Estatística Computacional

Simulação de variáveis aleatórias - Parte 1



Prof. Paulo Cerqueira Jr Faculdade de Estatística - FAEST Programa de Pós-graduação em Matemática e Estatística - PPGME

https://github.com/paulocerqueirajr

Estatística computacional envolve transformar teoria e métodos em algoritmos e cálculos numéricos reais com dados.

- Trata-se de resolver problemas computacionais reais que surgem quando visualizamos, analisamos e modelamos dados.
- A estatística computacional não é um tópico único e coerente, mas sim um grande número de técnicas computacionais vagamente relacionadas que usamos em estatística.
- Em vez disso, alguns tópicos e metodologias estatísticas selecionados são tratados com algum detalhe.
- Pretende-se que boas práticas computacionais possam ser aprendidas a partir desses tópicos e transferidas para outras metodologias estatísticas conforme necessário.

- Esta disciplina é inteiramente dedicada à exposição de métodos para simulação de variáveis aleatórias.
- A discussão dos algoritmos será fundamentada pela Teoria das Probabilidades.
- Algumas aplicações serão desenvolvidas ao final desta unidade tais como:
 - Geração de variáveis uniformes e não uniformes;
 - Integração Monte Carlo.

Simulação computacional significa usar um computador para recriar modelos matemáticos de sistemas ou processos em diferentes cenários.

• As simulações podem ser determinísticas ou estocásticas.

Por que é necessário saber gerar variáveis aleatórias?

- Gerar bancos de dados para avaliar o desempenho de modelos propostos;
- Aproximar integrais. Ex.: algoritmo EM Monte Carlo;
- Estatística Bayesiana: Gerar amostras da distribuição a posteriori quando a mesma não tem expressão fechada conhecida para sua função de densidade ou função massa de probabilidade.

Exemplo de Simulação determinística

- Considere o problema de condução de calor numa chapa metálica quadrada.
- Para simular este sistema é necessário resolver a seguinte equação diferencial parcial

$$k \frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t}$$
.

sujeita às condições de contorno nas bordas da chapa.

Exemplo de Simulação estocástica

- Suponha que clientes chegam para utilizar um certo serviço e são atendidos por k servidores onde k é um inteiro positivo.
- Suponha que os tempos entre chegadas sucessivas de clientes são variáveis aleatórias exponencialmente distribuídas com taxa λ e que o tempo de serviço prestado a cada cliente é uma variável aleatória exponencialmente distribuída com taxa μ .
- Além disso, suponha que tempos de serviço associados a clientes distintos são independentes. Quando existem mais de k clientes no sistema, o excesso forma um fila de espera até que um deles seja chamado por um dos servidores.

Eventualmente estaremos interessados em responder questões tais como:

- Quais cenários (valores de λ , μ e k) são capazes de produzir longas filas?
- Qual é o número médio de clientes no sistema?
- Qual é o tempo médio gasto por um cliente no sistema?

Simulação de Números Pseudo-Aleatórios

Simulação de Números Pseudo-Aleatórios

- Antigamente números aleatórios eram gerados mecanicamente ou manualmente, usando roletas, urnas, moedas ou dados.
- A abordagem moderna consiste em usar um computador para gerar uma sequência de números que para todos os fins práticos imita uma amostra aleatória simples de uma uniforme no intervalo (0,1).
- Na verdade, estes números são apenas pseudo-aleatórios pois, como veremos, eles são gerados de forma determinística.
- Obviamente isto pode trazer dúvidas quanto a eficiência de tais geradores como fontes de aleatoriedade. Porém a discuss ao deste tema é difícil e foge completamente do escopo do curso.
- Vamos assumir simplesmente que os algoritmos que serão apresentados produzem uma sequência de variáveis aleatórias i.i.d. uniformemente distribuídas no intervalo (0,1).

