

Simulación Estadística

Rubén Fernández Casal (ruben.fcasal@udc.es), Ricardo Cao (rcao@udc.es)

2020-04-21

Índice general

Prólogo	5
1 Introducción a la simulación	7
1.1 Conceptos básicos	7
1.2 Generación de números (pseudo)aleatorios	9
1.3 Números aleatorios puros	10
1.4 Números pseudoaleatorios	12
2 Números aleatorios en R	15
2.1 Opciones	16
2.2 Paquetes de R	17
2.3 Ejercicios	17
2.4 Tiempo de CPU	23
3 Generación de números pseudoaleatorios con distribución uniforme	27
3.1 Generadores congruenciales (lineales)	27
3.2 Análisis de la calidad de un generador	34
3.3 Ejercicios	44
4 Análisis de resultados de simulación	47
4.1 Convergencia	47
4.2 Estimación de la precisión	50
4.3 Teorema central del límite	51
4.4 Determinación del número de generaciones	52
4.5 El problema de la dependencia	53
4.6 Observaciones	63
5 Simulación de variables continuas	65
5.1 Método de inversión	65
5.2 Método de aceptación rechazo	70
5.3 Modificaciones del método de aceptación rechazo	79
5.4 Método de composición	82

5.5	Métodos específicos para la generación de algunas distribuciones notables	83
6	Simulación de variables discretas	85
6.1	Método de la transformación cuantil	86
6.2	Método de la tabla guía	91
6.3	Método de Alias	93
6.4	Simulación de una variable discreta con dominio infinito	96
6.5	Cálculo directo de la función cuantil	97
6.6	Otros métodos	98
6.7	Métodos específicos para generación de distribuciones notables .	101
7	Simulación de distribuciones multivariantes	103
7.1	Simulación de componentes independientes	103
7.2	El método de aceptación/rechazo	105
7.3	Factorización de la matriz de covarianzas	107
7.4	Método de las distribuciones condicionadas	111
7.5	Simulación condicional e incondicional	114
7.6	Simulación basada en cópulas	121
7.7	Simulación de distribuciones multivariantes discretas	127
7.8	Ejercicios propuestos	133
8	Aplicaciones de la simulación en Inferencia Estadística	135
8.1	Distribución en el muestreo	136
8.2	Intervalos de confianza	139
8.3	Contrastes de hipótesis	148
8.4	Comparación de estimadores	158
8.5	Remuestreo Bootstrap	161
9	Integración y Optimización Montecarlo	171
9.1	Integración Monte Carlo (clásica)	171
9.2	Muestreo por importancia	176
9.3	Optimización Monte Carlo	182
9.4	Temple simulado	186
9.5	Algoritmos genéticos	190
10	Técnicas de reducción de la varianza	193
10.1	Reducción de la varianza	193
10.2	Variables antitéticas	194
10.3	Estratificación	199
10.4	Variables de control	202
10.5	Números aleatorios comunes	204
10.6	Ejercicios fin de práctica	205
Referencias		207
Bibliografía básica		207
Bibliografía complementaria		207

ÍNDICE GENERAL 5

A Enlaces	211
B Bondad de Ajuste y Aleatoriedad	215
B.1 Métodos de bondad de ajuste	216
B.2 Diagnosis de la independencia	227
B.3 Contrastos específicos para generadores aleatorios	237
C Integración numérica	243
C.1 Integración numérica unidimensional	243
C.2 Integración numérica bidimensional	247

Prólogo

Este libro contiene los apuntes de la asignatura de Simulación Estadística del Máster en Técnicas Estadísticas.

Este libro ha sido escrito en R-Markdown empleando el paquete `bookdown` y está disponible en el repositorio Github: [rubenfcasal/simbook](https://rubenfcasal.github.io/simbook/). Se puede acceder a la versión en línea a través del siguiente enlace:

<https://rubenfcasal.github.io/simbook/index.html>.

donde puede descargarse en formato pdf.

Para instalar los paquetes necesarios para poder ejecutar los ejemplos mostrados en el libro se puede emplear el siguiente comando:

```
pkgs <- c('boot', 'randtoolbox', 'MASS', 'DEoptim', 'nortest', 'geoR', 'copula', 'sm',
         'car', 'tseries', 'forecast', 'plot3D', 'rgl')
install.packages(setdiff(pkgs, installed.packages()[, "Package"]),
                 dependencies = TRUE)

# Si aparecen errores debidos a incompatibilidades entre las versiones de los paquetes,
# probar a ejecutar en lugar de lo anterior:
# install.packages(pkgs, dependencies = TRUE) # Instala todos...
```

Para generar el libro (compilar) serán necesarios paquetes adicionales, para lo que se recomendaría consultar el libro de “Escritura de libros con bookdown” en castellano.



Este obra está bajo una licencia de Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 4.0 Internacional (esperamos poder liberarlo bajo una licencia menos restrictiva más adelante...).

Capítulo 1

Introducción a la simulación

Podríamos definir la *Simulación* como una técnica que consiste en realizar experimentos de muestreo sobre el modelo de un sistema, con el objetivo de recopilar información bajo determinadas condiciones.

1.1 Conceptos básicos

La experimentación directa sobre la realidad puede tener muchos inconvenientes:

- Coste elevado.
 - En ocasiones las pruebas son destructivas.
 - Lentitud.
- Puede no ser ética.
 - Experimentación sobre seres humanos.
- Puede resultar imposible.
 - Acontecimientos futuros, alternativas en el pasado, ...
- ...

Además la realidad puede ser demasiado compleja como para ser estudiada directamente y resultar preferible trabajar con un modelo del sistema real. Un modelo no es más que un conjunto de variables junto con ecuaciones matemáticas que las relacionan y restricciones sobre dichas variables. Habría dos tipos de modelos:

- Modelos deterministas.

- Modelos estocásticos (con componente aleatoria): tienen en cuenta la incertidumbre debida a que no se disponga de toda la información sobre las variables que influyen en el fenómeno en estudio (puede ser simplemente que haya errores de medida).

“Nothing in Nature is random... a thing appears random only through the incompleteness of our knowledge.”

— Spinoza, Baruch (Ethics, 1677)

La modelización es una etapa presente en la mayor parte de los trabajos de investigación (especialmente en las ciencias experimentales). El modelo debería considerar las variables más relevantes para explicar el fenómeno en estudio y las principales relaciones entre ellas. La inferencia estadística proporciona herramientas para estimar los parámetros y contrastar la validez de un modelo estocástico a partir de los datos observados.

La idea es emplear el modelo (suponiendo que es válido) para resolver el problema de interés. Si se puede obtener la solución de forma analítica, esta suele ser exacta (aunque en ocasiones solo se dispone de soluciones aproximadas, basadas en resultados asintóticos, o que dependen de suposiciones que pueden ser cuestionables) y a menudo la resolución también es rápida. Cuando la solución no se puede obtener de modo analítico (o si la aproximación disponible no es adecuada) se puede recurrir a la simulación.

Nos centraremos en el caso de la *Simulación Estocástica*: las conclusiones se obtienen generando repetidamente simulaciones del modelo aleatorio.

1.1.1 Ventajas e inconvenientes de la simulación

Ventajas (Shannon, 1975):

- Cuando la resolución analítica no puede llevarse a cabo.
- Cuando existen medios de resolver analíticamente el problema pero dicha resolución es complicada y costosa (o solo proporciona una solución aproximada).
- Si se desea experimentar antes de que exista el sistema (pruebas para la construcción de un sistema).
- Cuando es imposible experimentar sobre el sistema real por ser dicha experimentación destructiva.
- En ocasiones en las que la experimentación sobre el sistema es posible pero no ética.
- En sistemas que evolucionan muy lentamente en el tiempo.

El principal inconveniente puede ser el tiempo de computación necesario, aunque gracias a la gran potencia de cálculo de los computadores actuales, se puede obtener rápidamente una solución aproximada en la mayor parte de los problemas susceptibles de ser modelizados. Además siempre están presentes los posibles problemas debidos a emplear un modelo:

- La construcción de un buen modelo puede ser una tarea muy costosa (compleja, laboriosa y requerir mucho tiempo; e.g. modelos climáticos).
- Frecuentemente el modelo omite variables o relaciones importantes entre ellas (los resultados pueden no ser válidos para el sistema real).
- Resulta difícil conocer la precisión del modelo formulado.

Otro problema de la simulación es que se obtienen resultados para unos valores concretos de los parámetros del modelo, por lo que en principio resultaría complicado extraer las conclusiones a otras situaciones.

1.2 Generación de números (pseudo)aleatorios

Aplicaciones:

- Estadística:
 - Muestreo, remuestreo, ...
 - Aproximación de distribuciones (de estadísticos, estimadores, ...)
 - Realización de contrastes, intervalos de confianza, ...
 - Comparación de estimadores, contrastes, ...
 - Validación teoría (distribución asintótica,...)
 - Inferencia Bayesiana
- Optimización: Algoritmos genéticos, ...
- Análisis numérico: Aproximación de integrales, resolución de ecuaciones, ...
- Computación: Diseño, verificación y validación de algoritmos,...
- Criptografía: Protocolos de comunicación segura, ...
- Física: Simulación de fenómenos naturales, ...
- ...

En los capítulos 8 y 9 nos centraremos en algunas de las aplicaciones de utilidad en Estadística.

1.3 Números aleatorios puros

Una sucesión de números aleatorios puros (*true random*), se caracteriza por que no existe ninguna regla o plan que nos permita conocer sus valores.

Normalmente son obtenidos por procesos físicos (loterías, ruletas, ruidos,...) y se almacenaban en *tablas de dígitos aleatorios*. Por ejemplo, en 1955 la Corporación RAND publicó el libro *A Million Random Digits with 100,000 Normal Deviates* que contenía números aleatorios generados mediante una ruleta electrónica conectada a una computadora (ver Figura 1.1).

73735	45963	78134	63873
02965	58303	90708	20025
98859	23851	27965	62394
33666	62570	64775	78428
81666	26440	20422	05720
15838	47174	76866	14330
89793	34378	08730	56522
78155	22466	81978	57323
16381	66207	11698	99314
75002	80827	53867	37797
99982	27601	62686	44711
84543	87442	50033	14021
77757	54043	46176	42391
80871	32792	87989	72248
30500	28220	12444	71840

Figura 1.1: Líneas 10580-10594, columnas 21-40, del libro **A Million Random Digits with 100,000 Normal Deviates**.

El procedimiento para generar de forma manual números aleatorios en un rango de 1 a m era el siguiente:

- Se selecciona al azar un pto de inicio en la tabla y una dirección.
- Se agrupan los dígitos de forma que “cubran” el valor de m .
- Se seleccionan los valores menores o iguales que m (se descarta el resto).

Hoy en día están disponibles generadores de números aleatorios “online”:

- <http://www.random.org/integers> (ver paquete `random` en R).
- <http://www.fourmilab.ch/hotbits>

Aunque para un uso profesional puede ser recomendable emplear generadores implementados mediante hardware:

- <http://software.intel.com>.
- <http://spectrum.ieee.org>

Sus principales aplicaciones hoy en día son en criptografía (impredictibilidad).

1.3.1 Inconvenientes:

Para su aplicación en el campo de la Estadística:

- Es necesario conocer su distribución.
- Los datos generados deberían ser i.i.d.

(sería también muy recomendable para otros casos) y en general:

- Reproductividad.
- Pueden requerir del almacenamiento en tablas.

Además siempre está la posible presencia de sesgos, principalmente debidos a fallos del sistema o interferencias. Por ejemplo en el caso de la máquina RAND, fallos mecánicos en el sistema de grabación de los datos causaron problemas de aleatoriedad (Hacking, 1965, p. 129).

1.3.2 Alternativas:

A partir de la década de 1960, al disponer de computadoras de mayor velocidad, empezó a resultar más eficiente generar valores mediante software en lugar de leerlos de las tablas. Se distingue entre dos tipos de secuencias:

- *números pseudo-aleatorios*: simulan realizaciones de una variable aleatoria (uniforme).
- números cuasi-aleatorios: secuencias determinísticas con una distribución más uniforme en el rango considerado (se podría pensar que son una única generación de una variable aleatoria).

Algunos problemas, como la integración numérica (en el Capítulo 9 se tratarán métodos de integración Monte Carlo), no dependen realmente de la aleatoriedad de la secuencia. Para evitar generaciones poco probables, se puede recurrir a secuencias cuasi-aleatorias, también denominadas *sucesiones de baja discrepancia* (hablaríamos entonces de métodos cuasi-Monte Carlo). La idea sería que la proporción de valores en una región cualquiera sea siempre aproximadamente proporcional a la medida de la región (como sucedería en media con la distribución uniforme, aunque no necesariamente para una realización concreta).

Por ejemplo, el paquete `randtoolbox` implementa métodos para la generación de secuencias cuasi-aleatorias (ver Figura 1.2).

```
library(randtoolbox)
n <- 2000
par.old <- par(mfrow=c(1,3))
plot(halton(n, dim = 2), xlab = 'x1', ylab = 'x2')
plot(sobol(n, dim = 2), xlab = 'x1', ylab = 'x2')
plot(torus(n, dim = 2), xlab = 'x1', ylab = 'x2')
```

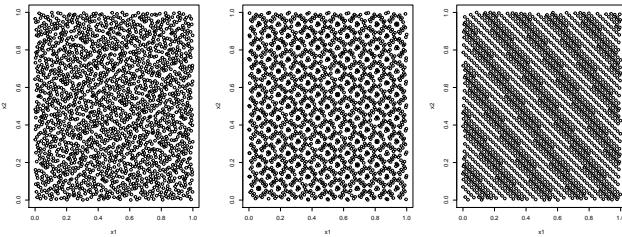


Figura 1.2: Secuencias cuasi-aleatorias bidimensionales obtenidas con los métodos de Halton (izquierda), Sobol (centro) y Torus (derecha).

```
par(par.old)
```

En este libro sólo consideraremos los números pseudoaleatorios y por comodidad se eliminará el prefijo “pseudo” en algunos casos.

1.4 Números pseudoaleatorios

La mayoría de los métodos de simulación se basan en la posibilidad de generar números pseudoaleatorios que imiten las propiedades de generaciones independientes de una distribución $\mathcal{U}(0, 1)$.

El procedimiento habitual para obtener estas secuencias es emplear un algoritmo recursivo denominado *generador*:

$$x_i = f(x_{i-1}, x_{i-2}, \dots, x_{i-k})$$

donde:

- k es el orden del generador.
- $(x_0, x_1, \dots, x_{k-1})$ es la *semilla* (estado inicial).

El *periodo* o *longitud del ciclo* es la longitud de la secuencia antes de que vuelva a repetirse. Lo denotaremos por p .

Los números de la sucesión serán predecibles, conociendo el algoritmo y la semilla.

- Sin embargo, si no se conociesen, *no se debería poder distinguir* una serie de números pseudoaleatorios *de una sucesión de números verdaderamente aleatoria* (utilizando recursos computacionales razonables).
- En caso contrario esta predecibilidad puede dar lugar a serios problemas (e.g. <http://eprint.iacr.org/2007/419>).

Como regla general, por lo menos mientras se está desarrollando un programa, interesa *fijar la semilla de aleatorización*.

- Permite la reproductibilidad de los resultados.
- Facilita la depuración del código.

Todo generador de números pseudoaleatorios mínimamente aceptable debe comportarse como si se tratase de una muestra genuina de datos independientes de una $\mathcal{U}(0, 1)$. Otras propiedades de interés serían:

- Reproducibilidad a partir de la semilla.
 - Periodo suficientemente largo.
 - Eficiencia (rapidez y requerimientos de memoria).
 - Portabilidad.
 - Generación de sub-secuencias (computación en paralelo).
 - Parsimonia, ...
- “... random numbers should not be generated with a method chosen at random.”
- Knuth, D.E. (TAOCP, 2002)

Gran cantidad de algoritmos:

- Cuadrados medios, Lehmer,...
- Congruenciales
- Registros desfasados
- Combinaciones
- ...

Código fuente disponible en múltiples librerías:

- GNU Scientific Library (GSL): <http://www.gnu.org/software/gsl/manual>
- StatLib: <http://lib.stat.cmu.edu>
- Numerical recipes: <http://www.nrbook.com/nr3>
- <http://random.mat.sbg.ac.at/software>
- KISS (Keep It Simple Stupid / Small and Simple): <http://www.fortran.com/kiss.f90>
- UNU.RAN (paquete **Runuran**): <http://statmath.wu.ac.at/unuran>
- ...

Nos centraremos en los generadores congruenciales, descritos en la Sección 3.1.

Capítulo 2

Números aleatorios en R

La generación de números pseudoaleatorios en R es una de las mejores disponibles en paquetes estadísticos. Entre las herramientas en el paquete base de R estarían:

- `set.seed(entero)`: permite establecer la semilla (y el generador).
- `RNGkind()`: selecciona el generador.
- `rdistribución(n,...)`: genera valores aleatorios de la correspondiente distribución. Por ejemplo: `rnorm(n, mean = 0, sd = 1)`, generaría n valores de una normal.
- `sample()`: genera muestras aleatorias de variables discretas y permutaciones (se tratará en el Capítulo 6).
- `simulate()`: genera realizaciones de la respuesta de un modelo ajustado.

Además están disponibles otros paquetes, como el paquete `distr`, que implementan distribuciones adicionales.

La semilla se almacena (en `globalenv`) en `.Random.seed`; es un vector de enteros cuya dimensión depende del tipo de generador:

- No debe ser modificado manualmente; se guarda con el entorno de trabajo.
- Si no se especifica con `set.seed` (o no existe) se genera a partir del reloj del sistema.

Nota: . Puede ser recomendable (para depurar) almacenarla antes de generar simulaciones, e.g. `semilla <- .Random.seed`.

En la mayoría de los ejemplos de este libro se generan todos los valores de una vez, se guardan y se procesan vectorialmente (normalmente empleando la función `apply`). En problemas mas complejos, en los que no es necesario almacenar todas las simulaciones, puede ser preferible emplear un bucle para generar

y procesar cada simulación iterativamente. Por ejemplo podríamos emplear el siguiente esquema:

```
# Fijar semilla
set.seed(1)
for (isim in 1:nsim) {
  seed <- .Random.seed
  # Si se produce un error, podremos depurarlo ejecutando:
  # .Random.seed <- seed
  ...
  # Generar valores pseudoaleatorios
  ...
}
```

o alternativamente fijar la semilla en cada iteración, por ejemplo:

```
for (isim in 1:nsim) {
  set.seed(isim)
  ...
  # Generar valores pseudoaleatorios
  ...
}
```

Hay que tener en cuenta que `.Random.seed` se almacena en el entorno de trabajo...

2.1 Opciones

La función `RNGkind(kind = NULL, normal.kind = NULL)` permite seleccionar el tipo de generador (en negrita los valores por defecto):

- `kind` especifica el generador aleatorio:
 - “Wichmann-Hill”: Ciclo 6.9536×10^{12}
 - “Marsaglia-Multicarry”: Ciclo mayor de 2^{60}
 - “Super-Duper”: Ciclo aprox. 4.6×10^{18} (S-PLUS)
 - “**Mersenne-Twister**”: Ciclo $2^{19937} - 1$ y equidistribution en 623 dimensiones.
 - “Knuth-TAOCP-2002”: Ciclo aprox. 2^{129} .
 - “Knuth-TAOCP”
 - “user-supplied”

- `normal.kind` selecciona el método de generación de normales (se tratará más adelante). “Kinderman-Ramage”, “Buggy Kinderman-Ramage”, “Ahrens-Dieter”, “Box-Muller”, “**Inversion**” , o “user-supplied”

2.2 Paquetes de R

Otros paquetes de R que pueden ser de interés:

- `setRNG` contiene herramientas que facilitan operar con la semilla (dentro de funciones,...).
- `random` permite la descarga de numeros “true random” desde RAND.ORG.
- `randtoolbox` implementa generadores más recientes (`rngWELL`) y generación de secuencias quasi-aleatorias.
- `RDieHarder` implementa diversos contrastes para el análisis de la calidad de un generador y varios generadores.
- `Runuran` interfaz para la librería UNU.RAN para la generación (automática) de variables aleatorias no uniformes (ver Hörmann et al., 2004).
- `rsprng`, `rstream` y `rlecuyer` implementan la generación de múltiples secuencias (para programación paralela).
- `gls`, `rngwell19937`, `randaes`, `SuppDists`, `lhs`, `mc2d`, `fOptions`, ...

2.3 Ejercicios

Ejercicio 2.1.

Sea (X, Y) es un vector aleatorio con distribución uniforme en el cuadrado $[-1, 1] \times [-1, 1]$ de área 4.

- a) Aproximar mediante simulación $P(X + Y \leq 0)$ y compararla con la probabilidad teórica (obtenida aplicando la regla de Laplace $\frac{\text{área favorable}}{\text{área posible}}$).

Probabilidad teórica $1/2$ (area favorable / área total)

```
set.seed(1)
n <- 10000
x <- runif(n, -1, 1)
y <- runif(n, -1, 1)
indice <- (x+y < 0)
# Aproximación por simulación
sum(indice)/n
```

```
## [1] 0.4996
mean(indice) # Alternativa
```

```
## [1] 0.4996
```

Nota: . R maneja internamente los valores lógicos como 1 (TRUE) y 0 (FALSE).

- b) Aproximar el valor de π mediante simulación a partir de $P(X^2 + Y^2 \leq 1)$.

```
set.seed(1)
n <- 10000
x <- runif(n, -1, 1)
y <- runif(n, -1, 1)
indice <- (x^2+y^2 < 1)
mean(indice)
```

```
## [1] 0.7806
```

```
pi/4
```

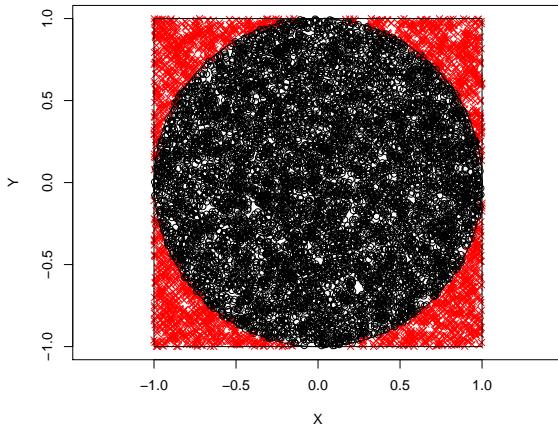
```
## [1] 0.7853982
```

```
pi_aprox <- 4*mean(indice)
pi_aprox
```

```
## [1] 3.1224
```

Gráfico

```
# Colores y símbolos dependiendo de si el índice correspondiente es verdadero:
color <- ifelse(indice, "black", "red")
simbolo <- ifelse(indice, 1, 4)
plot(x, y, pch = simbolo, col = color,
      xlim = c(-1, 1), ylim = c(-1, 1), xlab="X", ylab="Y", asp = 1)
      # asp = 1 para dibujar círculo
symbols(0, 0, circles = 1, inches = FALSE, add = TRUE)
symbols(0, 0, squares = 2, inches = FALSE, add = TRUE)
```

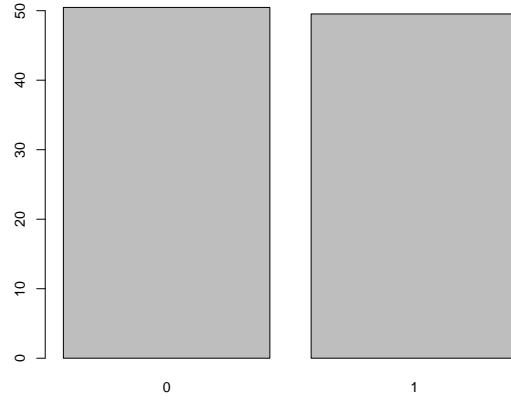
**Ejercicio 2.2.**

Consideramos el experimento de Bernoulli consistente en el lanzamiento de una moneda.

- a) Empleando la función `sample`, obtener 1000 simulaciones del lanzamiento de una moneda (0 = `cruz`, 1 = `cara`), suponiendo que no está trucada. Aproximar la probabilidad de cara a partir de las simulaciones.

```
set.seed(1)
nsim <- 10000
x <- sample(c(cara = 1, cruz = 0), nsim, replace = TRUE, prob = c(0.5,0.5))
mean(x)
```

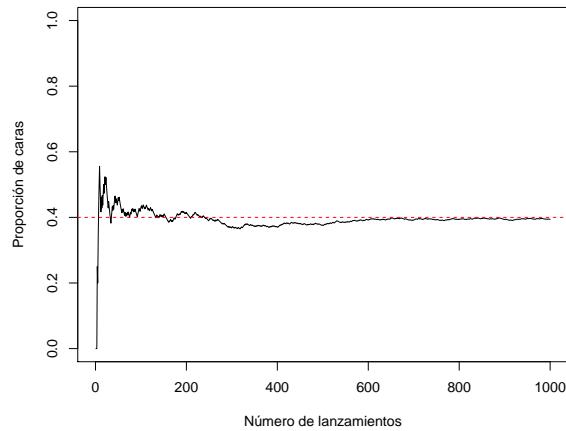
```
## [1] 0.4953
barplot(100*table(x)/nsim) # Representar porcentajes
```



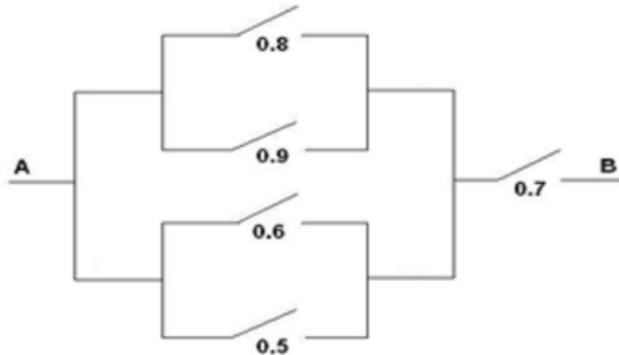
- b) En R pueden generarse valores de la distribución de Bernoulli mediante la función `rbinom(nsim, size=1, prob)`. Generar un gráfico de líneas considerando en el eje X el número de lanzamientos (de 1 a 10000) y en el eje Y la frecuencia relativa del suceso cara (puede ser recomendable emplear la función `cumsum`).

```
set.seed(1)
nsim <- 1000
p <- 0.4
x <- rbinom(nsim, size = 1, prob = p) # Simulamos una Bernouilli
n <- 1:nsim
# Alternativa programación: x <- runif(nsim) < p
mean(x)

## [1] 0.394
plot(n, cumsum(x)/n, type="l", ylab="Proporción de caras",
      xlab="Número de lanzamientos", ylim=c(0,1))
abline(h=p, lty=2, col="red")
```

**Ejercicio 2.3.**

Simular el paso de corriente a través del siguiente circuito, donde figuran las probabilidades de que pase corriente por cada uno de los interruptores:



Considerar que cada interruptor es una v.a. de Bernoulli independiente para simular 1000 valores de cada una de ellas.

Nota: . R maneja internamente los valores lógicos como 1 (TRUE) y 0 (FALSE). Recíprocamente, cualquier nº puede ser tratado como lógico (al estilo de C). El entero 0 es equivalente a FALSE y cualquier entero distinto de 0 a TRUE.

```
set.seed(1)
nsim <- 10000
x1 <- rbinom(nsim, size=1, prob=0.9)
x2 <- rbinom(nsim, size=1, prob=0.8)
z1 <- x1 | x2 # Operador lógico "|"
x3 <- rbinom(nsim, size=1, prob=0.6)
x4 <- rbinom(nsim, size=1, prob=0.5)
```

```

z2 <- x3 | x4
z3 <- z1 | z2
x5 <- rbinom(nsim, size=1, prob=0.7)
fin <- z3 & x5 # Operador lógico "Y"
mean(fin)

## [1] 0.6918

```

Ejercicio 2.4.

En 1651, el Caballero de Méré le planteó a Pascal una pregunta relacionada con las apuestas y los juegos de azar: ¿es ventajoso apostar a que en cuatro lanzamientos de un dado se obtiene al menos un seis? Este problema generó una fructífera correspondencia entre Pascal y Fermat que se considera, simbólicamente, como el nacimiento del Cálculo de Probabilidades.

- a) Escribir una función que simule el lanzamiento de n dados. El parámetro de entrada es el número de lanzamientos n , que toma el valor 4 por defecto, y la salida debe ser TRUE si se obtiene al menos un 6 y FALSE en caso contrario.

```

deMere <- function(n = 4){
  lanz <- sample(1:6, replace=TRUE, size=n)
  return(6 %in% lanz)
}

n <- 4
lanz <- sample(1:6, replace=TRUE, size=n)
lanz

## [1] 3 5 1 6
6 %in% lanz

## [1] TRUE

```

- b) Utilizar la función anterior para simular $nsim = 10000$ jugadas de este juego y calcular la proporción de veces que se gana la apuesta (obtener al menos un 6 en n lanzamientos), usando $n = 4$. Comparar el resultado con la probabilidad teórica $1 - (5/6)^n$.

```

set.seed(1)
n <- 4
nsim <- 10000
mean(replicate(nsim, deMere(n)))

## [1] 0.5148
1-(5/6)^n

```

```
## [1] 0.5177469
```

2.4 Tiempo de CPU

La velocidad del generador suele ser una característica importante. Para evaluar el rendimiento están disponibles en R distintas herramientas:

- `proc.time()`: permite obtener tiempo de computación real y de CPU.
- ```
tini <- proc.time()
Código a evaluar
tiempo <- proc.time() - tini
```
- `system.time(expresión)`: muestra el tiempo de computación (real y de CPU) de expresión.
  - `Rprof(fichero)`: permite evaluar el rendimiento muestreando la pila en intervalos para determinar en que funciones se emplea el tiempo de computación (de utilidad para optimizar la velocidad). `Rprof(NULL)`: desactiva el muestreo. `summaryRprof(fichero)`: muestra los resultados.

### 2.4.1 Utilidades tiempo de CPU

Por ejemplo, podríamos emplear las siguientes funciones para ir midiendo los tiempos de CPU durante una simulación:

```
CPUTimeini <- function() {
 .tiempo.ini <- proc.time()
 .tiempo.last <- .tiempo.ini
}

CPUTimeprint <- function() {
 tmp <- proc.time()
 cat("\nTiempo última operación:\n")
 print(tmp-.tiempo.last)
 cat("Tiempo total operación:\n")
 print(tmp-.tiempo.ini)
 .tiempo.last <- tmp
}
```

Llamando a `CPUTimeini()` donde se quiere empezar a contar, y a `CPUTimeprint()` para imprimir el tiempo total y el tiempo desde la última llamada a una de estas funciones. Ejemplo:

```

funtest <- function(n) median(runif(n)) # Función de prueba...
CPUtimeini()
funtest(1000000)

[1] 0.5003313
CPUtimeprint()

##
Tiempo última operación:
user system elapsed
0.06 0.00 0.06
Tiempo total operación:
user system elapsed
0.06 0.00 0.06
funtest(1000)

[1] 0.5050682
CPUtimeprint()

##
Tiempo última operación:
user system elapsed
0.02 0.00 0.02
Tiempo total operación:
user system elapsed
0.08 0.00 0.08

```

## 2.4.2 Paquetes de R

Por ejemplo, se puede emplear el paquete `npsp` (fichero `cpu.time.R`):

- Call `cpu.time(restart = TRUE)` where you want to start counting.
- Call `cpu.time()` to print/get total and/or partial (since the last call to this function) real and CPU times.

```

CPU time utilities

#' @rdname npsp-internals
#' @keywords internal
#' @export
.cpu.time.ini <- function() {
 time.ini <- structure(rep(0, 5), .Names = c("user.self", "sys.self", "elapsed",
 "user.child", "sys.child"), class = "proc_time")# proc.time()

```

```

time.last <- time.ini
function(..., reset = FALSE, total = TRUE, last = TRUE, flush = FALSE) {
 res <- list(time = proc.time())
 if (reset) {
 time.ini <-> res$time
 time.last <-> time.ini
 res$last <- res$total <- 0
 if (total | last) cat("CPU time has been initialized.\n")
 } else {
 res$last <- res$time - time.last
 res$total <- res$time - time.ini
 if (last) {
 cat("Time of last operation:", ..., "\n")
 print(res$last)
 }
 if (total) {
 cat("Total time:\n")
 print(res$total)
 }
 if (flush) flush.console()
 time.last <-> res$time
 }
 return(invisible(res))
}
}

#' Total and partial CPU time used
#'
#' Returns and (optionally) prints the total and/or partial
#' (since the last call to this function)
#' real and CPU times.
#' @param ... objects (describing the last operation) to be printed
#' (using \code{\link{cat}}),
#' if \code{last == TRUE}.
#' @param reset logical; if \code{TRUE}, time counters are initialized.
#' @param total logical; if \code{TRUE}, the total time used is printed.
#' @param last logical; if \code{TRUE}, the partial time used is printed.
#' @param flush logical; if \code{TRUE}, \code{\link{flush.console}} is called.
#' @return Invisibly returns a list with the following 3 components
#' (objects of class \code{"proc_time"}):
#' \item{time}{user, system, and total elapsed times for the currently running R process
#' (result of a call to \code{\link{proc.time}}). }
#' \item{last}{differences between the corresponding \code{\link{proc.time}} calls.}
#' @seealso
#' \code{\link{proc.time}}, \code{\link{system.time}}, \code{\link{flush.console}}.

```

```
#' @export
cpu.time <- .cpu.time.ini()
```

Ejemplo:

```
cpu.time(reset = TRUE)

CPU time has been initialized.

res <- funtest(1000000)
cpu.time('\nSample median of', 1000000, 'values =', res, total = FALSE)

Time of last operation:
Sample median of 1e+06 values = 0.4993323
user system elapsed
0.07 0.00 0.07

res <- funtest(1000)
cpu.time('\nSample median of', 1000, 'values =', res)

Time of last operation:
Sample median of 1000 values = 0.5126436
user system elapsed
0.00 0.00 0.00
Total time:
user system elapsed
0.07 0.00 0.07
```

Otro paquete que puede ser de utilidad es `microbenchmark` (si se quieren estudiar con más detalle los tiempos de computación; aunque en este libro no será el caso...). Hay que tener en cuenta que, por construcción, aunque se realicen en las mismas condiciones (en el mismo equipo), los tiempos de CPU en R pueden variar “ligeramente” entre ejecuciones.

## Capítulo 3

# Generación de números pseudoaleatorios con distribución uniforme

Como ya se comentó, los distintos métodos de simulación requieren disponer de secuencias de números pseudoaleatorios que imiten las propiedades de generaciones independientes de una distribución  $\mathcal{U}(0, 1)$ . En primer lugar nos centraremos en el caso de los generadores congruenciales. A pesar de su simplicidad, podrían ser adecuados en muchos casos y constituyen la base de los generadores avanzados habitualmente considerados. Posteriormente se dará una visión de las diferentes herramientas para estudiar la calidad de un generador de números pseudoaleatorios.

### 3.1 Generadores congruenciales (lineales)

Se basan en la idea de considerar una combinación lineal de los últimos  $k$  enteros generados y calcular su resto al dividir por un entero fijo  $m$ . En el método congruencial simple (de orden  $k = 1$ ), partiendo de una semilla inicial  $x_0$ , el algoritmo secuencial es el siguiente:

$$\begin{aligned}x_i &= (ax_{i-1} + c) \bmod m \\ u_i &= \frac{x_i}{m} \\ i &= 1, 2, \dots\end{aligned}$$

donde  $a$  (*multiplicador*),  $c$  (*incremento*) y  $m$  (*módulo*) son parámetros enteros del generador fijados de antemano. Si  $c = 0$  el generador se denomina con-

### 30 CAPÍTULO 3. GENERACIÓN DE NÚMEROS PSEUDOALEATORIOS CON DISTRIBUCIÓN UNIFORME

gruencial *multiplicativo* (Lehmer, 1951) y en caso contrario se dice que es *mixto* (Rotenburg, 1960).

