Simulación Monte Carlo y Cadenas de Markov

Módulo 4 : Técnicas computacionales avanzadas para modelar fenómenos sociales Concentración en Economía Aplicada y Ciencia de Datos ITESM

5 de mayo de 2023



Método de Monte Carlo

Idea: Método para calcular el área bajo una curva. Es una solución estadística al problema de integración.

2/68

(ITESM) 5 de mayo de 2023

Método de Monte Carlo



Figura: Stanisław Ulam

Método de Monte Carlo: La legenda (Zwanzig and Mahjani, 2019)



Figura: Stanisław Ulam





Método de Monte Carlo: La legenda (Zwanzig and Mahjani, 2019)

- ¿Cuál es la probabilidad de ganar el juego de solitario?
- Hacer los cálculos por combinatoria era muy largo.
- Decidió calcular la probabilidad al jugar el juego varias veces.
- Jugó 100 veces y contó el número de juegos ganados.
- Ulam estableció la idea que una integral¹ puede verse como el valor esperado de una función, y que este puede ser estimado estadísticamente.



¹La probabilidad de ganar en este caso.

Método de Monte Carlo (MC)

El objetivo de los métodos de Monte Carlo es encontrar el valor de la integral:

$$\mu = \int f(x)dx < \infty$$

Principio general del método de MC

• Encontrar una factorización adecuada para f(x),

$$f(x) = h(x)p(x) \tag{1}$$

donde p(x) es una densidad. μ puede ser interpretada como un valor esperado

$$\mu = Eh(x) = \int h(x)p(x)dx$$

7 / 68

(ITESM) 5 de mayo de 2023

Principio general del método de MC

Generar una muestra iid de tamaño arbitrario de p(x), i.e.
 x₁, x₂,..., x_n. La aproximación de MC es el estimador muestral de la media que es dada por el promedio

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} h(x_i)$$

Algoritmo MC Independiente

Algorithm 1: MC independiente

- 1.- Factoriza f(x) = h(x)p(x), donde p(x) es una función de densidad.
- **2.** Genera una muestra $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}$ de la distribución p(x)
- **3.** Aproxima μ con el promedio muestral

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} (h(x^{(1)}) + \cdots + h(x^{(n)}))$$

Ejemplo: Algoritmo MC Independiente

Supongamos que queremos encontrar el valor de

$$\mu = \int_0^{0.4} 4x^5 \exp{(-x^3)} dx$$

Podemos utilizar el Algoritmo MC Independiente para calcular μ .

Usamos la distribución Weibull con parámetro de escala, λ , 1 y parámetro de forma, α , 3 para factorizar la función. La función de densidad de la distribución Weibull es:

$$\lambda lpha (\lambda x)^{lpha-1} e^{-(\lambda x)^lpha}$$
 $p(x) = 3x^2 e^{-x^3}, \; {\sf para} \; x \geq 0$

у

$$h(x) = \frac{4}{3}x^3$$

meth1(1000) # Implementamos la aproximacion

11/68

(ITESM) 5 de mayo de 2023

Método de Monte Carlo : Algoritmo Hit-Miss

Para una función f acotada en $0 \le f(\theta) \le M$, y $\theta \in [a,b]$, queremos calcular la integral

$$I = \int_{a}^{b} f(\theta) d\theta \tag{2}$$

Dicha gráfica queda inscrita en el rectángulo $R = [a, b] \times [0, M]$.

12 / 68

(ITESM) 5 de mayo de 2023

Método de Monte Carlo

El algoritmo consiste en llenar el rectángulo $R = [a,b] \times [0,M]$ simulando una muestra $(\theta_1,\phi_1),\ldots,(\theta_N,\phi_N)$ de $p(\theta,\phi)$ de una función de densidad de una distribución uniforme sobre el rectángulo R y contando cuántos de estos valores caen bajo la curva $\phi = f(\theta)$.

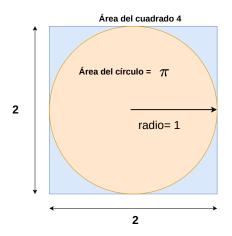
El estimador \hat{I} obtenido es un estimador insesgado de I.

