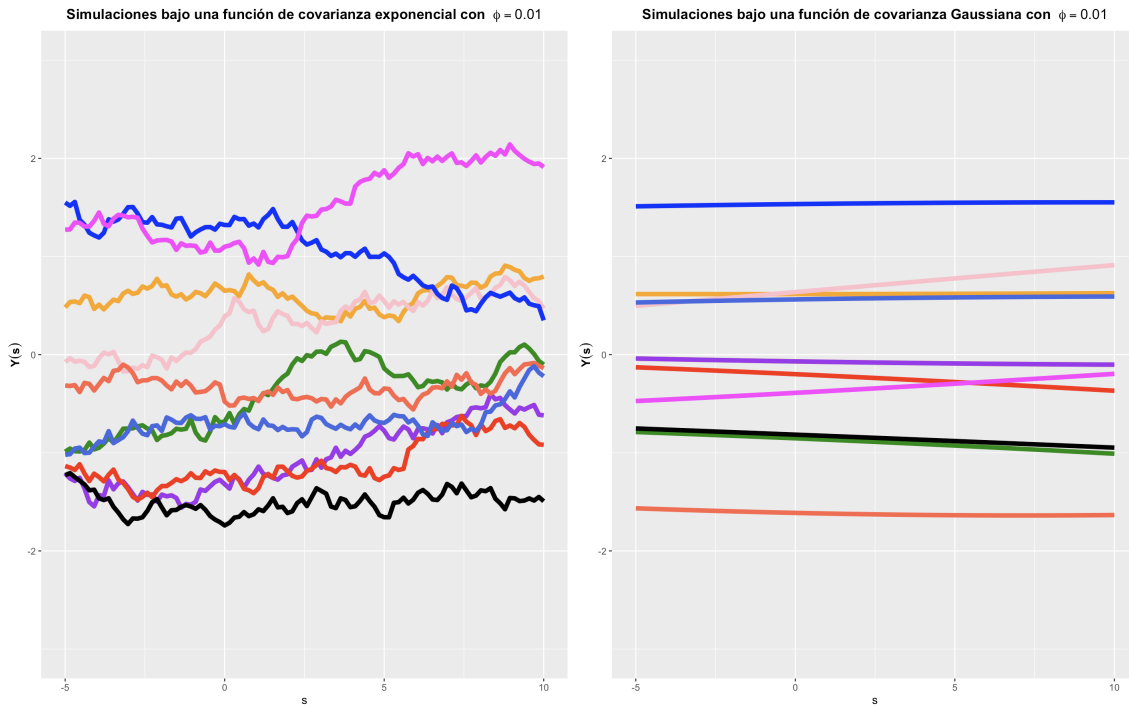

Figure 1: Para cada gráfica se simularon 10 trayectorias independientes del proceso Gaussiano con $\phi = 0.01$.

En comparación al resto de las figuras, vemos que estas trayectorias oscilan poco. De hecho para el caso Gaussiano son casi horizontales, es decir, constantes en el espacio. ¿Qué explica este fenómeno? Nótese que dada $i \in \{1, \ldots, 100\}$, $\mathbb{V}(Y(s_i)) = \mathbb{C}ov\Big(Y(s_i), Y(s_i)\Big) = \sigma^2 = 1$, pues $d_{i,i} = 0$. Y como $\phi = 0.01 \approx 0$ entonces para cualesquiera $i \neq j$ en $\{1, \ldots, 100\}$ se tiene que $\Sigma(s_i, s_j) \approx \sigma^2$. De manera que $Corr(Y(s_i), Y(s_j)) \approx \frac{\sigma^2}{\sqrt{\sigma^2}\sqrt{\sigma^2}} = 1$. Y dado que todas las $Y(s_i)'$s tienen media cero se sigue que $Y(s_i) \approx Y(s_j) \quad \forall i \neq j$ (recordemos que por la desigualdad de Cauchy-Schwarz, si X, Y son v.a.'s tales que $Corr(X, Y) = 1$ entonces existen constantes $a, b \in \mathbb{R}$ tales que $Y = aX + b$).