Operação $x \mod n$

Operação $x \bmod n$

Seja $n \in \mathbb{Z}$ e defina uma relação R em \mathbb{Z} tal como segue

$$xRy$$
 se, e somente se, $x-y=kn,\;k\in\mathbb{Z}$

A classe de equivalência de $y \in \mathbb{Z}$ é definida pelo conjunto,

$$ar{y}=\{x\in\mathbb{Z};xRy\}=\{x\in\mathbb{Z};x=kn+y,k\in\mathbb{Z}\}.$$

A relação R induz uma partição em $\mathbb Z$ tal como segue

$$\mathbb{Z} = \overline{0} \cup \overline{1} \cup \overline{2} \cup \cdots \cup \overline{n-1}.$$

Operação $x \bmod n$

Ou seja,

$$\left\{egin{aligned} ar{0} &= \{x \in \mathbb{Z}; x = kn, k \in \mathbb{Z}\} = \{\dots, -2n, -n, 0, n, 2n, \dots\} \ ar{1} &= \{x \in \mathbb{Z}; x = kn + 1, k \in \mathbb{Z}\} = \{\dots, -2n + 1, -n + 1, 1, n + 1, 2n + 1, \dots\} \ ar{2} &= \{x \in \mathbb{Z}; x = kn + 2, k \in \mathbb{Z}\} = \{\dots, -2n + 2, -n + 2, 2, n + 2, 2n + 2, \dots\} \ ar{:} \ ar{n - 1} &= \{x \in \mathbb{Z}; x = kn + n, k \in \mathbb{Z}\} = \{\dots, -n, -1, -1, n - 1, 2n - 1, \dots\} \end{aligned}
ight.$$

Note que, $ar{n}=ar{0}, \overline{n+1}=ar{1},$ etc.

Operação $x \bmod n$

A operação $x mod n, x \in \mathbb{Z}$ e $n \in \mathbb{Z}$, é definida por

$$x oxdot n = egin{cases} 0 & x \in ar{0} \ 1 & x \in ar{1} \ 2 & x \in ar{2} \ dots & dots \ n-1 & x \in ar{n-1} \end{cases}$$

Exemplo $x \bmod n$

Como exemplo, vejamos a operação $x \mod 4$:

$$x mod 4 = egin{cases} 0 & x \in ar{0} = \{ \ldots, -8, -4, 0, 4, 8, \ldots \} \ 1 & x \in ar{1} = \{ \ldots, -7, -3, 1, 5, 9, \ldots \} \ 2 & x \in ar{2} = \{ \ldots, -6, -2, 2, 6, 10, \ldots \} \ 3 & x \in ar{3} = \{ \ldots, -5, -1, 3, 7, 11, \ldots \} \end{cases}$$

No R

No R a operação $x \bmod n$ é realizada com o operador %%.

```
1 8%%4 # resto de divisão 8/4

[1] 0

1 11%%4 # resto de divisão 11/4

[1] 3

1 2%%4 # resto de divisão 2/4

[1] 2

1 -3%%4 # resto de divisão -3/4

[1] 1
```

Método Congruencial Linear

Método Congruencial Linear

- Sejam a,b e n inteiros positivos e seja x_1 um natural menor do que n.
- Este método propõe uma sequência de números pseudo-aleatórios gerada pela seguinte equação de recorrência:

$$x_{k+1}=(ax_k+b) mod n,$$

 $k\geq 1$. Tal como foi definida $x_k\in\{0,1,\ldots,n-1\}$ para todo $k\geq 1$. Portanto para obter uma sequência $(u_k)_{k\geq 1}$ com valores em (0,1), basta fazer

$$u_k=rac{x_k}{n},\quad k\geq 1.$$

Exemplo 1:

Faça $a=123, b=971, n=1137\,\mathrm{e}\,x_1=27.$

[19] 0.381706245 0.803869833 0.729991205

```
1 x <- NULL

2 x[1] <- 27

3 for(k in 1:20){

4 x[k+1] <- ((123*x[k] + 971) %% 1137)

5 }

6 u <- x/1137 # Seq. uniforme.

7 u

[1] 0.023746702 0.774846086 0.160070361 0.542656113 0.600703606 0.740545295

[7] 0.941072999 0.605980651 0.389621812 0.777484609 0.484608619 0.460861917
```

[13] 0.540017590 0.276165347 0.822339490 0.001759015 0.070360598 0.508355321

Exemplo: Ciclos peródicos

Certas escolhas dos valores de a,b e n, podem gerar sequências com ciclos periódicos.