La varianza del estimador es

$$Var(\hat{I}) = \frac{I}{N} \{ M(b-a) - I \}$$

(ロ) (型) (重) (重) (Q)

Cálculo de π por el método de Monte Carlo (Wilkinson and Allen, 1998)



$$rac{ ext{Área del círculo}}{ ext{Área del cuadrado}} = rac{\pi(1)^2}{4} = rac{\pi}{4}$$

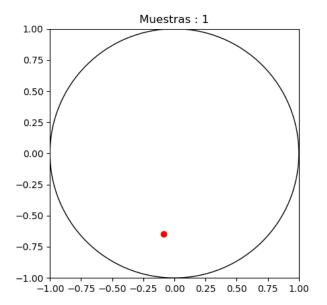
que puede ser descrita por la integral

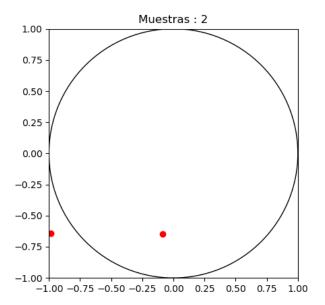
$$\int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx = \frac{\pi}{4}$$

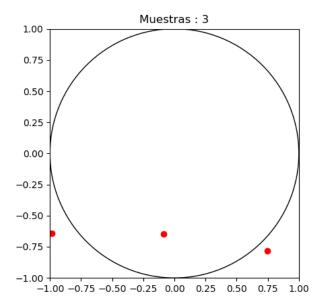
Para calcular π se generan parejas aleatorias de números (x_r, y_r) , distribuidos uniformemente entre 0 y 1, y contamos cuántos de estos puntos caen dentro del círculo, esto es, si se cumple la igualdad