Ahora bien, ¿por qué oscilan menos las trayectorias con función de covarianza Gaussiana en comparación a las trayectorias con con función de covarianza exponencial? Esto se debe a que $0 < \phi^2 < \phi \quad \forall \phi \in (0, 1)$. En particular nosotros usamos $\phi = 0.01 \in (0, 1)$, de manera que para cualesquiera $i < j$, con $i, j \in \{1, \ldots, 100\}$ se tiene que

$\sigma^2 \exp\{-\phi d_{i,j}\} < \sigma^2 \exp\{-\phi^2 d_{i,j}^2\} \iff -\phi d_{i,j} < -\phi^2 d_{i,j}^2 \iff \phi d_{i,j} < 1$
Lo cual es cierto pues el valor más grande que toma $d_{i,j}$ es de 15 (con $s_i = -5$ y $s_j = 10$) y además $\phi = 0.01$. Así que las $Y(s_i)'$s bajo el proceso Gaussiano con función de covarianza Gaussiana están más fuertemente correlacionadas que cuando se usa la función de covarianza exponencial.

La baja oscilación de las trayectorias se traduce en que, en la gran mayoría de las simulaciones, la trayectoria no cambia de signo, en el sentido de que o las $Y(s_i)'$s asociadas a una trayectoria son todas positivas o son todas negativas. No es algo que forzosamente ocurra, pero es común ese fenómeno por la baja oscilación.

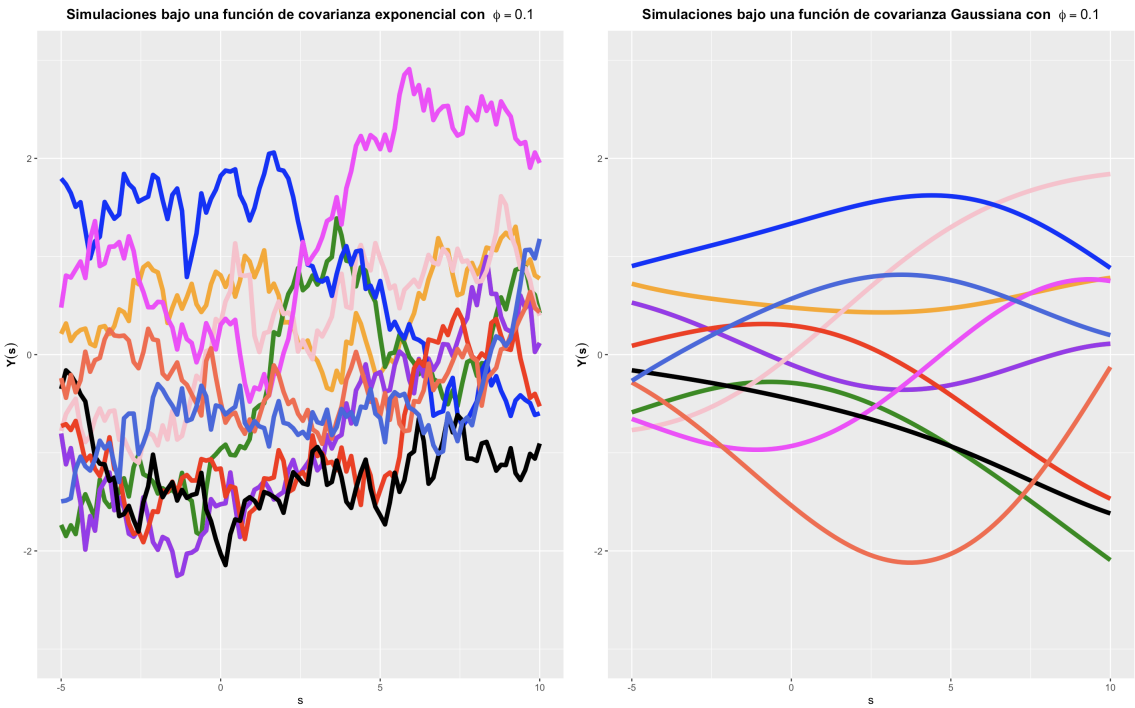

Figure 2: Para cada gráfica se simularon 10 trayectorias independientes del proceso Gaussiano con $\phi = 0.1$.