Este método está implementado en el fichero *RANDC.R*, tratando de imitar el funcionamiento de un generador de R (aunque de un forma no muy eficiente):

```
Generador congruencial de números pseudoaleatorios
=====

initRANDC(semilla,a,c,m)
Selecciona el generador congruencial
Por defecto RANDU de IBM con semilla del reloj
OJO: No se hace ninguna verificación de los parámetros
initRANDC <- function(semilla=as.numeric(Sys.time()), a=2^16+3, c=0, m=2^31) {
 .semilla <- as.double(semilla) %% m #Cálculos en doble precisión
 .a <- a
 .c <- c
 .m <- m
 return(invisible(list(semilla=.semilla,a=.a,c=.c,m=.m))) #print(initRANDC())
}

RANDC()
Genera un valor pseudoaleatorio con el generador congruencial
Actualiza la semilla (si no existe llama a initRANDC)
RANDC <- function() {
 if (!exists(".semilla", envir=globalenv())) initRANDC()
 .semilla <- (.a * .semilla + .c) %% .m
 return(.semilla/.m)
}

RANDCN(n)
Genera un vector de valores pseudoaleatorios con el generador congruencial
(por defecto de dimensión 1000)
Actualiza la semilla (si no existe llama a initRANDC)
RANDCN <- function(n=1000) {
 x <- numeric(n)
 for(i in 1:n) x[i]<-RANDC()
 return(x)
 # return(replicate(n,RANDC())) # Alternativa más rápida
}

initRANDC(543210) # Fijar semilla 543210 para reproductibilidad
```

Nota: . Para evitar problemas computacionales, se recomienda emplear el mé-

todo de Schrage (ver Bratley *et al.*, 1987; L'Ecuyer, 1988)

Ejemplos:

- $c = 0$ ,  $a = 2^{16} + 3 = 65539$  y  $m = 2^{31}$ , generador RANDU de IBM (**no recomendable**).
- $c = 0$ ,  $a = 7^5 = 16807$  y  $m = 2^{31} - 1$  (primo de Mersenne), Park y Miller (1988) “minimal standar”, empleado por las librerías IMSL y NAG.
- $c = 0$ ,  $a = 48271$  y  $m = 2^{31} - 1$  actualización del “minimal standar” propuesta por Park, Miller y Stockmeyer (1993).

Los parámetros y la semilla determinan los valores generados:

$$x_i = \left( a^i x_0 + c \frac{a^i - 1}{a - 1} \right) \bmod m$$

A pesar de su simplicidad, una adecuada elección de los parámetros permite obtener de manera eficiente secuencias de números “aparentemente” i.i.d.  $\mathcal{U}(0, 1)$ .

El procedimiento habitual solía ser escoger  $m$  de forma que la operación del módulo se pudiese realizar de forma muy eficiente, para posteriormente seleccionar  $c$  y  $a$  de forma que el período fuese lo más largo posible (o suficientemente largo).

### Teorema 3.1

(Hull y Dobell, 1962)

*Un generador congruencial tiene período máximo ( $p = m$ ) si y solo si:*

1.  $c$  y  $m$  son primos relativos (i.e.  $m.c.d.(c, m) = 1$ ).
2.  $a - 1$  es múltiplo de todos los factores primos de  $m$  (i.e.  $a \equiv 1 \pmod q$ , para todo  $q$  factor primo de  $m$ ).
3. Si  $m$  es múltiplo de 4, entonces  $a - 1$  también lo ha de ser (i.e.  $m \equiv 0 \pmod 4 \Rightarrow a \equiv 1 \pmod 4$ ).

Algunas consecuencias:

- Si  $m$  primo,  $p = m$  si y solo si  $a = 1$ .
- Un generador multiplicativo no cumple la condición 1 ( $m.c.d.(0, m) = m$ ).

### Teorema 3.2

*Un generador multiplicativo tiene período máximo ( $p = m - 1$ ) si:*

1.  $m$  es primo.
2.  $a$  es una raíz primitiva de  $m$  (i.e. el menor entero  $q$  tal que  $a^q \equiv 1 \pmod m$  es  $q = m - 1$ ).

## 32 CAPÍTULO 3. GENERACIÓN DE NÚMEROS PSEUDOALEATORIOS CON DISTRIBUCIÓN UNIFORME

Además de preocuparse de la longitud del ciclo, las secuencias generadas deben aparentar muestras i.i.d.  $\mathcal{U}(0, 1)$ .

Uno de los principales problemas es que los valores generados pueden mostrar una clara estructura reticular. Este es el caso por ejemplo del generador RANDU de IBM muy empleado en la década de los 70 (ver Figura 3.1). Por ejemplo, el conjunto de datos `randu` contiene 400 tripletas de números sucesivos obtenidos con la implementación en VAX/VMS 1.5 (1977).

```
system.time(u <- RANDCN(9999)) # Generar

user system elapsed
0.03 0.00 0.03

xyz <- matrix(u, ncol = 3, byrow = TRUE)

library(plot3D)
points3D(xyz[,1], xyz[,2], xyz[,3], colvar = NULL, phi = 60, theta = -50, pch = 21, cex = 1)
```

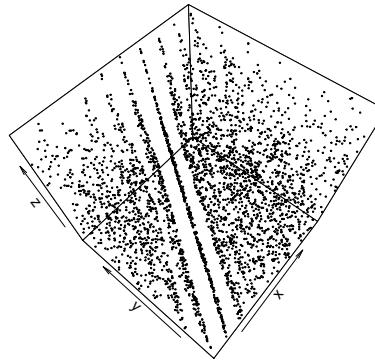


Figura 3.1: Grafico de dispersión de tripletas del generador RANDU de IBM (contenidas en 15 planos)

```
Alternativamente se podría utilizar la función `plot3d` del paquete `rgl`,
y pulsando con el ratón se podría rotar la figura para ver los hiperplanos:
library(rgl)
plot3d(xyz)
```

En general todos los generadores de este tipo van a presentar estructuras reticulares. Marsaglia (1968) demostró que las  $k$ -uplas de un generadores multipli-

cativo están contenidas en a lo sumo  $(k!m)^{1/k}$  hiperplanos paralelos (para más detalles sobre la estructura reticular, ver por ejemplo Ripley, 1987, sección 2.7). Por tanto habría que seleccionar adecuadamente  $m$  y  $c$  ( $a$  solo influiría en la pendiente) de forma que la estructura reticular sea impreceptible teniendo en cuenta el número de datos que se pretende generar (por ejemplo de forma que la distancia mínima entre los puntos sea próxima a la esperada en teoría).

Se han propuesto diversas pruebas (ver Sección 3.2) para determinar si un generador tiene problemas de este tipo y se han realizado numerosos estudios para determinadas familias (e.g. Park y Miller, 1988, estudiaron que parámetros son adecuados para  $m = 2^{31} - 1$ ).

- En cualquier caso, se recomienda considerar un “periodo de seguridad”  $\approx \sqrt{p}$  para evitar este tipo de problemas.
- Aunque estos generadores tienen limitaciones en su capacidad para producir secuencias muy largas de números i.i.d.  $\mathcal{U}(0, 1)$ , es un elemento básico en generadores más avanzados.

### 3.1.1 Otros generadores

Se han considerado diversas extensiones del generador congruencial lineal simple:

- Lineal múltiple:  $x_i = a_0 + a_1x_{i-1} + a_2x_{i-2} + \dots + a_kx_{i-k} \pmod{m}$ , con periodo  $p \leq m^k - 1$ .
- No lineal:  $x_i = f(x_{i-1}, x_{i-2}, \dots, x_{i-k}) \pmod{m}$ . Por ejemplo  $x_i = a_0 + a_1x_{i-1} + a_2x_{i-1}^2 \pmod{m}$ .
- Matricial:  $\mathbf{x}_i = A_0 + A_1\mathbf{x}_{i-1} + A_2\mathbf{x}_{i-2} + \dots + A_k\mathbf{x}_{i-k} \pmod{m}$ .

Un ejemplo de generador congruencia lineal múltiple es el denominado *generador de Fibonacci retardado* (Fibonacci-lagged generator; Knuth, 1969):

$$x_n = (x_{n-37} + x_{n-100}) \pmod{2^{30}},$$

con un período aproximado de  $2^{129}$  y que puede ser empleado en R (lo cual no sería en principio recomendable; ver Knuth Recent News 2002) estableciendo kind a "Knuth-TAOCP-2002" o "Knuth-TAOCP" en la llamada a `set.seed()` o `RNGkind()`.

El generador *Mersenne-Twister* (Matsumoto y Nishimura, 1998), empleado por defecto en R, de periodo  $2^{19937} - 1$  y equidistribución en 623 dimensiones, se puede expresar como un generador congruencial matricial lineal.

Un caso particular del generador lineal múltiple son los denominados *generadores de registros desfasados* (más relacionados con la Criptografía). Se generan bits de forma secuencial considerando  $m = 2$  y  $a_i \in \{0, 1\}$  y se van combinando  $l$  bits para obtener valores en el intervalo  $(0, 1)$ , por ejemplo  $u_i =$

$0.x_{it+1}x_{it+2}\dots x_{it+l}$ , siendo  $t$  un parámetro denominado *aniquilación* (Taušworthe, 1965). Los cálculos se pueden realizar rápidamente mediante operaciones lógicas (los sumandos de la combinación lineal se traducen en un “o” exclusivo XOR), empleando directamente los registros del procesador (ver por ejemplo, Ripley, 1987, Algoritmo 2.1).

Otras alternativas consisten en la combinación de varios generadores, las más empleadas son:

- Combinar las salidas: por ejemplo  $u_i = \sum_{l=1}^L u_i^{(l)} \bmod 1$ , donde  $u_i^{(l)}$  es el  $i$ -ésimo valor obtenido con el generador  $l$ .
- Barajar las salidas: por ejemplo se crea una tabla empleando un generador y se utiliza otro para seleccionar el índice del valor que se va a devolver y posteriormente actualizar.

El generador *L'Ecuyer-CMRG* (L'Ecuyer, 1999), empleado como base para la generación de múltiples secuencias en el paquete **parallel**, combina dos generadores concuenciales lineales múltiples de orden  $k = 3$  (el periodo aproximado es  $2^{191}$ ).

### Ejercicio 3.1.

Considera el generador congruencial definido por:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= (5x_n + 1) \bmod 512, \\ u_{n+1} &= \frac{x_{n+1}}{512}, \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

(de ciclo máximo).

NOTA: El algoritmo está implementado en el fichero *RANDC.R* y se muestra en la Sección 3.1.

- Generar 500 valores de este generador, obtener el tiempo de CPU, representar su distribución mediante un histograma (en escala de densidades) y compararla con la densidad teórica.

```
initRANDC(321, 5, 1, 512) # Fijar semilla para reproductibilidad
nsim <- 500
system.time(u <- RANDCN(nsim)) # Generar

user system elapsed
0 0 0

hist(u, freq = FALSE)
abline(h = 1) # Equivalente a curve(dunif(x, 0, 1), add = TRUE)
```

En este caso concreto la distribución de los valores generados es aparentemente más uniforme de lo que cabría esperar, lo que induciría a sospechar de la calidad de este generador.

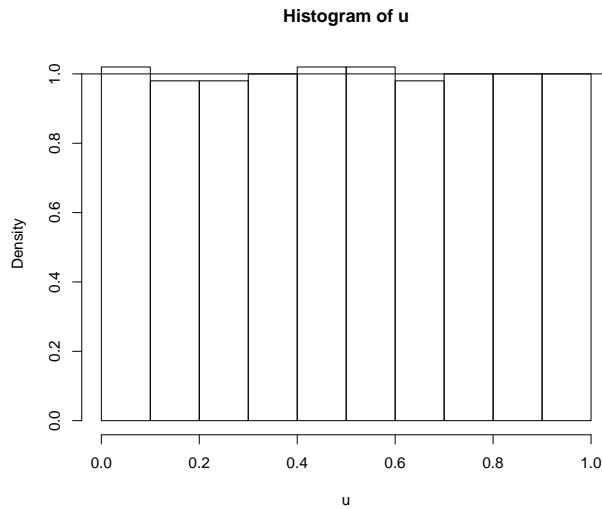


Figura 3.2: Histograma de los valores generados

- b) Calcular la media de las simulaciones (`mean`) y compararla con la teórica.

La aproximación por simulación de la media teórica es:

```
mean(u)
```

```
[1] 0.4999609
```

La media teórica es  $0.5$ . Error absoluto  $3.90625 \times 10^{-5}$ .

- c) Aproximar (mediante simulación) la probabilidad del intervalo  $(0.4; 0.8)$  y compararla con la teórica.

La probabilidad teórica es  $0.8 - 0.4 = 0.4$

La aproximación mediante simulación:

```
sum((0.4 < u) & (u < 0.8))/nsim
```

```
[1] 0.402
```

```
mean((0.4 < u) & (u < 0.8)) # Alternativa
```

```
[1] 0.402
```

## 3.2 Análisis de la calidad de un generador

Para verificar si un generador tiene las propiedades estadísticas deseadas hay disponibles una gran cantidad de test de hipótesis y métodos gráficos, incluyendo métodos genéricos (de bondad de ajuste y aleatoriedad) y contrastes específicos para generadores aleatorios. Se trata principalmente de contrastar si las muestras generadas son i.i.d.  $\mathcal{U}(0, 1)$  (análisis univariante). Aunque los métodos más avanzados tratan normalmente de contrastar si las  $d$ -uplas:

$$(U_{t+1}, U_{t+2}, \dots, U_{t+d}); t = (i - 1)d, i = 1, \dots, m$$

son i.i.d.  $\mathcal{U}(0, 1)^d$  (uniformes independientes en el hipercubo; análisis multivariante). En el Apéndice B se describen algunos de estos métodos.

En esta sección emplearemos únicamente métodos genéricos, ya que también pueden ser de utilidad para evaluar generadores de variables no uniformes y para la construcción de modelos del sistema real (e.g. para modelar variables que se tratarán como entradas del modelo general). Sin embargo, los métodos clásicos pueden no ser muy adecuados para evaluar generadores de números pseudoaleatorios (e.g. L'Ecuyer y Simard, 2007). La recomendación sería emplear baterías de contrastes recientes, como las descritas en la Subsección 3.2.2.

Hay que destacar algunas diferencias entre el uso de este tipo de métodos en inferencia y en simulación. Por ejemplo, si empleamos un constraste de hipótesis del modo habitual, desconfiamos del generador si la muestra (secuencia) no se ajusta a la distribución teórica ( $p$ -valor  $\leq \alpha$ ). En este caso además, también se sospecha si se ajusta demasiado bien a la distribución teórica ( $p$ -valor  $\geq 1 - \alpha$ ), lo que indicaría que no reproduce adecuadamente la variabilidad.

Uno de los contrastes más conocidos es el test ji-cuadrado de bondad de ajuste (`chisq.test` para el caso discreto). Aunque si la variable de interés es continua, habría que discretizarla (con la correspondiente perdida de información). Por ejemplo, se podría emplear la siguiente función (que imita a las incluidas en R):

```
#-----
chisq.test.cont(x, distribution, nclasses, output, nestpar,...)
#-----
Realiza el test ji-cuadrado de bondad de ajuste para una distribución continua
discretizando en intervalos equiprobables.
Parámetros:
distribution = "norm", "unif", etc
nclasses = floor(length(x)/5)
output = TRUE
nestpar = 0= nº de parámetros estimados
... = parámetros distribución
Ejemplo:
chisq.test.cont(x, distribution="norm", nestpar=2, mean=mean(x), sd=sqrt((nx-1)/nx))
```

```

#-----
chisq.test.cont <- function(x, distribution = "norm", nclasses = floor(length(x)/5),
 output = TRUE, nestpar = 0, ...) {
 # Funciones distribución
 q.distrib <- eval(parse(text = paste("q", distribution, sep = "")))
 d.distrib <- eval(parse(text = paste("d", distribution, sep = "")))
 # Puntos de corte
 q <- q.distrib((1:(nclasses - 1))/nclasses, ...)
 tol <- sqrt(.Machine$double.eps)
 xbreaks <- c(min(x) - tol, q, max(x) + tol)
 # Gráficos y frecuencias
 if (output) {
 xhist <- hist(x, breaks = xbreaks, freq = FALSE, lty = 2, border = "grey50")
 curve(d.distrib(x, ...), add = TRUE)
 } else {
 xhist <- hist(x, breaks = xbreaks, plot = FALSE)
 }
 # Cálculo estadístico y p-valor
 O <- xhist$counts # Equivalente a table(cut(x, xbreaks)) pero más eficiente
 E <- length(x)/nclasses
 DNAME <- deparse(substitute(x))
 METHOD <- "Pearson's Chi-squared test"
 STATISTIC <- sum((O - E)^2/E)
 names(STATISTIC) <- "X-squared"
 PARAMETER <- nclasses - nestpar - 1
 names(PARAMETER) <- "df"
 PVAL <- pchisq(STATISTIC, PARAMETER, lower.tail = FALSE)
 # Preparar resultados
 classes <- format(xbreaks)
 classes <- paste("(", classes[-(nclasses + 1)], ",", classes[-1], "]",
 sep = "")
 RESULTS <- list(classes = classes, observed = O, expected = E, residuals = (O -
 E)/sqrt(E))
 if (output) {
 cat("\nPearson's Chi-squared test table\n")
 print(as.data.frame(RESULTS))
 }
 if (any(E < 5))
 warning("Chi-squared approximation may be incorrect")
 structure(c(list(statistic = STATISTIC, parameter = PARAMETER, p.value = PVAL,
 method = METHOD, data.name = DNAME), RESULTS), class = "htest")
}

```

Continuando con el generador congruencial anterior, obtendríamos:

```
chisq.test.cont(u, distribution = "unif",
 nclasses = 10, nestpar = 0, min = 0, max = 1)
```

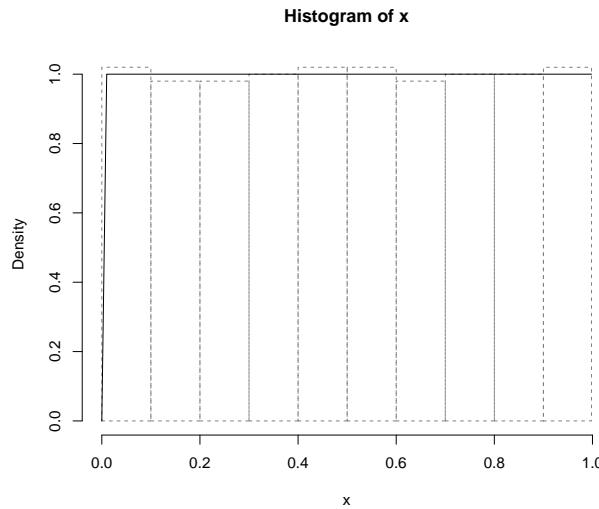


Figura 3.3: Gráfico resultante de aplicar la función ‘chisq.test.cont()’ comparando el histograma de los valores generados con la densidad uniforme.

```

Pearson's Chi-squared test table

classes observed expected residuals
1 (-1.490116e-08, 1.000000e-01] 51 50 0.1414214
2 (1.000000e-01, 2.000000e-01] 49 50 -0.1414214
3 (2.000000e-01, 3.000000e-01] 49 50 -0.1414214
4 (3.000000e-01, 4.000000e-01] 50 50 0.0000000
5 (4.000000e-01, 5.000000e-01] 51 50 0.1414214
6 (5.000000e-01, 6.000000e-01] 51 50 0.1414214
7 (6.000000e-01, 7.000000e-01] 49 50 -0.1414214
8 (7.000000e-01, 8.000000e-01] 50 50 0.0000000
9 (8.000000e-01, 9.000000e-01] 50 50 0.0000000
10 (9.000000e-01, 9.980469e-01] 50 50 0.0000000

Pearson's Chi-squared test

data: u
X-squared = 0.12, df = 9, p-value = 1
```

Como se muestra en la Figura 3.3 el histograma de la secuencia generada es muy plano (comparado con lo que cabría esperar de una muestra de tamaño 500 de

una uniforme), y consecuentemente el  $p$ -valor del contraste ji-cuadrado es prácticamente 1, lo que indicaría que este generador no reproduce adecuadamente la variabilidad de una distribución uniforme.

Otro contraste de bondad de ajuste muy conocido es el test de Kolmogorov-Smirnov, implementado en `ks.test`. En la Sección B.1 se describen con más detalle estos contrastes.

### Ejercicio 3.2.

Continuando con el generador congruencial anterior:

```
initRANDC(321, 5, 1, 512) # Fijar semilla para reproductibilidad
nsim <- 500
system.time(u <- RANDCN(nsim)) # Generar
```

- Realizar el contraste de Kolmogorov-Smirnov para estudiar el ajuste a una  $\mathcal{U}(0, 1)$ .

Este contraste de hipótesis compara la función de distribución bajo la hipótesis nula con la función de distribución empírica (ver Sección B.1.2):

```
Distribución empírica
curve(ecdf(u)(x), type = "s", lwd = 2)
curve(punif(x, 0, 1), add = TRUE)
```

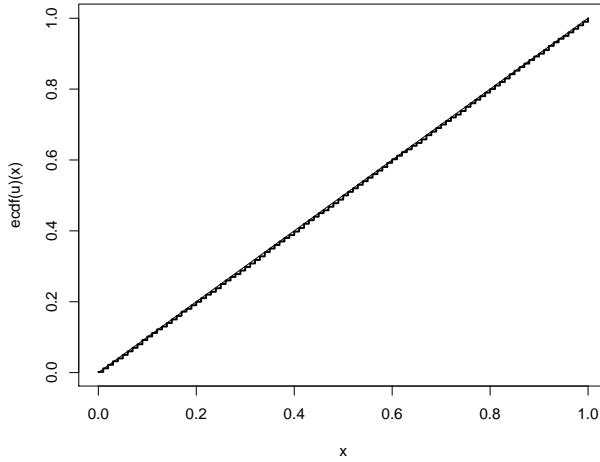


Figura 3.4: Comparación de la distribución empírica de la secuencia generada con la función de distribución uniforme.

Podemos realizar el contraste con el siguiente código:

40 CAPÍTULO 3. GENERACIÓN DE NÚMEROS PSEUDOALEATORIOS CON DISTRIBUCIÓN UNIFORME

```
Test de Kolmogorov-Smirnov
ks.test(u, "punif", 0, 1)
```

```
##
One-sample Kolmogorov-Smirnov test
##
data: u
D = 0.0033281, p-value = 1
alternative hypothesis: two-sided
```

- b) Obtener el gráfico secuencial y el de dispersión retardado, ¿se observa algún problema?

Gráfico secuencial:

```
plot(as.ts(u))
```

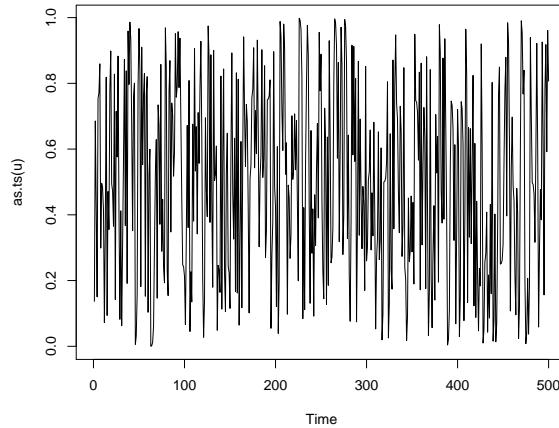
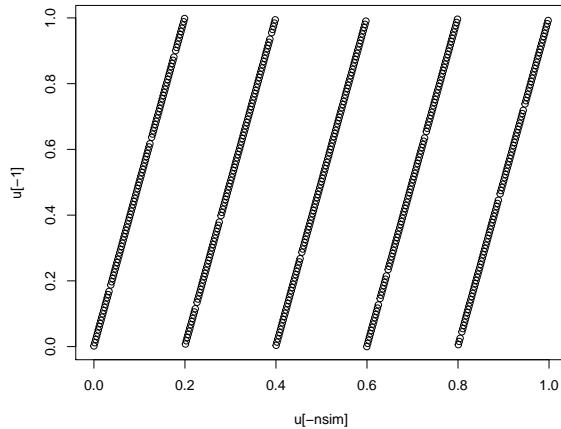


Gráfico de dispersión retardado:

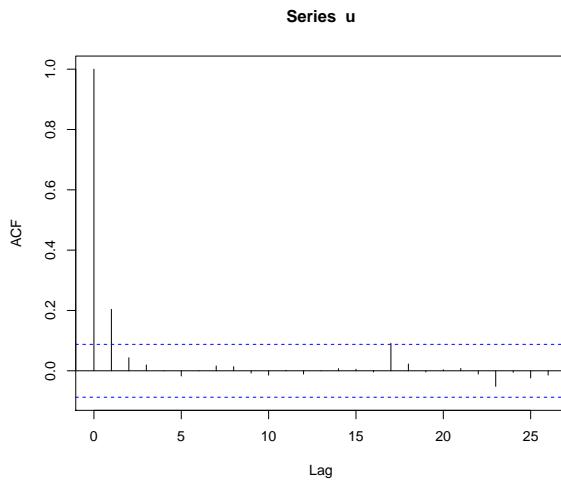
```
plot(u[-nsim], u[-1])
```



- c) Estudiar las correlaciones del vector  $(u_i, u_{i+k})$ , con  $k = 1, \dots, 10$ . Contrastar si son nulas.

Correlaciones:

```
acf(u)
```



Test de Ljung-Box:

```
Box.test(u, lag = 10, type = "Ljung")
```

```

Box-Ljung test
##
```

```
data: u
X-squared = 22.533, df = 10, p-value = 0.01261
```

### 3.2.1 Repetición de contrastes

Los contrastes se plantean habitualmente desde el punto de vista de la inferencia estadística en la práctica: se realiza una prueba sobre la única muestra disponible. Si se realiza una única prueba, en las condiciones de  $H_0$  hay una probabilidad  $\alpha$  de rechazarla. En simulación tiene mucho más sentido realizar un gran número de pruebas:

- La proporción de rechazos debería aproximarse al valor de  $\alpha$  (se puede comprobar para distintos valores de  $\alpha$ ).
- La distribución del estadístico debería ajustarse a la teórica bajo  $H_0$  (se podría realizar un nuevo contraste de bondad de ajuste).
- Los  $p$ -valores obtenidos deberían ajustarse a una  $\mathcal{U}(0, 1)$  (se podría realizar también un contraste de bondad de ajuste).

Este procedimiento es también el habitual para validar un método de contraste de hipótesis por simulación.

#### Ejemplo 3.1.

Consideramos el generador congruencial RANDU:

```
Valores iniciales
initRANDC(543210) # Fijar semilla para reproducibilidad
set.seed(543210)
n <- 500
nsim <- 1000
estadistico <- numeric(nsim)
pvalor <- numeric(nsim)

Realizar contrastes
for(isim in 1:nsim) {
 u <- RANDCN(n) # Generar
 # u <- runif(n)
 tmp <- chisq.test.cont(u, distribution="unif",
 nclasses=100, output=FALSE, nestpar=0, min=0, max=1)
 estadistico[isim] <- tmp$statistic
 pvalor[isim] <- tmp$p.value
}
```

Proporción de rechazos:

```
cat("\nProporción de rechazos al 1% =", sum(pvalor < 0.01)/nsim, "\n")
cat("\nProporción de rechazos al 1% =", mean(pvalor < 0.01), "\n")

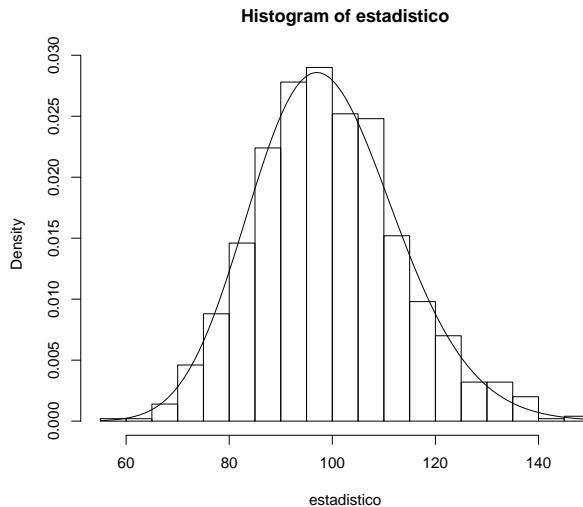
Proporción de rechazos al 1% = 0.014
cat("Proporción de rechazos al 5% =", sum(pvalor < 0.05)/nsim, "\n")
cat("Proporción de rechazos al 5% =", mean(pvalor < 0.05), "\n")

Proporción de rechazos al 5% = 0.051
cat("Proporción de rechazos al 10% =", sum(pvalor < 0.1)/nsim, "\n")
cat("Proporción de rechazos al 10% =", mean(pvalor < 0.1), "\n")

Proporción de rechazos al 10% = 0.112
```

Análisis del estadístico contraste:

```
Histograma
hist(estadistico, breaks = "FD", freq=FALSE)
curve(dchisq(x,99), add=TRUE)
```



```
Test ji-cuadrado
chisq.test.estadistico, distribution="chisq", nclasses=20, nestpar=0, df=99)
Test de Kolmogorov-Smirnov
ks.test(estadistico, "pchisq", df=99)

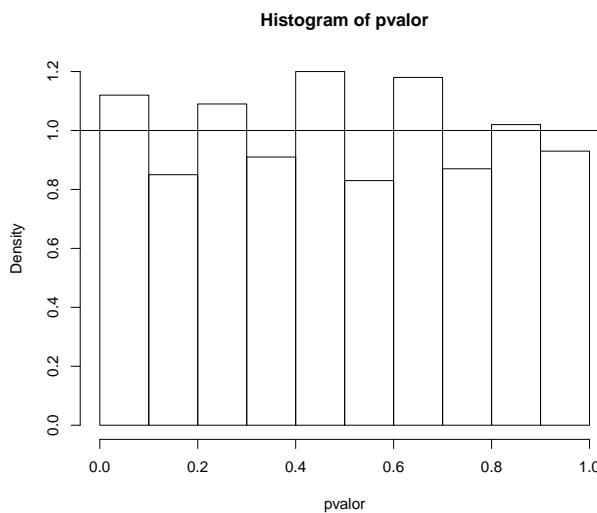
##
One-sample Kolmogorov-Smirnov test
##
```

#### 44 CAPÍTULO 3. GENERACIÓN DE NÚMEROS PSEUDOALEATORIOS CON DISTRIBUCIÓN UNIFORME

```
data: estadistico
D = 0.023499, p-value = 0.6388
alternative hypothesis: two-sided
```

Análisis de los *p*-valores:

```
Histograma
hist(pvalor, freq=FALSE)
abline(h=1) # curve(dunif(x,0,1), add=TRUE)
```



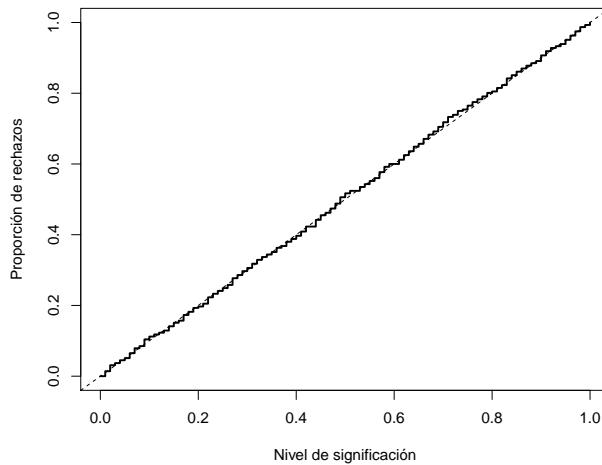
```
Test ji-cuadrado
chisq.test.cont(pvalor, distribution="unif", nclasses=20, nestpar=0, min=0, max=1)
Test de Kolmogorov-Smirnov
ks.test(pvalor, "punif", min=0, max=1)
```

```
##
One-sample Kolmogorov-Smirnov test
##
data: pvalor
D = 0.023499, p-value = 0.6388
alternative hypothesis: two-sided
```

Adicionalmente, si queremos estudiar la proporción de rechazos (el *tamaño del contraste*) para los posibles valores de  $\alpha$ , podemos emplear la distribución empírica del *p*-valor (proporción de veces que resultó menor que un determinado valor):

```
Distribución empírica
curve(ecdf(pvalor)(x), type = "s", lwd = 2,
 xlab = 'Nivel de significación', ylab = 'Proporción de rechazos')
```

```
abline(a=0, b=1, lty=2) # curve(punif(x, 0, 1), add = TRUE)
```



### 3.2.2 Baterías de contrastes

Hay numerosos ejemplos de generadores que pasaron diferentes test de uniformidad y aleatoriedad pero que fallaron estrepitosamente al considerar nuevos contrastes diseñados específicamente para generadores aleatorios (ver Marsaglia *et al.*, 1990). Por este motivo, el procedimiento habitual en la práctica es aplicar un número más o menos elevado de contrastes (de distinto tipo y difíciles de pasar, e.g. Marsaglia y Tsang, 2002), de forma que si el generador los pasa tendremos mayor confianza en que sus propiedades son las adecuadas. Este conjunto de pruebas es lo que se denomina batería de contrastes. Una de las primeras se introdujo en Knuth (1969) y de las más recientes podríamos destacar:

- Diehard tests (The Marsaglia Random Number CDROM, 1995): <http://www.stat.fsu.edu/pub/diehard> (versión archivada el 2016-01-25).
- Dieharder (Brown y Bauer, 2003): Dieharder Page, paquete **RDieHarder**.
- TestU01 (L'Ecuyer y Simard, 2007): <http://simul.iro.umontreal.ca/testu01/tu01.html>.
- NIST test suite (National Institute of Standards and Technology, USA, 2010): <http://csrc.nist.gov/groups/ST/toolkit/rng>.

Para más detalles, ver por ejemplo<sup>1</sup>:

---

<sup>1</sup>También puede ser de interés el enlace Randomness Tests: A Literature Survey y la entidad certificadora (gratuita) en línea CAcert.

- Marsaglia, G. y Tsang, W.W. (2002). Some difficult-to-pass tests of randomness. *Journal of Statistical Software*, 7(3), 1-9.
- Demirhan, H. y Bitirim, N. (2016). CryptRndTest: an R package for testing the cryptographic randomness. *The R Journal*, 8(1), 233-247.

### 3.3 Ejercicios

#### Ejercicio 3.3.

Uno de los primeros generadores fue el denominado método de los cuadrados medios propuesto por Von Neumann (1946). Con este procedimiento se generan números pseudoaleatorios de 4 dígitos de la siguiente forma:

- i. Se escoge un número de cuatro dígitos  $x_0$  (semilla).
- ii. Se eleva al cuadrado ( $x_0^2$ ) y se toman los cuatro dígitos centrales ( $x_1$ ).
- iii. Se genera el número pseudo-aleatorio como

$$u_1 = \frac{x_1}{10^4}.$$

- iv. Volver al paso ii y repetir el proceso.

Para obtener los  $k$  (número par) dígitos centrales de  $x_i^2$  se puede utilizar que:

$$x_{i+1} = \left\lfloor \left( x_i^2 - \left\lfloor \frac{x_i^2}{10^{(2k-\frac{k}{2})}} \right\rfloor 10^{(2k-\frac{k}{2})} \right) / 10^{\frac{k}{2}} \right\rfloor$$

El algoritmo está implementado en el fichero *RANDVN.R*:

```
Generador Von Neumann de números pseudoaleatorios
=====

#

initRANDVN(semilla,n)
Inicia el generador
n número de dígitos centrales, 4 por defecto (debe ser un nº par)
Por defecto semilla del reloj
OJO: No se hace ninguna verificación de los parámetros
initRANDVN <- function(semilla = as.numeric(Sys.time()), n = 4) {
 .semilla <- as.double(semilla) %% 10^n # Cálculos en doble precisión
 .n <- n
 .aux <- 10^(2*n-n/2)
 .aux2 <- 10^(n/2)
 return(invisible(list(semilla=.semilla,n=.n)))
}
```

```

}

RANDVN()
Genera un valor pseudoaleatorio con el generador de Von Neumann
Actualiza la semilla (si no existe llama a initRANDVN)
RANDVN <- function() {
 if (!exists(".semilla", envir=globalenv())) initRANDVN()
 z <- .semilla^2
 .semilla <- trunc((z-trunc(z/.aux)*.aux)/.aux2)
 return(.semilla/10^.n)
}

RANDVNN(n)
Genera un vector de valores pseudoaleatorios con el generador congruencial
(por defecto de dimensión 1000)
Actualiza la semilla (si no existe llama a initRANDVN)
RANDVNN <- function(n = 1000) {
 x <- numeric(n)
 for(i in 1:n) x[i] <- RANDVN()
 return(x)
 # return(replicate(n,RANDVN())) # Alternativa más rápida
}

```

Estudiar las características del generador de cuadrados medios a partir de una secuencia de 500 valores. Emplear únicamente métodos gráficos.