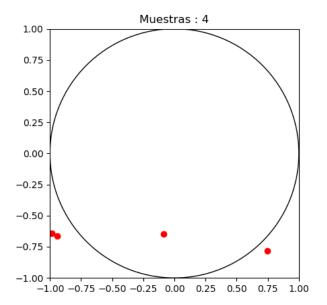
$$y_r^2 + x_r^2 < 1$$

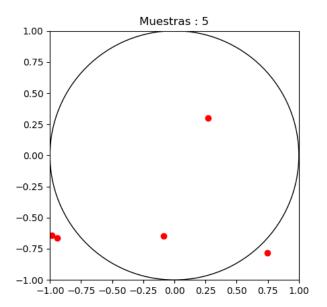
<ロト <回 > < 亘 > < 亘 > く 亘 > り < @

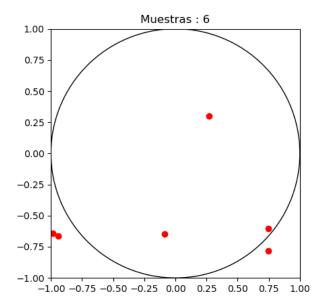


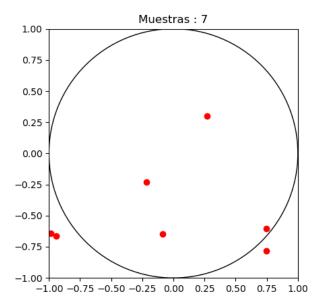


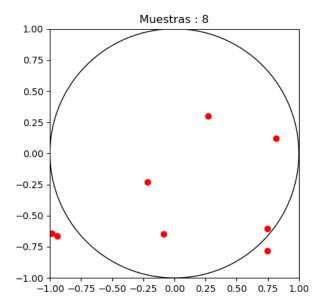


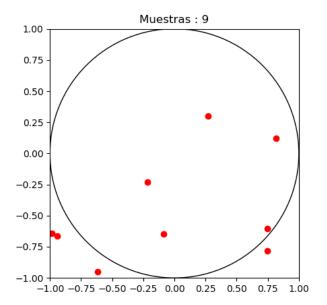


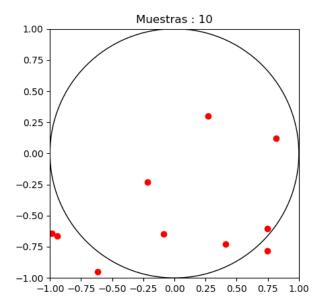


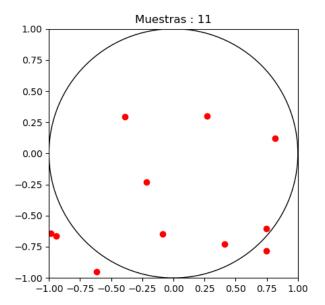


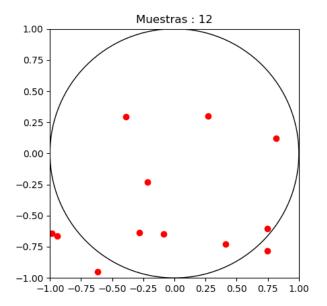


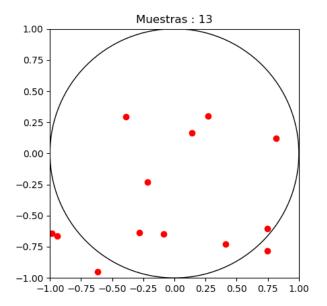


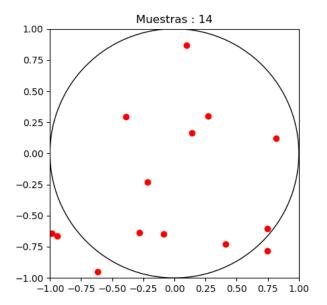


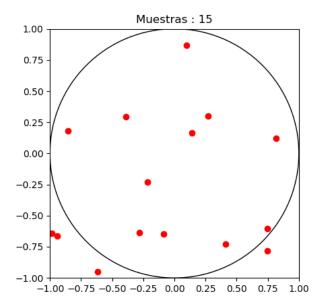


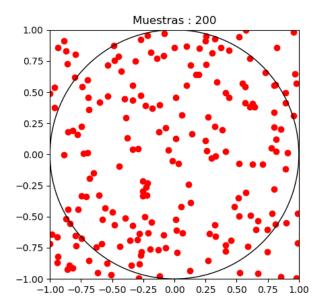




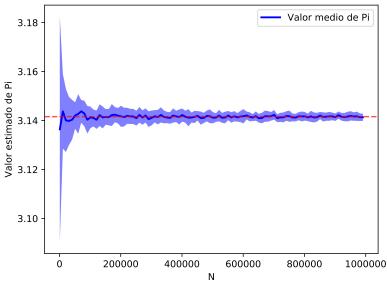












```
import random
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import math
pi_mean = []
pi_std = []
for n in range(1000,1001000,10000):
    print(n)
    experimentos = []
    for _ in range(30):
        parejas = [(random.random(), random.random()) for i in range
    (n)]
        count = 0
        for x, y in parejas:
          if x * x + y * y < 1:
            count += 1
        pi = (count/n) * 4
        experimentos.append(pi)
    pi_mean.append(np.mean(experimentos))
    pi_std.append(np.std(experimentos))
                                              4 D > 4 B > 4 B > 4 B > 9 Q P
```

(ITESM) 5 de mayo de 2023 32 / 68

Monte Carlo vía Cadenas de Markov (MCMC)

Consideremos nuevamente el problema de determinar el valor de la integral $\mu = \int f(x)dx$, donde factorizamos $f(x) = h(x)\pi(x)$,

$$\mu = E_{\pi}h(x) = \int_{B} h(x)\pi(x)dx, \quad B \subseteq R^{d}$$

Los métodos de Monte Carlo vía Cadenas de Markov (MCMC) son especialmente útiles para integrales sobre regiones de varias dimensiones, dado que la simulación de variables iid en varias dimensiones es altamente ineficiente.

La integral μ puede interpretarse como un valor esperado con respecto a una distribución estacionaria π de una Cadena de Markov.

4□▶ 4□▶ 4□▶ 4□▶ 4□ 900

Monte Carlo vía Cadenas de Markov (MCMC)

Consideremos nuevamente el problema de determinar el valor de la integral $\mu = \int f(x)dx$, donde factorizamos $f(x) = h(x)\pi(x)$,

$$\mu = E_{\pi}h(x) = \int_{B}h(x)\pi(x)dx, \quad B \subseteq R^{d}$$

Los métodos de Monte Carlo vía Cadenas de Markov (MCMC) son especialmente útiles para integrales sobre regiones de varias dimensiones, dado que la simulación de variables iid en varias dimensiones es altamente ineficiente.

La integral μ puede interpretarse como un valor esperado con respecto a una distribución estacionaria π de una Cadena de Markov.