Al haber incrementado el valor de ϕ vemos que las trayectorias oscilan más. Esto se debe a que para $d_{i,j} \neq 0$ y σ^2 fijas, si pensamos en las funciones de $\phi > 0$

$$\phi \mapsto \sigma^2 exp\{-\phi d_{i,j}\}$$
$$\phi \mapsto \sigma^2 exp\{-\phi^2 d_{i,j}^2\}$$

ambas son decrecientes en ϕ, por lo que tanto para el caso de trayectorias con

función de covarianza exponencial como con función de covarianza Gaussiana, se tiene que incrementar la ϕ da lugar a correlaciones más débiles entre las $Y(s_i)'$s, por lo tanto las trayectorias oscilan más volátilmente. En el caso Gaussiano, las trayectorias formadas por el proceso Gaussiano todavía se ven suaves, y se debe nuevamente a que $\phi = .1 < 1$ sigue siendo cercano a cero, por lo que al elevarlo al cuadrado se vuelve todavía más pequeño. Además se sigue cumpliendo que $\phi^2 < \phi$ ya que $\frac{1}{10} \in (0, 1)$. La suavidad de las trayectorias bajo una función de covarianza Gaussiana se explica por la misma razón que en el caso en que tomamos $\phi = 0.01 = \frac{1}{100}$.

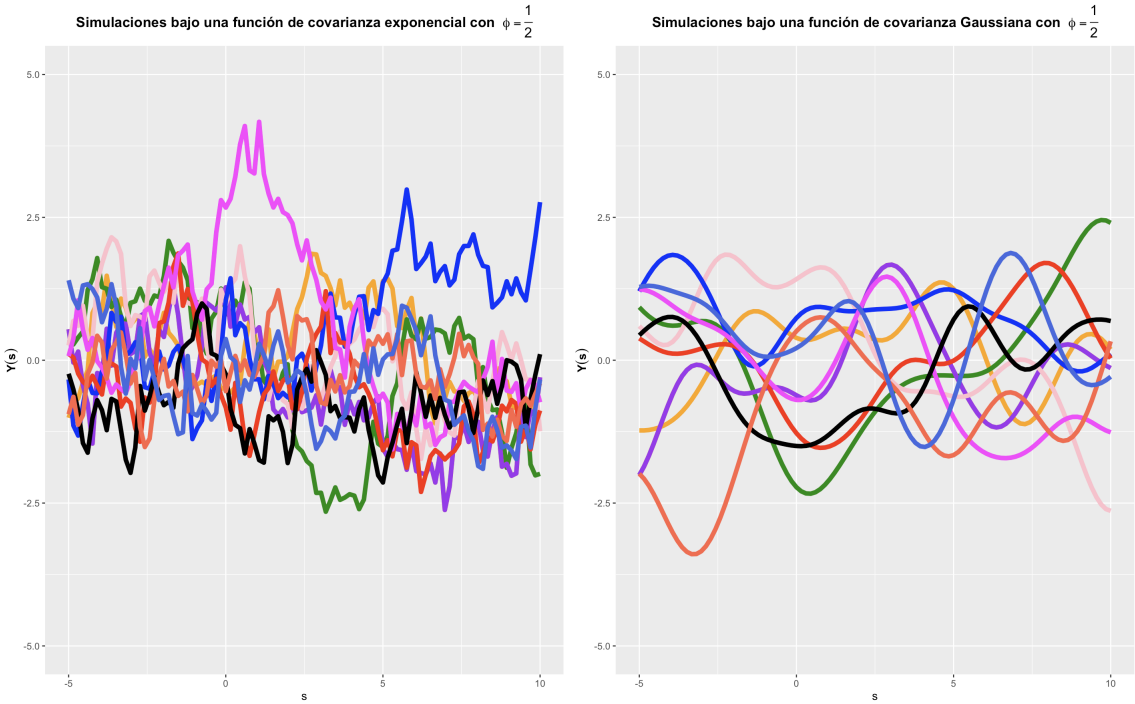

Figure 3: Para cada gráfica se simularon 10 trayectorias independientes del proceso Gaussiano con $\phi = \frac{1}{2}$.