#### Ejercicio 3.4.

Considerando el generador congruencial multiplicativo de parámetros  $a = 7^5 = 16807$ ,  $c = 0$  y  $m = 2^{31} - 1$ . ¿Se observan los mismos problemas que con el algoritmo RANDU al considerar las tripletas  $(x_k, x_{k+1}, x_{k+2})$ ?



## Capítulo 4

# Análisis de resultados de simulación

Work in progress...

En este capítulo nos centraremos en la aproximación mediante simulación de la media teórica de un estadístico a partir de la media muestral de una secuencia de simulaciones de dicho estadístico. La aproximación de una probabilidad sería un caso particular considerando una variable de Bernoulli.

En primer lugar se tratará el análisis de la convergencia y la precisión de la aproximación por simulación. Al final del capítulo se incluye una breve introducción a los problemas de estabilización y dependencia (con los que nos solemos encontrar en simulación dinámica y MCMC).

### 4.1 Convergencia

Supongamos que estamos interesados en aproximar la media teórica  $\mu = E(X)$  a partir de una secuencia i.i.d.  $X_1, X_2, \dots, X_n$  mediante la media muestral  $\bar{X}_n$ . Una justificación teórica de la validez de la aproximación obtenida mediante simulación es *la ley (débil) de los grandes números*:

- Si  $X_1, X_2, \dots$  es una secuencia de v.a.'s independientes con:

$$E(X_i) = \mu \text{ y } \text{Var}(X_i) = \sigma^2 < \infty,$$

entonces  $\bar{X}_n = (X_1 + \dots + X_n)/n$  converge en probabilidad a  $\mu$ . i.e. para cualquier  $\varepsilon > 0$ :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|\bar{X}_n - \mu| < \varepsilon) = 1.$$

- La ley fuerte establece la convergencia casi segura.

**Ejemplo 4.1.** Aproximación de una probabilidad

Simulamos una distribución de Bernoulli de parámetro  $p = 0.5$ :

```
p <- 0.5
set.seed(1)
nsim <- 10000
nsim <- 100
rx <- runif(nsim) <= p
```

La aproximación por simulación de  $p$  será:

```
mean(rx)
```

```
[1] 0.5047
```

Podemos generar un gráfico con la evolución de la aproximación con el siguiente código:

```
plot(cumsum(rx)/1:nsim, type="l", lwd=2, xlab="Número de generaciones",
 ylab="Proporción muestral", ylim=c(0,1))
abline(h = mean(rx), lty = 2)
valor teórico
abline(h = p)
```

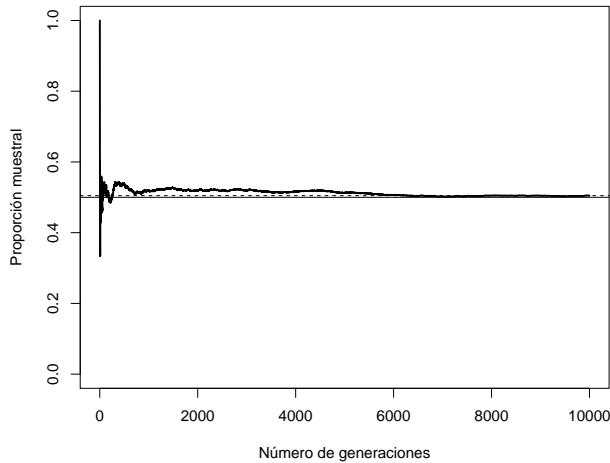


Figura 4.1: Aproximación de la proporción en función del número de generaciones.

### 4.1.1 Detección de problemas de convergencia

Una suposición crucial es que las variables  $X_i$  deben tener varianza finita (realmente esta suposición puede relajarse:  $E(|X_i|) < \infty$ ). En caso contrario la media muestral puede no converger a una constante. Un ejemplo conocido es la distribución de Cauchy:

```
set.seed(1)
nsim <- 10000
rx <- rcauchy(nsim)
plot(cumsum(rx)/1:nsim, type="l", lwd=2,
 xlab="Número de generaciones", ylab="Media muestral")
```

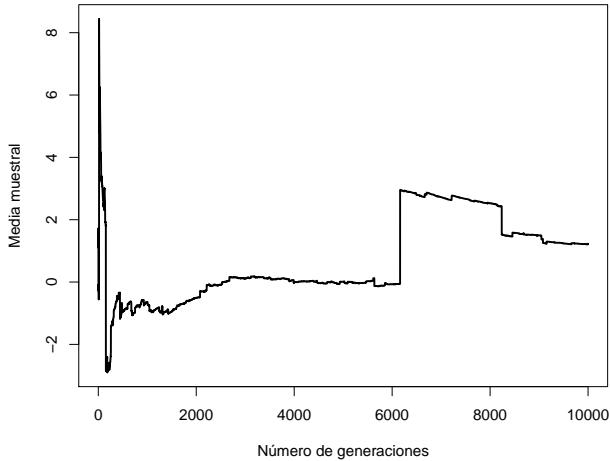


Figura 4.2: Evolución de la media muestral de una distribución de Cauchy en función del número de generaciones.

Para detectar problemas de convergencia es recomendable representar la evolución de la aproximación de la característica de interés (sobre el número de generaciones), además de realizar otros análisis descriptivos de las simulaciones. Por ejemplo, en este caso podemos observar los valores que producen estos saltos mediante un gráfico de cajas:

```
boxplot(rx)
```

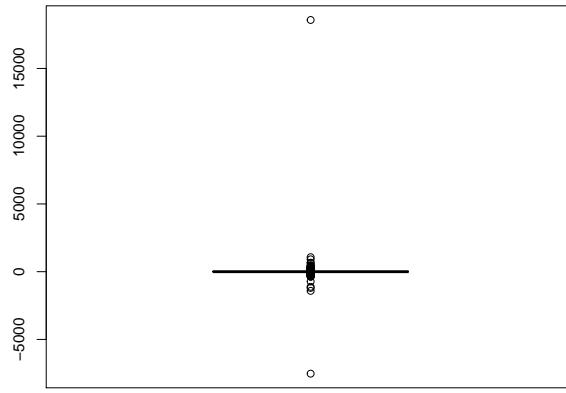


Figura 4.3: Gráfico de cajas de 10000 generaciones de una distribución de Cauchy.

## 4.2 Estimación de la precisión

En el caso de la media muestral  $\bar{X}_n$ , un estimador insesgado de  $Var(\bar{X}_n) = \sigma^2/n$  es la cuasi-varianza muestral:

$$\widehat{Var}(\bar{X}_n) = \frac{\widehat{S}^2}{n}$$

con:

$$\widehat{S}^2_n = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2.$$

En el caso de una proporción  $\hat{p}_n$ :

$$\widehat{Var}(\hat{p}_n) = \frac{\hat{p}_n(1-\hat{p}_n)}{n-1},$$

aunque se suele emplear la varianza muestral.

Los valores obtenidos servirían como medidas básicas de la precisión de la aproximación, aunque su principal aplicación es la construcción de intervalos de confianza.

### 4.3 Teorema central del límite

Si  $X_1, X_2, \dots$  es una secuencia de v.a.'s independientes con  $E(X_i) = \mu$  y  $Var(X_i) = \sigma^2 < \infty$ , entonces:

$$Z_n = \frac{\bar{X}_n - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \xrightarrow{d} N(0, 1)$$

i.e.  $\lim_{n \rightarrow \infty} F_{Z_n}(z) = \Phi(z)$ . Por tanto, un intervalo de confianza asintótico para  $\mu$  es:

$$IC_{1-\alpha}(\mu) = \left( \bar{X}_n - z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_n}{\sqrt{n}}, \bar{X}_n + z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_n}{\sqrt{n}} \right).$$

Podemos considerar que  $z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_n}{\sqrt{n}}$  es la precisión obtenida (con nivel de confianza  $1 - \alpha$ ).

La convergencia de la aproximación, además de ser aleatoria, se podría considerar lenta. La idea es que para doblar la precisión (disminuir el error a la mitad), necesitaríamos un número de generaciones cuatro veces mayor. Pero una ventaja, es que este error no depende del número de dimensiones (en el caso multidimensional puede ser mucho más rápida que otras alternativas numéricas).

**Ejemplo 4.2.** Aproximación de la media de una distribución normal

```
xsd <- 1
xmed <- 0
set.seed(1)
nsim <- 1000
rx <- rnorm(nsim, xmed, xsd)
```

La aproximación por simulación de la media será:

```
mean(rx)

[1] -0.01164814
```

Como medida de la precisión de la aproximación podemos considerar (se suele denominar error de la aproximación):

```
2*sd(rx)/sqrt(nsim)
```

```
[1] 0.06545382
```

(es habitual emplear 2 en lugar de 1.96, lo que se correspondería con  $1 - \alpha = 0.9545$  en el caso de normalidad). Podemos añadir también los correspondientes intervalos de confianza al gráfico de convergencia:

```

n <- 1:n sim
est <- cumsum(rx)/n
Errores estándar calculados con la varianza muestral por comodidad:
esterr <- sqrt(cumsum((rx-est)^2))/n
plot(est, type = "l", lwd = 2, xlab = "Número de generaciones",
 ylab = "Media y rango de error", ylim = c(-1, 1))
abline(h = est[n sim], lty=2)
lines(est + 2*esterr, lty=3)
lines(est - 2*esterr, lty=3)
abline(h = xmed)

```

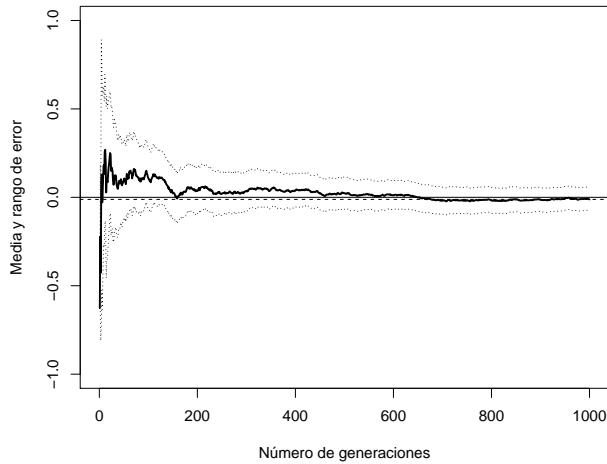


Figura 4.4: Gráfico de convergencia incluyendo el error de la aproximación.

## 4.4 Determinación del número de generaciones

Normalmente el valor de  $n$  se toma del orden de varias centenas o millares. En los casos en los que la simulación se utiliza para aproximar una característica central de la distribución (como una media) puede bastar un número de simulaciones del orden de  $n = 100, 200, 500$ . Sin embargo, en otros casos pueden ser necesarios valores del tipo  $B = 1000, 2000, 5000, 10000$ .

En muchas ocasiones puede interesar obtener una aproximación con un nivel de precisión fijado. Para una precisión absoluta  $\varepsilon$ , se trata de determinar  $n$  de

forma que:

$$z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_n}{\sqrt{n}} < \varepsilon$$

Un algoritmo podría ser el siguiente:

1. Hacer  $j = 0$  y fijar un tamaño inicial  $n_0$  (e.g. 30 ó 60).
2. Generar  $\{X_i\}_{i=1}^{n_0}$  y calcular  $\bar{X}_{n_0}$  y  $\hat{S}_{n_0}$ .
3. Mientras  $z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_{n_j}}{\sqrt{n_j}} > \varepsilon$  hacer:
  - 3.1.  $j = j + 1$ .
  - 3.2.  $n_j = \left\lceil \left( z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_{n_{j-1}}}{\varepsilon} \right)^2 \right\rceil$ .
  - 3.3. Generar  $\{X_i\}_{i=n_{j-1}+1}^{n_j}$  y calcular  $\bar{X}_{n_j}$  y  $\hat{S}_{n_j}$ .
4. Devolver  $\bar{X}_{n_j}$  y  $z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_{n_j}}{\sqrt{n_j}}$ .

Para una precisión relativa  $\varepsilon |\mu|$  se procede análogamente de forma que:

$$z_{1-\alpha/2} \frac{\hat{S}_n}{\sqrt{n}} < \varepsilon |\bar{X}_n|.$$

## 4.5 El problema de la dependencia

En el caso de dependencia, la estimación de la precisión se complica:

$$Var(\bar{X}) = \frac{1}{n^2} \left( \sum_{i=1}^n Var(X_i) + 2 \sum_{i < j} Cov(X_i, X_j) \right).$$

**Ejemplo 4.3.** Aproximación de una proporción bajo dependencia (cadena de Markov)

Supongamos que en A Coruña llueve de media 1/3 días al año, y que la probabilidad de que un día llueva solo depende de lo que ocurrió el día anterior, siendo 0.94 si el día anterior llovió y 0.03 si no. Podemos generar valores de la variable indicadora de día lluvioso con el siguiente código:

```
Variable dicotómica 0/1 (FALSE/TRUE)
set.seed(1)
nsim <- 10000
alpha <- 0.03 # prob de cambio si seco
beta <- 0.06 # prob de cambio si lluvia
rx <- logical(nsim) # x == "llueve"
```

```
rx[1] <- FALSE # El primer día no llueve
for (i in 2:nsim)
 rx[i] <- if (rx[i-1]) runif(1) > beta else runif(1) < alpha
```

Se podría pensar en emplear las expresiones anteriores:

```
n <- 1:nsim
est <- cumsum(rx)/n
esterr <- sqrt(est*(1-est)/(n-1)) # OJO! Supone independencia
plot(est, type="l", lwd=2, ylab="Probabilidad",
 xlab="Número de simulaciones", ylim=c(0,0.6))
abline(h = est[nsim], lty=2)
lines(est + 2*esterr, lty=2)
lines(est - 2*esterr, lty=2)
abline(h = 1/3, col="darkgray") # Prob. teor. cadenas Markov
```

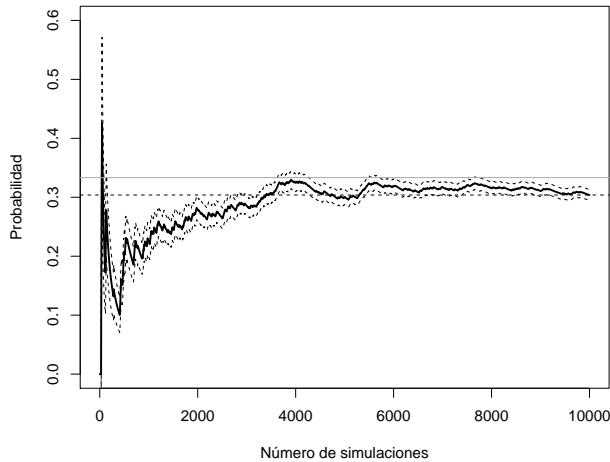


Figura 4.5: Gráfico de convergencia incluyendo el error de la aproximación (calculado asumiendo independencia).

La aproximación de la proporción sería correcta (es consistente):

```
est[nsim]
```

```
[1] 0.3038
```

Sin embargo, al ser datos dependientes esta aproximación del error standar no es adecuada:

```
esterr[nsim]
[1] 0.004599203
```

En este caso al haber dependencia positiva se produce una subestimación del verdadero error estandar.

```
acf(as.numeric(rx))
```

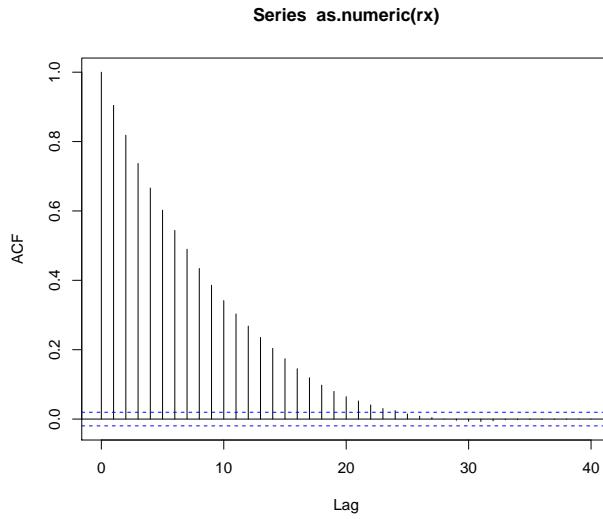


Figura 4.6: Correlograma de la secuencia indicadora de días de lluvia.

El gráfico de autocorrelaciones sugiere que si tomamos 1 de cada 25 podemos suponer independencia.

```
lag <- 24
xlag <- c(rep(FALSE, lag), TRUE)
rxi <- rx[xlag]
acf(as.numeric(rxi))

nrxi <- length(rxi)
n <- 1:nrxi
est <- cumsum(rxi)/n
esterr <- sqrt(est*(1-est)/(n-1))
plot(est, type="l", lwd=2, ylab="Probabilidad",
 xlab=paste("Número de simulaciones /", lag + 1), ylim=c(0,0.6))
abline(h = est[length(rxi)], lty=2)
lines(est + 2*esterr, lty=2) # Supone independencia
lines(est - 2*esterr, lty=2)
abline(h = 1/3, col="darkgray") # Prob. teor. cadenas Markov
```

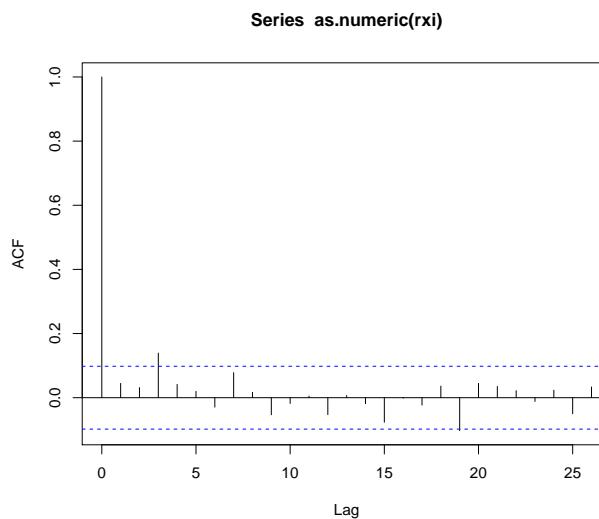


Figura 4.7: Correlograma de la subsecuencia de días de lluvia obtenida seleccionando uno de cada 25 valores.

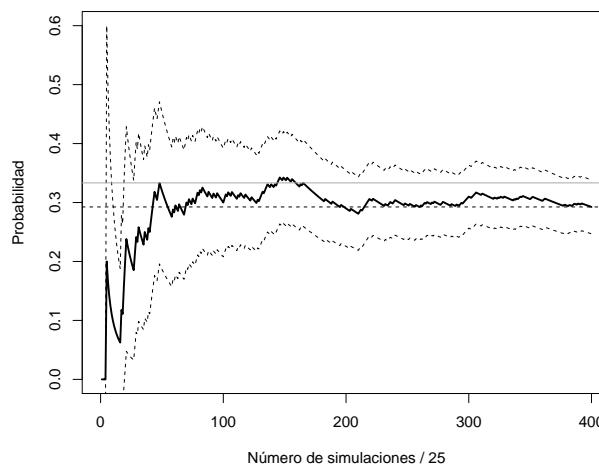


Figura 4.8: Gráfico de convergencia de la aproximación de la probabilidad a partir de la subsecuencia de días de lluvia (calculando el error de aproximación asumiendo independencia).

Esta forma de proceder podría ser adecuada para tratar de aproximar la preci-

sión:

```
esterr[nrxi]
[1] 0.02277402
```

pero no sería eficiente para aproximar la media. Siempre será preferible emplear todas las observaciones.

Por ejemplo, se podría pensar en considerar las medias de grupos de 24 valores consecutivos y suponer que hay independencia entre ellas:

```
r xm <- rowMeans(matrix(rx, ncol = lag, byrow = TRUE))
nr xm <- length(r xm)
n <- 1:nr xm
est <- cumsum(r xm)/n
esterr <- sqrt(cumsum((r xm-est)^2))/n # Error estándar
plot(est, type="l", lwd=2, ylab="Probabilidad",
 xlab=paste("Número de simulaciones /", lag + 1), ylim=c(0,0.6))
abline(h = est[length(r xm)], lty=2)
lines(est + 2*esterr, lty=2) # OJO! Supone independencia
lines(est - 2*esterr, lty=2)
abline(h = 1/3, col="darkgray") # Prob. teor. cadenas Markov
```

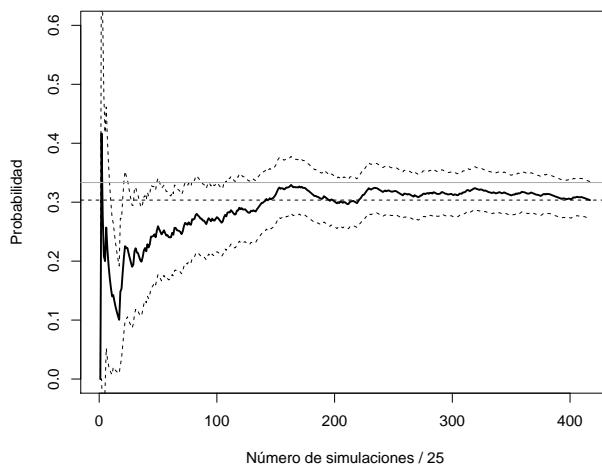


Figura 4.9: Gráfico de convergencia de las medias por lotes.

Esta es la idea del método de medias por lotes (*batch means; macro-micro replicaciones*) para la estimación de la varianza. En el ejemplo anterior se calcula el error estándar de la aproximación por simulación de la proporción:

```
esterr[nrxm]
```

```
[1] 0.01569017
```

pero si el objetivo es la aproximación de la varianza (de la variable y no de las medias por lotes), habrá que reescalarlo adecuadamente. Supongamos que la correlación entre  $X_i$  y  $X_{i+k}$  es aproximadamente nula, y consideramos las subsecuencias (lotes)  $(X_{t+1}, X_{t+2}, \dots, X_{t+k})$  con  $t = (j-1)k$ ,  $j = 1, \dots, m$  y  $n = mk$ . Entonces:

$$\begin{aligned} Var(\bar{X}) &= Var\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i\right) = Var\left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(\frac{1}{k} \sum_{t=(i-1)k+1}^{ik} X_t\right)\right) \\ &\approx \frac{1}{m^2} \sum_{j=1}^m Var\left(\frac{1}{k} \sum_{t=(i-1)k+1}^{ik} X_t\right) \approx \frac{1}{m} Var(\bar{X}_k) \end{aligned}$$

donde  $\bar{X}_k$  es la media de una subsecuencia de longitud  $k$ .

```
var.aprox <- nsim * esterr[length(rxm)]^2
var.aprox
```

```
[1] 2.461814
```

Obtenida asumiendo independencia entre las medias por lotes, y que será una mejor aproximación que asumir independencia entre las generaciones de la variable:

```
var(rx)
```

```
[1] 0.2115267
```

Alternativamente se podría recurrir a la generación de múltiples secuencias independientes entre sí:

```
Variable dicotómica 0/1 (FALSE/TRUE)
set.seed(1)
nsim <- 1000
nsec <- 10
alpha <- 0.03 # prob de cambio si seco
beta <- 0.06 # prob de cambio si lluvia
rxm <- matrix(FALSE, nrow = nsec, ncol = nsim)
for (i in 1:nsec) {
 # rxm[i, 1] <- FALSE # El primer día no llueve
 # rxm[i, 1] <- runif(1) < 1/2 # El primer día llueve con probabilidad 1/2
 rxm[i, 1] <- runif(1) < 1/3 # El primer día llueve con probabilidad 1/3 (ideal)
 for (j in 2:nsim)
 rxm[i, j] <- if (rxm[i, j-1]) runif(1) > beta else runif(1) < alpha
}
```

La idea sería considerar las medias de las series como una muestra independiente de una nueva variable y estimar su varianza de la forma habitual:

```
Media de cada secuencia
n <- 1:n sim
est <- apply(rxm, 1, function(x) cumsum(x)/n)
matplot(n, est, type = 'l', lty = 3, col = "lightgray",
 ylab="Probabilidad", xlab="Número de simulaciones")
Aproximación
mest <- apply(est, 1, mean)
lines(mest, lwd = 2)
abline(h = mest[n sim], lty = 2)
Precisión
mesterr <- apply(est, 1, sd)/sqrt(nsec)
lines(mest + 2*mesterr, lty = 2)
lines(mest - 2*mesterr, lty = 2)
Prob. teor. cadenas Markov
abline(h = 1/3, col="darkgray")
```

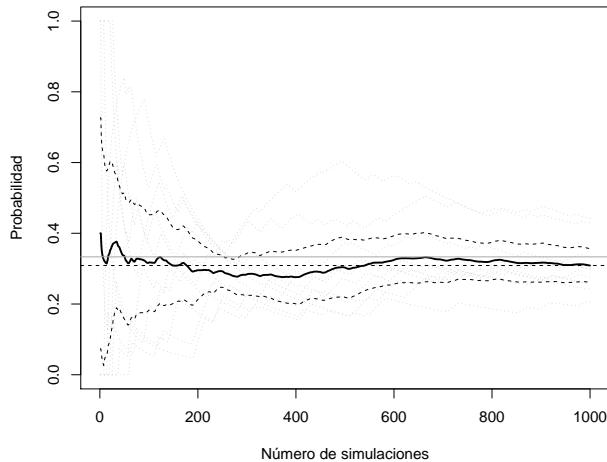


Figura 4.10: Gráfico de convergencia de la media de 10 secuencias generadas de forma independiente.

```
Aproximación final
mest[n sim] # mean(rxm)
```

```
[1] 0.3089
```

```
Error estándar
mesterr[nsim]
```

```
[1] 0.02403491
```

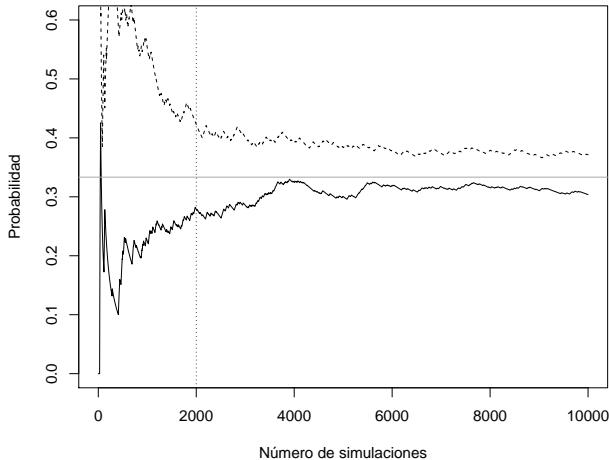
Trataremos este tipo de problemas en la diagnosis de algoritmos de simulación Monte Carlo de Cadenas de Markov (MCMC). Aparecen también en la simulación dinámica (por eventos o cuantos).

#### 4.5.1 Periodo de calentamiento

En el caso de simulación de datos dependientes (simulación dinámica) pueden aparecer problemas de estabilización. Puede ocurrir que el sistema evolucione lentamente en el tiempo hasta alcanzar su distribución estacionaria, siendo muy sensible a las condiciones iniciales con las que se comenzó la simulación. En tal caso resulta conveniente ignorar los resultados obtenidos durante un cierto período inicial de tiempo (denominado período de calentamiento o estabilización), cuyo único objeto es conseguir que se stabilice la distribución de probabilidad.

Como ejemplo comparamos la simulación del Ejemplo 4.3 con la obtenida considerando como punto de partida un día lluvioso (con una semilla distinta para evitar dependencia).

```
set.seed(2)
nsim <- 10000
rx2 <- logical(nsim)
rx2[1] <- TRUE # El primer día llueve
for (i in 2:nsim)
 rx2[i] <- if (rx2[i-1]) runif(1) > beta else runif(1) < alpha
n <- 1:nsim
est <- cumsum(rx)/n
est2 <- cumsum(rx2)/n
plot(est, type="l", ylab="Probabilidad",
 xlab="Número de simulaciones", ylim=c(0,0.6))
lines(est2, lty = 2)
Ejemplo periodo calentamiento nburn = 2000
abline(v = 2000, lty = 3)
Prob. teor. cadenas Markov
abline(h = 1/3, col="darkgray")
```



En estos casos puede ser recomendable ignorar los primeros valores generados (por ejemplo los primeros 2000) y recalcular los estadísticos deseados.

También trataremos este tipo de problemas en la diagnosis de algoritmos MCMC.

**Ejemplo 4.4.** Simulación de un proceso autorregresivo (serie de tiempo)

$$X_t = \mu + \rho * (X_{t-1} - \mu) + \varepsilon_t$$

Podemos tener en cuenta que en este caso la varianza es:

$$\text{var}(X_t) = E(X_t^2) - \mu^2 = \frac{\sigma_\varepsilon^2}{1 - \rho^2}.$$

Establecemos los parámetros:

```
nsim <- 200 # Número de simulaciones
xmed <- 0 # Media
rho <- 0.5 # Coeficiente AR
nburn <- 10 # Período de calentamiento (burn-in)
```

Se podría fijar la varianza del error:

```
evar <- 1
Varianza de la respuesta
xvar <- evar / (1 - rho^2)
```

pero la recomendación sería fijar la varianza de la respuesta:

```
xvar <- 1
Varianza del error
evar <- xvar*(1 - rho^2)
```

Para simular la serie, al ser un  $AR(1)$ , normalmente simularíamos el primer valor

```
rx[1] <- rnorm(1, mean = xmed, sd = sqrt(xvar))
```

o lo fijamos a la media (en este caso nos alejamos un poco de la distribución estacionaria, para que el “periodo de calentamiento” sea mayor). Después generamos los siguientes valores de forma recursiva:

```
set.seed(1)
x <- numeric(nsim + nburn)
Establecer el primer valor
x[1] <- -10
Simular el resto de la secuencia
for (i in 2:length(x))
 x[i] <- xmed + rho*(x[i-1] - xmed) + rnorm(1, sd=sqrt(evar))
x <- as.ts(x)
plot(x)
abline(v = nburn, lty = 2)
```

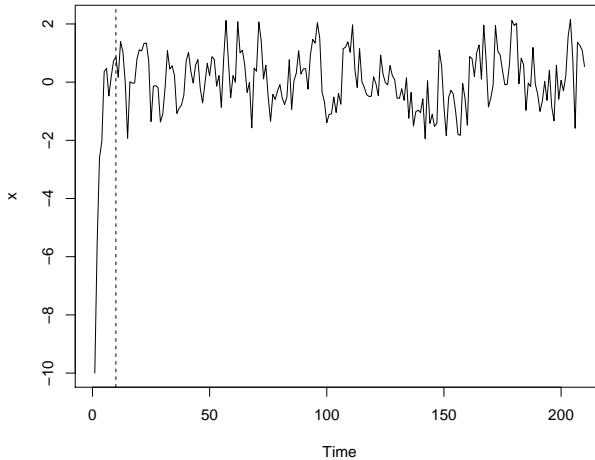


Figura 4.11: Ejemplo de una simulación de una serie de tiempo autorregresiva.

y eliminamos el periodo de calentamiento:

```
rx <- x[-seq_len(nburn)]
```

Para simular una serie de tiempo en R se puede emplear la función `arima.sim` del paquete base `stats`. En este caso el periodo de calentamiento se establece mediante el parámetro `n.start` (que se fija automáticamente a un valor adecuado).

Por ejemplo, podemos generar este serie autoregresiva con:

```
rx2 <- arima.sim(list(order = c(1,0,0), ar = rho), n = nsim, n.start = nburn, sd = sqrt(evar))
```

La recomendación es fijar la varianza de las series simuladas si se quieren comparar resultados considerando distintos parámetros de dependencia.

## 4.6 Observaciones

- En el caso de que la característica de interés de la distribución de  $X$  no sea la media, los resultados anteriores no serían en principio aplicables.
- Incluso en el caso de la media, las “bandas de confianza” obtenidas con el TCL son puntuales (si generamos nuevas secuencias de simulación es muy probable que no estén contenidas).
- En muchos casos (p.e. la generación de múltiples secuencias de simulación puede suponer un coste computacional importante), puede ser preferible emplear un método de remuestreo.



## Capítulo 5

# Simulación de variables continuas

En este capítulo se expondrán métodos generales para simular distribuciones continuas: el método de inversión y los basados en aceptación/rechazo. En todos los casos como punto de partida es necesario disponer de un método de generación de números pseudoaleatorios uniformes en  $(0, 1)$ .

### 5.1 Método de inversión

Se trataría del método preferible para la simulación de una variable continua (siempre que se disponga de la función cuantil). Está basado en los siguientes resultados:

Si  $X$  es una variable aleatoria con función de distribución  $F$  continua y estrictamente monótona (invertible), entonces:

$$U = F(X) \sim \mathcal{U}(0, 1),$$

ya que:

$$G(u) = P(Y \leq u) = P(F(X) \leq u) = P(X \leq F^{-1}(u)) = F(F^{-1}(u)) = u.$$

El recíproco también es cierto, si  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$  entonces:

$$F^{-1}(U) \sim X$$

**Algoritmo (método de inversión):**

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .

2. Devolver  $X = F^{-1}(U)$ .

**Ejemplo 5.1** (Simulación de una distribución exponencial).

La distribución exponencial  $\exp(\lambda)$  de parámetro  $\lambda > 0$  tiene como función de densidad  $f(x) = \lambda e^{-\lambda x}$ , si  $x \geq 0$ , y como función de distribución:

$$F(x) = \begin{cases} 1 - e^{-\lambda x} & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

Teniendo en cuenta que:

$$1 - e^{-\lambda x} = u \Leftrightarrow x = -\frac{\ln(1-u)}{\lambda},$$

el algoritmo para simular esta variable mediante el método de inversión es:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Devolver  $X = -\frac{\ln(1-U)}{\lambda}$ .

En el último paso podemos emplear directamente  $U$  en lugar de  $1 - U$ , ya que  $1 - U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ . Esta última expresión para acelerar los cálculos es la que denominaremos *forma simplificada*.

El código para implementar este algoritmo en R podría ser el siguiente:

```
Simular vector exp(lambda)
tini <- proc.time()

lambda <- 2
nsim <- 10^5
set.seed(1)
U <- runif(nsim)
X <- -log(U)/lambda # -log(1-U)/lambda

tiempo <- proc.time() - tini
tiempo

user system elapsed
0.02 0.00 0.02

hist(X, breaks = "FD", freq = FALSE,
 main = "", xlim = c(0, 5), ylim = c(0, 2.5))
curve(dexp(x, lambda), lwd = 2, add = TRUE)
```

Como se observa en la Figura 5.1 se trata de un método exacto (si está bien implementado) y la distribución de los valores generados se aproxima a la distribución teórica como cabría esperar con una muestra de ese tamaño.

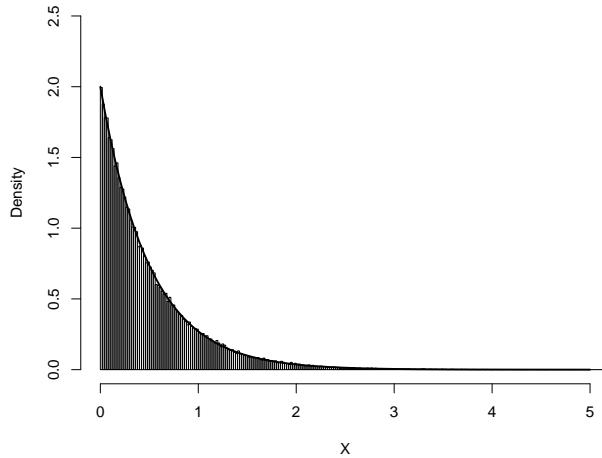


Figura 5.1: Distribución de los valores generados de una exponencial mediante el método de inversión.