Propiedad de Markov

Definition

Propiedad de Markov. Un proceso estocástico discreto con estados finitos que cumple la propiedad de Markov si,

$$P(X_{t+1} = s | X_1 = s_1, ..., X_t = s_t) = P(X_{t+1} = s | X_t = s_t)$$

Cadenas de Markov

d

Estados:

d: Dormitorio

b: Bar

c: Comedor

c

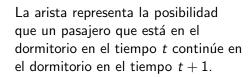
Ejemplo tomado de

b



0.70





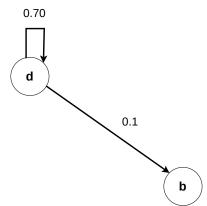


Se etiqueta con la probabilidad de que esto suceda (**Probabilidad de transición**)

$$P(X_{t+1} = d \mid X_t = d) = 0.7$$



(ロト 4回 ト 4 至 ト 4 巨) 9 Q (^)

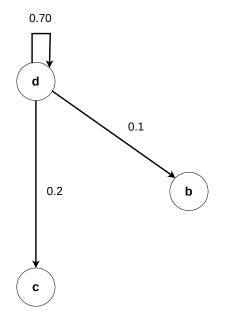


Arista para la transición del dormitorio al bar

$$P(X_{t+1} = b \mid X_t = d) = 0,1$$



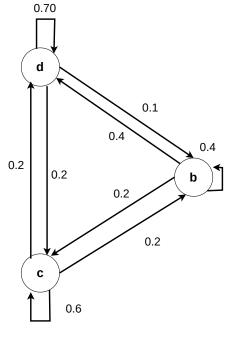
38 / 68



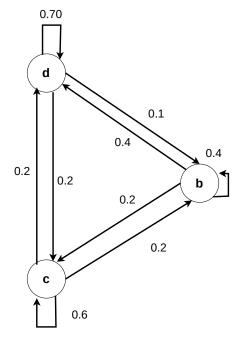
Arista para la transición del dormitorio al comedor

$$P(X_{t+1} = c \mid X_t = d) = 0,2$$

39 / 68



Agregamos todas las transiciones posibles y sus probabilidades.



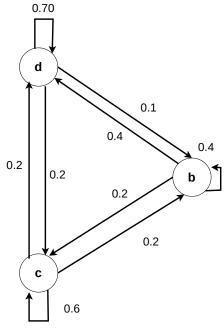
Las probabilidades de transición pueden representarse de manera matricial:

$$T = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.1 & 0.2 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.2 & 0.6 \end{bmatrix}$$
 (3)

con entradas

$$p_{i,j} \equiv P(X_{t+1} = i \mid X_t = j)$$

41 / 68



Matriz de probabilidad de estado:

$$T = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.1 & 0.2 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.2 & 0.6 \end{bmatrix}$$

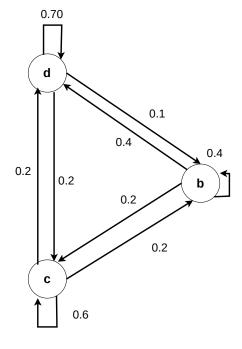
La dinámica para la distribución de probabilidad puede expresarse^a

$$\begin{bmatrix}
P(X_{t+1} = d) \\
P(X_{t+1} = b) \\
P(X_{t+1} = c)
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
P(X_t = d) \\
P(X_t = b) \\
P(X_t = c)
\end{bmatrix} T$$
(4)

$$P(X_{t+1}) = P(X_t)T$$
 (5)

(ITESM) 5 de mayo de 2023 42 / 68

 $^{{}^{}a}P(X_{t})$ es un vector fila.



Si sabemos que el pasajero se encuentra en el dormitorio al tiempo t=0:

$$P(X_0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = P_0$$

Al tiempo siguiente la distribución es:

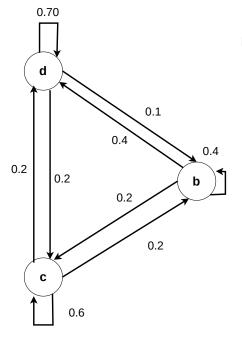
$$P(X_1) = P_0 T = P_1$$

$$P(X_1) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.7 & 0.1 & 0.2 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.2 & 0.6 \end{bmatrix}$$

$$P(X_1) = \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.1 \\ 0.2 \end{bmatrix}$$

◄□▶◀圖▶◀불▶◀불▶ 불 쒸٩○

(ITESM) 5 de mayo de 2023 43 / 68



Para tiempos futuros

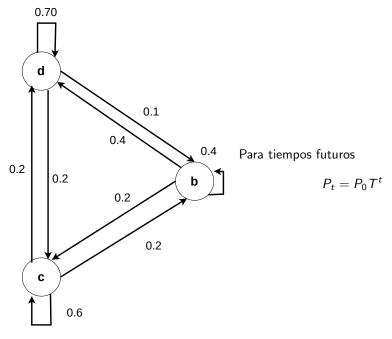
$$P(X_t) = P(X_{t-1})T \equiv P_t$$

$$P1 = P_0 T$$
$$P2 = P_1 T$$

$$\begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.1 \\ 0.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.7 & 0.1 & 0.2 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.2 & 0.6 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0,57\\0,15\\0,28 \end{bmatrix}$$

$$P_0TT = P_0T^2$$



Teorema Perron-Frobenius

Un proceso de Markov converge a un equilibrio estadístico único si cumple las siguientes condiciones