Faça a=6,b=7,n=5 e $x_1=2$.

```
1 x <- NULL

2 x[1] <- 2

3 for(k in 1:12) {

4 x[k+1] <- ((6*x[k] + 7) %% 5)

5 }

6 x
```

[1] 2 4 1 3 0 2 4 1 3 0 2 4 1

```
1 u <- x/5
2 u
```

[1] 0.4 0.8 0.2 0.6 0.0 0.4 0.8 0.2 0.6 0.0 0.4 0.8 0.2

Exemplo: Ciclos peródicos

Faça a=1,b=1,n=10 e $x_1=3$.

```
1 x <- NULL

2 x[1] <- 3

3 for (k in 1:15) {

4 x[k+1] <- ((x[k] + 1) %% 10)

5 }

6 x

[1] 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4 5 6 7 8
```

1 u <- x/10 2 u

[1] 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 0.0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8

Exemplo

Algumas boas receitas:

- $x_{k+1} = (44485709377909x_k + 375) \mod 248;$
- $x_{k+1} = (16807x_k + 8437) \mod (231 1)$.

Semente

- No programa R podemos gerar números aleatórios uniformes contínuos utilizando uma função pré-programada.
- Os números aleatórios uniformes são gerados pelo comando runif(n, min, max), em que:
 - n é o tamanho da sequência;
 - min e max são argumentos que delimitam o valor mínimo e máximo da sequência a ser gerada.
- O controle da semente para se gerar uma sequência reproduzível de números uniformes é dada pelo comando set.seed(semente), onde o argumento semente deve ser um número inteiro.
- O R automaticamente determina a cada chamada uma nova semente.

Semente

Conseguimos gerar diferentes sequências em cada chamada do comando runif(n, min, max), sem nos preocuparmos com a semente aleatória.

Devemos reiterar que o programa R oferece seis geradores de eventos uniformes:

Wichmann-Hill De período aproximado $7 imes 10^{12}$.

Marsaglia-Multicarry De período aproximadamente igual a 2^{60} , passa em testes rigorosos.

Super-Duper De período aproximado $5 imes 10^{18}$, não passa em alguns testes rigorosos.

Mersenne-Twister De período $2^{19937}-1$ e boa distribuição em espaços de dimensões inferiores a 623. (default !)

Knuth-TAOCP Este gerador é definido pela relação $u_j = (u_{j-100} - u_{j-37}) \bmod 2^{30}$ e seu periodo é de aproximadamente 2^129 .

Uma versão atualizada e melhorada do anterior.

Uniformes no R

Usando a função do R para gerar valores de uma uniforme (runif):

```
1 (x <- runif(n=10, min=0, max=1))

[1] 0.14554156 0.09331545 0.41229396 0.33507436 0.22957404 0.87948652

[7] 0.37231981 0.61602233 0.50631418 0.70808067

1 (x <- runif(n=10, min=1, max=2))

[1] 1.041380 1.689070 1.631495 1.556898 1.993820 1.646151 1.592357 1.164192

[9] 1.706494 1.946865

1 (x <- runif(n=10, min=-1, max=1))

[1] -0.255531147 0.152504665 0.001797940 -0.810972475 0.239659859

[6] -0.799610405 -0.713856413 -0.828371328 0.001905327 0.513070924
```

Método da Transformação Inversa

Método da Transformação Inversa

Seja X uma v.a. com função de distribuição acumulada F contínua. Seja $F^{-1}:(0,1) o\mathbb{R}$ uma função definida por