### 5.1.1 Algunas distribuciones que pueden simularse por el método de inversión

A continuación se incluyen algunas distribuciones que se pueden simular fácilmente mediante el método de inversión. Se adjunta una forma simplificada del método que tiene por objeto evitar cálculos innecesarios (tal y como se hizo en el ejemplo de la exponencial).

| Nombre                             | Densidad                                                                      | $F(x)$                                        | $F^{-1}(U)$                                                   | Forma simplificada                    |
|------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------|
| $\exp(\lambda)$<br>$(\lambda > 0)$ | $\lambda e^{-\lambda x}$ , si<br>$x \geq 0$                                   | $1 - e^{-\lambda x}$                          | $-\frac{\ln(1-U)}{\lambda}$                                   | $-\frac{\ln U}{\lambda}$              |
| Cauchy                             | $\frac{1}{\pi(1+x^2)}$                                                        | $\frac{1}{2} + \frac{\arctan x}{\pi}$         | $\tan\left(\pi\left(U - \frac{1}{2}\right)\right) \tan \pi U$ |                                       |
| Triangular<br>en $(0, a)$          | $\frac{2}{a} \left(1 - \frac{x}{a}\right)$ ,<br>si $0 \leq x \leq a$          | $\frac{2}{a} \left(x - \frac{x^2}{2a}\right)$ | $a(1 - \sqrt{1-U})$                                           | $a(1 - \sqrt{U})$                     |
| Pareto<br>$(a, b > 0)$             | $\frac{ab^a}{x^{a+1}}$ , si<br>$x \geq b$                                     | $1 - \left(\frac{b}{x}\right)^a$              | $\frac{b}{(1-U)^{1/a}}$                                       | $\frac{b}{U^{1/a}}$                   |
| Weibull<br>$(\lambda, \alpha > 0)$ | $\alpha \lambda^\alpha x^{\alpha-1} e^{-(\lambda x)^\alpha}$<br>si $x \geq 0$ | $1 - e^{-(\lambda x)^\alpha}$                 | $\frac{(-\ln(1-U))^{1/\alpha}}{\lambda}$<br>strut             | $\frac{(-\ln U)^{1/\alpha}}{\lambda}$ |

#### Ejercicio 5.1.

La distribución doble exponencial (o distribución de Laplace) de parámetro  $\lambda$  tiene función de densidad:

$$f(x) = \frac{\lambda}{2} e^{-\lambda|x|}, \quad x \in \mathbb{R}$$

y función de distribución:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt = \begin{cases} \frac{1}{2} e^{\lambda x} & \text{si } x < 0 \\ 1 - \frac{1}{2} e^{-\lambda x} & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

```

rdexp <- function(lambda = 1){
 # Simulación por inversión
 # Doble exponencial
 U <- runif(1)
 if (U<0.5) {
 return(log(2*U)/lambda)
 } else {
 return(-log(2*(1-U))/lambda)
 }
}

rdexpn <- function(n = 1000, lambda = 1) {
 # Simulación n valores de doble exponencial
 x <- numeric(n)
 for(i in 1:n) x[i]<-rdexp(lambda)
 return(x)
}

```

- b) Generar  $10^4$  valores de la distribución doble exponencial de parámetro  $\lambda = 2$  y obtener el tiempo de CPU que tarda en generar la secuencia.

```

set.seed(54321)
system.time(x <- rdexpn(10^4, 2))

```

```

user system elapsed
0.03 0.00 0.03

```

- c) Representar el histograma y compararlo con la densidad teórica.

```

hist(x, breaks = "FD", freq = FALSE, main="")
lines(density(x), col = 'blue')
curve(ddexp(x, 2), add = TRUE)

```

### 5.1.2 Ventajas e inconvenientes

Ventajas:

- Aplicable, en principio, a cualquier distribución continua.

Inconvenientes:

- Puede no ser posible encontrar una expresión explícita para  $F^{-1}(u)$ .
- Aún disponiendo de una expresión explícita para  $F^{-1}(u)$ , su evaluación directa puede requerir mucho tiempo de computación.

Alternativas:

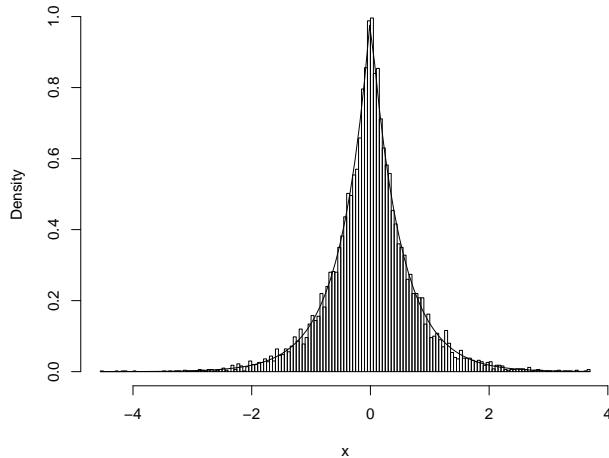


Figura 5.2: Distribución de los valores generados de una doble exponencial mediante el método de inversión.

- Emplear métodos numéricos para resolver  $F(x) - u = 0$  (requeriría resolver numéricamente esta ecuación para cada valor aleatorio que se deseé generar).
- Utilizar una aproximación a  $F^{-1}(u)$  (inversión aproximada).

### 5.1.3 Inversión aproximada

En muchos casos en los que no se puede emplear la expresión exacta de la función cuantil  $F^{-1}(u)$ , se dispone de una aproximación suficientemente buena que se puede emplear en el algoritmo anterior (se obtendrían simulaciones con una distribución aproximada a la deseada).

Por ejemplo, para aproximar la función cuantil de la normal estándar, Odeh y Evans consideraron la siguiente función auxiliar :

$$g(v) = \sqrt{-2 \ln v} \frac{A(\sqrt{-2 \ln v})}{B(\sqrt{-2 \ln v})},$$

siendo  $A(x) = \sum_{i=0}^4 a_i x^i$  y  $B(x) = \sum_{i=0}^4 b_i x^i$  con:

$$\begin{array}{ll}
 a_0 = -0.322232431088 & b_0 = 0.0993484626060 \\
 a_1 = -1 & b_1 = 0.588581570495 \\
 a_2 = -0.342242088547 & b_2 = 0.531103462366 \\
 a_3 = -0.0204231210245 & b_3 = 0.103537752850 \\
 a_4 = -0.0000453642210148 & b_4 = 0.0038560700634
 \end{array}$$

La aproximación consiste en utilizar  $g(1-u)$  en lugar de  $F^{-1}(u)$  para los valores de  $u \in [10^{-20}, \frac{1}{2}]$  y  $-g(u)$  si  $u \in [\frac{1}{2}, 1 - 10^{-20}]$ . Para  $u \notin [10^{-20}, 1 - 10^{-20}]$  (que sólo ocurre con una probabilidad de  $2 \cdot 10^{-20}$ ) la aproximación no es recomendable.

### Algoritmo de Odeh y Evans

1. Generar  $U \sim U(0, 1)$ .
2. Si  $U < 10^{-20}$  ó  $U > 1 - 10^{-20}$  entonces volver a 1.
3. Si  $U < 0.5$  entonces hacer  $X = g(1-U)$  en caso contrario hacer  $X = -g(U)$ .
4. Devolver  $X$ .

En manuales de funciones matemáticas, como Abramowitz y Stegun (1964), se tienen aproximaciones de la función cuantil de las principales distribuciones (por ejemplo en la página 993 las correspondientes a la normal estándar).

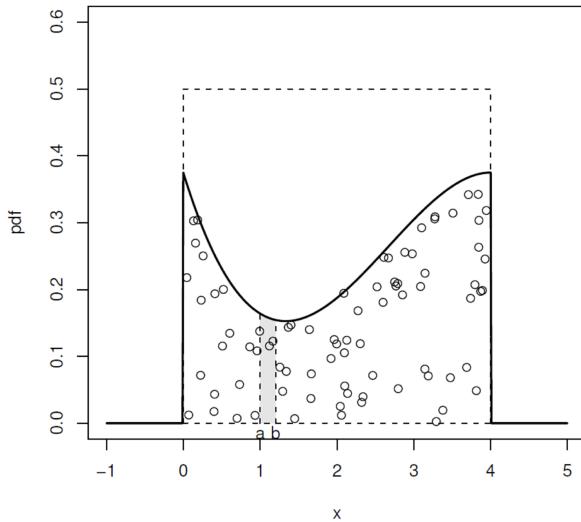
## 5.2 Método de aceptación rechazo

Se trata de un método universal alternativo al de inversión para el caso de que no se pueda emplear la función cuantil, pero se dispone de una expresión (preferiblemente sencilla) para la función de densidad  $f(x)$ .

Si  $f$  es la densidad objetivo, la idea es simular una variable aleatoria bidimensional  $(X, Y)$  con distribución uniforme en el hipógrafo de  $f$  (el conjunto de puntos del plano comprendidos entre el eje  $OX$  y  $f$ ):

$$A_f = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq y \leq f(x)\}.$$

De esta forma la primera componente tendrá la distribución deseada:



$$P(a < X < b) = \frac{\text{Área de } \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : a < x < b; 0 \leq y \leq f(x)\}}{\text{Área de } A_f} = \int_a^b f(x) dx$$

El resultado anterior es también válido para una cuasi-densidad  $f^*$  (no depende de la constante normalizadora). El resultado general sería en siguiente:

- Si  $X$  es una variable aleatoria con función de densidad  $f$  y  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$  entonces

$$(X, c \cdot U \cdot f(X)) \sim \mathcal{U}(A_{cf})$$

siendo  $A_{cf} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq y \leq cf(x)\}$ .

- Recíprocamente si  $(X, Y) \sim \mathcal{U}(A_{cf}) \Rightarrow X \sim f$ .

Para generar valores de una variable aleatoria bidimensional con distribución uniforme en  $A_f$  (o en  $A_{f^*}$ ), se emplea el resultado anterior para generar valores en  $A_{cg} \supset A_f$ , siendo  $g$  una densidad auxiliar (preferiblemente fácil de simular y similar a  $f$ ). Teniendo en cuenta además que:

- Si  $(X, Y) \sim \mathcal{U}(A)$  y  $B \subset A \Rightarrow (X, Y)|_B \sim \mathcal{U}(B)$

Por tanto, si  $(T, Y)$  sigue una distribución uniforme en  $A_{cg}$ , aceptando los valores de  $(T, Y)$  que pertenezcan a  $A_f$  (o a  $A_{f^*}$ ) se obtendrán generaciones con distribución uniforme sobre  $A_f$  (o  $A_{f^*}$ ) y la densidad de la primera componente  $T$  será  $f$ .

### 5.2.1 Algoritmo

Supongamos que  $f$  es la densidad objetivo y  $g$  es una densidad auxiliar (fácil de simular y similar a  $f$ ), de forma que existe una constante  $c > 0$  tal que:

$$f(x) \leq c \cdot g(x), \forall x \in \mathbb{R}.$$

Algoritmo (Von Neuman, 1951):

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Generar  $T \sim g$ .
3. Si  $c \cdot U \cdot g(T) \leq f(T)$  devolver  $X = T$ ,  
en caso contrario volver al paso 1.

### 5.2.2 Densidades acotadas en un intervalo cerrado

Sea  $f$  una función de densidad cualquiera con soporte en un intervalo cerrado  $[a, b]$  (es decir,  $\{x/f(x) \neq 0\} = [a, b]$ ) de tal forma que existe una constante  $M > 0$  tal que  $f(x) \leq M \forall x$  (es decir,  $f$  es acotada superiormente). En este caso puede tomarse como densidad auxiliar  $g$ , la de una  $\mathcal{U}(a, b)$ . En efecto, tomando  $c = M(b - a)$  y teniendo en cuenta que

$$g(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{si } x \in [a, b] \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

se tiene que  $f(x) \leq M = \frac{c}{b-a} = c \cdot g(x), \forall x \in [a, b]$ . Así pues, el algoritmo quedaría como sigue:

1. Generar  $U, V \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Hacer  $T = a + (b - a)V$ .
3. Si  $M \cdot U \leq f(T)$  devolver  $X = T$ ,  
en caso contrario volver al paso 1.

**Nota:** no confundir  $M$  con  $c = M(b - a)$ .

#### Ejercicio 5.2.

Desarrollar el código necesario para generar, por el método de aceptación-rechazo, una muestra de  $n$  observaciones de una distribución normal estándar:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}, x \in \mathbb{R},$$

empleando como distribución auxiliar una doble exponencial con  $\lambda = 1$  (más adelante veremos que esta es la elección óptima para el parámetro de la densidad auxiliar) y que la cota optima es:

$$c_{\text{opt}} = \sqrt{\frac{2e}{\pi}} \simeq 1.3155.$$

Para establecer la condición de aceptación o rechazo se puede tener en cuenta que:

$$c \cdot U \cdot g(T) = \sqrt{\frac{2e}{\pi}} U \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp\left(\frac{T^2}{2} - |T|\right) = U \cdot \exp\left(\frac{T^2}{2} - |T| + \frac{1}{2}\right),$$

aunque en general puede ser recomendable emplear  $c \cdot U \cdot g(T) \leq f(T)$ .

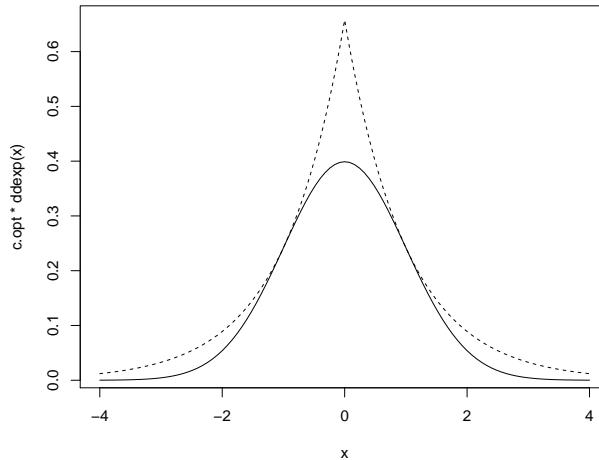
```
densidad objetivo: dnorm
densidad auxiliar: ddexp

EJECUTAR CÓDIGO DEL APARTADO A DEL EJERCICIO 1
c.opt <- sqrt(2*exp(1)/pi)
lambda.opt <- 1
ngen <- 0

rnormAR <- function() {
 # Simulación por aceptación-rechazo
 # Normal estandar a partir de doble exponencial
 while (TRUE) {
 U <- runif(1)
 X <- rdexp(1) # lambda = 1
 ngen <- ngen+1 # Comentar esta línea para uso normal
 # if (U*exp((X^2+1)*0.5-abs(X)) <= 1) return(X)
 if (c.opt * U * ddexp(X, lambda.opt) <= dnorm(X)) return(X)
 }
}

rnormARN <- function(n=1000) {
 # Simulación n valores N(0,1)
 x <- numeric(n)
 for(i in 1:n) x[i] <- rnormAR()
 return(x)
}

Grafico
curve(c.opt * ddexp(x), xlim = c(-4, 4), lty = 2)
curve(dnorm(x), add = TRUE)
```



- a) Generar una muestra de  $10^4$  observaciones empleando este algoritmo. Obtener el tiempo de CPU y calcular el número medio de generaciones de la distribución auxiliar.

```
set.seed(54321)
nsim <- 10^4

ngen <- 0
system.time(x <- rnormARn(nsim))

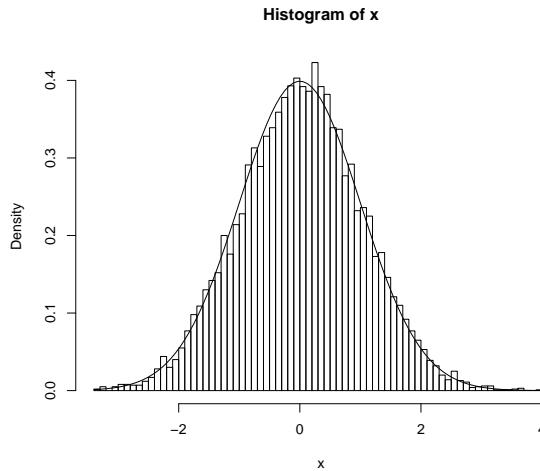
user system elapsed
0.09 0.00 0.09

Nº generaciones
{
 cat("\nNº de generaciones = ", ngen)
 cat("\nNº medio de generaciones = ", ngen/nsim)
 cat("\nProporción de rechazos = ", 1-nsim/ngen, "\n")
}

Nº de generaciones = 13163
Nº medio de generaciones = 1.3163
Proporción de rechazos = 0.2402948
```

- b) Representar el histograma y compararlo con la densidad teórica.

```
hist(x, breaks="FD", freq=FALSE)
curve(dnorm(x), add=TRUE)
```



### 5.2.3 Eficiencia del algoritmo

Como medida de la eficiencia del algoritmo de aceptación-rechazo podríamos considerar el número de iteraciones del algoritmo, es decir, el número de generaciones de la densidad auxiliar y de comparaciones para aceptar un valor de la densidad objetivo. Este número  $N$  es aleatorio y sigue una distribución geométrica (número de pruebas necesarias hasta obtener el primer éxito) con parámetro  $p$  (probabilidad de aceptación en el paso 3):

$$p = \frac{\text{area}(A_f)}{\text{area}(A_{cg})} = \frac{1}{c}.$$

Por tanto:

$$E(N) = \frac{1}{p} = c$$

es el número medio de iteraciones del algoritmo (el número medio de pares de variables  $(T, U)$  que se necesitan generar, y de comparaciones, para obtener una simulación de la densidad objetivo).

Es obvio, por tanto, que cuanto más cercano a 1 sea el valor de  $c$  más eficiente será el algoritmo (el caso de  $c = 1$  se correspondería con  $g = f$  y no tendría sentido emplear este algoritmo). El principal problema con este método es encontrar una densidad auxiliar  $g$  de forma que:

$$c_{\text{opt}} = \max_{\{x: g(x) > 0\}} \frac{f(x)}{g(x)}.$$

sea próximo a 1. Una solución intermedia consiste en seleccionar una familia paramétrica de densidades  $\{g_\theta : \theta \in \Theta\}$  entre las que haya alguna que se parezca

bastante a  $f$ , encontrar el valor de  $c$  óptimo para cada densidad de esa familia:

$$c_\theta = \max_x \frac{f(x)}{g_\theta(x)}$$

y, finalmente, elegir el mejor valor  $\theta_0$  del parámetro, en el sentido de ofrecer el menor posible  $c_\theta$ :

$$c_{\theta_0} = \min_{\theta \in \Theta} \max_x \frac{f(x)}{g_\theta(x)}.$$

### Ejercicio 5.3.

Continuando con el ejercicio anterior del método de aceptación-rechazo para generar observaciones de una distribución normal estándar, empleando como distribución auxiliar una doble exponencial:

- c) Aproximar la cota óptima numéricamente.

```
Obtención de un valor c óptimo aproximado
optimize(f=function(x){dnorm(x)/ddexp(x)}, maximum=TRUE, interval=c(-1,1))

$maximum
[1] -0.999959
##
$objective
[1] 1.315489

NOTA: Cuidado con los límites
optimize(f=function(x){dnorm(x)/ddexp(x)}, maximum=TRUE, interval=c(0,2))

Valor óptimo real
sqrt(2*exp(1)/pi)
c.opt
```

## [1] 1.315489

- d) Aproximar el parámetro óptimo de la densidad auxiliar numéricamente (normalmente comenzaríamos por este paso).

```
Obtención de valores c y lambda óptimos aproximados
fopt <- function(lambda) {
 # Obtiene c fijado lambda
 optimize(f = function(x){dnorm(x)/ddexp(x,lambda)},
 maximum=TRUE, interval=c(0,2))$objective
}

Encontrar lambda que minimiza
res <- optimize(f=function(x){fopt(x)}, interval=c(0.5,2))
lambda.opt2 <- res$minimum
c.opt2 <- res$objective
```

### 5.2.4 Ejemplo: Inferencia Bayesiana

El algoritmo de Aceptación-Rechazo se emplea habitualmente en Inferencia Bayesiana:

- $f(x|\theta)$  densidad muestral.
- $\pi(\theta)$  densidad a priori.
- $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)'$  muestra observada.
- La distribución a posteriori de  $\theta$  es:

$$\pi(\theta|\mathbf{x}) = \frac{L(\mathbf{x}|\theta)\pi(\theta)}{\int L(\mathbf{x}|\theta)\pi(\theta)d\theta}$$

siendo  $L(\mathbf{x}|\theta)$  la función de verosimilitud ( $L(\mathbf{x}|\theta) = \prod_{i=1}^n f(x_i|\theta)$  suponiendo i.i.d.). Es decir:

$$\pi(\theta|\mathbf{x}) \propto L(\mathbf{x}|\theta)\pi(\theta).$$

Para simular valores de la densidad a posteriori  $\pi(\theta|\mathbf{x})$  a partir de la densidad a priori  $\pi(\theta)$

- $\pi(\theta|\mathbf{x})/\pi(\theta) \propto L(\mathbf{x}|\theta)$
- $L(\mathbf{x}|\theta) \leq c' = L(\mathbf{x}|\hat{\theta})$  siendo  $\hat{\theta}$  el estimador MV de  $\theta$ .

Algoritmo:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Generar  $\tilde{\theta} \sim \pi(\theta)$ .
3. Si  $L(\mathbf{x}|\hat{\theta}) \cdot U \leq L(\mathbf{x}|\tilde{\theta})$  devolver  $\tilde{\theta}$ ,  
en caso contrario volver al paso 1.

#### Ejercicio 5.4.

Para la estimación Bayes de la media de una normal se suele utilizar como distribución a priori una Cauchy.

- a) Generar una muestra i.i.d.  $X_i \sim N(\theta_0, 1)$  de tamaño  $n = 10$  con  $\theta_0 = 1$ . Utilizar una  $Cauchy(0, 1)$  (`rcauchy`) como distribución a priori y como densidad auxiliar para simular por aceptación-rechazo una muestra de la densidad a posteriori (emplear `dnorm` para construir la verosimilitud). Obtener el intervalo de probabilidad al 95%.

```
mu0 <- 1
n <- 10
nsim <- 10^3
set.seed(54321)
```

```

x <- rnorm(n, mean = mu0)

Función de verosimilitud
lik <- function(mu){prod(dnorm(x, mean = mu))}

Cota óptima
Estimación por máxima verosimilitud
emv <- optimize(f = lik, int = range(x), maximum = TRUE)
emv

$maximum
[1] 0.7353805
##
$objective
[1] 3.303574e-08
c <- emv$objective

```

En este caso concreto, ya sabríamos que el estimador máximo verosímil es la media muestral:

```

mean(x)

[1] 0.7353958

y por tanto:
c <- lik(mean(x))
c

[1] 3.303574e-08

```

Finalmente podríamos emplear el siguiente código para generar simulaciones de la distribución a posteriori mediante aceptación-rechazo a partir de la distribución de Cauchy:

```

ngen <- nsim
Y <- rcauchy(nsim)
ind <- (c*runif(nsim) > sapply(Y, lik)) # TRUE si no verifica condición
Volver a generar si no verifica condición
while (sum(ind)>0){
 le <- sum(ind)
 ngen <- ngen + le
 Y[ind] <- rcauchy(le)
 ind[ind] <- (c*runif(le) > sapply(Y[ind], lik)) # TRUE si no verifica condición
}

{ # Número generaciones
 cat("Número de generaciones = ", ngen)
}

```

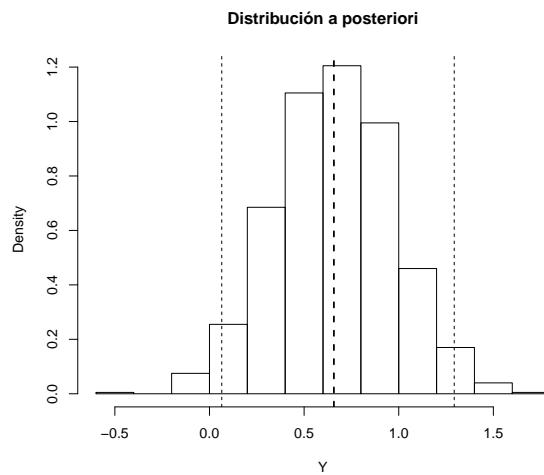
```

cat("\nNúmero medio de generaciones = ", ngen/nsim)
cat("\nProporción de rechazos = ", 1-nsim/ngen, "\n")
}

Número de generaciones = 5898
Número medio de generaciones = 5.898
Proporción de rechazos = 0.830451
Intervalo de probabilidad al 95% (IC Bayes)
q <- quantile(Y, c(0.025, 0.975))

Representar estimador e IC Bayes
hist(Y, freq=FALSE, main="Distribución a posteriori")
abline(v = mean(x), lty = 3) # Estimación frecuentista
abline(v = mean(Y), lty = 2, lwd = 2) # Estimación Bayesiana
abline(v = q, lty = 2)

```



- b) Repetir el apartado anterior con  $n = 100$ .

### 5.3 Modificaciones del método de aceptación rechazo

En el tiempo de computación influye:

- La proporción de aceptación (debería ser grande).
- La dificultad de simular con la densidad auxiliar.
- El tiempo necesario para hacer la comparación en el paso 4.

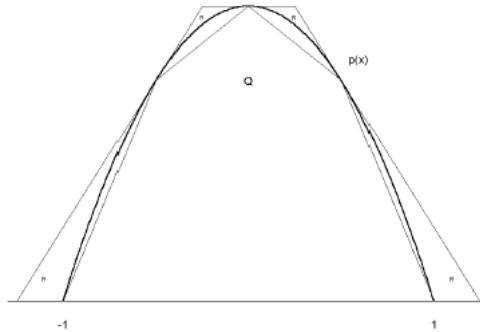
En ciertos casos el tiempo de computación necesario para evaluar  $f(x)$  puede ser alto.

Para evitar evaluaciones de la densidad se puede emplear una función “squeeze” (Marsaglia, 1977) que aproxime la densidad por abajo:

$$s(x) \leq f(x).$$

Algoritmo:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$  y  $T \sim g$ .
2. Si  $c \cdot U \cdot g(T) \leq s(T)$  devolver  $X = T$ ,  
en caso contrario
  - 2.a. si  $c \cdot U \cdot g(T) \leq f(T)$  devolver  $X = T$ ,
  - 2.b. en caso contrario volver al paso 1.



Cuanto mayor sea el área bajo  $s(x)$  (más próxima a 1) más efectivo será el algoritmo.

Se han desarrollado métodos generales para la construcción de las funciones  $g$  y  $s$  de forma automática (cada vez que se evalúa la densidad se mejoran las aproximaciones). Estos métodos se basan principalmente en que una transformación de la densidad objetivo es cóncava o convexa.

### 5.3.1 Muestreo por rechazo adaptativo (ARS)

Supongamos que  $f$  es una cuasi-densidad log-cóncava (i.e.  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \log f(x) < 0, \forall x$ ).

Sea  $S_n = \{x_i : i = 0, \dots, n+1\}$  con  $f(x_i)$  conocidos.

Denotamos por  $L_{i,i+1}(x)$  la recta pasando por  $(x_i, \log f(x_i))$  y  $(x_{i+1}, \log f(x_{i+1}))$

- $L_{i,i+1}(x) \leq \log f(x)$  en el intervalo  $I_i = (x_i, x_{i+1}]$
- $L_{i,i+1}(x) \geq \log f(x)$  fuera de  $I_i$

En el intervalo  $I_i$  se definen las envolventes de  $\log f(x)$ :

- $\underline{\phi}_n(x) = L_{i,i+1}(x)$
- $\bar{\phi}_n(x) = \min\{L_{i-1,i}(x), L_{i+1,i+2}(x)\}$

Las envolventes de  $f(x)$  en  $I_i$  serán:

- $s_n(x) = \exp(\underline{\phi}_n(x))$
- $G_n(x) = \exp(\bar{\phi}_n(x))$

Tenemos entonces que:

$$s_n(x) \leq f(x) \leq G_n(x) = c \cdot g_n(x)$$

donde  $g_n(x)$  es una mixtura discreta de distribuciones tipo exponencial truncadas (las tasas pueden ser negativas), que se puede simular fácilmente mediante el método de inversión.

Algoritmo (Gilks, 1992):

1. Inicializar  $n$  y  $s_n$ .
2. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$  y  $T \sim g_n$ .
3. Si  $U \cdot G_n(T) \leq s_n(T)$  devolver  $X = T$ ,  
en caso contrario,  
3.a Si  $U \cdot G_n(T) \leq f(T)$  devolver  $X = T$ .  
3.b Hacer  $n = n + 1$ , añadir  $T$  a  $S_n$  y actualizar  $s_n$  y  $G_n$ .
4. Volver al paso 2.

Gilks y Wild (1992) propusieron un método similar pero empleando tangentes para construir la cota superior.

La mayoría de las densidades de la familia de distribuciones exponencial son log-cónicas. Hörmann (1995) extendió esta aproximación al caso de densidades  $T_c$ -cónicas:

$$T_c(x) = \text{signo}(c)x^c T_0(x) = \log(x).$$

A parte de la transformación logarítmica, la transformación  $T_{-1/2}(x) = -1/\sqrt{x}$  es habitualmente la más empleada.

### 5.3.2 Método del cociente de uniformes

Se puede ver como una modificación del método de aceptación rechazo, de especial interés cuando el soporte no es acotado.

Si  $(U, V)$  se distribuye uniformemente sobre:

$$C_h = \left\{ (u, v) \in \mathbb{R}^2 : 0 < u \leq \sqrt{h(v/u)} \right\},$$

siendo  $h$  una función no negativa integrable (cuasi-densidad), entonces  $X = V/U$  tiene función de densidad proporcional a  $h$  (Kinderman y Monahan, 1977). Además  $C_h$  tiene área finita.

De modo análogo al método de aceptación-rechazo, hay modificaciones para acelerar los cálculos y automatizar el proceso, construyendo regiones mediante polígonos:

$$C_i \subset C_h \subset C_s.$$

## 5.4 Método de composición

En ocasiones la densidad de interés se puede expresar como una mixtura discreta de densidades:

$$f(x) = \sum_{j=1}^k p_j f_j(x)$$

con  $\sum_{j=1}^k p_j = 1$ ,  $p_j \geq 0$  y  $f_j$  densidades (sería también válido para funciones de distribución o variables aleatorias, incluyendo el caso discreto).

Algoritmo:

1. Generar  $J$  con distribución  $P(J = j) = p_j$ .
2. Generar  $X \sim f_J$ .

**Ejemplo 5.2** (Distribución doble exponencial).

A partir de la densidad de la distribución doble exponencial:

$$f(x) = \frac{\lambda}{2} e^{-\lambda|x|}, \forall x \in \mathbb{R},$$

se deduce que:

$$f(x) = \frac{1}{2} f_1(x) + \frac{1}{2} f_2(x)$$

siendo:

$$f_1(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x} & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad f_2(x) = \begin{cases} \lambda e^{\lambda x} & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

Algoritmo:

1. Generar  $U, V \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .

2. Si  $U < 0.5$  devolver  $X = -\ln(1 - V)$ .
3. En caso contrario devolver  $X = \ln V$ .

Observaciones:

- En ocasiones se hace un reciclado de los números aleatorios (solo se genera una uniforme, e.g.  $V = 2(U - 0.5)$  si  $U \in (0.5, 1)$ ).
- En ciertas ocasiones por comodidad, para simular una muestra de tamaño  $n$ , se simulan muestras de tamaño  $np_i$  con densidad  $f_i$  y se combinan aleatoriamente.

Otro ejemplo de una mixtura discreta es el estimador tipo núcleo de la densidad (ver e.g. la ayuda de la función `density()` de R o la Sección 4.3 del libro Técnicas de Remuestreo). Simular a partir de una estimación de este tipo es lo que se conoce como *bootstrap suavizado*.

En el caso de una mixtura continua tendríamos:

$$f(x) = \int g(x|y)h(y)dy$$

Algoritmo:

1. Generar  $Y \sim h$ .
2. Generar  $X \sim g(\cdot|Y)$ .

Este algoritmo es muy empleado en Inferencia Bayesiana y en la simulación de algunas variables discretas (como la Binomial Negativa, denominada también distribución Gamma–Poisson, o la distribución Beta-Binomial), ya que el resultado sería válido cambiando las funciones de densidad  $f$  y  $g$  por funciones de masa de probabilidad.

## 5.5 Métodos específicos para la generación de algunas distribuciones notables

Ver ejemplos en el libro de Ricardo (cuidado con la notación de la distribución Gamma, no es la empleada en R y en el presente libro) y ayuda de las funciones implementadas en R:

- Método de Box-Müller (para la generación de normales independientes)
- Algoritmos de Jöhnk y Cheng para la generación de la distribución Beta.

### 5.5.1 Método de Box-Müller

Se basa en la siguiente propiedad. Dadas dos variables aleatorias independientes  $E \sim \exp(1)$  y  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ , las variables  $\sqrt{2E} \cos 2\pi U$  y  $\sqrt{2E} \sin 2\pi U$  son  $\mathcal{N}(0, 1)$  independientes.

#### Algoritmo de Box-Müller

1. Generar  $U, V \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Hacer  $W_1 = \sqrt{-2 \ln U}$  y  $W_2 = 2\pi V$ .
3. Devolver  $X_1 = W_1 \cos W_2$ ,  $X_2 = W_1 \sin W_2$ .

Podemos hacer que la función `rnorm()` de R emplee este algoritmo estableciendo el parámetro `normal.kind` a "Box-Muller" en una llamada previa a `set.seed()` o `RNGkind()`.

Este método está relacionado con el de la FFT (transformada de Fourier; e.g. Davies y Harte, 1987) o el *Circular embedding* (Dietrich and Newsam, 1997), para la generación de una normal multidimensional con dependencia. Considerando módulos exponenciales y fases aleatorias generamos normales independientes:

- Cambiando la varianza de  $W_1$  se induce dependencia.
- Cambiando la distribución de  $W_2$  se generan distribuciones distintas de la normal.

# Capítulo 6

## Simulación de variables discretas

Se trata de simular una variable aleatoria discreta  $X$  con función de masa de probabilidad (f.m.p.):

$$\begin{array}{c|cccccc} x_i & | & x_1 & x_2 & \cdots & x_n & \cdots \\ \hline P(X = x_i) & | & p_1 & p_2 & \cdots & p_n & \cdots \end{array}$$

Considerando como partida una  $\mathcal{U}(0, 1)$ , la idea general consiste en asociar a cada posible valor  $x_i$  de  $X$  un subintervalo de  $(0, 1)$  de longitud igual a la correspondiente probabilidad. Por ejemplo, como ya se mostró en capítulos anteriores, es habitual emplear código de la forma:

```
x <- runif(nsim) <- p
```

para simular una distribución  $Bernoulli(p)$ .

Para generar variables discretas con dominio finito en R, si no se dispone de un algoritmo específico más eficiente, es recomendable emplear:

```
sample(valores, nsim, replace = TRUE, prob)
```

Esta función del paquete base implementa eficientemente el método “alias” que describiremos más adelante en la Sección 6.3.

## 6.1 Método de la transformación cuantil

Este método es una adaptación del método de inversión (válido para el caso continuo) a distribuciones discretas. En este caso, la función de distribución es:

$$F(x) = \sum_{x_j \leq x} p_j,$$

y la distribución de la variable aleatoria  $F(X)$  no es uniforme (es una variable aleatoria discreta que toma los valores  $F(x_i)$  con probabilidad  $p_i$ ,  $i = 1, 2, \dots$ ). Sin embargo, se puede generalizar el método de inversión a situaciones en las que  $F$  no es invertible considerando la función cuantil.

Se define la función cuantil o inversa generalizada de una función de distribución  $F$  como:

$$Q(u) = \inf \{x \in \mathbb{R} : F(x) \geq u\}, \quad \forall u \in (0, 1).$$

Si  $F$  es invertible  $Q = F^{-1}$ .

**Teorema 6.1** (de inversión generalizada)

*Si  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ , la variable aleatoria  $Q(U)$  tiene función de distribución  $F$ .*

*Prueba.* Bastaría ver que:

$$Q(u) \leq x \iff u \leq F(x).$$

Como  $F$  es monótona y por la definición de  $Q$ :

$$Q(u) \leq x \Rightarrow u \leq F(Q(u)) \leq F(x).$$

Por otro lado como  $Q$  también es monótona:

$$u \leq F(x) \Rightarrow Q(u) \leq Q(F(x)) \leq x$$

□

A partir de este resultado se deduce el siguiente algoritmo general para simular una distribución de probabilidad discreta.

**Algoritmo 6.1** (de transformación cuantil)    1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .

2. Devolver  $X = Q(U)$ .

El principal problema es el cálculo de  $Q(U)$ . En este caso, suponiendo por comodidad que los valores que toma la variable están ordenados ( $x_1 < x_2 < \dots$ ), la función cuantil será:

$$\begin{aligned} Q(U) &= \inf \left\{ x_j : \sum_{i=1}^j p_i \geq U \right\} \\ &= x_k, \text{ tal que } \sum_{i=1}^{k-1} p_i < U \leq \sum_{i=1}^k p_i \end{aligned}$$

Para encontrar este valor se puede emplear el siguiente algoritmo:

**Algoritmo 6.2** (de transformación cuantil con búsqueda secuencial) 1.

Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .

2. Hacer  $I = 1$  y  $S = p_1$ .
3. Mientras  $U > S$  hacer  $I = I + 1$  y  $S = S + p_I$
4. Devolver  $X = x_I$ .

Este algoritmo no es muy eficiente, especialmente si el número de posibles valores de la variable es grande.

*Nota:* . El algoritmo anterior es válido independientemente de que los valores que tome la variable estén ordenados.

Si la variable toma un número finito de valores, se podría implementar en R de la siguiente forma:

```
rfmp0 <- function(x, prob = 1/length(x), nsim = 1000) {
 # Simulación nsim v.a. discreta a partir de fmp
 # por inversión generalizada (transformación cuantil)
 X <- numeric(nsim)
 U <- runif(nsim)
 for(j in 1:nsim) {
 i <- 1
 Fx <- prob[1]
 while (Fx < U[j]) {
 i <- i + 1
 Fx <- Fx + prob[i]
 }
 X[j] <- x[i]
 }
 return(X)
}
```

Adicionalmente, para disminuir el tiempo de computación, se puede almacenar las probabilidades acumuladas en una tabla. Si también se quiere obtener el número de comparaciones se puede considerar una variable global `ncomp`:

```
ncomp <- 0

rfmp <- function(x, prob = 1/length(x), nsim = 1000) {
 # Simulación nsim v.a. discreta a partir de fmp
 # por inversión generalizada (transformación cuantil)
 # Inicializar FD
 Fx <- cumsum(prob)
 # Simular
 X <- numeric(nsim)
 U <- runif(nsim)
 for(j in 1:nsim) {
```

```

 i <- 1
 while (Fx[i] < U[j]) i <- i + 1
 X[j] <- x[i]
 ncomp <- ncomp + i
}
return(X)
}

```

**Ejercicio 6.1.**

Generar, por el método de la transformación cuantil usando búsqueda secuencial, una muestra de  $nsim = 10^5$  observaciones de una variable  $\mathcal{B}(10, 0.5)$ . Obtener el tiempo de CPU empleado. Aproximar por simulación la función de masa de probabilidad, representarla gráficamente y compararla con la teórica. Calcular también la media muestral (compararla con la teórica  $np$ ) y el número medio de comparaciones para generar cada observación.

Empleamos la rutina anterior para generar las simulaciones:

```

set.seed(54321)
n <- 10
p <- 0.5
nsim <- 10^5

x <- 0:n
fmp <- dbinom(x, n, p)

ncomp <- 0
system.time(rx <- rfmp(x, fmp, nsim))

user system elapsed
0.07 0.00 0.08

```

Aproximación de la media:

```
mean(rx)
```

```
[1] 5.00322
```

El valor teórico es  $n*p = 5$ .

Número medio de comparaciones:

```
ncomp/nsim
```

```
[1] 6.00322
```

*# Se verá más adelante que el valor teórico es sum((1:length(x))\*fmp)*

Análisis de los resultados:

```
res <- table(rx)/nsim
plot(res, ylab = "frecuencia relativa", xlab = "valores")
points(x, fmp, pch = 4) # Comparación teórica
```

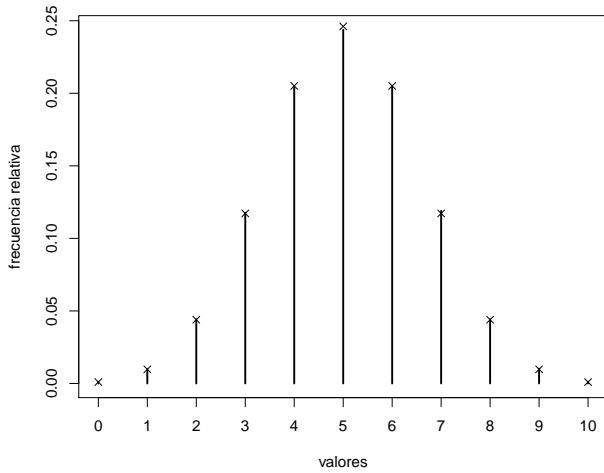


Figura 6.1: Comparación de las frecuencias relativas de los valores generados con las probabilidades teóricas.

```
res <- as.data.frame(res)
names(res) <- c("x", "psim")
res$pteor <- fmp
res

x psim pteor
1 0 0.00107 0.0009765625
2 1 0.00990 0.0097656250
3 2 0.04432 0.0439453125
4 3 0.11778 0.1171875000
5 4 0.20425 0.2050781250
6 5 0.24375 0.2460937500
7 6 0.20454 0.2050781250
8 7 0.11898 0.1171875000
9 8 0.04419 0.0439453125
10 9 0.01023 0.0097656250
11 10 0.00099 0.0009765625

Errores
max(abs(res$psim - res$pteor))
```

```
[1] 0.00234375
max(abs(res$psim - res$pteor) / res$pteor)
```

```
[1] 0.09568
```

*Nota:* . Puede ocurrir que no todos los valores sean generados en la simulación. En el código anterior si `length(x) > length(psim)`, la sentencia `res$pteor <- fmp` gererará un error. Alternativamente se podría emplear por ejemplo:

```
res <- data.frame(x = x, pteor = fmp, psim = 0)
res.sim <- table(rx)/nsim
index <- match(names(res.sim), x)
res$psim[index] <- res.sim
```

### 6.1.1 Eficiencia del algoritmo

Si consideramos la variable aleatoria  $\mathcal{I}$  correspondiente a las etiquetas, su función de masa de probabilidad sería:

$$\begin{array}{c|cccccc} i & 1 & 2 & \cdots & n & \cdots \\ \hline P(\mathcal{I} = i) & p_1 & p_2 & \cdots & p_n & \cdots \end{array}$$

y el número de comparaciones en el paso 3 sería un valor aleatorio de esta variable. Una medida de la eficiencia del algoritmo de la transformación cuantil es el número medio de comparaciones:

$$E(\mathcal{I}) = \sum_i ip_i.$$

Realmente, cuando la variable toma un número finito de valores:  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , no sería necesario hacer la última comprobación  $U > \sum_{i=1}^n p_i = 1$  y se generaría directamente  $x_n$ , por lo que el número medio de comparaciones sería:

$$\sum_{i=1}^{n-1} ip_i + (n-1)p_n.$$

Para disminuir el número esperado de comparaciones podemos reordenar los valores  $x_i$  de forma que las probabilidades correspondientes sean decrecientes. Esto equivale a considerar un etiquetado  $l$  de forma que:

$$p_{l(1)} \geq p_{l(2)} \geq \cdots \geq p_{l(n)} \geq \cdots$$

#### Ejercicio 6.2.

Repetir el ejercicio anterior ordenando previamente las probabilidades en orden decreciente y también empleando la función `sample` de R.

```
tini <- proc.time()

ncomp <- 0
ind <- order(fmp, decreasing=TRUE)
rx <- rfmp(x[ind], fmp[ind], nsim)

tiempo <- proc.time() - tini
tiempo

user system elapsed
0.05 0.01 0.07
Número de comparaciones
ncomp/nsim

[1] 3.08969
sum((1:length(x))*fmp[ind]) # Valor teórico

[1] 3.083984
```

Como ya se comentó, en R se recomienda emplear la función `sample` (implementa eficientemente el método de Alias):

```
system.time(rx <- sample(x, nsim, replace = TRUE, prob = fmp))

user system elapsed
0 0 0
```

## 6.2 Método de la tabla guía

La idea consiste en construir  $m$  subintervalos equiespaciados contenidos en  $[0, 1]$  de la forma

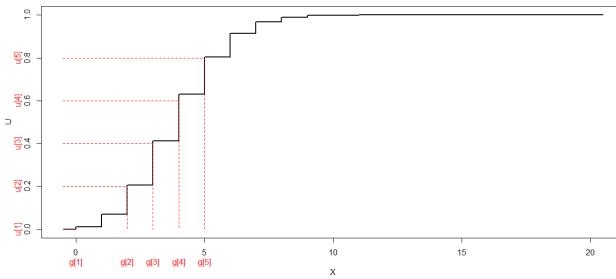
$$I_j = [u_j, u_{j+1}) = \left[ \frac{j-1}{m}, \frac{j}{m} \right) \text{ para } j = 1, 2, \dots, m$$

y utilizarlos como punto de partida para la búsqueda. En una tabla guía se almacenan los índices de los cuantiles correspondientes a los extremos inferiores de los intervalos:

$$g_j = Q_{\mathcal{I}}(u_j) = \inf \left\{ i : F_i \geq u_j = \frac{j-1}{m} \right\}$$

El punto de partida para un valor  $U$  será  $g_{j_0}$  siendo:

$$j_0 = \lfloor mU \rfloor + 1$$



En este caso, puede verse que una cota del número medio de comparaciones es:

$$E(N) \leq 1 + \frac{n}{m}$$

**Algoritmo 6.3** (de simulación mediante una tabla guía)  
*Inicialización:*

1. Hacer  $F_1 = p_1$ .
2. Desde  $i = 2$  hasta  $n$  hacer  $F_i = F_{i-1} + p_i$ .

*Cálculo de la tabla guía:*

1. Hacer  $g_1 = 1$  e  $i = 1$ .
2. Desde  $j = 2$  hasta  $m$  hacer
  - 2.a Mientras  $(j - 1)/m > F_i$  hacer  $i = i + 1$ .
  - 2.b  $g_j = i$

*Simulación mediante tabla guía:*

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Hacer  $j = \lfloor mU \rfloor + 1$ .
3. Hacer  $i = g_j$ .
4. Mientras  $U > F_i$  hacer  $i = i + 1$ .
5. Devolver  $X = x_i$ .

### Ejercicio 6.3.

Diseñar una rutina que permita generar  $nsim$  valores de una distribución discreta usando una tabla guía. Repetir el ejercicio anterior empleando esta rutina con  $m = n - 1$ .

```
rfmp.tabla <- function(x, prob = 1/length(x), m, nsim = 1000) {
 # Simulación v.a. discreta a partir de función de masa de probabilidad
 # por tabla guía de tamaño m
```

```

Inicializar tabla y FD
Fx <- cumsum(prob)
g <- rep(1,m)
i <- 1
for(j in 2:m) {
 while (Fx[i] < (j-1)/m) i <- i+1
 g[j] <- i
}
Generar valores
X <- numeric(nsim)
U <- runif(nsim)
for(j in 1:nsim) {
 i <- g[floor(U[j]*m)+1]
 while (Fx[i] < U[j]) i <- i + 1
 X[j] <- x[i]
}
return(X)
}

system.time(rx <- rfmp.tabla(x, fmp, n-1, nsim))

user system elapsed
0.04 0.00 0.05

```

Análisis de los resultados:

```

res <- table(rx)/nsim
plot(res, ylab = "frecuencia relativa", xlab = "valores")
points(x, fmp, pch = 4) # Comparación teórica

```

## 6.3 Método de Alias

Se basa en representar la distribución de  $X$  como una mixtura (uniforme) de variables dicotómicas (Walker, 1977):

$$Q^{(i)} = \begin{cases} x_i & \text{con prob. } q_i \\ x_{a_i} & \text{con prob. } 1 - q_i \end{cases}$$

La idea para construir estas variables es “tomar prestada” parte de la probabilidad de los valores más probables (ricos) para asignársela a los valores menos probables (pobres), almacenando en  $a_i$  el índice del valor de donde procede. El algoritmo “Robin Hood” de inicialización (Kronmal y Peterson, 1979) es el siguiente:

1. Desde  $i = 1$  hasta  $n$  hacer  $q_i = np_i$ .

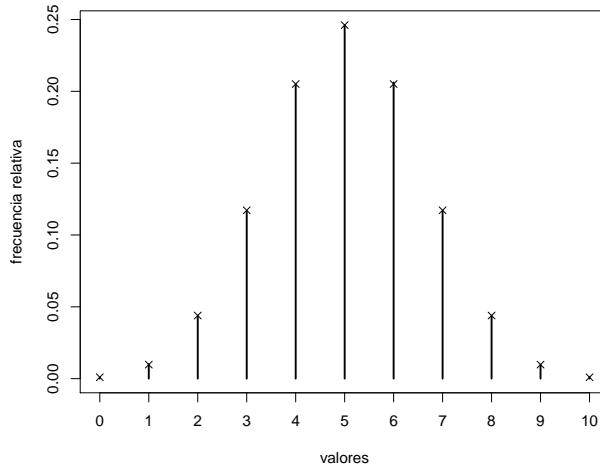


Figura 6.2: Comparación de las frecuencias relativas de los valores generados con las probabilidades teóricas.

2. Establecer  $L = \{l : q_l < 1\}$  y  $H = \{h : q_h \geq 1\}$ .
3. Si  $L$  ó  $H$  vacíos terminar.
4. Seleccionar  $l \in L$  y  $h \in H$ .
5. Hacer  $a_l = h$ .
6. Eliminar  $l$  de  $L$ .
7. Hacer  $q_h = q_h - (1 - q_l)$ .
8. Si  $q_h < 1$  mover  $h$  de  $H$  a  $L$ .
9. Ir al paso 3.

El algoritmo para generar las simulaciones es el estándar del método de composición:

1. Generar  $U, V \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Hacer  $i = \lfloor nU \rfloor + 1$ .
3. Si  $V < q_i$  devolver  $X = x_i$ .
4. En caso contrario devolver  $X = x_{a_i}$ .

Este algoritmo es muy eficiente y es el implementado en la función `sample` de R.

#### Ejercicio 6.4.

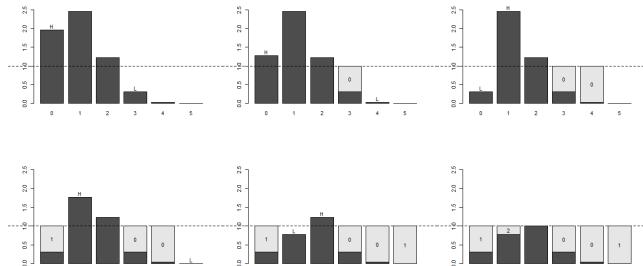


Figura 6.3: Pasos del algoritmo de inicialización del método Alias.

Diseñar una rutina que permita generar  $nsim$  valores de una distribución discreta usando el método de Alias. Repetir el ejercicio anterior empleando esta rutina.

```
rfmp.alias <- function(x, prob = 1/length(x), nsim = 1000) {
 # Inicializar tablas
 a <- numeric(length(x))
 q <- prob*length(x)
 low <- which(q < 1)
 high <- which(!low)
 low <- which(low)
 while (length(high) && length(low)) {
 l <- low[1]
 h <- high[1]
 a[l] <- h
 q[h] <- q[h] - (1 - q[l])
 if (q[h] < 1) {
 high <- high[-1]
 low[1] <- h
 } else low <- low[-1]
 } # while
 # Generar valores
 V <- runif(nsim)
 i <- floor(runif(nsim)*length(x)) + 1
 return(x[ifelse(V < q[i], i, a[i])])
}

system.time(rx <- rfmp.alias(x,fmp,nsim))
```

```
user system elapsed
0.03 0.00 0.04
```

Análisis de los resultados:

```
res <- table(rx)/nsim
plot(res, ylab = "frecuencia relativa", xlab = "valores")
points(x, fmp, pch = 4) # Comparación teórica
```

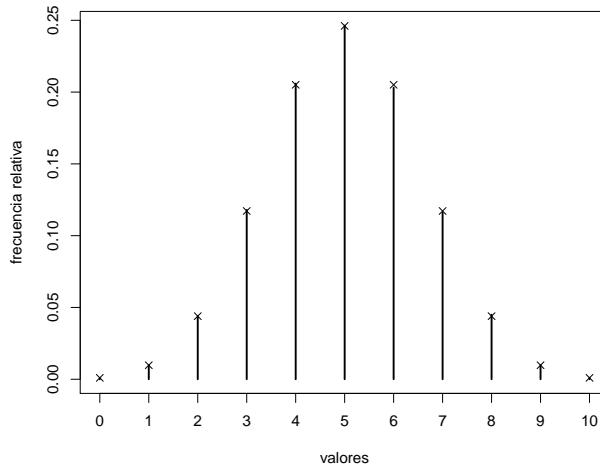


Figura 6.4: Comparación de las frecuencias relativas de los valores generados con las probabilidades teóricas.

## 6.4 Simulación de una variable discreta con dominio infinito

Los métodos anteriores están pensados para variables que toman un número finito de valores. Si la variable discreta tiene dominio infinito no se podrían almacenar las probabilidades acumuladas, aunque en algunos casos podrían calcularse de forma recursiva.

**Ejemplo 6.1** (distribución de Poisson).

Una variable  $X$  con distribución de Poisson de parámetro  $\lambda$ , toma los valores  $x_1 = 0, x_2 = 1, \dots$  con probabilidades:

$$p_j = P(X = x_j) = P(X = j - 1) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^{j-1}}{(j-1)!}, \quad j = 1, 2, \dots$$

En este caso, como:

$$P(X = j) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^j}{j!} = \frac{\lambda}{j} \frac{e^{-\lambda} \lambda^{j-1}}{(j-1)!} = \frac{\lambda}{j} P(X = j - 1),$$

el algoritmo de inversión con búsqueda secuencial sería:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Hacer  $I = 0$ ,  $p = e^{-\lambda}$  y  $S = p$ .
3. Mientras  $U > S$  hacer  $I = I + 1$ ,  $p = \frac{\lambda}{I} p$  y  $S = S + p$ .
4. Devolver  $X = I$ .

Hay modificaciones de los algoritmos anteriores, e.g. incluyendo una búsqueda secuencial en la cola de la distribución, para estos casos.

Como alternativa, siempre se puede pensar en truncar la distribución, eliminando los valores muy poco probables (teniendo en cuenta el número de generaciones que se pretenden realizar), de esta forma la distribución de las simulaciones sería aproximada.

## 6.5 Cálculo directo de la función cuantil

En ocasiones el método de la transformación cuantil puede acelerarse computacionalmente porque, mediante cálculos directos, es posible encontrar el valor de la función cuantil en cualquier  $U$ , evitando el bucle de búsqueda. Normalmente se realiza mediante truncamiento de una distribución continua.

**Ejemplo 6.2** (distribución uniforme discreta).

La función de masa de probabilidad de una distribución uniforme discreta en  $\{1, 2, \dots, n\}$  viene dada por

$$p_j = \frac{1}{n}, \text{ para } j = 1, 2, \dots, n.$$

Pueden generarse valores de esta distribución de forma muy eficiente truncando la distribución uniforme:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Devolver  $X = \lfloor nU \rfloor + 1$ .

**Ejemplo 6.3** (distribución geométrica).

La función de masa de probabilidad de una distribución geométrica es:

$$P(X = j) = P(I = j + 1) = p(1 - p)^j, \quad j = 0, 1, \dots$$

Si se considera como variable aleatoria continua auxiliar una exponencial, con función de distribución  $G(x) = 1 - e^{-\lambda x}$  si  $x \geq 0$ , se tiene que:

$$\begin{aligned} G(i) - G(i-1) &= 1 - e^{-\lambda i} - (1 - e^{-\lambda(i-1)}) = e^{-\lambda(i-1)} - e^{-\lambda i} \\ &= e^{-\lambda(i-1)} (1 - e^{-\lambda}) = (1 - e^{-\lambda}) (e^{-\lambda})^{i-1} \\ &= p (1 - p)^{i-1}, \end{aligned}$$

tomando  $p = 1 - e^{-\lambda}$ . De donde se obtendría el algoritmo:

0. Hacer  $\lambda = -\ln(1-p)$ .
1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0,1)$ .
2. Hacer  $T = -\frac{\ln U}{\lambda}$ .
3. Devolver  $X = \lfloor T \rfloor$ .

## 6.6 Otros métodos

- Aceptación-Rechazo: Este método también sería directamente aplicable al caso discreto. En principio habría que considerar una variable auxiliar discreta con el mismo soporte, pero también hay modificaciones para variables auxiliares continuas.
- Método de composición: este es otro método directamente aplicable y que se emplea en el método de Alias
- Hay otros métodos que tratan de reducir el número medio de comparaciones de la búsqueda secuencial, por ejemplo los árboles (binarios) de Huffman (e.g. Cao, 2002, Sección 4.2).

### Ejercicio 6.5.

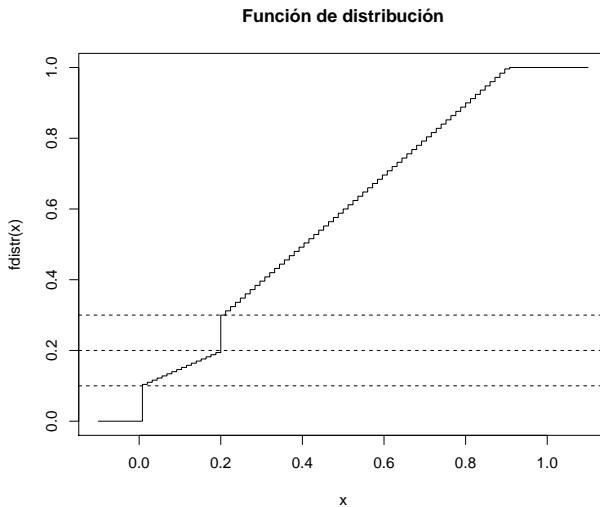
Considera la variable aleatoria con función de distribución dada por:

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ \frac{x}{2} + \frac{1}{10} & \text{si } x \in [0, \frac{1}{5}) \\ x + \frac{1}{10} & \text{si } x \in [\frac{1}{5}, \frac{9}{10}] \\ 1 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Función de distribución:

```
fdistr <- function(x) {
 ifelse(x < 0, 0,
 ifelse(x < 1/5, x/2 + 1/10,
 ifelse(x <= 9/10, x + 1/10, 1))
)}
```

```
Empleando ifelse se complica un poco más pero el resultado es una función vectorial.
curve(fdistr(x), from = -0.1, to = 1.1, type = 's',
 main = 'Función de distribución')
Discontinuidades en 0 y 1/5
abline(h = c(1/10, 2/10, 3/10), lty = 2)
```



**Nota:** Esta variable toma los valores 0 y  $1/5$  con probabilidad  $1/10$ .

- a) Diseña un algoritmo basándose en el método de inversión generalizado para generar observaciones de esta variable.

El algoritmo general es siempre el mismo. Empleando la función cuantil:

$$Q(u) = \inf \{x \in \mathbb{R} : F(x) \geq u\},$$

el algoritmo sería:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$
2. Devolver  $X = Q(U)$

En este caso concreto:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$
2. Si  $U < \frac{1}{10}$  devolver  $X = 0$
3. Si  $U < \frac{2}{10}$  devolver  $X = 2(U - \frac{1}{10})$
4. Si  $U < \frac{3}{10}$  devolver  $X = \frac{2}{10}$
5. En caso contrario devolver  $X = U - \frac{1}{10}$

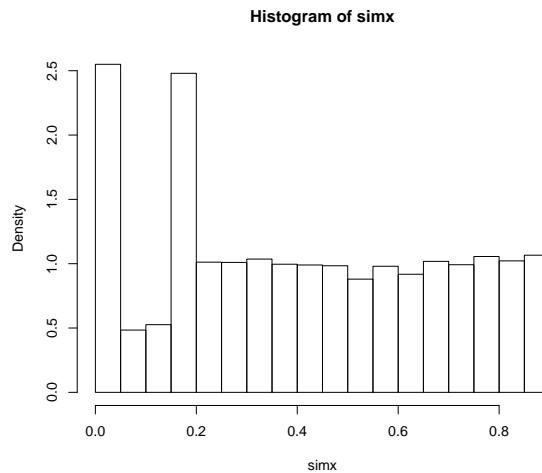
- b) Implementa el algoritmo en una función que permita generar  $nsim$  valores de la variable.

```
Función cuantil:
fquant <- function(u) {
 ifelse(u < 1/10, 0,
 ifelse(u < 2/10, 2*(u - 1/10),
 ifelse(u < 3/10, 1/5, u - 1/10))
 }
Función para generar nsim valores:
rx <- function(nsim) fquant(runif(nsim))
```

Ejemplo:

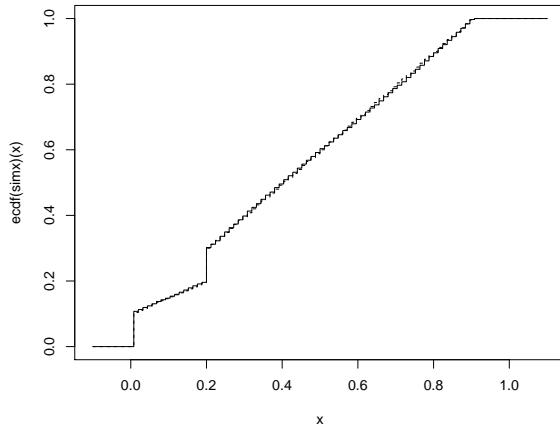
```
set.seed(1)
nsim <- 10^4
system.time(simx <- rx(nsim))
```

```
user system elapsed
0 0 0
hist(simx, breaks = "FD", freq = FALSE)
```



En este caso como no es una variable absolutamente continua mejor emplear la función de distribución para compararla con la teórica:

```
curve(ecdf(simx)(x), from = -0.1, to = 1.1, type = "s")
curve(fdistr(x), type = "s", lty = 2, add = TRUE)
```



**Ejercicio 6.6.** (propuesto)

Se pretende simular  $nsim = 10^4$  observaciones de una variable hipergeométrica (`dhyper(x, m, n, k)`) de parámetros  $m =$  el nº de grupo multiplicado por 10,  $n = 100 - m$  y  $k = 20$ .

- a) Comprobar que el rango de posibles valores de esta variable es  $\max(0, k-n) : \min(m, k)$ . Generar los valores empleando el método de la transformación cuantil usando búsqueda secuencial. Obtener el tiempo de CPU empleado. Aproximar por simulación la función de masa de probabilidad, representarla gráficamente y compararla con la teórica. Calcular también la media muestral (compararla con la teórica  $km/(m+n)$ ) y el número medio de comparaciones para generar cada observación.
- b) Repetir el apartado anterior ordenando previamente las probabilidades en orden decreciente y también: empleando la función `sample` de R, mediante una tabla guía (con  $k-1$  subintervalos) y usando el método de Alias.

## 6.7 Métodos específicos para generación de distribuciones notables

Ver ejemplos del libro de Ricardo y de las funciones implementadas en R.



# Capítulo 7

## Simulación de distribuciones multivariantes

La simulación de vectores aleatorios  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_d)$  que sigan cierta distribución dada no es tarea siempre sencilla. En general, no resulta una extensión inmediata del caso unidimensional, aunque muchos de los algoritmos descritos en los temas anteriores (como el de aceptación-rechazo o el de composición) son válidos para distribuciones multivariantes. En este caso sin embargo, puede ser mucho más difícil cumplir los requerimientos (e.g. encontrar una densidad auxiliar adecuada) y los algoritmos obtenidos pueden ser computacionalmente poco eficientes (especialmente si el número de dimensiones es grande).

En las primeras secciones de este capítulo supondremos que se pretende simular una variable aleatoria multidimensional continua  $\mathbf{X}$  con función de densidad conjunta  $f(x_1, x_2, \dots, x_d)$  (aunque muchos resultados serán válidos para variables discretas multidimensionales, simplemente cambiando funciones de densidad por las correspondientes de masa de probabilidad). En la Sección 7.7 se tratará brevemente la simulación de vectores aleatorios discretos y de tablas de contingencia, centrándose en el caso bidimensional.

### 7.1 Simulación de componentes independientes

Si las componentes son independientes y  $f_i$  son las correspondientes densidades marginales, bastará con generar  $X_i \sim f_i$ . Las dificultades aparecerán cuando se quiera simular componentes con una determinada estructura de dependencia.

**Ejemplo 7.1** (simulación de normales independientes).

## 106CAPÍTULO 7. SIMULACIÓN DE DISTRIBUCIONES MULTIVARIANTES

Si  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_d)^t$  es un vector (de medias) y  $\Sigma$  es una matriz  $d \times d$  definida positiva (de varianzas-covarianzas), el vector aleatorio  $\mathbf{X}$  sigue una distribución normal multivariante con esos parámetros,  $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ , si su función de densidad es de la forma:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^t \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right),$$

donde  $|\Sigma|$  es el determinante de  $\Sigma$ .

Si la matriz de covarianzas es diagonal  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_d^2)$ , entonces las componentes  $X_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i^2)$  son independientes y podemos simular el vector aleatorio de forma trivial, por ejemplo mediante el siguiente algoritmo:

**Algoritmo 7.1** (de simulación de normales independientes)    1. *Simular*

$Z_1, Z_2, \dots, Z_d \sim \mathcal{N}(0, 1)$  *independientes.*

2. *Para*  $i = 1, 2, \dots, d$  *hacer*  $X_i = \mu_i + \sigma_i Z_i$ .

Las funciones implementadas en el paquete base de R permiten simular fácilmente en el caso independiente ya que admiten vectores como parámetros. Por ejemplo en el caso bidimensional con  $X_1 \sim \mathcal{N}(0, 1)$  y  $X_2 \sim \mathcal{N}(-1, 0.5^2)$ :

```
f1 <- function(x) dnorm(x)
f2 <- function(x) dnorm(x, -1, 0.5)
curve(f1, -3, 3, ylim = c(0, f2(-1)), ylab = "fdp")
curve(f2, add = TRUE, lty = 2)
```

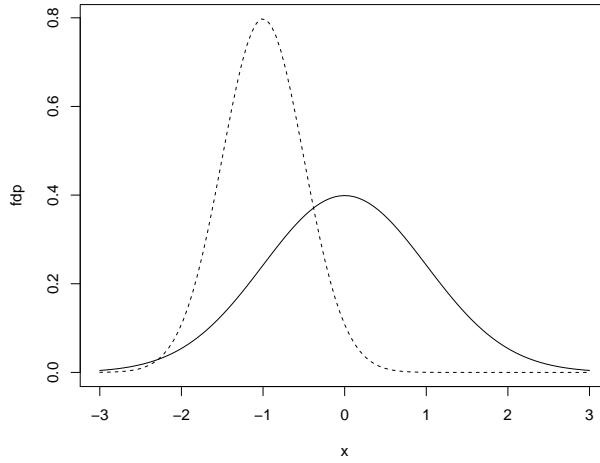


Figura 7.1: Densidades marginales de las componentes del Ejemplo 7.1.

Para simular una generación bastaría con:

```

set.seed(1)
rnorm(2, c(0, -1), c(1, 0.5))

[1] -0.6264538 -0.9081783

y para simular nsim:

set.seed(1)
nsim <- 5
rx <- matrix(rnorm(2*nsim, c(0, -1), c(1, 0.5)), nrow = nsim, byrow = TRUE)
colnames(rx) <- paste0("X", 1:ncol(rx))
rx

X1 X2
[1,] -0.6264538 -0.9081783
[2,] -0.8356286 -0.2023596
[3,] 0.3295078 -1.4102342
[4,] 0.4874291 -0.6308376
[5,] 0.5757814 -1.1526942

```

## 7.2 El método de aceptación/rechazo

El algoritmo de aceptación-rechazo es el mismo que el del caso univariante descrito en la Sección 5.2, la única diferencia es que las densidades son multidimensionales. Supongamos que la densidad objetivo  $f$  y la densidad auxiliar  $g$  verifican:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_d) \leq c \cdot g(x_1, x_2, \dots, x_d), \forall \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d.$$

para una constante  $c > 0$ . El algoritmo sería:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Generar  $\mathbf{T} = (T_1, T_2, \dots, T_d) \sim g$ .
3. Si  $c \cdot U \cdot g(T_1, T_2, \dots, T_d) \leq f(T_1, T_2, \dots, T_d)$  devolver  $\mathbf{X} = \mathbf{T}$ .

En caso contrario volver al paso 1.

Por ejemplo, de forma análoga al caso unidimensional, en el caso de una densidad acotada en un hipercubo (intervalo cerrado multidimensional) siempre podríamos considerar una uniforme como densidad auxiliar.

**Ejemplo 7.2** (distribución bidimensional acotada).

Supongamos que estamos interesados en generar valores de una variable aleatoria bidimensional  $(X, Y)$  con función de densidad:

$$f(x, y) = \begin{cases} \frac{3}{16} (2 - (x^2 + y^2)) & \text{si } x \in [-1, 1] \text{ e } y \in [-1, 1] \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Podríamos considerar como densidad auxiliar la uniforme en  $[-1, 1] \times [-1, 1]$ :

$$g(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{4} & \text{si } x, y \in [-1, 1] \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Como  $f(x, y) \leq M = f(0, 0) = \frac{3}{8}$ , tomando  $c = \frac{M}{g(x, y)} = \frac{3}{2}$  tendríamos que  $f(x, y) \leq cg(x, y) = M$  y el algoritmo sería:

1. Generar  $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
2. Generar  $T_1, T_2 \sim \mathcal{U}(-1, 1)$ .
3. Si  $M \cdot U \leq f(T_1, T_2)$  devolver  $\mathbf{X} = (T_1, T_2)$ .
4. En caso contrario volver al paso 1.

En este caso, la condición de aceptación del paso 3 simplificada sería:  $U \leq 1 - (T_1^2 + T_2^2) / 2$ .

**Ejemplo 7.3** (distribución uniforme en la esfera).

Supongamos que el objetivo es simular puntos uniformemente distribuidos sobre la “esfera” unitaria  $d$ -dimensional:

$$C_d = \{(x_1, x_2, \dots, x_d) : x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2 \leq 1\}.$$

Denotando por  $V_d(1)$ , el “volumen” (la medida) de la esfera  $d$ -dimensional de radio 1 (en general, la de radio  $r$  verifica  $V_d(r) = r^d V_d(1)$ ), se tiene:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_d) = \begin{cases} \frac{1}{V_d(1)} & \text{si } (x_1, x_2, \dots, x_d) \in C_d \\ 0 & \text{si } (x_1, x_2, \dots, x_d) \notin C_d \end{cases}$$

Para simular valores en  $\mathbb{R}^d$ , con densidad  $f$ , podemos utilizar como distribución auxiliar una  $\mathcal{U}([-1, 1] \times [-1, 1] \times \dots \times [-1, 1]) = \mathcal{U}([-1, 1]^d)$ , dada por:

$$g(x_1, x_2, \dots, x_d) = \begin{cases} \frac{1}{2^d} & \text{si } x_i \in [-1, 1], \text{ para todo } i = 1, 2, \dots, d \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

La constante  $c$  óptima para la utilización del método de aceptación/rechazo es:

$$c = \max_{\{\mathbf{x}: g(\mathbf{x}) > 0\}} \frac{f(\mathbf{x})}{g(\mathbf{x})} = \frac{\frac{1}{V_d(1)}}{\frac{1}{2^d}} = \frac{2^d}{V_d(1)}$$

y la condición de aceptación  $cUg(\mathbf{T}) \leq f(\mathbf{T})$  se convierte en:

$$\frac{2^d}{V_d(1)} U \frac{1}{2^d} \mathbf{1}_{[-1, 1]^d}(\mathbf{T}) \leq \frac{1}{V_d(1)} \mathbf{1}_{C_d}(\mathbf{T}),$$

o, lo que es lo mismo,  $U \mathbf{1}_{[-1,1]^d}(\mathbf{T}) \leq \mathbf{1}_{C_d}(\mathbf{T})$ . Dado que el número aleatorio  $U$  está en el intervalo  $(0, 1)$  y que las funciones indicadoras valen 0 ó 1, esta condición equivale a que  $\mathbf{1}_{[-1,1]^d}(\mathbf{T}) = \mathbf{1}_{C_d}(\mathbf{T})$ , es decir, a que  $\mathbf{T} \in C_d$ , es decir, que se verifique:

$$T_1^2 + T_2^2 + \cdots + T_d^2 \leq 1.$$

Por otra parte, la simulación de  $T \sim \mathcal{U}([-1, 1]^d)$  puede hacerse trivialmente mediante  $T_i \sim \mathcal{U}(-1, 1)$  para cada  $i = 1, 2, \dots, d$ , ya que las componentes son independientes. Como el valor de  $U$  es superfluo en este caso, el algoritmo queda:

1. Simular  $V_1, V_2, \dots, V_d \sim \mathcal{U}(0, 1)$  independientes.
2. Para  $i = 1, 2, \dots, d$  hacer  $T_i = 2V_i - 1$ .
3. Si  $T_1^2 + T_2^2 + \cdots + T_d^2 > 1$  entonces volver al paso 1.
4. Devolver  $\mathbf{X} = (T_1, T_2, \dots, T_d)^t$ .