- Conjunto finito de estados: $S = \{1, 2, \dots, K\}$
- Reglas de transición fijas: La matriz de transición no cambia en el tiempo.
- Ergodicidad (accesibilidad entre estados): El sistema puede alcanzar cualquier estado desde cualquier estado a través de una serie de transiciones.
- No ciclicidad: El sistema no produce un ciclo a través de una secuencia de estados.

46 / 68

En procesos estocásticos y determinísticos frecuentemente nos interesa el comportamiento de largo plazo del sistema.

Martell recolectó datos diarios sobre riesgo de incendios del Canadian Forest Fire Weather Index en un periodo de 26 años para 15 estaciones climáticas.

Para la región de Ontario construyó una cadena de Markov de cinco estados de los cambios diarios en el indice.

El índice clasifica cada riesgo diario de incendio en el bosque en nil, low, moderate, high y extremo.

(ITESM) 5 de mayo de 2023 47 / 68

La matrix de transición es la siguiente

| | | | Moderate | _ | | |
|---|--------|-------|----------|-------|---------|-----|
| Nil Low $T = Moderate$ $High$ $Extreme$ | (0,575 | 0,118 | 0,172 | 0,109 | 0,026 \ | |
| Low | 0,453 | 0,243 | 0,148 | 0,123 | 0,033 | |
| T = Moderate | 0,104 | 0,343 | 0,367 | 0,167 | 0,019 | (6) |
| High | 0,015 | 0,066 | 0,318 | 0,505 | 0,096 | |
| Extreme | 0,000 | 0,060 | 0,149 | 0,567 | 0,224 | |

(ITESM)

A los administradores del bosque les interesa conocer el comportamiento de largo plazo. Esto es, la distribución de probabilidad de largo plazo del índice diario.

Con respecto al riesgo particular de cualquier día² ¿Cual es la probabilidad de riesgo de un día típico al comienzo de verano?

Para responder a la pregunta, obtengamos las potencia de la matriz de transición para distintos t.

²Esto es, independientemente de la condición inicial o punto de partida. 📳 🗦 🔊 🔾

(ITESM) 5 de mayo de 2023 49 / 68

| | | | | Moderate | _ | |
|---------|----------|--------|-------|----------------------------------|-------|---------|
| | Nil | (0,404 | 0,164 | 0,218 0,212 0,259 0,304 | 0,176 | 0,038 \ |
| | Low | 0,388 | 0,173 | 0,212 | 0,185 | 0,042 |
| $T^2 =$ | Moderate | 0,256 | 0,234 | 0,259 | 0,21 | 0,041 |
| | High | 0,079 | 0,166 | 0,304 | 0,372 | 0,079 |
| | Extreme | 0,051 | 0,117 | 0,304 0,277 | 0,446 | 0,109 |

7)

(ITESM) 5 de mayo de 2023 50 / 68

| | | Nil | Low | Moderate | High | Extreme |
|---------|----------|--------|-------|-------------------------|-------|---------|
| | Nil | (0,332 | 0,176 | 0,235 | 0,211 | 0,046 \ |
| | Low | 0,326 | 0,175 | 0,235 0,235 0,247 | 0,216 | 0,047 |
| $T^3 =$ | Moderate | 0,283 | 0,192 | 0,247 | 0,229 | 0,049 |
| | High | 0,158 | 0,183 | 0,28 | 0,312 | 0,067 |
| | Extreme | 0,118 | 0,165 | 0,286 | 0,353 | 0,078 / |

51/68

| | | Nil | Low | Moderate | High | Extreme |
|---------|----------|--------|-------|------------------------|-------|---------|
| | Nil | (0,282 | 0,18 | 0,248 | 0,239 | 0,051 \ |
| | Low | 0,279 | 0,18 | 0,248 0,248 0,25 | 0,241 | 0,052 |
| $T^5 =$ | Moderate | 0,273 | 0,181 | 0,25 | 0,244 | 0,052 |
| | High | 0,235 | 0,183 | 0,259 | 0,266 | 0,057 |
| | Extreme | 0,217 | 0,183 | 0,264 | | 0,06 |