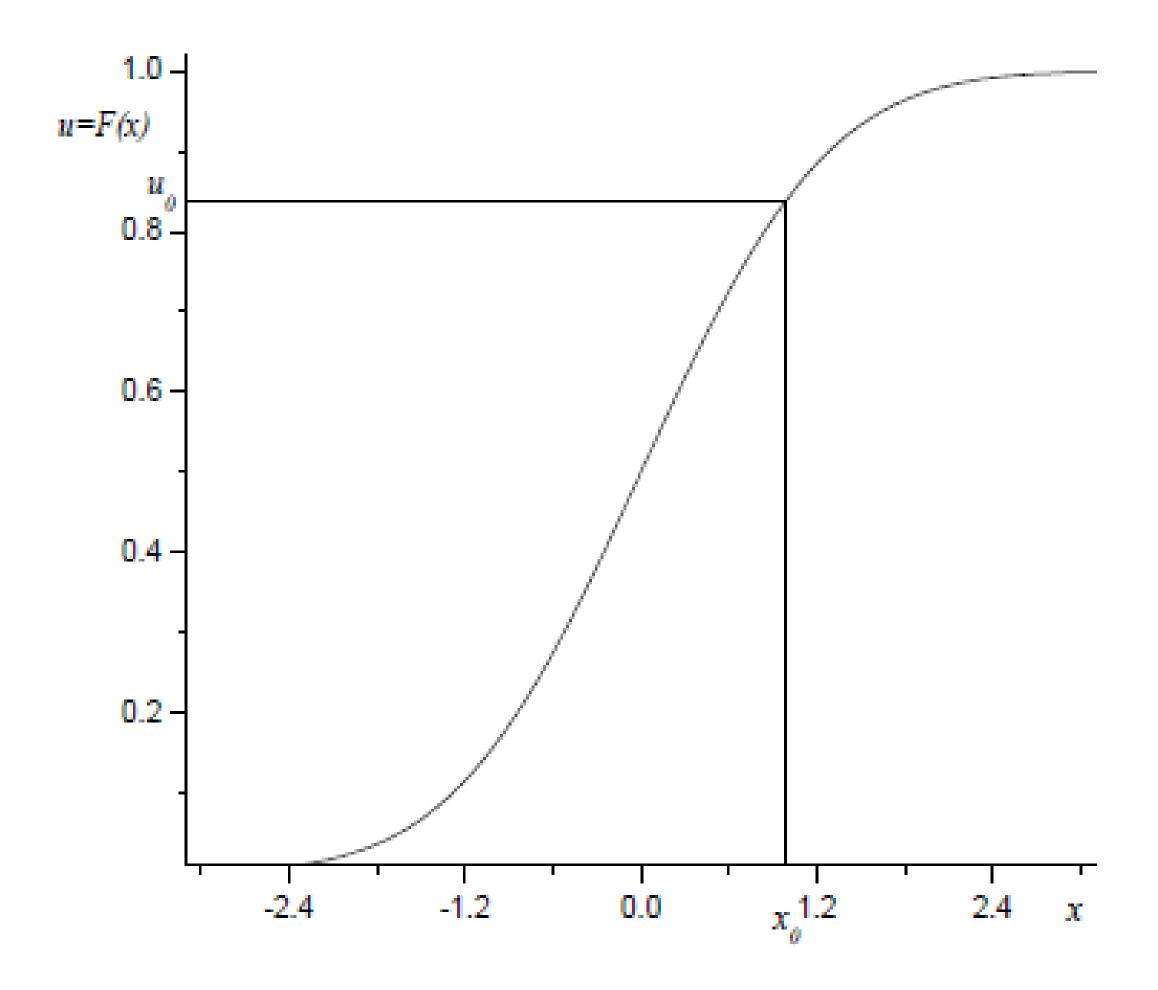
$$F^{-1}(u)=\inf\{x\in\mathbb{R}:F(x)\geq u\}.$$

A função F^{-1} é a função generalizada de F.

Proposição 1:
$$U=F(X)\sim U(0,1)$$

Proposição 2: seja $U\sim U(0,1)$ e seja X uma v.a. com função de distribuição acumulada F contínua. Então, $F^{-1}(U)\sim F$, ou seja, X possui a mesma distribuição que $F^{-1}(U)$.

Graficamente



Simulação de $X \sim Exp(1)$.

- Temos que a função de distribuição é $F(x)=1-e^{-x}$.
- Logo, usando o método da transformação inversa temos que,

$$u = F(x) \Leftrightarrow u = 1 - e^{-x} \Leftrightarrow 1 - u = e^{-x}$$
.

$$\log(1-u) = -x \Leftrightarrow x = -\log(1-u).$$

Assim, $X = -\log(1-U) \sim Exp(1)$, em que $U \sim Unif(0,1)$.

Exemplo

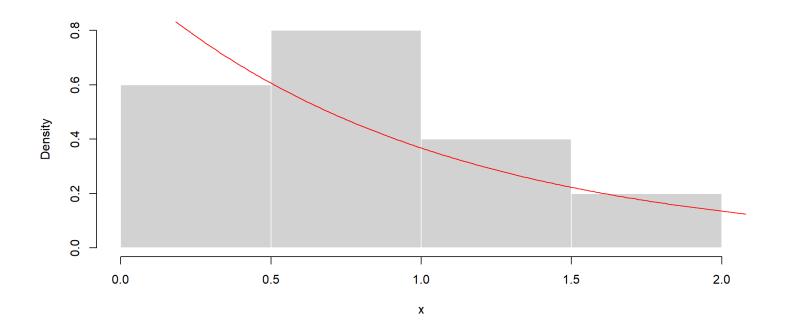
Simulação de $X \sim Exp(1)$.