Ver el Ejercicio 2.1 para el caso de  $d = 2$ .

Usando las fórmulas del “volumen” de una “esfera”  $d$ -dimensional:

$$V_d(r) = \begin{cases} \frac{\pi^{d/2} r^d}{(d/2)!} & \text{si } d \text{ es par} \\ \frac{2^{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 1} \pi^{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor} r^d}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots d} & \text{si } d \text{ es impar} \end{cases}$$

puede verse que el número medio de iteraciones del algoritmo, dado por la constante  $c = \frac{2^d}{V_d(1)}$ , puede llegar a ser enormemente grande. Así, si  $d = 2$  se tiene  $c = 1.27$ , si  $d = 3$  se tiene  $c = 1.91$ , si  $d = 4$  entonces  $c = 3.24$  y para  $d = 10$  resulta  $c = 401.5$  que es un valor que hace que el algoritmo sea tremadamente lento en dimensión 10. Esto está relacionado con la *maldición de la dimensionalidad* (curse of dimensionality), a medida que aumenta el número de dimensiones el volumen de la “frontera” crece exponencialmente.

### 7.3 Factorización de la matriz de covarianzas

Teniendo en cuenta que si  $Cov(\mathbf{X}) = I$ , entonces:

$$Cov(A\mathbf{X}) = AA^t.$$

La idea de este tipo de métodos es simular datos independientes y transformarlos linealmente de modo que el resultado tenga la covarianza deseada  $\Sigma = AA^t$ .

Este método se emplea principalmente para la simulación de una normal multivariante, aunque también es válido para muchas otras distribuciones como la  $t$ -multivariante.

En el caso de normalidad, el resultado general es el siguiente.

**Proposición 7.1**

Si  $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$  y  $A$  es una matriz  $p \times d$ , de rango máximo, con  $p \leq d$ , entonces:

$$A\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_p(A\boldsymbol{\mu}, A\Sigma A^t).$$

Partiendo de  $\mathbf{Z} \sim \mathcal{N}_d(\mathbf{0}, I_d)$ , se podrían considerar distintas factorizaciones de la matriz de covarianzas:

- Factorización espectral:  $\Sigma = H\Lambda H^t = H\Lambda^{1/2}(H\Lambda^{1/2})^t$ , donde  $H$  es una matriz ortogonal (i.e.  $H^{-1} = H^t$ ), cuyas columnas son los autovectores de la matriz  $\Sigma$ , y  $\Lambda$  es una matriz diagonal, cuya diagonal está formada por los correspondientes autovalores (positivos). De donde se deduce que:

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + H\Lambda^{1/2}\mathbf{Z} \sim \mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \Sigma).$$

- Factorización de Cholesky:  $\Sigma = LL^t$ , donde  $L$  es una matriz triangular inferior (fácilmente invertible), por lo que:

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + L\mathbf{Z} \sim \mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \Sigma).$$

Desde el punto de vista de la eficiencia computacional la factorización de Cholesky sería la preferible. Pero en ocasiones, para evitar problemas numéricos (por ejemplo, en el caso de matrices no definidas positivas) puede ser más adecuado emplear la factorización espectral. En el primer caso el algoritmo sería el siguiente:

**Algoritmo 7.2** (de simulación de una normal multivariante) 1. Obtener la factorización de Cholesky  $\Sigma = LL^t$ .

2. Simular  $\mathbf{Z} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_d)$  i.i.d.  $\mathcal{N}(0, 1)$ .
3. Hacer  $\mathbf{X} = \boldsymbol{\mu} + L\mathbf{Z}$ .
4. Repetir los pasos 2 y 3 las veces necesarias.

**Nota:** Hay que tener en cuenta el resultado del algoritmo empleado para la factorización de Cholesky. Por ejemplo si se obtiene  $\Sigma = U^tU$ , hará que emplear  $L = U^t$ .

**Ejemplo 7.4** (simulación de datos funcionales o temporales).

Supongamos que el objetivo es generar una muestra de tamaño `nsim` de la variable funcional:

$$Y(x) = \sin(2\pi x) + \varepsilon(x)$$

con  $0 \leq x \leq 1$  y  $Cov(\varepsilon(x), \varepsilon(y)) = e^{-\|x-y\|}$ , considerando 100 puntos de discretización (se puede pensar también que es un proceso temporal).

```

nsim <- 20
n <- 100
x <- seq(0, 1, length = n)
Media
mu <- sin(2*pi*x)
Covarianzas
x.dist <- as.matrix(dist(x))
x.cov <- exp(-x.dist)

```

Para la factorización de la matriz de covarianzas emplearemos la función `chol` del paquete base de R (si las dimensiones fueran muy grandes podría ser preferible emplear otros paquetes, e.g. `spam::chol.spam`), pero al devolver la matriz triangular superior habrá que transponer el resultado:

```

U <- chol(x.cov)
L <- t(U)

```

Si queremos simular una realización:

```

set.seed(1)
head(mu + L %*% rnorm(n))

[,1]
1 -0.6264538
2 -0.5307633
3 -0.5797968
4 -0.2844357
5 -0.1711797
6 -0.2220796

y para simular nsim:

z <- matrix(rnorm(nsim * n), nrow = n)
y <- mu + L %*% z

matplot(x, y, type = "l", ylim = c(-3.5, 3.5))
lines(x, mu, lwd = 2)

```

Alternativamente se podría emplear, por ejemplo, la función `mvrnorm` del paquete MASS que emplea la factorización espectral (`eigen`):

```

library(MASS)
mvrnorm

function (n = 1, mu, Sigma, tol = 1e-06, empirical = FALSE, EISPACK = FALSE)
{
p <- length(mu)
if (!all(dim(Sigma) == c(p, p)))
stop("incompatible arguments")

```

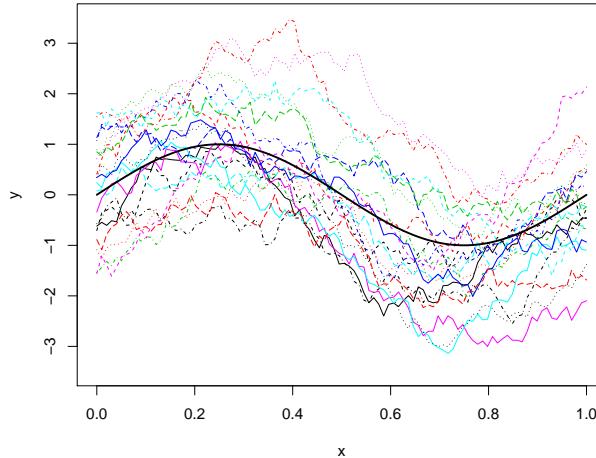


Figura 7.2: Realizaciones del proceso funcional del Ejemplo 7.4, obtenidas a partir de la factorización de Cholesky.

```

if (EISPACK)
stop("'EISPACK' is no longer supported by R", domain = NA)
eS <- eigen(Sigma, symmetric = TRUE)
ev <- eS$values
if (!all(ev >= -tol * abs(ev[1L])))
stop("'Sigma' is not positive definite")
X <- matrix(rnorm(p * n), n)
if (empirical) {
X <- scale(X, TRUE, FALSE)
X <- X %*% svd(X, nu = 0)$v
X <- scale(X, FALSE, TRUE)
}
X <- drop(mu) + eS$vectors %*% diag(sqrt(pmax(ev, 0)), p) %*%
t(X)
nm <- names(mu)
if (is.null(nm) && !is.null(dn <- dimnames(Sigma)))
nm <- dn[[1L]]
dimnames(X) <- list(nm, NULL)
if (n == 1)
drop(X)
else t(X)
}
<bytecode: 0x000000002e2a61e8>
<environment: namespace:MASS>
```

```
y <- mvrnorm(nsim, mu, x.cov)

matplotlib(x, t(y), type = "l")
lines(x, mu, lwd = 2)
```

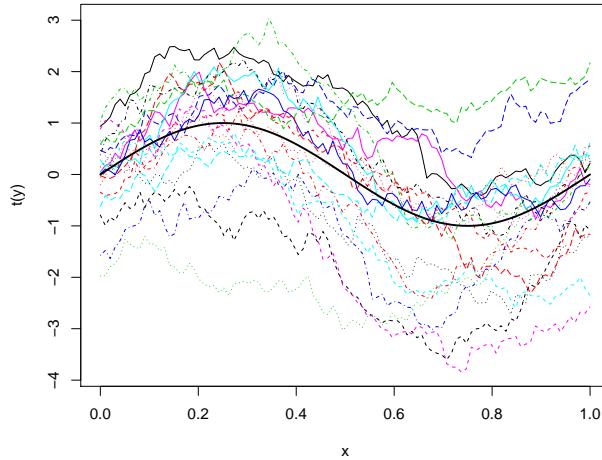


Figura 7.3: Realizaciones del proceso funcional del Ejemplo 7.4, obtenidas empleando la función MASS::mvrnorm.

Otros métodos para variables continuas relacionados con la factorización de la matriz de covarianzas son el método FFT (transformada rápida de Fourier; e.g. Davies y Harte, 1987) o el *Circular embedding* (Dietrich and Newsam, 1997), que realmente son el mismo.

## 7.4 Método de las distribuciones condicionadas

Teniendo en cuenta que:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_d) = f_1(x_1) \cdot f_2(x_2|x_1) \cdots f_d(x_d|x_1, x_2, \dots, x_{d-1}),$$

donde las densidades condicionales pueden obtenerse a partir de las correspondientes marginales:

$$f_i(x_i|x_1, x_2, \dots, x_{i-1}) = \frac{f_{1,\dots,i}(x_1, x_2, \dots, x_i)}{f_{1,\dots,i-1}(x_1, x_2, \dots, x_{i-1})},$$

se obtiene el siguiente algoritmo general:

**Algoritmo 7.3** (de simulación mediante distribuciones condicionadas) 1.

Generar  $X_1 \sim f_1$ .

2. Desde  $i = 2$  hasta  $d$  generar  $X_i \sim f_i(\cdot | X_1, X_2, \dots, X_{i-1})$ .
3. Devolver  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_d)$ .

**Nota:** En las simulaciones unidimensionales se puede tener en cuenta que  $f_i(x_i | x_1, x_2, \dots, x_{i-1}) \propto f_{1,\dots,i}(x_1, x_2, \dots, x_i)$ .

**Ejemplo 7.5** (distribución uniforme en el círculo unitario).

Se trata de la distribución bidimensional continua con densidad constante en el círculo:

$$C = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R} : x_1^2 + x_2^2 \leq 1\}.$$

Su función de densidad viene dada por:

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} & \text{si } (x_1, x_2) \in C \\ 0 & \text{si } (x_1, x_2) \notin C \end{cases}$$

La densidad marginal de la primera variable resulta:

$$f_1(x_1) = \int_{-\sqrt{1-x_1^2}}^{+\sqrt{1-x_1^2}} \frac{1}{\pi} dx_2 = \frac{2\sqrt{1-x_1^2}}{\pi} \text{ si } x_1 \in [-1, 1],$$

es decir:

$$f_1(x_1) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \sqrt{1-x_1^2} & \text{si } x_1 \in [-1, 1] \\ 0 & \text{si } x_1 \notin [-1, 1] \end{cases}$$

Además:

$$f_2(x_2 | x_1) = \frac{f(x_1, x_2)}{f_1(x_1)} = \frac{\frac{1}{\pi}}{\frac{2\sqrt{1-x_1^2}}{\pi}} = \frac{1}{2\sqrt{1-x_1^2}}, \text{ si } x_2 \in \left[-\sqrt{1-x_1^2}, \sqrt{1-x_1^2}\right]$$

valiendo cero en otro caso. Se tiene entonces que:

$$X_2 | X_1 \sim \mathcal{U}\left(-\sqrt{1-X_1^2}, \sqrt{1-X_1^2}\right),$$

siempre que  $X_1 \in [-1, 1]$ .

Finalmente, el algoritmo resulta:

1. Simular  $X_1$  con densidad  $f_1(x_1) = \frac{2}{\pi} \sqrt{1-x_1^2} \mathbf{1}_{\{|x_1| \leq 1\}}$ .
2. Simular  $X_2$  con densidad  $\mathcal{U}\left(-\sqrt{1-X_1^2}, \sqrt{1-X_1^2}\right)$ .
3. Devolver  $\mathbf{X} = (X_1, X_2)^t$ .

Para el paso 1 puede utilizarse, por ejemplo, el método de aceptación/rechazo, pues se trata de una densidad acotada definida en un intervalo acotado.

**Ejemplo 7.6** (distribución normal bidimensional).

En el caso de una distribución normal bidimensional:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \sim \mathcal{N} \left( \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_1\sigma_2\rho \\ \sigma_1\sigma_2\rho & \sigma_2^2 \end{pmatrix} \right)$$

tendríamos que:

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp \left( -\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left( \frac{(x_1 - \mu_1)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(x_2 - \mu_2)^2}{\sigma_2^2} - \frac{2\rho(x_1 - \mu_1)(x_2 - \mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} \right) \right)$$

de donde se deduce (ver e.g. Cao, 2002, p.88; o ecuaciones (7.1) y (7.2) en la Sección 7.5.1) que:

$$\begin{aligned} f_1(x_1) &= \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} \exp \left( -\frac{(x_1 - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2} \right) \\ f_2(x_2|x_1) &= \frac{f(x_1, x_2)}{f_1(x_1)} \\ &= \frac{1}{\sigma_2\sqrt{2\pi(1-\rho^2)}} \exp \left( -\frac{\left( x_2 - \mu_2 - \frac{\sigma_2}{\sigma_1}\rho(x_1 - \mu_1) \right)^2}{2\sigma_2^2(1-\rho^2)} \right) \end{aligned}$$

Por tanto  $X_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2)$  y  $X_2|X_1 \sim \mathcal{N}\left(\mu_2 + \frac{\sigma_2}{\sigma_1}\rho(X_1 - \mu_1), \sigma_2^2(1 - \rho^2)\right)$ , y el algoritmo sería el siguiente:

**Algoritmo 7.4** (de simulación de una normal bidimensional)    1. *Simular*  $Z_1, Z_2 \sim \mathcal{N}(0, 1)$  *independientes.*

2. *Hacer*  $X_1 = \mu_1 + \sigma_1 Z_1$ .

3. *Hacer*  $X_2 = \mu_2 + \sigma_2 \rho Z_1 + \sigma_2 \sqrt{1 - \rho^2} Z_2$ .

Este algoritmo es el mismo que obtendríamos con la factorización de la matriz de covarianzas ya que  $\Sigma = LL^t$  con:

$$L = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ \sigma_2\rho & \sigma_2\sqrt{1-\rho^2} \end{pmatrix}$$

Además, esta aproximación puede generalizarse al caso multidimensional, ver Sección 7.5.1.

## 7.5 Simulación condicional e incondicional

En ocasiones en inferencia estadística interesa la simulación condicional de nuevos valores de forma que se preserven los datos observados, para lo que se suele emplear el algoritmo anterior partiendo de la muestra observada:

**Algoritmo 7.5** (de simulación condicional) 1. *Obtener la distribución condicional (correspondiente al punto que se quiere simular) dada la muestra y los valores simulados anteriormente.*

2. *Simular un valor de la distribución condicional.*
3. *Agregar este valor al conjunto de datos y volver al paso 1.*

En el caso de normalidad, en lugar de simular punto a punto, podemos obtener fácilmente la distribución condicionada para simular los valores de forma conjunta.

### 7.5.1 Simulación condicional de una normal multivariante

Si  $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$  es tal que  $\mathbf{X}$ ,  $\boldsymbol{\mu}$  y  $\boldsymbol{\Sigma}$  se particionan de la forma:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{X}_2 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix},$$

suponiendo que  $\mathbf{X}_1$  se corresponde con los valores observados y  $\mathbf{X}_2$  con los que se pretende simular, entonces puede verse (e.g. Ripley, 1987) que la distribución de  $\mathbf{X}_2|\mathbf{X}_1$  es normal con:

$$E(\mathbf{X}_2|\mathbf{X}_1) = \boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\mathbf{X}_1 - \boldsymbol{\mu}_1), \quad (7.1)$$

$$Cov(\mathbf{X}_2|\mathbf{X}_1) = \boldsymbol{\Sigma}_{22} - \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}. \quad (7.2)$$

**Nota:** La ecuación (7.1) coincide con la expresión de la predicción lineal óptima de  $\mathbf{X}_2$  a partir de  $\mathbf{X}_1$  con media y varianzas conocidas (denominado predictor del kriging simple en estadística espacial, y la diagonal de (7.2) son las correspondientes varianzas kriging).

**Ejemplo 7.7** (simulación condicional de datos funcionales o temporales).

Continuando con el Ejemplo 7.4 anterior, consideramos los primeros valores de una simulación incondicional como los datos:

```
idata <- x < 0.5
idata <- x < 0.2 / x > 0.8
mu1 <- mu[idata]
n1 <- length(mu1)
```

```

cov.data <- x.cov[idata, idata]
U <- chol(cov.data)
Simulación (incondicional):
set.seed(1)
data <- drop(mu1 + t(U) %*% rnorm(n1))

```

Para obtener la simulación condicional en los puntos de predicción, calculamos la correspondiente media y matriz de covarianzas condicionadas:

```

mu2 <- mu[!idata]
n2 <- length(mu2)
cov.pred <- x.cov[!idata, !idata]
cov.preddat <- x.cov[!idata, idata]
Cálculo de los pesos kriging:
cov.data.inv <- chol2inv(U)
lambda <- cov.preddat %*% cov.data.inv
La media serán las predicciones del kriging simple:
kpred <- mu2 + drop(lambda %*% (data - mu1))
Varianza de la distribución condicional
kcov <- cov.pred - lambda %*% t(cov.preddat)
(La diagonal serán las varianzas kriging).

```

Las simulaciones condicionales se obtendrán de forma análoga (Figura 7.4):

```

z <- matrix(rnorm(nsim * n2), nrow = n2)
y <- kpred + t(chol(kcov)) %*% z
Representación gráfica:
plot(x, mu, type = "l", lwd = 2, ylab = "y", ylim = c(-3.5, 3.5)) # media teórica
lines(x[idata], data) # datos
y <- rep(NA, n)
y[idata] <- data
lines(x, y)
matplot(x[!idata], y, type = "l", add = TRUE) # simulaciones condicionales
lines(x[!idata], kpred, lwd = 2, lty = 2) # media condicional (predicción kriging)

```

**Ejemplo 7.8** (simulación condicional de datos espaciales).

Consideramos un proceso espacial bidimensional normal  $Z(\mathbf{s}) \equiv Z(x, y)$  de media 0 y covariograma exponencial:

$$\text{Cov}(Z(\mathbf{s}_1), Z(\mathbf{s}_2)) = C(\|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2\|) = e^{-\|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2\|}.$$

En primer lugar, obtendremos una simulación del proceso en las posiciones  $\{(0, 0), (0, 1), (1, 0), (1, 1)\}$  que será considerada posteriormente como los datos observados.

Empleando las herramientas del paquete `geoR`, resulta muy fácil obtener una simulación incondicional en una rejilla en el cuadrado unidad mediante la función

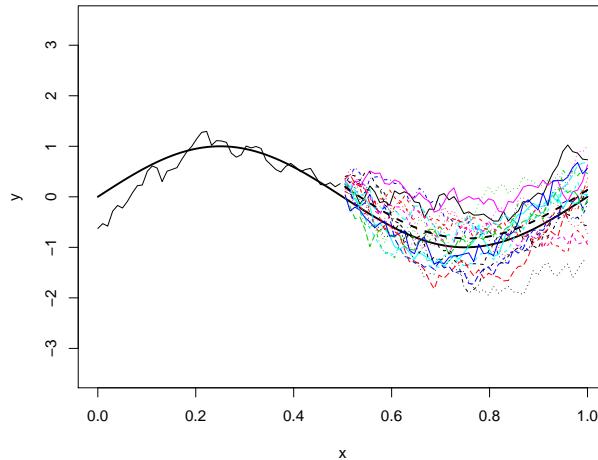


Figura 7.4: Realizaciones condicionales del proceso funcional del Ejemplo 7.7.

```

grf:
library(geoR)
n <- 4
set.seed(1)
z <- grf(n, grid="reg", cov.pars=c(1,1))

grf: generating grid 2 * 2 with 4 points
grf: process with 1 covariance structure(s)
grf: nugget effect is: tausq= 0
grf: covariance model 1 is: exponential(sigmasq=1, phi=1)
grf: decomposition algorithm used is: cholesky
grf: End of simulation procedure. Number of realizations: 1
names(z)
z$coords

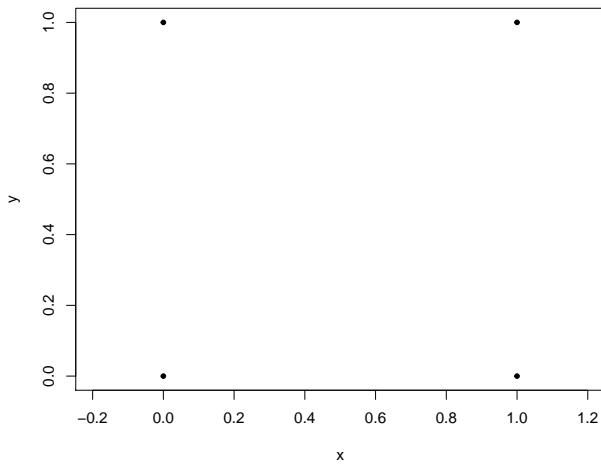
x y
[1,] 0 0
[2,] 1 0
[3,] 0 1
[4,] 1 1
z$data
[1] -0.62645381 -0.05969442 -0.98014198 1.09215113

```

La `grf` función emplea por defecto el método de la factorización de la matriz de

covarianzas, sin embargo, si se desean obtener múltiples realizaciones, en lugar de llamar repetidamente a esta función, puede ser preferible emplear la siguiente aproximación:

```
Posiciones datos
nx <- c(2, 2)
data.s <- expand.grid(x = seq(0, 1, len = nx[1]), y = seq(0, 1, len = nx[2]))
plot(data.s, type = "p", pch = 20, asp = 1) # Representar posiciones
```



```
Matriz de varianzas covarianzas
cov.matrix <- varcov.spatial(coords=data.s, cov.pars=c(1,1))$varcov
cov.matrix

[,1] [,2] [,3] [,4]
[1,] 1.0000000 0.3678794 0.3678794 0.2431167
[2,] 0.3678794 1.0000000 0.2431167 0.3678794
[3,] 0.3678794 0.2431167 1.0000000 0.3678794
[4,] 0.2431167 0.3678794 0.3678794 1.0000000

Simular valores
set.seed(1)
L <- t(chol(cov.matrix))

Bucle simulación
nsim <- 1 # 1000
for (i in 1:nsim) {
 y <- L %*% rnorm(n)
 # calcular estadísticos, errores, ...
}
```

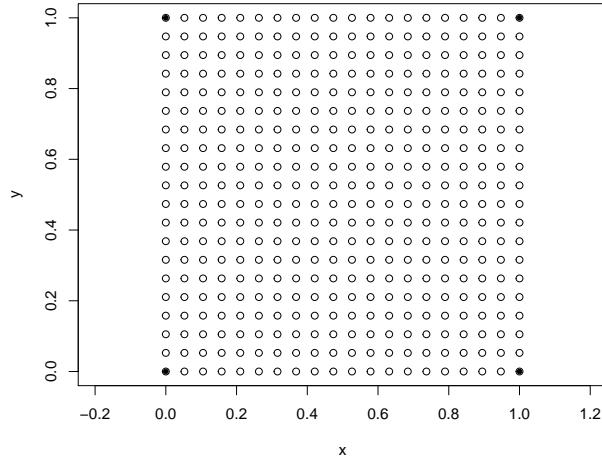
120 CAPÍTULO 7. SIMULACIÓN DE DISTRIBUCIONES MULTIVARIANTES

```
y
```

```
[,1]
[1,] -0.62645381
[2,] -0.05969442
[3,] -0.98014198
[4,] 1.09215113
```

Para generar simulaciones condicionales podemos emplear la función `krige.conv`. Por ejemplo, para generar 4 simulaciones en la rejilla regular  $10 \times 10$  en el cuadrado unidad  $[0, 1] \times [0, 1]$  condicionadas a los valores generados en el apartado anterior podríamos emplear el siguiente código:

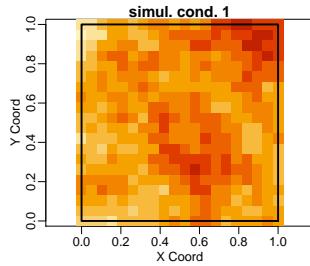
```
Posiciones simulación condicional
nnx <- c(20, 20)
nn <- prod(nnx)
ndata.s <- expand.grid(x = seq(0, 1, len = nnx[1]), y = seq(0, 1, len = nnx[2]))
plot(ndata.s, type = "p", pch = 20, asp = 1)
points(ndata.s)
```



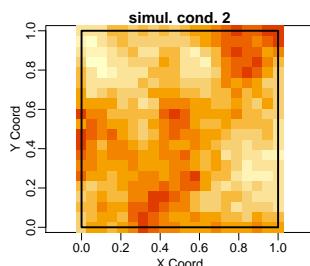
```
Simulación condicional
set.seed(1)
s.out <- output.control(n.predictive = 4)
kc <- krige.conv(z, loc = ndata.s, output = s.out,
 krige = krige.control(type.krige="SK", beta = 0, cov.pars = c(1, 1)))

krige.conv: results will be returned only for prediction locations inside the border
krige.conv: model with constant mean
krige.conv: sampling from the predictive distribution (conditional simulations)
```

```
krige.conv: Kriging performed using global neighbourhood
Generar gráficos
par.old <- par(mfrow = c(2, 2), mar = c(3.5, 3.5, 1, 0), mgp = c(1.5, .5, 0))
zlim <- range(kc$simul) # Escala común
image(kc, val=kc$simul[,1], main="simul. cond. 1", zlim=zlim)
```

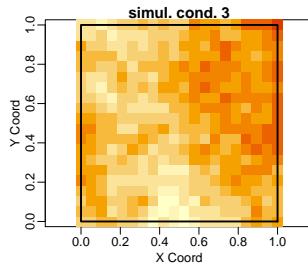


```
image(kc, val=kc$simul[,2], main="simul. cond. 2", zlim=zlim)
```

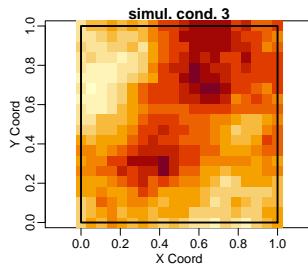


```
image(kc, val=kc$simul[,3], main="simul. cond. 3", zlim=zlim)
```

122 CAPÍTULO 7. SIMULACIÓN DE DISTRIBUCIONES MULTIVARIANTES



```
image(kc, val=kc$simul[,4], main="simul. cond. 3", zlim=zlim)
```



```
par(par.old)
```

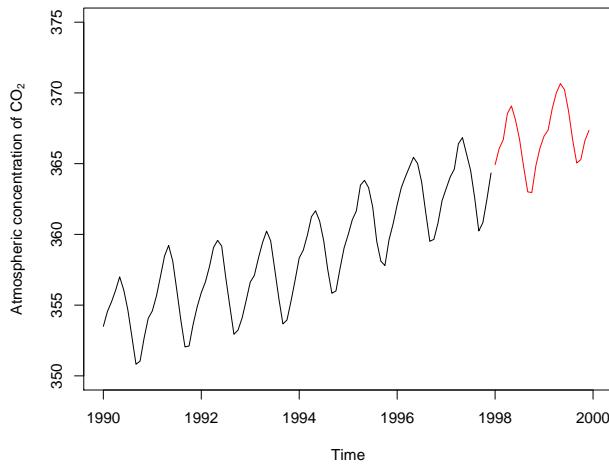
Los valores en las posiciones  $\{(0, 0), (0, 1), (1, 0), (1, 1)\}$  coinciden con los generados anteriormente.

### 7.5.2 Simulación condicional a partir de un modelo ajustado

En la práctica normalmente se ajusta un modelo a los datos observados y posteriormente se obtienen las simulaciones condicionadas empleando el modelo ajustado.

Por ejemplo, en el caso de series de tiempo, se puede emplear la función `simulate` del paquete `forecast`:

```
library(forecast)
data <- window(co2, 1990) # datos de co2 desde 1990
plot(data, ylab = expression("Atmospheric concentration of CO"[2]),
 xlim=c(1990,2000), ylim=c(350, 375))
fit <- ets(data)
plot(forecast(fit, h=24))
set.seed(1)
lines(simulate(fit, 24), col="red")
```



## 7.6 Simulación basada en cópulas

Una cópula es una función de distribución multidimensional con distribuciones marginales uniformes (e.g. Nelsen, 2006). Se emplean principalmente para la construcción de distribuciones multivariantes a partir de distribuciones marginales (también en análisis de dependencia y medidas de asociación).

Nelsen, R.B. (2006). *An introduction to copulas*, 2<sup>a</sup> ed., Springer

Hofert, M. (2018). *Elements of Copula Modeling with R*, Springer.

Por simplicidad nos centraremos en el caso bidimensional. El teorema central en la teoría de cópulas es el teorema de Sklar (1959), que en este caso es:

**Teorema 7.1** (de Sklar, caso bidimensional)

*Si  $(X, Y)$  es una variable aleatoria bidimensional con función de distribución conjunta  $F(\cdot, \cdot)$  y distribuciones marginales  $F_1(\cdot)$  y  $F_2(\cdot)$  respectivamente, entonces existe una cópula  $C(\cdot, \cdot)$  tal que:*

$$F(x, y) = C(F_1(x), F_2(y)), \quad \forall x, y \in \mathbb{R}.$$

*Además, si  $F_1(\cdot)$  y  $F_2(\cdot)$  son continuas  $C(\cdot, \cdot)$  es única.*

*El recíproco también es cierto.*

### 7.6.1 Cópulas Arquimediana

Además de las cópulas Gausianas, es una de las familias de cópulas más utilizadas. Son de la forma:

$$C(x_1, x_2, \dots, x_d) = \Psi^{-1} \left( \sum_{i=1}^d \Psi(F_i(x_i)) \right),$$

siendo  $\Psi$  su función generadora.

Una condición suficiente para que sea una cópula multidimensional válida es que  $\Psi(1) = 0$ ,  $\lim_{x \rightarrow 0} \Psi(x) = \infty$ ,  $\Psi'(x) < 0$  y  $\Psi''(x) > 0$ .

**Ejemplos:**

- Cúpula producto o independiente:  $\Psi(x) = -\ln(x)$ ,

$$F(x, y) = F_1(x)F_2(y).$$

- Cúpula de Clayton:  $\Psi(x) = \frac{1}{\alpha}(x^{-\alpha} - 1)$ ;  $\alpha > 0$ ,

$$F(x, y) = (F_1(x)^{-\alpha} + F_2(y)^{-\alpha} - 1)^{-1/\alpha}.$$

- Cúpula de Gumbel:  $\Psi(x) = (-\ln(x))^\alpha$ ;  $\alpha \geq 1$

### 7.6.2 Simulación

Las cópulas pueden facilitar notablemente la simulación de la distribución conjunta. Si  $(U, V) \sim C(\cdot, \cdot)$  (marginales uniformes):

$$(F_1^{-1}(U), F_2^{-1}(V)) \sim F(\cdot, \cdot)$$

En la mayoría de los casos se dispone de expresiones explicitas de  $C_u(v) \equiv C_2(v|u)$  y de su inversa  $C_u^{-1}(w)$ , por lo que se puede generar  $(U, V)$  fácilmente mediante el método secuencial de distribuciones condicionadas descrito en la Sección 7.4.

**Algoritmo 7.6** (de simulación bidimensional mediante cópulas) 1. Generar  $U, W \sim \mathcal{U}(0, 1)$

2. Obtener  $V = C_U^{-1}(W)$

3. Devolver  $(F_1^{-1}(U), F_2^{-1}(V))$

### Ejercicio 7.1.

Consideramos una v.a. bidimensional con distribuciones marginales uniformes y distribución bidimensional determinada por la cópula de Clayton.

a) Teniendo en cuenta que en este caso:

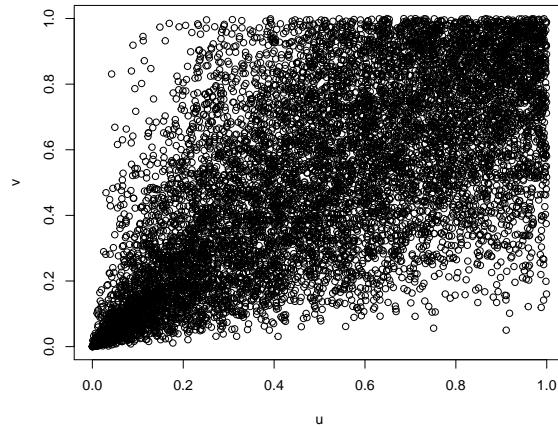
$$C_u^{-1}(w) \equiv \left( u^{-\alpha} \left( w^{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} - 1 \right) + 1 \right)^{-\frac{1}{\alpha}},$$

diseñar una rutina que permita generar una muestra de tamaño  $n$  de esta distribución.

```
rcclayton <- function(alpha, n) {
 val <- cbind(runif(n), runif(n))
 val[, 2] <- (val[, 1]^(−alpha) *
 (val[, 2]^(−alpha/(alpha + 1)) − 1) + 1)^(-1/alpha)
 return(val)
}
```

b) Utilizando la rutina anterior generar una muestra de tamaño 10000 y representar gráficamente los valores obtenidos y sus distribuciones marginales.