9)

(ITESM) 5 de mayo de 2023 52 / 68

| | | Nil | Low | Moderate | High | Extreme |
|------------|----------|--------|-------|----------------|-------|---------|
| | Nil | /0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,053 \ |
| | Low | 0,264 | 0,181 | 0,252 0,252 | 0,249 | 0,054 |
| $T^{10} =$ | Moderate | 0,264 | 0,181 | 0,252 | | |
| | High | 0,263 | 0,181 | 0,252 | | |
| | Extreme | 0,262 | 0,181 | 0,252 | 0,251 | 0,054 |

(10)

(ITESM) 5 de mayo de 2023 53 / 68

| | | Nil | Low | Moderate | High | Extreme |
|------------|------------------|--------|-------|-------------------------|-------|---------|
| | Nil | /0,264 | 0,181 | 0,252 0,252 0,252 | 0,249 | 0,054 \ |
| | Low | 0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 |
| $T^{17} =$ | ${\sf Moderate}$ | 0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 |
| | High | 0,264 | 0,181 | 0,252 0,252 | 0,249 | 0,054 |
| | Extreme | 0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 |

(11)

(ITESM) 5 de mayo de 2023 54 / 68

| | | Nil | Low | Moderate | High | Extreme |
|------------|----------|--|-------|----------|-------|---------|
| | Nil | /0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 \ |
| | Low | $\begin{pmatrix} 0,264 \\ 0,264 \end{pmatrix}$ | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 |
| $T^{18} =$ | Moderate | 0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 |
| | High | 0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 |
| | Extreme | 0,264 | 0,181 | 0,252 | 0,249 | 0,054 / |

(12)

(ITESM) 5 de mayo de 2023 55 / 68

- La evidencia numérica sugiere que las potencias de la matriz de transición están convergiendo a un límite.
- Además, las filas de las matrices, en el límite, son todas las mismas.
- El hecho que las filas de T¹⁷ son las mismas significa que la probabilidad del índice de incendio, después de 17 días, no depende del nivel actual de riesgo.
- Después de 17 días, el efecto de estado inicial se ha desvanecido, y no tiene efectos en la distribución del indice de incendio.

56 / 68

La distribución de largo plazo del índice de fuego es la siguiente:

| Nil | Low | Moderate | High | Extreme |
|-------|-------|----------|-------|---------|
| 0.264 | 0.181 | 0.252 | 0.249 | 0.054 |

57 / 68

Zhang et al. (2011) estudiaron los cambios en la distribución de humedales en Yinchuan, China. Los humedales son considerados entre los ecosistemas más importantes de la tierra.

Zhang et al. (2011) desarrollaron un modelo de Markov para dar seguimiento a los cambios anuales entre tipos de humedales.

(ITESM)

Utilizando imágenes y datos satelitales de los años 1991, 1999 y 2006, estimaron las distribuciones anuales de tipos de humedales en la región y estimaron la siguiente matriz de transición:

River Lake Pond Paddy Non

River
$$\begin{pmatrix} 0.342 & 0.005 & 0.001 & 0.020 & 0.632 \\ 0.001 & 0.252 & 0.107 & 0.005 & 0.635 \\ 0.000 & 0.043 & 0.508 & 0.015 & 0.434 \\ 0.001 & 0.002 & 0.004 & 0.665 & 0.328 \\ 0.007 & 0.007 & 0.007 & 0.025 & 0.954 \end{pmatrix}$$

(13)

El estado Non se refiere a regiones que no son humedales.

◆ロト ◆個ト ◆差ト ◆差ト 差 めるぐ

(ITESM)

- Utiliza la matriz de transición para encontrar la distribución estacionaria de los estados de humedales.
- ¿En cuántos años la distribución de humedales estará en estado estacionario?

La siguiente matriz de transición representa la probabilidad de cambio de alcaldía de acuerdo a la encuesta intercensal de 2015.