Vamos gerar 10 valores de uma distribuição exponencial com taxa 1:

```
1 u <- runif(10,0,1)
2 x <- -log(1-u)
3 summary(x)

Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu.
Max.
0.08763 0.41454 0.85939 0.83117 1.17131
1.64151</pre>
```

```
1 hist(x, main="", border=FALSE,
2     freq = FALSE)
3 aux <- seq(0,10, length.out=1000)
4 lines(aux, dexp(x=aux, rate = 1),
5     col="red")</pre>
```



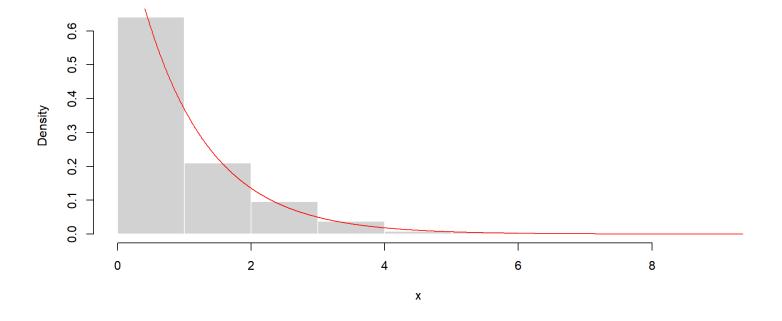
Simulação de $X \sim Exp(1)$.

Vamos gerar 500 valores de uma distribuição exponencial com taxa 1:

```
1 u <- runif(500,0,1)
2 x <- -log(1-u)
3 summary(x)

Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu.
Max.
0.007822 0.323116 0.656488 1.011301 1.380847
8.965339</pre>
```

```
1 hist(x, main="", border=FALSE,
2     freq = FALSE)
3 aux <- seq(0,10, length.out=1000)
4 lines(aux, dexp(x=aux, rate = 1),
5     col="red")</pre>
```



Método da transformação inversa

Algoritmo genérico:

- 1. Obtenha a função F^{-1} , ou seja, obtenha a inversa generalizada de F (onde F representa a função de distribuição de X);
- 2. Simule $U \sim U(0,1)$;
- 3. Faça $X=F^{-1}(U)$. A proposição 2 garante que $X\sim F$.

Aviso:

- ullet E se F não possuir função inversa de forma analítica?
- Como resolver?

Método da transformação inversa

• Precisamos lembrar da seguinte relação do método:

$$u = F(x) \Rightarrow F(x) - u = 0$$

- Observe que F(x)-u=0 é uma função em que a raiz é x.
- Dessa forma, podemos usar métodos de otimização numérica no caso univariado.

Exemplo - Modelo N(0,1)

Sabemos por definção do modelo que

$$F(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} rac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-0.5X\} dx.$$

- Neste caso, só conseguiremos resolver, mudando as coordenadas ou através de algum método numérico de integração.
- No R:

```
1 ## Função para otimizar
2 f <- function(x, u) {
3  pnorm(x, 0, 1) - u
4 }
```

Exemplo - Modelo N(0,1)

- Função de otimização:
- No R dispomos de diversar funções para encontrar raiz ded funções univariadas.
- Usaremos a função uniroot como proposta.
- Logo, para gerar um valor da variável X:

```
1 uniroot(f, interval = c(-5, 5),
2     u=runif(1))

$root
[1] 0.9666498

$f.root
[1] -2.174406e-07

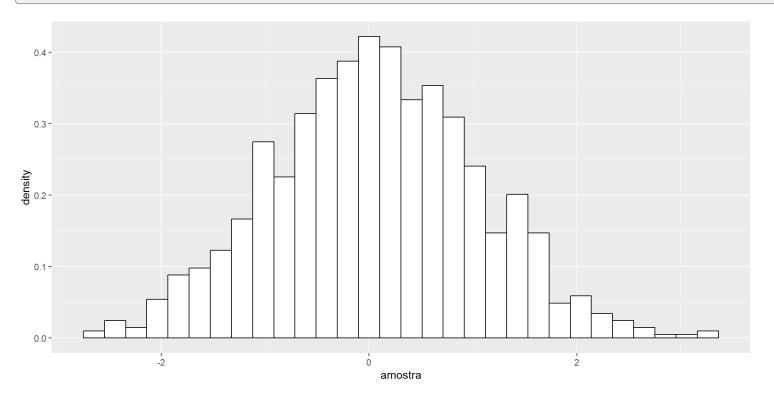
$iter
[1] 9

$init.it
[1] NA
```