Incrementando ϕ apreciamos que los procesos Gaussianos comienzan a recorrer más el soporte de la variable aleatoria normal (todo $\mathbb{R}$). Por ejemplo, para la figura 1, con $\phi = 1/100$, todas las trayectorias viven en $[-2, 2]$ excepto una rosa cuando la función de covarianza es exponencial. Pero ya en la figura 3, con $\phi = \frac{1}{2} > 1/100$ vemos que hay más trayectorias que se salen del intervalo $[-2, 2]$. Esto se debe precisamente a que la covarianza entre las $Y(s_i)'$s es menor. Se sigue cumpliendo que bajo la función de covarianza exponencial las trayectorias tienen oscilaciones con más picos, mientras que las trayectorias bajo una función

de covarianza Gaussiana tienen oscilaciones más suaves.

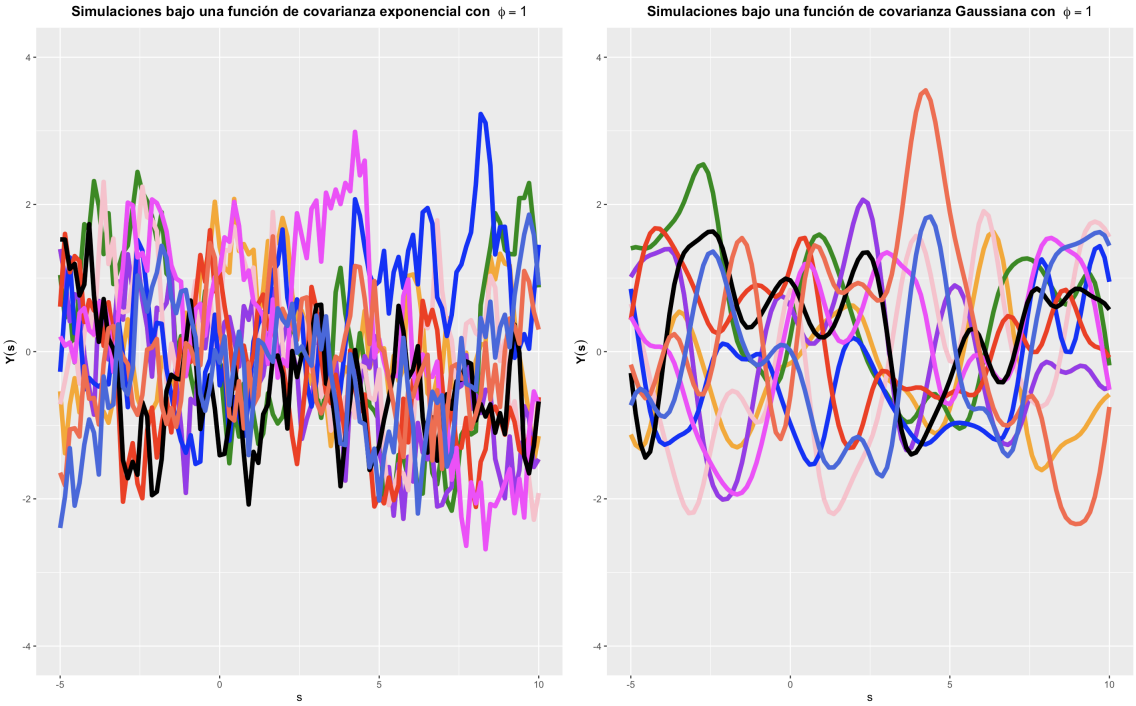

Figure 4: Para cada gráfica se simularon 10 trayectorias independientes del proceso Gaussiano con $\phi = 1$.

Nuevamente notamos que al incrementar el valor de ϕ las trayectorias tienen más picos y oscilan más fuertemente.