Se construyó identificando los flujos de personas que en 2010 vivían en una alcaldía i y que en 2015 vivían en una alcaldía j.

| | | 9002 | 9003 | 9004 | 9005 | 9006 | 9007 | 9008 | 9009 | 9010 | 9011 | 9012 | 9013 | 9014 | 9015 | 9016 | 9017 |
|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|--------|
| | 9002 | ,974 | ,002 | ,0 | ,006 | ,001 | ,002 | ,0 | ,0 | ,001 | ,0 | ,001 | ,001 | ,002 | ,004 | ,004 | ,001 \ |
| | 9003 | ,0 | ,944 | ,001 | ,002 | ,001 | ,01 | ,001 | ,001 | ,004 | ,002 | ,012 | ,004 | ,01 | ,004 | ,002 | ,001 |
| | 9004 | ,0 | ,001 | ,984 | ,001 | ,0 | ,0 | ,0 | ,0 | ,004 | ,0 | ,001 | ,0 | ,001 | ,004 | ,004 | ,0 |
| | 9005 | ,002 | ,002 | ,0 | ,983 | ,001 | ,001 | ,0 | ,0 | ,001 | ,0 | ,001 | ,0 | ,002 | ,004 | ,001 | ,002 |
| | 9006 | ,001 | ,003 | ,0 | ,003 | ,957 | ,015 | ,0 | ,0 | ,002 | ,002 | ,001 | ,0 | ,006 | ,004 | ,002 | ,004 |
| | 9007 | ,0 | ,003 | ,0 | ,001 | ,004 | ,977 | ,0 | ,0 | ,001 | ,004 | ,002 | ,001 | ,003 | ,002 | ,001 | ,001 |
| | 9008 | ,001 | ,003 | ,0 | ,001 | ,0 | ,004 | ,97 | ,0 | ,007 | ,0 | ,008 | ,001 | ,003 | ,001 | ,001 | ,0 |
| T = | 9009 | ,0 | ,001 | ,0 | ,0 | ,0 | ,001 | ,0 | ,987 | ,001 | ,002 | ,001 | ,004 | ,001 | ,0 | ,001 | ,0 |
| 1 = | 9010 | ,001 | ,002 | ,002 | ,001 | ,001 | ,002 | ,002 | ,0 | ,972 | ,0 | ,002 | ,0 | ,006 | ,003 | ,003 | ,001 |
| | 9011 | ,0 | ,004 | ,0 | ,001 | ,0 | ,009 | ,0 | ,001 | ,001 | ,975 | ,002 | ,003 | ,001 | ,001 | ,0 | ,001 |
| | 9012 | ,0 | ,008 | ,0 | ,001 | ,001 | ,002 | ,003 | ,001 | ,003 | ,001 | ,967 | ,003 | ,006 | ,002 | ,002 | ,0 |
| | 9013 | ,001 | ,005 | ,0 | ,001 | ,0 | ,002 | ,0 | ,003 | ,001 | ,003 | ,006 | ,973 | ,002 | ,001 | ,001 | ,0 |
| | 9014 | ,001 | ,013 | ,001 | ,002 | ,004 | ,008 | ,001 | ,0 | ,01 | ,002 | ,006 | ,001 | ,934 | ,009 | ,007 | ,001 |
| | 9015 | ,004 | ,004 | ,0 | ,006 | ,002 | ,004 | ,0 | ,0 | ,002 | ,0 | ,002 | ,0 | ,012 | ,952 | ,006 | ,005 |
| | 9016 | ,008 | ,002 | ,003 | ,002 | ,001 | ,001 | ,0 | ,0 | ,005 | ,0 | ,002 | ,001 | ,009 | ,009 | ,955 | ,002 |
| | 9017 | ,001 | ,002 | ,0 | ,006 | ,005 | ,005 | ,0 | ,0 | ,001 | ,0 | ,002 | ,0 | ,005 | ,005 | ,001 | ,966 |
| | | | | | | | | | | | | | | | | | (14) |

4 D > 4 D > 4 E > 4 E > E 990

61 / 68

| Clave | Demarcación terrirorial |
|--------|-------------------------|
| 09002 | Azcapotzalco |
| 09003 | Coyoacán |
| 09004 | Cuajimalpa de Morelos |
| 09005 | Gustavo A. Madero |
| 09006 | Iztacalco |
| 09007 | Iztapalapa |
| 09008 | La Magdalena Contreras |
| 09009 | Milpa Alta |
| 090010 | Álvaro Obregón |
| 090011 | Tláhuac |
| 090012 | Tlalpan |
| 090013 | Xochimilco |
| 090014 | Benito Juárez |
| 090015 | Cuauhtémoc |
| 090016 | Miguel Hidalgo |
| 090017 | Venustiano Carranza |

- Utiliza la matriz de transición para encontrar la distribución estacionaria.
- ¿En cuántos años la distribución probabilidad de cambio de alcaldía estará en estado estacionario?