Exemplo - Modelo N(0,1)

• Para gerar uma amostra de tamanho *n* basta fazer:

Avaliando o histograma com os dados gerados:

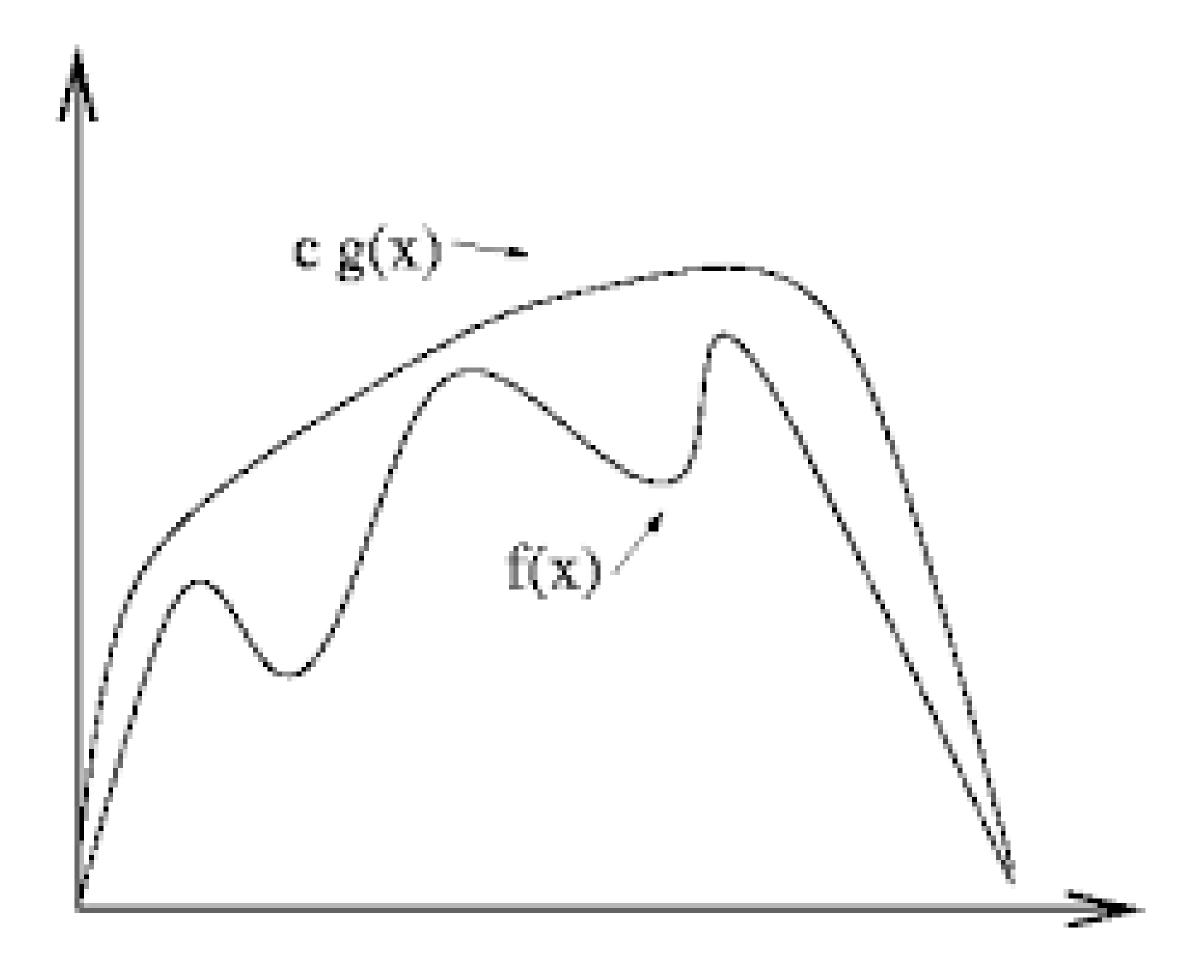


- Seja X uma v.a. contínua com densidade g e assuma que existe um método para simular de g.
- É possível usar este método como base para simular de uma outra v.a. contínua Y com densidade f.
- A idéia fundamental é inicialmente gerar X de g e então aceitar o valor gerado, com probabilidade proporcional a f(X)/g(X), com sendo uma valor gerado de f.
- Este método é chamado de aceitação/rejeição (A-R).