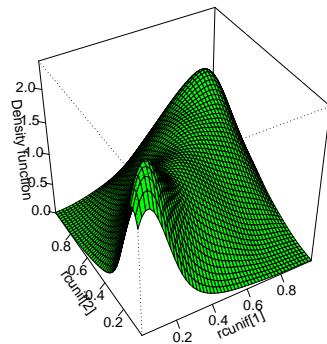
```
set.seed(54321)
rcunif <- rcclayton(2, 10000)
plot(rcunif, xlab = "u", ylab = "v")
```



Representar la densidad conjunta (con `sm::sm.density()`) y las marginales:

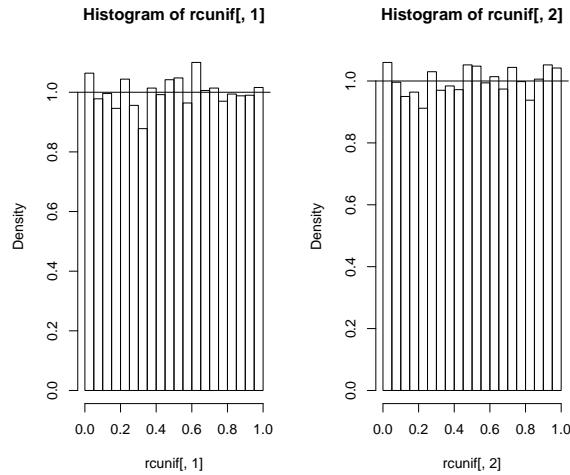
```
Densidad conjunta
if(!require(sm)) stop('Required package `sm` not installed.')
sm::sm.density(rcunif)
```

## Warning: weights overwritten by binning



```
Distribuciones marginales
par.old <- par(mfrow = c(1, 2))
hist(rcunif[,1], freq = FALSE)
abline(h = 1)
```

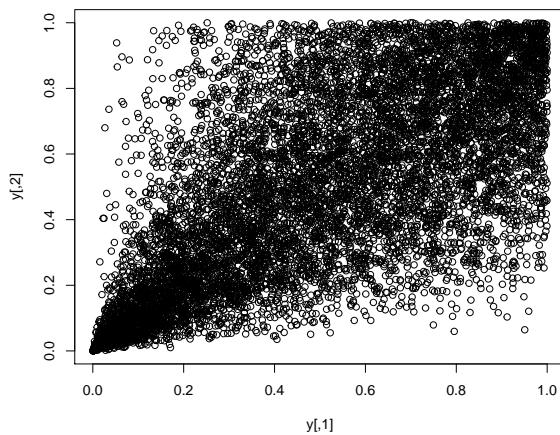
```
hist(rcunif[,2], freq = FALSE)
abline(h = 1)
```



```
par(par.old)
```

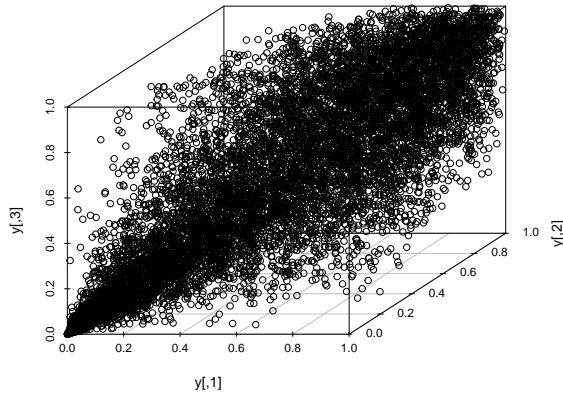
Empleando el paquete `copula`:

```
if(!require(copula)) stop('Required package `copula` not installed.')
clayton.cop <- claytonCopula(2, dim = 2) # caso bidimensional
y <- rCopula(10000, clayton.cop)
plot(y)
```



128 CAPÍTULO 7. SIMULACIÓN DE DISTRIBUCIONES MULTIVARIANTES

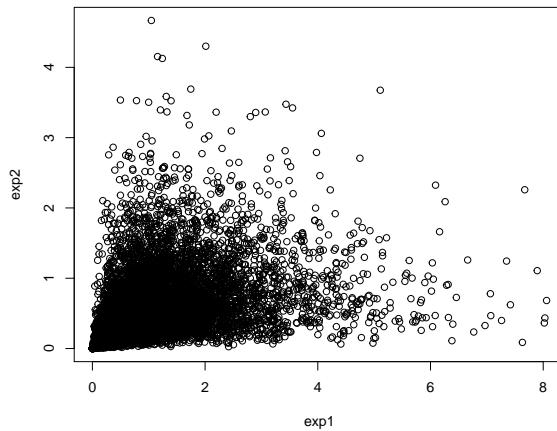
```
clayton.cop <- claytonCopula(2, dim = 3) # caso tridimensional
y <- rCopula(10000, clayton.cop)
scatterplot3d:::scatterplot3d(y)
```



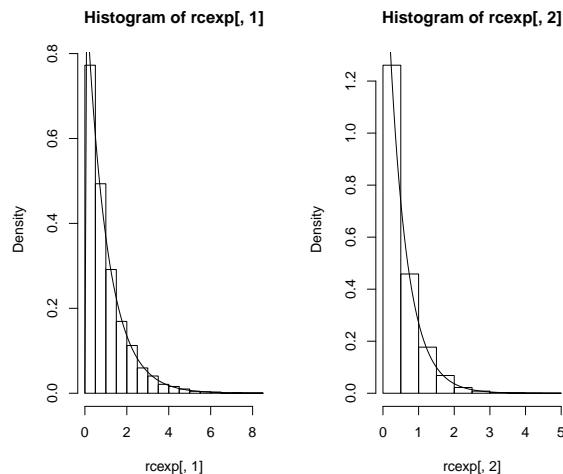
```
plot3D:::points3D(y[,1], y[,2], y[, 3], colvar = NULL)
```

- c) A partir de la muestra anterior generar una muestra de una v.a. bidimensional con distribuciones marginales exponenciales de parámetros 1 y 2 respectivamente (y distribución bidimensional determinada por la cópula de Clayton).

```
rcexp <- cbind(qexp(rcunif[,1], 1), qexp(rcunif[,2], 2))
plot(rcexp, xlab = "exp1", ylab = "exp2")
```



```
Distribuciones marginales
par.old <- par(mfrow = c(1, 2))
hist(rcexp[,1], freq = FALSE)
curve(dexp(x,1), add = TRUE)
hist(rcexp[,2], freq = FALSE)
curve(dexp(x,2), add = TRUE)
```



```
par(par.old)
```

## 7.7 Simulación de distribuciones multivariantes discretas

### 7.7.1 Métodos de codificación o etiquetado para variables discretas

En el caso de una distribución  $d$ -dimensional discreta el procedimiento habitual es simular una variable aleatoria discreta unidimensional equivalente. Este tipo de procedimientos son conocidos como métodos de etiquetado o codificación y la idea básica consistiría en construir un índice unidimensional equivalente al índice multidimensional.

Si la variable discreta multidimensional tiene soporte finito, este tipo de recodificación se puede hacer de forma automática en R cambiando simplemente el indexado (internamente un objeto `matrix` o `array` ya está almacenado como un vector y R permite un indexado multidimensional a partir del atributo `dim`).

```

z <- 1:10
xy <- matrix(z, ncol = 2)
xy

[,1] [,2]
[1,] 1 6
[2,] 2 7
[3,] 3 8
[4,] 4 9
[5,] 5 10
as.vector(xy)

[1] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

```

Si la variable discreta multidimensional no tiene soporte finito (no se podría guardar la f.m.p. en una tabla), se podrían emplear métodos de codificación más avanzados (ver sección 6.3 del libro de R. Cao).

### 7.7.2 Simulación de una variable discreta bidimensional

Consideramos datos recogidos en un estudio de mejora de calidad en una fábrica de semiconductores. Se obtuvo una muestra de obleas que se clasificaron dependiendo de si se encontraron partículas en la matriz que producía la oblea y de si la calidad de oblea era buena (para más detalles Hall, 1994. Analysis of defectivity of semiconductor wafers by contingency table. Proceedings of the Institute of Environmental Sciences 1, 177-183).

```

n <- c(320, 14, 80, 36)
particulas <- gl(2, 1, 4, labels = c("no", "si"))
calidad <- gl(2, 2, labels = c("buena", "mala"))
df <- data.frame(n, particulas, calidad)
df

n particulas calidad
1 320 no buena
2 14 si buena
3 80 no mala
4 36 si mala

```

En lugar de estar en el formato de un conjunto de datos (`data.frame`) puede que los datos estén en formato de tabla (`table, matrix`):

```

tabla <- xtabs(n ~ calidad + particulas)
tabla

particulas
calidad no si

```

## 7.7. SIMULACIÓN DE DISTRIBUCIONES MULTIVARIANTES DISCRETAS131

```
buena 320 14
mala 80 36
```

Lo podemos convertir directamente a `data.frame`:

```
as.data.frame(tabla)
```

```
calidad particulas Freq
1 buena no 320
2 mala no 80
3 buena si 14
4 mala si 36
```

En este caso definimos las probabilidades a partir de las frecuencias:

```
df$p <- df$n/sum(df$n)
df
```

```
n particulas calidad p
1 320 no buena 0.71111111
2 14 si buena 0.03111111
3 80 no mala 0.17777778
4 36 si mala 0.08000000
```

En formato tabla:

```
pij <- tabla/sum(tabla)
pij
```

```
particulas
calidad no si
buena 0.71111111 0.03111111
mala 0.17777778 0.08000000
```

Para simular la variable bidimensional consideramos una variable unidimensional de índices:

```
z <- 1:nrow(df)
z
```

```
[1] 1 2 3 4
```

Con probabilidades:

```
pz <- df$p
pz
```

```
[1] 0.71111111 0.03111111 0.17777778 0.08000000
```

Si las probabilidades estuviesen en una matriz, las convertiríamos a un vector con:

## 132 CAPÍTULO 7. SIMULACIÓN DE DISTRIBUCIONES MULTIVARIANTES

```
as.vector(pij)

[1] 0.71111111 0.17777778 0.03111111 0.08000000
```

Si simulamos la variable unidimensional:

```
set.seed(1)
nsim <- 20
rz <- sample(z, nsim, replace = TRUE, prob = pz)
```

Podríamos obtener simulaciones bidimensionales, por ejemplo:

```
etiquetas <- as.matrix(df[c('particulas', 'calidad')])
rxy <- etiquetas[rz,]
head(rxy)
```

```
particulas calidad
[1,] "no" "buena"
[2,] "no" "buena"
[3,] "no" "buena"
[4,] "si" "mala"
[5,] "no" "buena"
[6,] "si" "mala"
```

Alternativamente, si queremos trabajar con data.frames:

```
etiquetas <- df[c('particulas', 'calidad')]
rxy <- etiquetas[rz,]
head(rxy)
```

```
particulas calidad
1 no buena
1.1 no buena
1.2 no buena
4 si mala
1.3 no buena
4.1 si mala
```

# Si se quieren eliminar las etiquetas de las filas:  
row.names(rxy) <- NULL  
head(rxy)

```
particulas calidad
1 no buena
2 no buena
3 no buena
4 si mala
5 no buena
6 si mala
```

### 7.7.3 Simulación de tablas de contingencia

El código anterior puede ser empleado para simular tablas de contingencia. Aunque en estos casos se suele fijar el total de la tabla (o incluso las frecuencias marginales). En este caso, sólo habría que fijar el nº de simulaciones al total de la tabla:

```
nsim <- sum(n)
set.seed(1)
rz <- sample(z, nsim, replace = TRUE, prob = pz)
rtable <- table(rz) # Tabla de frecuencias unidimensional
matrix(rtable, ncol = 2) # Tabla de frecuencias bidimensional

[,1] [,2]
[1,] 321 78
[2,] 15 36
```

Aunque puede ser preferible emplear directamente `rmultinom` si se van a generar muchas:

```
ntsim <- 1000
rtablas <- rmultinom(ntsim, sum(n), pz)
rtablas[, 1:5] # Las cinco primeras simulaciones

[,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
[1,] 298 329 323 323 307
[2,] 15 21 5 15 15
[3,] 92 68 91 77 92
[4,] 45 32 31 35 36
```

Por ejemplo, si se quiere simular bajo independencia, estimando las probabilidades a partir de la tabla:

```
tabla
```

```
particulas
calidad no si
buena 320 14
mala 80 36
```

Consideraríamos como probabilidades:

```
pind <- (rowSums(tabla) %o% colSums(tabla)) / (sum(tabla)^2)
matrix(pind, nrow = nrow(tabla))

[,1] [,2]
[1,] 0.6597531 0.08246914
[2,] 0.2291358 0.02864198

rtablas <- rmultinom(ntsim, sum(n), pind)
rtablas[, 1:5] # Las cinco primeras simulaciones
```

```
[,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
[1,] 292 285 309 303 290
[2,] 96 105 97 84 113
[3,] 48 48 36 49 39
[4,] 14 12 8 14 8
```

Para realizar el contraste de independencia:

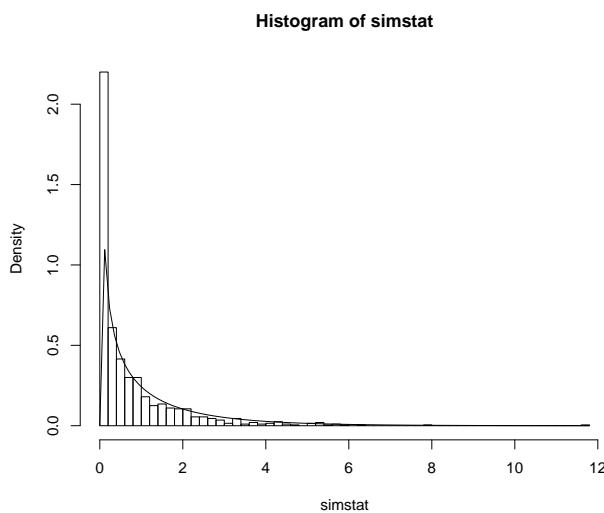
```
res <- chisq.test(tabla)
res
```

```
##
Pearson's Chi-squared test with Yates' continuity correction
##
data: tabla
X-squared = 60.124, df = 1, p-value = 8.907e-15
```

**Ejercicio 7.2** (Distribución del estadístico chi-cuadrado de independencia).

Aproximar por simulación la distribución (exacta) del estadístico chi-cuadrado bajo independencia.

```
simstat <- apply(rtablas, 2, function(x){chisq.test(matrix(x,nrow=nrow(tabla)))$statistic})
hist(simstat, freq = FALSE, breaks = 'FD')
Distribución asintótica (aproximación chi-cuadrado)
curve(dchisq(x, res$parameter), add = TRUE)
```



## 7.8 Ejercicios propuestos

### Ejercicio 7.3.

Dar un algoritmo basado en el método de aceptación-rechazo (considerando como densidad auxiliar una uniforme) que permita generar observaciones de una variable aleatoria bidimensional  $(X, Y)$  con función de densidad:

$$f(x, y) = \begin{cases} \frac{3}{16} (2 - (x^2 + y^2)) & \text{si } x \in [-1, 1] \text{ e } y \in [-1, 1] \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

### Ejercicio 7.4.

Considerando la variable aleatoria bidimensional del ejercicio anterior y teniendo en cuenta que la densidad marginal de la variable  $X$  es:

$$f_X(x) = \begin{cases} \frac{1}{8} (5 - 3x^2) & \text{si } x \in [-1, 1] \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Describir brevemente un algoritmo para la simulación del vector aleatorio basado en el método de las distribuciones condicionadas (asumir que se dispone de un algoritmo para generar observaciones de las distribuciones unidimensionales de interés).



## Capítulo 8

# Aplicaciones de la simulación en Inferencia Estadística

Como ya se comentó en la introducción muchas de las aplicaciones de la simulación serían de utilidad en Estadística:

- Muestreo, aproximación de distribuciones, remuestreo, ...
- Optimización: Algoritmos genéticos, ...
- Análisis numérico: Evaluación de expresiones, ...
- ...

En este capítulo nos centraremos en algunas de las aplicaciones en inferencia estadística:

- Distribución de estimadores puntuales/estadísticos:
  - Aproximación de la distribución.
    - \* Aproximación de características de la distribución.
    - \* Validez de la distribución asintótica.
  - Comparación de estimadores.
- Estimación por intervalo de confianza:
  - Obtención de intervalos/bandas de confianza (probabilidad).
  - Análisis de un estimador por intervalo de confianza.
- Contrastes de hipótesis:

- Aproximación del  $p$ -valor.
- Análisis de un contraste de hipótesis.
- Validación teoría.
- Métodos de remuestro bootstrap.
- Inferencia Bayesiana
- ...

En el siguiente capítulo traremos la Integración y Optimización Monte Carlo.

Observación: En este capítulo se obtendrán simulaciones de estadísticos a partir de muestras (podemos pensar que se parte de generaciones de una variable multivariante). En la mayoría de los ejemplos se generan todas las muestras de una vez, se guardan y se procesan vectorialmente (normalmente empleando la función `apply`). Como ya se comentó en la el Capítulo 2, en problemas mas complejos, en los que no es necesario almacenar todas las muestras, puede ser preferible emplear un bucle para generar y procesar las muestras iterativamente.

## 8.1 Distribución en el muestreo

### Ejercicio 8.1.

Si  $X_1, \dots, X_n$  es una muestra aleatoria simple de una variable aleatoria  $X \sim N(\mu, \sigma)$ , la distribución en el muestreo de:

$$\hat{\mu} = \bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$$

es:

$$\bar{X} \sim N\left(\mu, \frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right)$$

Confirmar este resultado mediante simulación, para ello:

- Crear un conjunto de datos `muestras` con 500 muestras de tamaño  $n = 10$  de una  $N(1, 2)$ . Añadir al conjunto de datos las estimaciones de la media y desviación típica obtenidas con cada una de las muestras.

Valores iniciales:

```
set.seed(54321) # Fijar semilla para reproductibilidad
nsim <- 500
nx <- 10
```

Valores teóricos:

```
mux <- 1
sdx <- 2
```

Simulación de las muestras (al estilo Rcmdr):

```
muestras <- as.data.frame(matrix(rnorm(nsim*nx, mean=mux, sd=sdx), ncol=nx))
rownames(muestras) <- paste("muestra", 1:nsim, sep="")
colnames(muestras) <- paste("obs", 1:nx, sep="")
str(muestras)

'data.frame': 500 obs. of 10 variables:
$ obs1 : num 0.642 -0.856 -0.568 -2.301 0.184 ...
$ obs2 : num 3.483 2.216 1.1 4.305 0.677 ...
$ obs3 : num 1.24 -1.51 -3.98 2.29 2.46 ...
$ obs4 : num 3.286 0.947 0.953 -1.663 2.623 ...
$ obs5 : num 3.77 -1.34 1.61 -2.46 1.11 ...
$ obs6 : num -2.044 0.32 3.046 0.136 3.555 ...
$ obs7 : num 0.6186 -1.8614 4.3386 0.0996 0.8334 ...
$ obs8 : num -0.829 2.202 -1.688 1.534 -0.114 ...
$ obs9 : num 0.4904 -0.6713 0.5451 -0.6517 0.0168 ...
$ obs10: num 2.79 2.84 1.27 3.93 2.17 ...
```

Estimaciones:

```
muestras$mean <- rowMeans(muestras[,1:nx])
muestras$sd <- apply(muestras[,1:nx], 1, sd)
```

Nota: . La fila `muestras[i,]` contiene las observaciones de la i-ésima muestra y la correspondiente media y desviación típica.

```
muestras[1,]
```

```
obs1 obs2 obs3 obs4 obs5 obs6 obs7
muestra1 0.6421985 3.482661 1.242483 3.28559 3.766896 -2.04443 0.6186323
obs8 obs9 obs10 mean sd
muestra1 -0.8293636 0.4903819 2.790091 1.344514 1.951292
```

Normalmente emplearemos sin embargo una ordenación por columnas (cada fila se corresponderá con una generación).

- Generar el histograma (en escala de densidades) de las medias muestrales y compararlo con la densidad teórica.

Distribución de la media muestral:

```
hist(muestras$mean, freq = FALSE, breaks = "FD",
 xlab = "Medias", ylab = "Densidad")
Densidad observada (estimación)
lines(density(muestras$mean))
Densidad teórica (bajo normalidad)
```

```

curve(dnorm(x, mux, sdx/sqrt(nx)), lwd = 2, col = "blue", add = TRUE)
Aproximación del valor esperado de la media muestral mediante simulación
abline(v = mean(muestras$mean), lty = 2)
Valor esperado de la media muestral (teórico)
abline(v = mux, col = "blue")

```

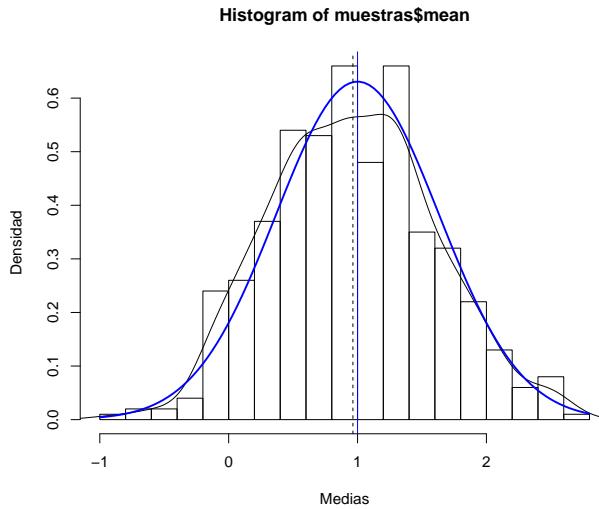


Figura 8.1: Distribución de la media muestral de una distribución normal.

### Ejercicio 8.2.

Si  $X_1, \dots, X_n$  es una m.a.s. de una variable aleatoria  $X$  (cualquiera) con  $E(X) = \mu$  y  $Var(X) = \sigma^2$ , por el Teorema Central del Límite, la distribución en el muestreo de  $\hat{\mu} = \bar{X}$  se aproxima a la normalidad:

$$\bar{X} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} N\left(\mu, \frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right)$$

Típicamente se suele considerar que esta aproximación es buena para tamaños muestrales  $n > 30$ , aunque dependerá de las características de la distribución de  $X$ .

- a) Repetir el ejercicio anterior considerando muestras de una  $Exp(1)$  (tener en cuenta que  $X \sim Exp(\lambda) \Rightarrow \mu_X = \sigma_X = 1/\lambda$ ). ¿Qué ocurre con la distribución de la media muestral?

```
set.seed(54321) # Fijar semilla para reproducibilidad
nsim <- 500
nx <- 10
nx <- 50
```

Valores teóricos:

```
lambda <- 1
muexp <- 1/lambda
sdexp <- muexp
```

Simulación de las muestras:

```
muestras2 <- as.data.frame(matrix(rexp(nsim*nx, rate=lambda), ncol=nx))
rownames(muestras2) <- paste("muestra", 1:nsim, sep="")
colnames(muestras2) <- paste("obs", 1:nx, sep="")
```

Estimaciones:

```
muestras2$mean <- rowMeans(muestras2[,1:nx])
muestras2$sd <- apply(muestras2[,1:nx], 1, sd)
```

Distribución de la media muestral:

```
hist(muestras2$mean, xlim = c(-0.1, 2.5), freq = FALSE, breaks = "FD",
 xlab = "Medias", ylab = "Densidad")
Densidad observada (estimación)
lines(density(muestras2$mean))
Distribución asintótica (TCL)
curve(dnorm(x,muexp,sdexp/sqrt(nx)), lwd=2, col="blue", add=TRUE)
Aproximación del valor esperado de la media muestral mediante simulación
abline(v=mean(muestras2$mean),lty=2)
Valor esperado de la media muestral (teórico)
abline(v=muexp, col="blue")
```

- b) Aumentar el tamaño muestral a 50. ¿Se aproxima más la distribución de las medias muestrales a la teórica bajo normalidad?

Ejecutar el código del apartado anterior fijando `nx <- 50`.

## 8.2 Intervalos de confianza

### Ejercicio 8.3.

Siguiendo el enunciado del ejercicio 1, se deduce que el intervalo de confianza (de nivel  $1 - \alpha$ ) para la media  $\mu$  de una población normal con varianza conocida

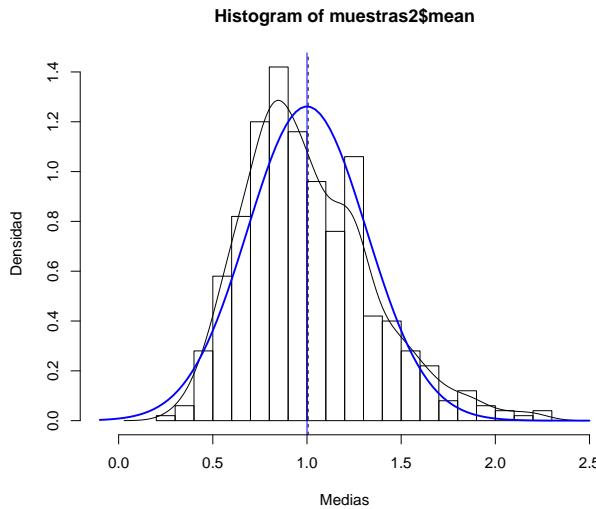


Figura 8.2: Distribución de la media muestral de una distribución exponencial y distribución asintótica.

es:

$$IC_{1-\alpha}(\mu) = \left( \bar{X} - z_{1-\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{X} + z_{1-\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right).$$

La idea es que el  $100(1 - \alpha)\%$  de los intervalos así construidos contendrán el verdadero valor del parámetro.

- a) Utilizando el conjunto de datos `muestras` del ejercicio 1 (500 muestras de tamaño  $n = 10$  de una  $N(1, 2)$ ), añadir en dos nuevas variables los extremos del intervalo de confianza para la media con varianza conocida al conjunto de datos. Analizar la cobertura de estas estimaciones por IC.

IC para la media con varianza conocida (bajo normalidad):

```
alfa <- 0.05
z <- qnorm(1 - alfa/2)
muestras$ici <- muestras$mean - z*sdx/sqrt(nx)
muestras$ics <- muestras$mean + z*sdx/sqrt(nx)
```

Cobertura de las estimaciones por IC:

```
muestras$cob <- (muestras$ici < mux) & (mux < muestras$ics)
ncob <- sum(muestras$cob) # N° de intervalos que contienen la verdadera media
ncob
```

```
[1] 480
```

```

100*ncob/nsim # Proporción de intervalos

[1] 96
100*(1 - alfa) # Proporción teórica bajo normalidad

[1] 95

```

Como ejemplo ilustrativo, generamos el gráfico de los primeros 50 intervalos:

```

m <- 50
tmp <- muestras[1:m,]
attach(tmp)
color <- ifelse(cob,"blue","red")
plot(1:m, mean, col = color, ylim = c(min(ici),max(ics)),
 xlab = "Muestra", ylab = "IC")
arrows(1:m, ici, 1:m, ics, angle = 90, length = 0.05, code = 3, col = color)
abline(h = mux, lty = 3)

```

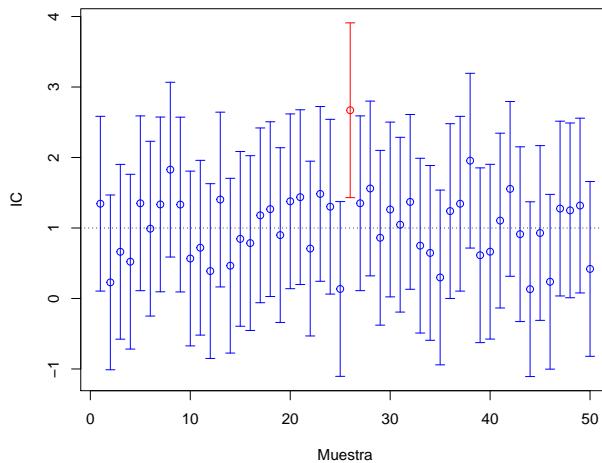


Figura 8.3: Cobertura de las estimaciones por IC.

```
detach(tmp)
```

- b) Repetir el apartado anterior considerando muestras de una  $Exp(1)$ . ¿Qué ocurre con la cobertura del intervalo de confianza obtenido bajo normalidad?

144 CAPÍTULO 8. APLICACIONES DE LA SIMULACIÓN EN INFERENCIA ESTADÍSTICA

Ejecutar el código del apartado a) del ejercicio 2.

IC para la media con varianza conocida (bajo normalidad)

```
alfa <- 0.05
z <- qnorm(1 - alfa/2)
muestras2$ici <- muestras2$mean - z*sdxp/sqrt(nx)
muestras2$ics <- muestras2$mean + z*sdxp/sqrt(nx)
```

Cobertura de las estimaciones por IC:

```
muestras2$cob <- (muestras2$ici < muexp) & (muexp < muestras2$ics)
ncob <- sum(muestras2$cob) # N° de intervalos que contienen la verdadera media
ncob

[1] 469
100*ncob/nsim # Proporción de intervalos

[1] 93.8
100*(1 - alfa) # Proporción teórica bajo normalidad

[1] 95
```

Como ejemplo ilustrativo, generamos el gráfico de los primeros 100 intervalos:

```
m <- 100
tmp <- muestras2[1:m,]
attach(tmp)
color <- ifelse(cob,"blue","red")
plot(1:m, mean, col = color, ylim = c(min(ici),max(ics)),
 xlab = "Muestra", ylab = "IC")
arrows(1:m, ici, 1:m, ics, angle = 90, length = 0.05, code = 3, col = color)
abline(h = muexp, lty = 3)

detach(tmp)
```

c) ¿Qué ocurre si aumentamos el tamaño muestral a 50?

Ejecutar el código del ejercicio anterior fijando `nx <- 50` y el del apartado anterior.

En los apartados b) y c) podíamos considerar bootstrap descrito al final de este capítulo.

Podemos aproximar por simulación los intervalos de probabilidad de la media muestral (tendríamos una idea del valor esperado de lo que obtendríamos con el bootstrap percentil; en este caso el estimador es insesgado...):

```
Distribución de la media muestral
hist(muestras2$mean, freq=FALSE, breaks="FD",
```

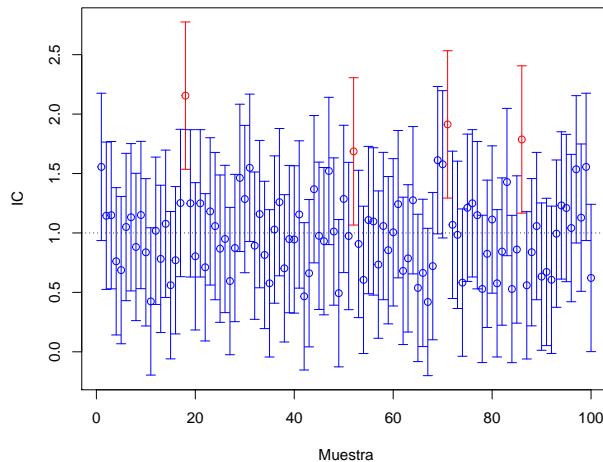


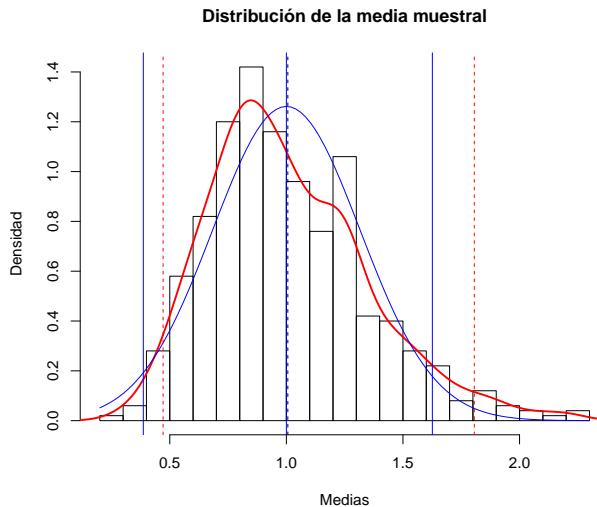
Figura 8.4: Cobertura de las estimaciones por IC (bajo normalidad).

```

main="Distribución de la media muestral", xlab="Medias", ylab="Densidad")
Densidad observada (estimación)
lines(density(muestras2$mean), lwd=2, col='red')
Densidad teórica (bajo normalidad)
curve(dnorm(x,muexp,sdexp/sqrt(nx)), col="blue", add=TRUE)
Aproximación por simulación del valor esperado de la media muestral
abline(v=mean(muestras2$mean), lty=2)
Valor esperado de la media muestral (teórico)
abline(v=muexp, col="blue")
IP bajo normalidad
ic.aprox <- apply(muestras2[,c('ici','ics')], 2, mean)
ic.aprox
ici ics
0.3865199 1.6261099
Intervalo de probabilidad para la media muestral aproximado bajo normalidad
abline(v = ic.aprox, col='blue')

Intervalo de probabilidad para la media muestral (aproximado por simulación)
ic.sim <- quantile(muestras2$mean, c(alfa/2, 1 - alfa/2))
ic.sim
2.5% 97.5%
0.4714233 1.8059094
IP (aprox.)
abline(v=ic.sim, lty=2, col='red')

```



*Nota:* . Estimaciones puntuales, por intervalo de confianza y contrastes de hipótesis para la media con varianza desconocida bajo normalidad se pueden obtener con la función `t.test`.

#### Ejercicio 8.4.

El Intervalo de confianza para una proporción construido usando la aproximación normal tiene un mal comportamiento cuando el tamaño de la muestra es pequeño. Una simple y efectiva mejora consiste en añadir a la muestra  $2a$  elementos,  $a$  éxitos y  $a$  fracasos. Así el intervalo de confianza al  $(1 - \alpha) 100\%$  para una proporción mejorado es:

$$IC_{1-\alpha}^a(p) = \left( \tilde{p} - z_{1-\alpha/2} \sqrt{\frac{\tilde{p}(1-\tilde{p})}{\tilde{n}}}, \tilde{p} + z_{1-\alpha/2} \sqrt{\frac{\tilde{p}(1-\tilde{p})}{\tilde{n}}} \right),$$

siendo  $\tilde{n} = n + 2a$ ,  $\tilde{p} = \frac{np + a}{\tilde{n}}$ .

En el caso de  $a = 2$  se denomina IC Agresti-Coull.

- a) Teniendo en cuenta que la v.a.  $X = n\hat{p} \sim \mathcal{B}(n, p)$ , obtener y representar gráficamente la cobertura teórica del intervalo de confianza estándar ( $a = 0$ ) de una proporción para una muestra de tamaño  $n = 30$ ,  $\alpha = 0.05$  y distintos valores de  $p$  (`p.teor <- seq(1/n, 1 - 1/n, length = 1000)`).

Parámetros:

```
n <- 30
alpha <- 0.05
adj <- 0 # (adj <- 2 para Agresti-Coull)
```

Probabilidades teóricas:

```
m <- 1000
p.teor <- seq(1/n, 1 - 1/n, length = m)
```

Posibles resultados:

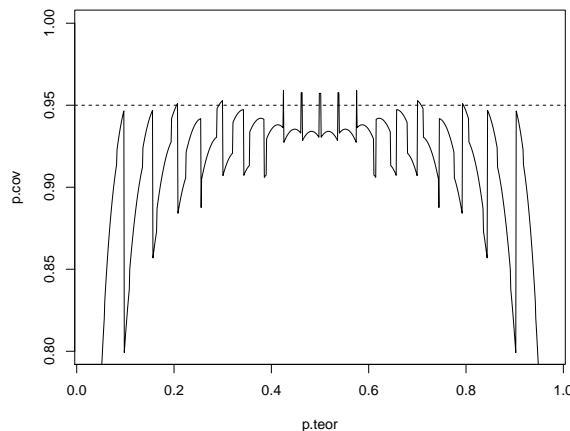
```
x <- 0:n
p.est <- (x + adj)/(n + 2 * adj)
ic.err <- qnorm(1 - alpha/2) * sqrt(p.est * (1 - p.est)/(n + 2 * adj))
lcl <- p.est - ic.err
ucl <- p.est + ic.err
```

Recorrer prob. teóricas:

```
p.cov <- numeric(m)
for (i in 1:m) {
 # cobertura de los posibles intervalos
 cover <- (p.teor[i] >= lcl) & (p.teor[i] <= ucl)
 # prob. de los posibles intervalos
 p.rel <- dbinom(x[cover], n, p.teor[i])
 # prob. total de cobertura
 p.cov[i] <- sum(p.rel)
}
```

Gráfico coberturas:

```
plot(p.teor, p.cov, type = "l", ylim = c(1 - 4 * alpha, 1))
abline(h = 1 - alpha, lty = 2)
```



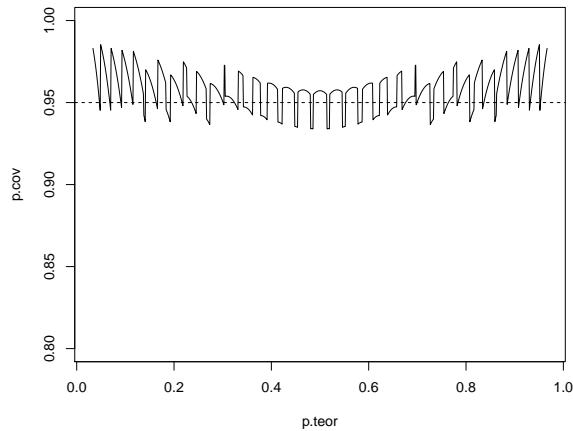
Fuente Suess y Trumbo (2010).

- b) Repetir el apartado anterior considerando intervalos de confianza Agresti-Coull ( $a = 2$ ).

Parámetros:

```
n <- 30
alpha <- 0.05
adj <- 2 # Agresti-Coull

Probabilidades teóricas:
m <- 1000
p.teor <- seq(1/n, 1 - 1/n, length = m)
Posibles resultados:
x <- 0:n
p.est <- (x + adj)/(n + 2 * adj)
ic.err <- qnorm(1 - alpha/2) * sqrt(p.est * (1 - p.est)/(n + 2 * adj))
lcl <- p.est - ic.err
ucl <- p.est + ic.err
Recorrer prob. teóricas:
p.cov <- numeric(m)
for (i in 1:m) {
 # cobertura de los posibles intervalos
 cover <- (p.teor[i] >= lcl) & (p.teor[i] <= ucl)
 # prob. de los posibles intervalos
 p.rel <- dbinom(x[cover], n, p.teor[i])
 # prob. total de cobertura
 p.cov[i] <- sum(p.rel)
}
Gráfico coberturas:
plot(p.teor, p.cov, type = "l", ylim = c(1 - 4 * alpha, 1))
abline(h = 1 - alpha, lty = 2)
```



- c) Repetir el apartado anterior empleando simulación para aproximar la cobertura.