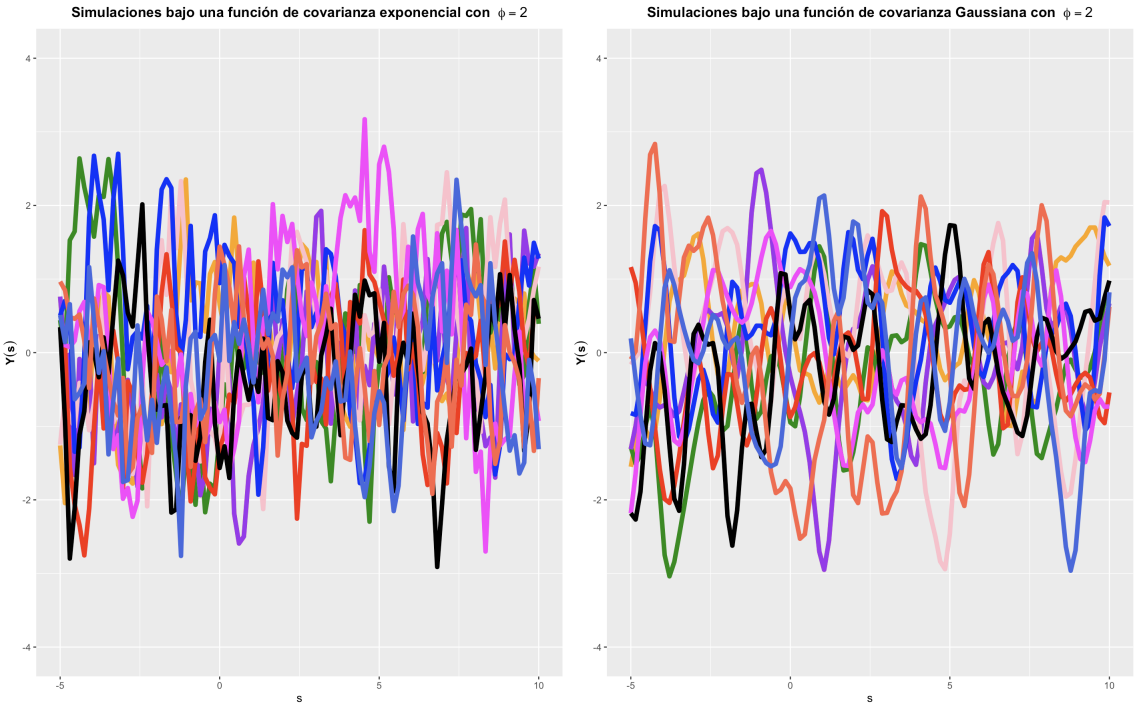

Figure 5: Para cada gráfica se simularon 10 trayectorias independientes del proceso Gaussiano con $\phi = 2$.

Vemos que se mueven más rápidamente las trayectorias, en particular las correspondientes a una función de covarianza exponencial. Notamos que ahora todas las trayectorias salen del intervalo $[-2, 2]$.