Algorítmo genérico:

- 1. Simule $X \sim g$ e $U \sim U(0,1)$;
- 2. Faça Y=X se $U\leq f(X)/cg(X)$. Caso contrário, volte ao passo anterior.
- A constante c é tal que $f(X) \leq cg(X)$ para todo x no suporte de f e g.
- A função cg é chamada de envelope.

Graficamente



Proposições

- 1. O algoritmo acima produz uma v.a. com distribuição f.
- 2. Seja au o número de iterações do algoritmo necessárias para produzir um valor Y com distribuição f. Então

$$au \sim Geo(1/c), \; {
m com} \; E(au) = c.$$

Exercício

Seja $Y \sim f(x) = 12x^2(1-x), \ 0 < x < 1.$ Utilize o método da aceitação-rejeição para simular 1000 valores de f.

Solução:

- Note que $X\sim U(0,1)$. Como esta variável pertence ao intervalo (0,1), podemos considerar o método com g(x)=1, para $x\in (0,1)$, i.e, uma distribuição uniforme.
- Para determinar o menor valor de c tal que $f(x)/g(x) \leq c$, maximizamos

$$rac{f(x)}{g(x)}=12x^2(1-x)$$

• Temos que a derivada da expressão anterior e igualada a zero é $2x-3x^2=0$. Temos que o valor de x que maximiza é x=2/3.

Assim, $f(x)/g(x) \leq 12(2/3)^2(1/3) = 16/9 = c$. Logo, temos que

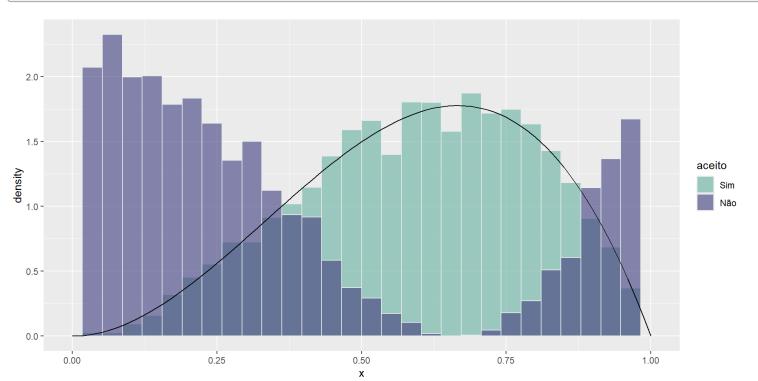
$$rac{f(x)}{c \ g(x)} = rac{9}{16} 12x^2 (1-x) = rac{27}{9} x^2 (1-x).$$

Assim, para este exemplo o algoritmo fica:

- 1. Gere x e u com distribuição U(0,1);
- 2. Se $u \leq \frac{27}{4}x^2(1-x)$, aceite o valor Y=x. Caso contrário, retorne o passo 1.

```
1 #gerando os valores que podem sef
2 x = runif(10000,0,1)
3 aceito.val = c()
4
5 for(i in 1:length(x)) {
6    U = runif(1)
7    if(U <= (27/4)*(x[i]^2)*(1-x[i])
8     aceito.val[i] = 'Sim'
9    }
10    else{
11     aceito.val[i] = 'Não'
12    }
13 }
14 T = data.frame(x,
15 aceito = factor(aceito xel</pre>
```

```
x aceito
1 0.2094598 Não
2 0.9152412 Não
3 0.5431052 Sim
4 0.5613739 Sim
5 0.8326165 Não
6 0.5052088 Sim
```



- O algoritmo sampling importance resampling (SIR) simula realizações aproximadas de alguma distribuição alvo.
- Informalmente temos que:
 - lacktriangle Amostras são geradas de uma função de amostragem por importância g.
 - ullet Cada ponto na amostra é ponderado para corrigir a probabilidade de amostragem de tal forma que a amostra ponderada seja relacionada da densidade alvo f.

ullet Para a densidade alvo f, os pesos usados para corrigir as probabilidades de amostragem são chamados pesos de importância padronizados e são definidos por

$$\omega(x_i) = rac{f(x_i)/g(x_i)}{\sum_{i=1}^m f(x_i)/g(x_i)},$$

para uma coleção de valores x_1, \ldots, x_m gerados de g.