Monte Carlo vía Cadenas de Markov (MCMC)

Consideremos nuevamente el problema de determinar el valor de la integral $\mu = \int f(x)dx$, donde factorizamos $f(x) = h(x)\pi(x)$,

$$\mu = E_{\pi}h(x) = \int_{B} h(x)\pi(x)dx, \quad B \subseteq R^{d}$$

Los métodos de Monte Carlo vía Cadenas de Markov (MCMC) son especialmente útiles para integrales sobre regiones de varias dimensiones, dado que la simulación de variables iid en varias dimensiones es altamente ineficiente.

La integral μ puede interpretarse como un valor esperado con respecto a una distribución estacionaria π de una Cadena de Markov.

4□▶ 4□▶ 4□▶ 4□▶ 4□ 900

(ITESM)

Algoritmo de Metropolis (Hanada and Matsuura, 2022)

Supongamos una distribución de probabilidad P(x)

$$P(x) = \frac{e^{-S(x)}}{Z} \tag{15}$$

En física, la función S(x) es llamada la acción y el factor de normalización Z es llamada la función de partición.

En nuestro contexto, podemos pensar S como una función de log verosimilitud.

Se asume que S(x) es una función continua de una variable real x.

4□ > 4□ > 4 = > 4 = > = 90

(ITESM) 5 de mayo de 2023 65 / 68

Algoritmo de Metropolis (Hanada and Matsuura, 2022)

Para el caso de una distribución normal³, la acción es

$$S(x) = \frac{x^2}{2}$$

y la función de partición es

$$Z = \sqrt{2\pi}$$

Normalmente en aplicaciones sólo conocemos S(x) y Z es desconocida.

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

Para $\mu = 0$ y $\sigma = 1$, obtenemos las funciones de acción y partición propuestasS(x)

(ITESM) 5 de mayo de 2023

66 / 68

³La distribución normal es

Algoritmo de Metropolis (Hanada and Matsuura, 2022)

En el Algoritmo de Metropolis comenzamos con un valor inicial $x^{(0)}$ y generamos una secuencia $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(k)}, x^{(k+1)}$, siguiendo las siguientes reglas:

Algorithm 2: Algoritmo (General) de Metropolis

Escoge un número real Δx de forma aleatoria

Se propone $x' = x^{(k)} + \Delta x$ como candidato para $x^{(k)}$

Metropolis test: se acepta el candidato x' y el valor de x es actualizado a $x^{(k+1)} = x'$ con probabilidad mín $(1, e^{S(x^{(k)}) - S(x')})$.

En caso contrario, se rechaza al candidato x' y el valor de x permanece inalterado, esto es, $x^{(k+1)} = x^{(k)}$

Para el **Metropolis test**, se genera un número aleatorio r entre 0 y 1 y se acepta el candidato x' si $r < e^{S(x^{(k)}) - S(x')}$.

(ITESM) 5 de mayo de 2023 67/68

Implementación del Algoritmo de Metropolis

```
import numpy as np
niter = 100000
x = 0
for it in range(niter):
    backup = x
    action_init = (1/2)*x**2
    dx = np.random.random()
    dx = (dx-0.5)*2.0
    x = x + dx
    action final = (1/2)*x**2
    ### Metropolis tes
    r = np.random.random()
    if np.exp(action_init - action_final) > r:
        ## Aceptamos el candidato
        naccept += 1
    else:
        ## Rechazamos el candidato
        x = backup
```

References I

- Dobrow, R. P. (2016). *Introduction to stochastic processes with R.* John Wiley & Sons.
- Hanada, M. and Matsuura, S. (2022). MCMC from Scratch: A Practical Introduction to Markov Chain Monte Carlo. Springer Nature.
- Theodoridis, S. (2020). *Machine Learning. A Bayesian and Optimization Perspective*. Academic Press, second edition edition.
- Wilkinson, B. and Allen, M. (1998). Parallel Programming: Techniques and Applications Using Networked Workstations and Parallel Computers. Prentice-Hall, Inc., USA.
- Zhang, R., Tang, C., Ma, S., Yuan, H., Gao, L., and Fan, W. (2011). Using markov chains to analyze changes in wetland trends in arid yinchuan plain, china. *Mathematical and Computer Modelling*, 54(3-4):924–930.
- Zwanzig, S. and Mahjani, B. (2019). *Computer intensive methods in statistics*. CRC Press.

(ITESM) 5 de mayo de 2023 69 / 68