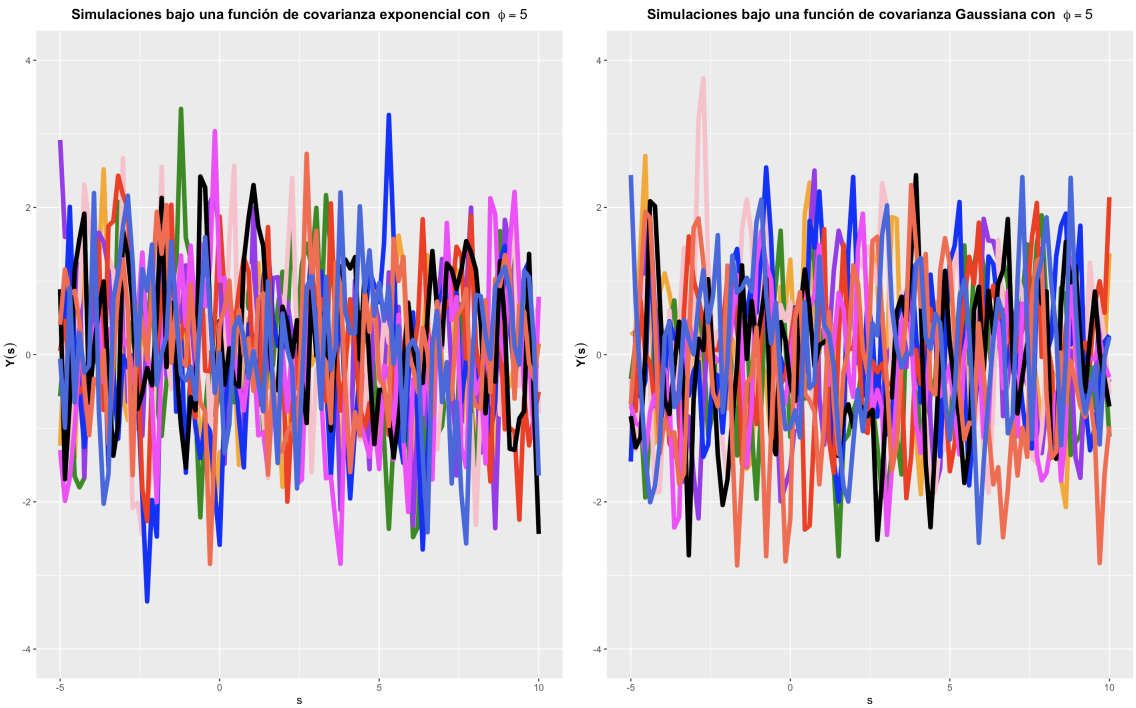

Figure 6: Para cada gráfica se simularon 10 trayectorias independientes del proceso Gaussiano con $\phi = 5$.

Ya no hay diferencias visibles tan evidentes en la forma en que oscilan los procesos Gaussianos usando diferentes funciones de covarianza. Vemos que en ambos casos las trayectorias tienen muchos picos y se mueven rápido en [-4,4]

2 Analizando casos límite

Resulta interesante pensar en lo anterior desde la perspesctiva de MCMC. Si bien, MCMC y los procesos Gaussianos no son lo mismo, lo que hemos visto de MCMC en otros reportes nos ofrece una perspectiva interesante para comprender los procesos Gaussianos.

2.1 Cuando $\phi \longrightarrow 0^+$

Cuando $\phi \longrightarrow 0^+$ tenemos que $\Sigma(s_i, s_j) \longrightarrow \sigma^2 \quad \forall i, j \in \{1, \ldots, 100\}$ tanto para la covarianza exponencial como para la Gaussiana. Ahora, tal como analizabamos en la figura 1, es como si cada trayectoria fuera constante en un solo valor. Esto es como en MCMC cuando el número efectivo de simulaciones en un

caso extremo fuera igual a 1. Así que, cuando $\phi \longrightarrow 0^+$ cada trayectoria sería como una realización de una $\mathcal{N}(0,1)$. Esto se ve reflejado de manera parcial en la figura 1, pues vemos que cuando ϕ es pequeña las trayectorias son casi horizontales. La convergencia anterior ocurre tanto con la función de covarianza exponencial como con la función de covarianza Gaussiana. Lo que las distingue es la velocidad de convergencia. Y eso es lo que vemos reflejado en la figura 1. Dados $i \neq j$ en $\{1, \ldots, 100\}$, $\sigma^2 exp\{-\phi d_{i,j}\}$ tiende a σ^2 más lento de lo que $\sigma^2 exp\{-\phi^2 d_{i,j}^2\}$ tiende a σ^2 cuando $\phi \longrightarrow 0^+$. Esto se debe a que para cualquier $\phi \in (0,1)$ se tiene que $0 < \phi^2 < \phi$. Por eso vemos que las trayectorias bajo la función de covarianza Gaussiana oscilan menos en la figura 1 en comparación a las trayectorias bajo la función de covarianza exponencial.

2.2 Cuando $\phi \longrightarrow +\infty$

Si $\phi \longrightarrow +\infty$, entonces $\Sigma(s_i, s_j) \longrightarrow 0 \forall i \neq j$. En ese caso límite tenemos que el proceso Gaussiano satisface la siguiente condición

$$\begin{pmatrix} Y(s_1) \\ Y(s_2) \\ \vdots \\ Y(s_{100}) \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}_{100}\Big(\mathbf{0}, I_{100}\Big)$$

pues al usar $\sigma^2 = 1$ la matriz de varianzas covarianzas (tanto en el caso de la función de covarianza exponencial como en el de la función de covarianza Gaussiana) converge a la matriz identidad de 100×100, la cual denotamos por $I_{100} \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$. Lo que distingue a ambas funciones de covarianza es la velocidad con la cual dicha convergencia ocurre, lo mismo que con el caso límite $\phi \longrightarrow 0^+$. Pensando bajo la perspectiva de MCMC sería como tener un número efectivo de simlaciones igual a 100 pues las 100 realizaciones en el proceso Gaussiano serían independientes.