• Podemos ver este método como uma aproximação de f por uma distribuição discreta tendo massa $\omega(x_i)$ em cada ponto observado x_i para $i=1,\ldots,m$.

Algoritmo genérico:

- 1. Gere candidatos Y_1, \ldots, Y_m iid de g.
- 2. Calcule os pesos de importância padronizados , $\omega(Y_1),\ldots,\omega(Y_m)$.
- 3. Reamostre, com reposição, X_1,\ldots,X_n de Y_1,\ldots,Y_m com probabilidades $\omega(Y_1),\ldots,\omega(Y_m).$

A variável aleatória X amostrada com o algoritmo SIR tem distribuição que converge para f quando $m \to \infty$.

Considerações:

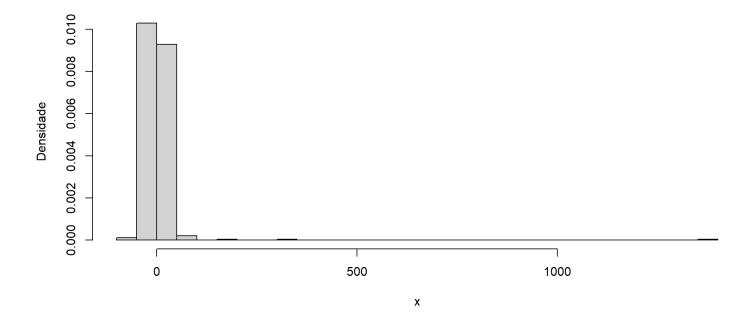
- n/m o 0 para convergência em distribuição da amostra e, para n fixo, a convergência ocorre quando m o 1.
- A tolerância máxima para a razão n/m depende da qualidade da densidade g. Algumas vezes $n/m \leq 1/10$ é suficiente para resultar em uma reamostra que não contenha muitas replicações de valores.
- O suporte de g deve incluir todo o suporte de f e g deve ter caudas mais pesadas que f, ou de forma mais geral, g ser escolhida garantindo que f(x)/g(x)4 nunca cresça demais.
- Se g(x) está próximo de zero em um local onde f(x) é positivo, então um valor gerado desta região acontecerá muito raramente, mas quando isso acontecer receberá um enorme peso.

Sejam X e U variáveis aleatórias independentes, X com distribuição N(0,1) e U com distribuição Uniforme(0,1). Dizemos que Y=X/U tem distribuição de Slash e sua função densidade de probabilidade é dada por

$$f(y) = \left\{ egin{array}{l} rac{1-\exp{-y^2/2}}{y^2\sqrt{2\pi}}, & \sec{y}
eq 0 \ rac{1}{2\sqrt{2\pi}}, & \sec{y} = 0 \end{array}
ight.$$

- Esta densidade tem caudas muito pesadas.
- Para entendermos melhor a vantagem do SIR, veja abaixo a geração de amostra da distribuição Slash diretamente por transformação. Note que são gerados alguns valores muito atípicos.

```
1 x <- rslash(500)
2 hist(x, ylab = "Densidade", xlab =
3 main = "", breaks = 30,
4 prob = TRUE)</pre>
```



- Agora ilustramos o uso do SIR, considerando:
 - Uso do SIR com proposta Slash para gerar da Normal padrão.
 - Uso do SIR com proposta Normal padrão para gerar da Slash.
- No R, temos:

```
1 n <- 5000
2 \text{ m} < -100000
3 amostra1 <- rnorm sir(n, m)</pre>
 4 amostra2 <- rslash sir(n, m)
                                                                                        1 par(mar = c(4, 4, 3, 2), mfrow = c(1, 2))
 2 hist(amostra1, prob = TRUE, main = "", xlab = "x",
 3 col = "darkgoldenrod", breaks = 50, ylab = "Densidade" )
 4 grid < seq(-5, 5, by = 0.01)
 5 densidade <- dnorm(grid)</pre>
 6 lines(grid, densidade, col = 2, lty = 1, lwd = 2)
 7 hist(amostra2, prob = TRUE, main = "", xlab = "x",
 8 col = "aquamarine1", breaks = 50, xlim = c(-7,7), ylab = "Densidade")
 9 grid <- seq(-7, 7, by = 0.01)
10 densidade <- dslash(grid)
11 lines(grid, densidade, col = 2, lty = 1, lwd = 2)
```