Parámetros:

```
n <- 30
alpha <- 0.05
adj <- 2 #' (2 para Agresti-Coull)

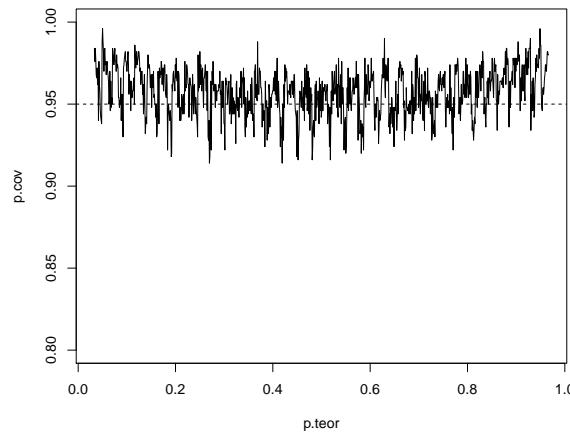
set.seed(54321)
nsim <- 500
Probabilidades teóricas:
m <- 1000
p.teor <- seq(1/n, 1 - 1/n, length = m)
```

Recorrer prob. teóricas:

```
m <- length(p.teor)
p.cov <- numeric(m)
for (i in 1:m) {
 # Equivalente a simular nsim muestras de tamaño n
 # ry <- matrix(rbinom(n*nsim, 1, p.teor[i]), ncol=n)
 # rx <- apply(ry, 1, sum)
 rx <- rbinom(nsim, n, p.teor[i])
 p.est <- (rx + adj)/(n + 2 * adj)
 ic.err <- qnorm(1 - alpha/2) * sqrt(p.est * (1 - p.est)/(n + 2 * adj))
 p.cov[i] <- mean(abs(p.est - p.teor[i]) < ic.err)
}
```

Representar:

```
plot(p.teor, p.cov, type = "l", ylim = c(1 - 4 * alpha, 1))
abline(h = 1 - alpha, lty = 2)
```



Como ya se comentó, el caso de ajustar un modelo a los datos y realizar simulaciones a partir de ese modelo ajustado para aproximar las características de interés de un estadístico, se denomina también bootstrap paramétrico (Ver Sección 4.1 de Cao y Fernández-Casal, 2019).

En este libro en las secciones 5.6 y E.3.2, se incluyen ejemplos adicionales de estudios de simulación.

### 8.3 Contrastes de hipótesis

Ver Apéndice A de Cao y Fernández-Casal (2019).

#### Ejercicio 8.5.

En el tema 2 se propuso el análisis de la bondad de ajuste de un generador de números pseudo-aleatorios mediante el test de Kolmogorov-Smirnov. Sin embargo, si  $H_0$  es compuesta (los parámetros desconocidos se estiman por máxima verosimilitud y se trabaja con  $\hat{F}_0$ ) los cuantiles de la distribución (asintótica) de  $D_n$  pueden ser demasiado conservativos y sería preferible utilizar la distribución exacta.

- a) Analizar el comportamiento del contraste de Kolmogorov-Smirnov para contrastar normalidad empleando repetidamente este test, considerando 1000 pruebas con muestras de tamaño 30 de una  $\mathcal{N}(0, 1)$ . Comparar gráficamente el ajuste de la distribución del  $p$ -valor a la de referencia (estudiar el tamaño del contraste).

Valores iniciales:

```
set.seed(54321)
nx <- 30
mx <- 0
sx <- 1
nsim <- 1000
estadistico <- numeric(nsim)
pvalor <- numeric(nsim)
```

Realizar contrastes

```
for(isim in 1:nsim) {
 rx <- rnorm(nx, mx, sx)
 tmp <- ks.test(rx, "pnorm", mean(rx), sd(rx))
 estadistico[isim] <- tmp$statistic
 pvalor[isim] <- tmp$p.value
}
```

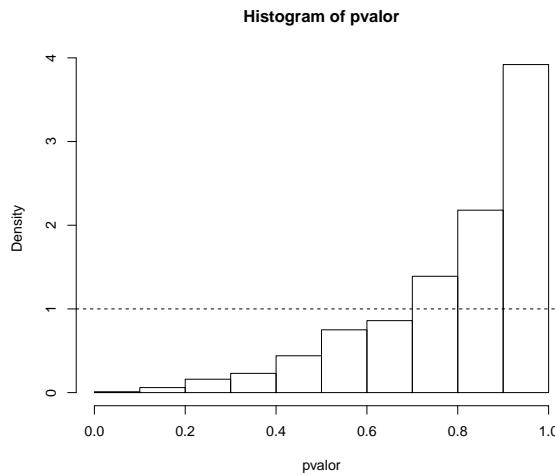
Proporción de rechazos:

```
{
 cat("\nProporción de rechazos al 1% =", mean(pvalor < 0.01), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 5% =", mean(pvalor < 0.05), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 10% =", mean(pvalor < 0.1), "\n")
}

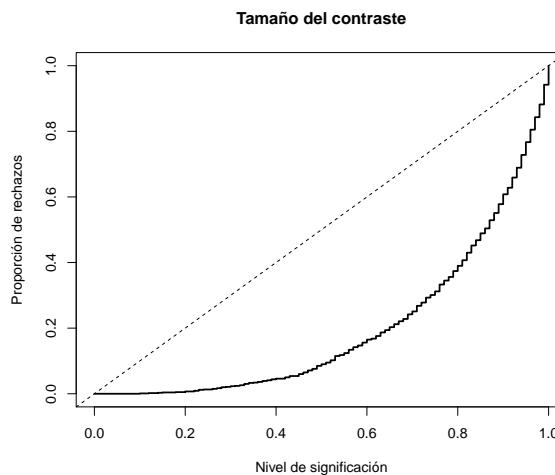
Proporción de rechazos al 1% = 0
Proporción de rechazos al 5% = 0
Proporción de rechazos al 10% = 0.001
```

Análisis de los p-valores:

```
hist(pvalor, freq=FALSE)
abline(h=1, lty=2) # curve(dunif(x,0,1), add=TRUE)
```



```
Distribución empírica
curve(ecdf(pvalor))(x), type = "s", lwd = 2,
 main = 'Tamaño del contraste', ylab = 'Proporción de rechazos',
 xlab = 'Nivel de significación')
abline(a=0, b=1, lty=2) # curve(punif(x, 0, 1), add = TRUE)
```



- b) Repetir el apartado anterior considerando el test de Lilliefors (rutina `lillie.test` del paquete `nortest`).

```
library(nortest, quietly = TRUE)
```

Valores iniciales:

```
set.seed(54321)
nx <- 30
mx <- 0
sx <- 1
nsim <- 1000
estadistico <- numeric(nsim)
pvalor <- numeric(nsim)
```

Realizar contrastes

```
for(isim in 1:nsim) {
 rx <- rnorm(nx, mx, sx)
 # tmp <- ks.test(rx, "pnorm", mean(rx), sd(rx))
 tmp <- lillie.test(rx)
 estadistico[isim] <- tmp$statistic
 pvalor[isim] <- tmp$p.value
}
```

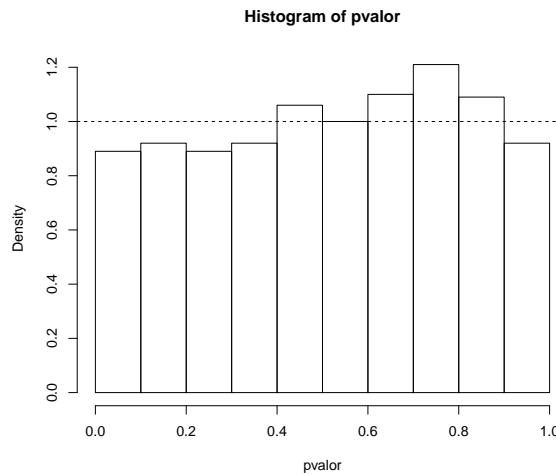
Proporción de rechazos:

```
{
 cat("\nProporción de rechazos al 1% =", mean(pvalor < 0.01), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 5% =", mean(pvalor < 0.05), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 10% =", mean(pvalor < 0.1), "\n")
}
```

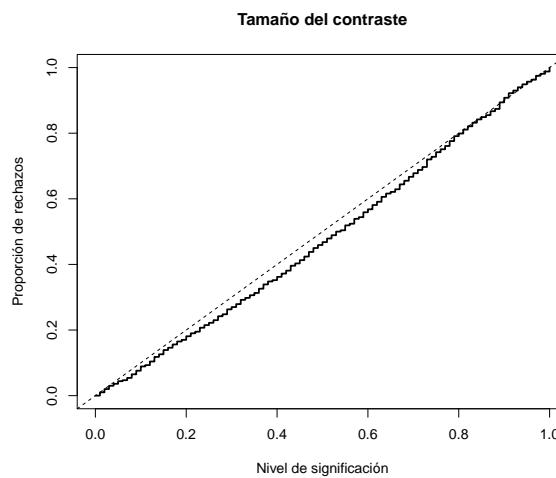
```
##
Proporción de rechazos al 1% = 0.01
Proporción de rechazos al 5% = 0.044
Proporción de rechazos al 10% = 0.089
```

Análisis de los p-valores:

```
hist(pvalor, freq=FALSE)
abline(h=1, lty=2) # curve(dunif(x,0,1), add=TRUE)
```



```
Distribución empírica
curve(ecdf(pvalor))(x), type = "s", lwd = 2, main = 'Tamaño del contraste',
 ylab = 'Proporción de rechazos', xlab = 'Nivel de significación')
abline(a=0, b=1, lty=2) # curve(punif(x, 0, 1), add = TRUE)
```



- c) Repetir el apartado a) contrastando una distribución exponencial y considerando 500 pruebas con muestras de tamaño 30 de una  $Exp(1)$ .

Valores iniciales:

```
set.seed(54321)
nx <- 30
rateex <- 1
```

```
nsim <- 500
estadistico <- numeric(nsim)
pvalor <- numeric(nsim)
```

Realizar contrastes

```
for(isim in 1:nsim) {
 rx <- rexp(nx, ratex)
 tmp <- ks.test(rx, "pexp", 1/mean(rx))
 estadistico[isim] <- tmp$statistic
 pvalor[isim] <- tmp$p.value
}
```

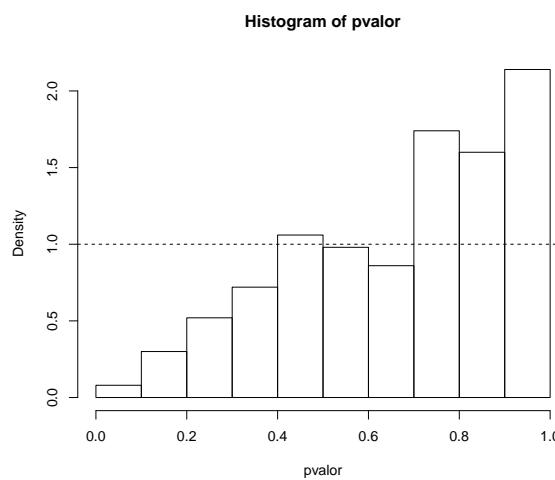
Proporción de rechazos:

```
{
 cat("\nProporción de rechazos al 1% =", mean(pvalor < 0.01), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 5% =", mean(pvalor < 0.05), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 10% =", mean(pvalor < 0.1), "\n")
}

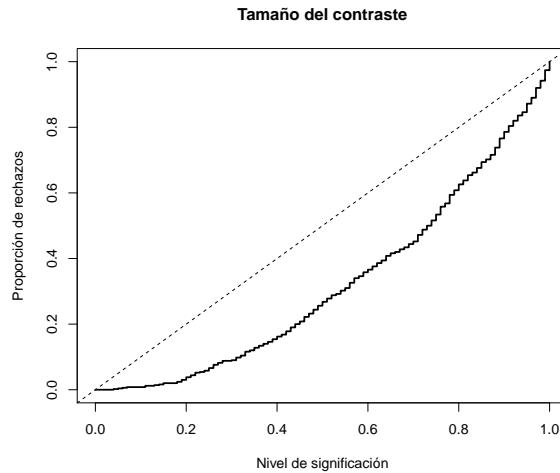
##
Proporción de rechazos al 1% = 0
Proporción de rechazos al 5% = 0.004
Proporción de rechazos al 10% = 0.008
```

Análisis de los p-valores:

```
hist(pvalor, freq=FALSE)
abline(h=1, lty=2) # curve(dunif(x,0,1), add=TRUE)
```



```
Distribución empírica
curve(ecdf(pvalor)(x), type = "s", lwd = 2,
 main = 'Tamaño del contraste', ylab = 'Proporción de rechazos',
 xlab = 'Nivel de significación')
abline(a=0, b=1, lty=2) # curve(punif(x, 0, 1), add = TRUE)
```



- d) Diseñar una rutina que permita realizar el contraste KS de bondad de ajuste de una variable exponencial aproximando el  $p$ -valor por simulación y repetir el apartado anterior empleando esta rutina.

```
ks.exp.sim <- function(x, nsim = 10^3) {
 DNAME <- deparse(substitute(x))
 METHOD <- "Kolmogorov-Smirnov Test of pexp by simulation"
 n <- length(x)
 RATE <- 1/mean(x)
 ks.exp.stat <- function(x, rate=1/mean(x)) {
 DMinus <- pexp(sort(x), rate=rate) - (0:(n - 1))/n
 DPlus <- 1/n - DMinus
 Dn = max(c(DMinus, DPlus))
 }
 STATISTIC <- ks.exp.stat(x, rate = RATE)
 names(STATISTIC) <- "Dn"
 # PVAL <- 0
 # for(i in 1:nsim) {
 # rx <- rexp(n, rate = RATE)
 # if (STATISTIC <= ks.exp.stat(rx)) PVAL <- PVAL+1
 # }
 # PVAL <- PVAL/nsim
 # PVAL <- PVAL/(nsim + 1)
```

```

PVAL <- (PVAL + 1)/(nsim + 2)
rx <- matrix(rexp(n*nsim, rate = RATE), ncol=n)
PVAL <- mean(STATISTIC <= apply(rx, 1, ks.exp.stat))
return(structure(list(statistic = STATISTIC, alternative = "two.sided",
 p.value = PVAL, method = METHOD, data.name = DNAME),
 class = "htest"))
}

```

Simulación:

```

set.seed(54321)
nx <- 30
ratex <- 1
nsim <- 500
estadistico <- numeric(nsim)
pvalor <- numeric(nsim)

```

Realizar contrastes

```

for(isim in 1:nsim) {
 rx <- rexp(nx, ratex)
 # tmp <- ks.test(rx, "pexp", 1/mean(rx))
 tmp <- ks.exp.sim(rx, nsim = 200)
 estadistico[isim] <- tmp$statistic
 pvalor[isim] <- tmp$p.value
}

```

Proporción de rechazos:

```

{
 cat("\nProporción de rechazos al 1% =", mean(pvalor < 0.01), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 5% =", mean(pvalor < 0.05), "\n")
 cat("Proporción de rechazos al 10% =", mean(pvalor < 0.1), "\n")

 ##
 ## Proporción de rechazos al 1% = 0.008
 ## Proporción de rechazos al 5% = 0.058
 ## Proporción de rechazos al 10% = 0.106
}

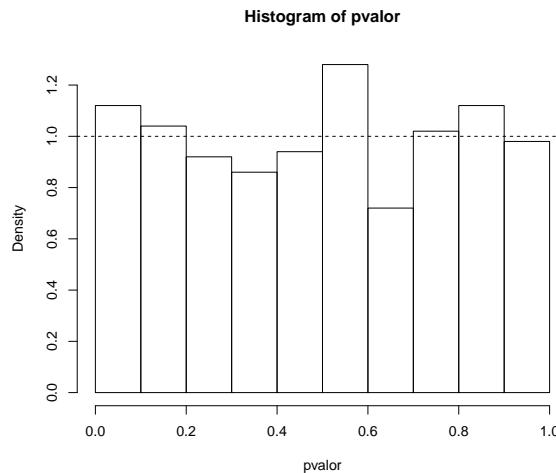
```

Análisis de los p-valores:

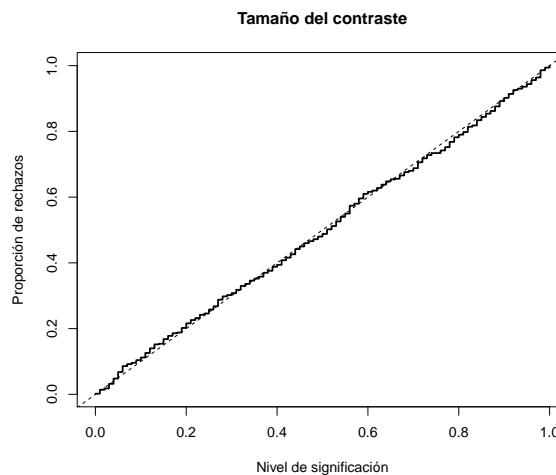
```

hist(pvalor, freq=FALSE)
abline(h=1, lty=2) # curve(dunif(x,0,1), add=TRUE)

```



```
Distribución empírica
curve(ecdf(pvalor))(x), type = "s", lwd = 2,
 main = 'Tamaño del contraste', ylab = 'Proporción de rechazos',
 xlab = 'Nivel de significación')
abline(a=0, b=1, lty=2) # curve(punif(x, 0, 1), add = TRUE)
```



- e) Estudiar la potencia de los contrastes de los apartados c) y d), considerando como alternativa una distribución Weibull.

La distribución exponencial es un caso particular de la Weibull: `dexp(x, ratex) == dweibull(x, 1, 1/ratex)`. Estudiamos lo que ocurre al desplazar `dweibull(x, shape, 1/ratex)` con  $0 < \text{shape} < 2$ .

CUIDADO: las simulaciones pueden requerir de mucho tiempo de

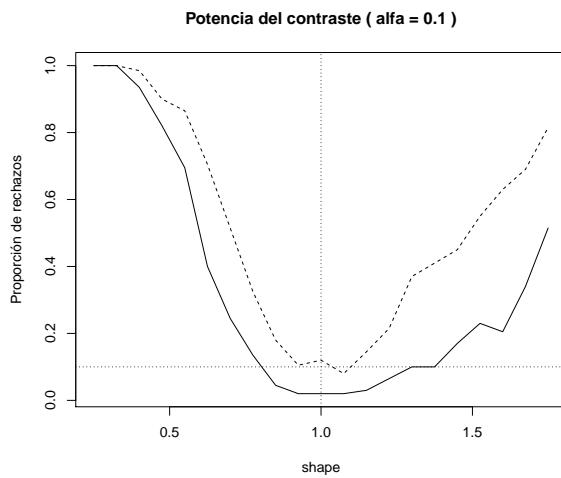
computación (consideramos valores pequeños de `nx` y `nsim` en datos y en `ks.exp.sim`).

```
set.seed(54321)
nx <- 20
ratex <- 1 # Puede ser interesante representarlo variando rate
nsim <- 200
alfa <- 0.1 # Puede ser interesante representarlo variando alfa

shapex <- seq(0.25, 1.75, len=21)
preject <- numeric(length(shapex)) # Porporciones de rechazos con ks.test
ks.test.p <- function(x) ks.test(x, "pexp", 1/mean(x))$p.value
preject2 <- preject # Porporciones de rechazos con ks.exp.sim
ks.exp.sim.p <- function(x) ks.exp.sim(x, 200)$p.value

for (i in seq_along(shapex)) {
 rx <- matrix(rweibull(nx*nsim, shape = shapex[i], scale = 1/ratex), ncol=nx)
 preject[i] <- mean(apply(rx, 1, ks.test.p) <= alfa)
 preject2[i] <- mean(apply(rx, 1, ks.exp.sim.p) <= alfa)
}

plot(shapex, preject, type="l", main = paste("Potencia del contraste (alfa =", alfa, ")"),
 xlab = "shape", ylab = "Proporción de rechazos")
lines(shapex, preject2, lty = 2)
abline(h = alfa, v = 1, lty = 3)
```



El estadístico de Kolmogorov-Smirnov `Dn = max(c(DMinus, DPlus))` tiene ventajas desde el punto de vista teórico, pero puede no ser muy potente para detectar diferencias entre la distribución bajo la hipótesis nula y la distribución de los

datos. La ventaja de la aproximación por simulación es que no estamos atados a resultados teóricos y podemos emplear el estadístico que se considere oportuno (la principal desventaja es el tiempo de computación). Por ejemplo, podríamos pensar en utilizar como estadístico la suma de los errores en valor absoluto del correspondiente gráfico PP, y solo habría que cambiar el estadístico  $D_n$  en la función `ks.exp.sim` por  $D_n = \sum(\text{abs}((1:n - 0.5)/n - \text{pexp}(\text{sort}(x), \text{rate}=rate)))$ .

## 8.4 Comparación de estimadores

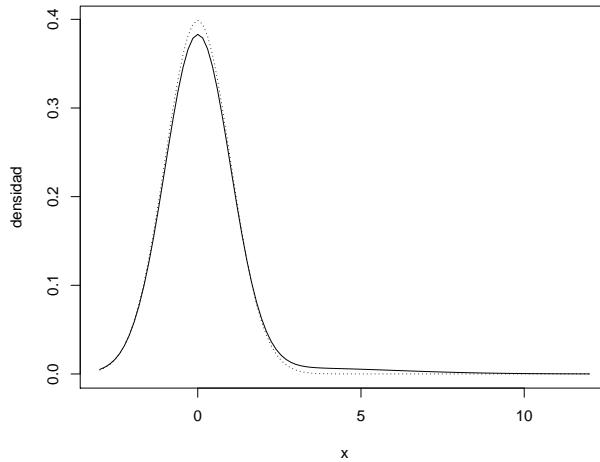
### Ejercicio 8.6.

Supongamos que estamos interesados en estudiar el efecto de datos atípicos en la estimación de la media teórica mediante la media y la mediana muestrales. Consideramos una v.a. con distribución normal contaminada, en la que una observación procede de una  $N(0, 1)$  con probabilidad 0.95 y de una  $N(3, 3^2)$  con probabilidad 0.05 (mixtura). Se puede generar una muestra de esta variable mediante los comandos:

```
p.sim <- rbinom(n, 1, 0.05)
dat.sim <- rnorm(n, 3*p.sim, 1+2*p.sim)
```

Función de densidad:

```
curve(dnorm(x, 0, 1), -3, 12, ylab = 'densidad', lty = 3)
curve(0.95*dnorm(x, 0, 1) + 0.05*dnorm(x, 3, 3), add = TRUE)
```



*Nota:* . También es habitual simular este tipo de datos generando un porcentaje alto de valores (en este caso un 95%) de la distribución base ( $N(0, 1)$ ) y el resto

(5%) de la distribución “contaminadora” ( $N(3, 3^2)$ ), aunque se suele considerar un porcentaje de contaminación del 1% o inferior. En el tema 7 se describirá el método de composición para simular mixturas.

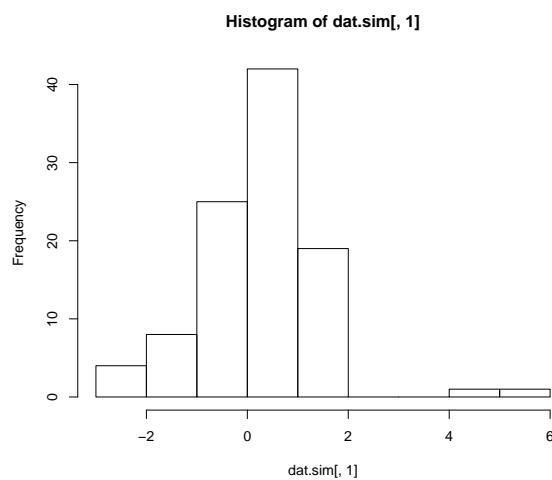
- a) Aproximar mediante simulación (500 generaciones) el sesgo y error estándar de la media y la mediana en el caso de una muestra de tamaño  $n = 100$  (suponiendo que se pretende estimar la media no contaminada 0).

```
media y mediana
xsd <- 1
xmed <- 0
ndat <- 100
nsim <- 500

for (isim in 1:nsim) # evitar matrix y apply
set.seed(1)
ntsim <- ndat*nsim
p.sim <- rbinom(ntsim, 1, 0.05)
dat.sim <- rnorm(ntsim, 3*p.sim, 1+2*p.sim)
dat.sim <- matrix(dat.sim, ncol=nsim)
```

Cada columna es una muestra

```
str(dat.sim[,1])
num [1:100] 0.197 -0.42 1.163 -0.406 0.744 ...
hist(dat.sim[,1])
```



Calculamos los estimadores:

```
mean.sim <- apply(dat.sim, 2, mean)
median.sim <- apply(dat.sim, 2, median)
```

Estimamos sus características:

```
mean(mean.sim) # Coincide con el sesgo (media teórica es 0)
```

```
[1] 0.1459986
```

```
sd(mean.sim)
```

```
[1] 0.1349537
```

```
mean(median.sim) # Coincide con el sesgo (media teórica es 0)
```

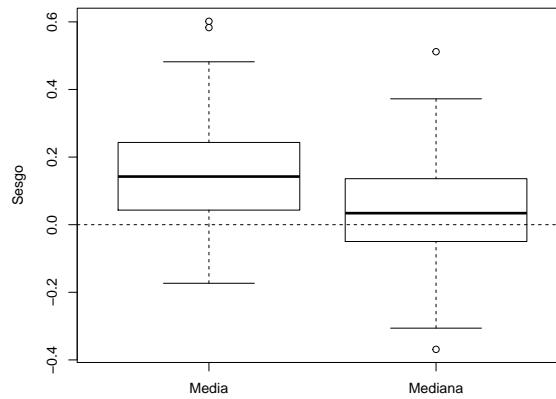
```
[1] 0.04453509
```

```
sd(median.sim)
```

```
[1] 0.1300611
```

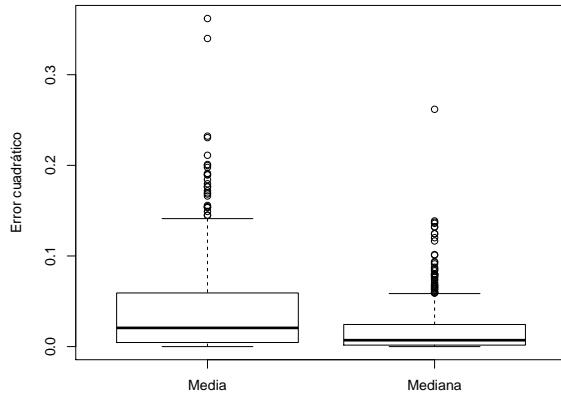
Sesgo:

```
boxplot(mean.sim-xmed, median.sim-xmed,
 names=c("Media", "Mediana"), ylab="Sesgo")
abline(h = 0, lty = 2)
```



Error cuadrático:

```
boxplot((mean.sim-xmed)^2, (median.sim-xmed)^2,
 names=c("Media", "Mediana"), ylab="Error cuadrático")
```



Estadísticos error cuadrático:

```
SE media
summary((mean.sim-xmed)^2)

Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu. Max.
0.0000005 0.0045072 0.0206272 0.0394917 0.0591531 0.3619587

SE mediana
summary((median.sim-xmed)^2)

Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu. Max.
0.0000001 0.0016481 0.0070625 0.0188654 0.0243903 0.2618368
```

## 8.5 Remuestreo Bootstrap

Ver Cao y Fernández-Casal (2019).

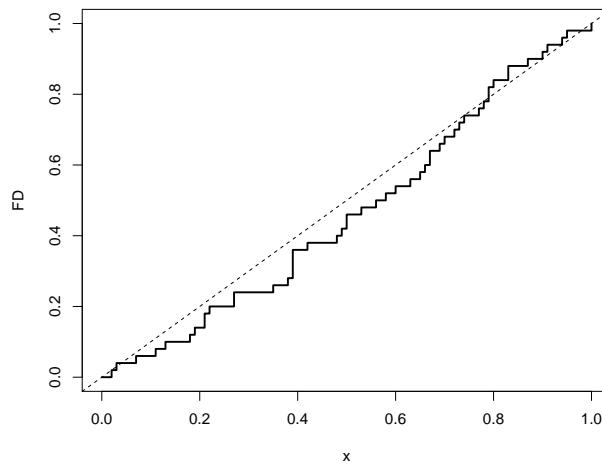
### 8.5.1 Idea:

Consideramos un conjunto de datos simulado:

```
set.seed(1)
data <- runif(50)
```

La idea es aproximar características poblacionales por las correspondientes de la distribución empírica de los datos observados:

```
Distribución bootstrap
curve(ecdf(data)(x), ylab = "FD", type = "s", lwd = 2)
Distribución teórica
abline(a = 0, b = 1, lty = 2)
```



Las características de la distribución empírica se pueden aproximar mediante simulación. En el caso i.i.d. esto puede ser implementado mediante remuestreo, realizando repetidamente muestreo aleatorio con reemplazamiento del conjunto de datos original (manteniendo el tamaño muestral):

```
Muestra bootstrap
xboot <- sample(data, replace=TRUE)
```

### 8.5.2 Métodos de remuestreo Bootstrap

Método de remuestreo (Efron, 1979) utilizado para aproximar características de la distribución en el muestreo de un estadístico:

- Aproximación del sesgo y de la varianza.
- Construcción de intervalos de confianza
- Realizar contrastes de hipótesis.

De utilidad cuando no se dispone la distribución exacta, no es adecuado emplear la distribución asintótica, etc. La idea es aproximar características poblacionales por las correspondientes de la distribución empírica de los datos observados. En el caso i.i.d. esto puede ser implementado mediante remuestreo, realizando

repetidamente **muestreo aleatorio con reemplazamiento del conjunto de datos original** (manteniendo el tamaño muestral).

Si  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$  es una muestra i.i.d.  $F_\theta$  y  $\hat{\theta} = T(\mathbf{x})$  es un estimador de  $\theta$ . Para  $b = 1, \dots, B$  :

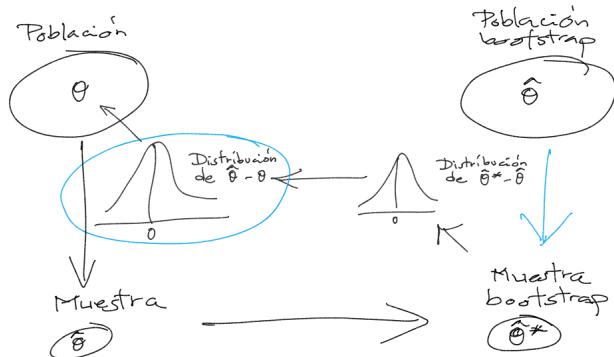
- $\mathbf{x}_b^* = (x_{b1}^*, x_{b2}^*, \dots, x_{bn}^*)^t$  muestra bootstrap obtenida mediante muestreo con reemplazamiento de  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ .
- $\hat{\theta}_b^* = T(\mathbf{x}_b^*)$  valor del estadístico en la muestra bootstrap.

La idea original (bootstrap natural, Efron) es que la variabilidad de  $\hat{\theta}_b^*$  en torno a  $\hat{\theta}$  aproxima la variabilidad de  $\hat{\theta}$  en torno a  $\theta$ :

- La distribución de  $\hat{\theta}_b^* - \hat{\theta}$  aproxima la distribución de  $\hat{\theta} - \theta$ .

En general podríamos decir que:

- la muestra es a la población lo que la muestra bootstrap es a la muestra.



Para información adicional sobre bootstrap ver p.e.: Davison, A.C. and Hinkley, D.V. (1997). *Bootstrap Methods and Their Application*. Cambridge University Press

### 8.5.3 Ejemplo

Como ejemplo consideraremos una muestra de tamaño  $n = 100$  de una normal estándar para tratar de aproximar el sesgo y error estándar de la media y la mediana mediante bootstrap.

```
dat <- dat.sim[, 1]
set.seed(54321)
ndat <- 100
datmed <- 0
```

## 166CAPÍTULO 8. APLICACIONES DE LA SIMULACIÓN EN INFERENCIA ESTADÍSTICA

```
datstd <- 1
dat <- rnorm(ndat, mean=datmed, sd=datstd)
```

Consideramos 1000 réplicas bootstrap:

```
nboot <- 1000
```

Es habitual tomar nboot + 1 entero múltiplo de 100 e.g. nboot = 999 ó 1999 (facilita el cálculo de percentiles, orden (nboot + 1)\*p)

El valor del estadístico en la muestra es:

```
stat.dat <- mean(dat)
```

Generamos las réplicas bootstrap:

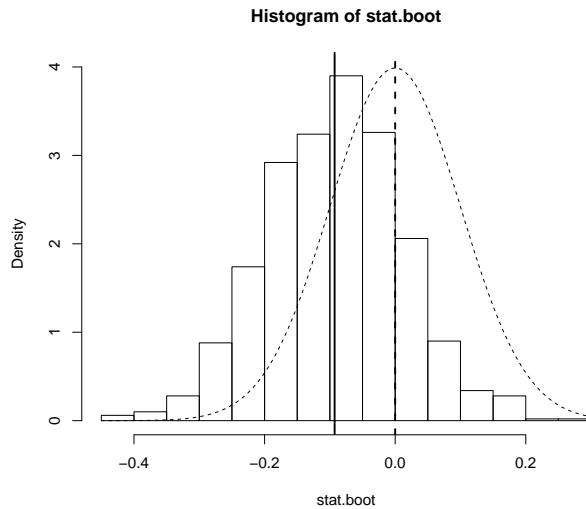
```
set.seed(1)
stat.boot <- numeric(nboot)
for (i in 1:nboot) {
 dat.boot <- sample(dat, replace=TRUE)
 stat.boot[i] <- mean(dat.boot)
}
Valor esperado bootstrap del estadístico
mean.boot <- mean(stat.boot)
mean.boot
```

```
[1] -0.09274131
```

Bootstrap percentil:

```
hist(stat.boot, freq=FALSE, ylim = c(0,4))
abline(v=mean.boot, lwd=2)
abline(v=stat.dat)

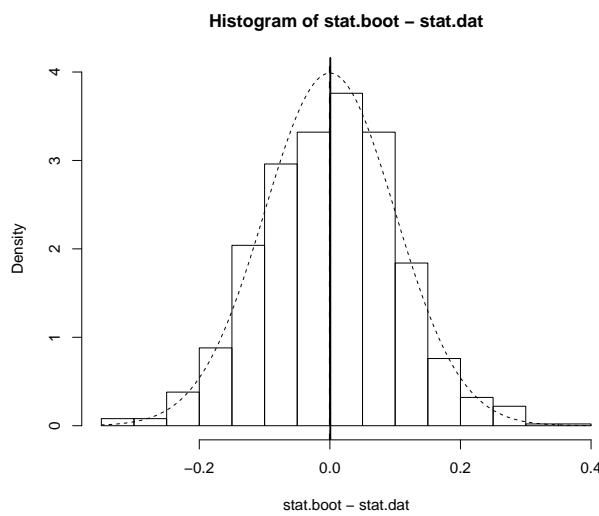
Distribución poblacional
curve(dnorm(x, datmed, datstd/sqrt(ndat)), lty=2, add=TRUE)
abline(v=datmed, lwd=2, lty=2)
```



Bootstrap natural/básico:

```
hist(stat.boot-stat.dat, freq=FALSE, ylim = c(0,4))
abline(v=mean.boot-stat.dat, lwd=2)

Distribución poblacional
Distribución teórica de stat.dat - stat.teor
curve(dnorm(x, 0, datsd/sqrt(ndat)), lty=2, add=TRUE)
abline(v=0, lwd=2, lty=2)
```



Sesgo y error estándar bootstrap:

```
sesgo (teor=0)
mean.boot - stat.dat

[1] 0.0006390906
error estándar
sd(stat.boot)

[1] 0.1044501
error estándar teórico
dat$sd/sqrt(ndat)
```

```
[1] 0.1
```

Versión “optimizada” para R:

```
boot.bootstrap <- function(dat, nboot=1000, statistic=mean)
{
 ndat <- length(dat)
 dat.boot <- sample(dat, ndat*nboot, replace=T)
 dat.boot <- matrix(dat.boot, ncol=nboot, nrow=ndat)
 stat.boot <- apply(dat.boot, 2, statistic)
}

fstatistic <- function(dat){
 # mean(dat)
 mean(dat, trim=0.2)
 # median(dat)
 # max(dat)
}

set.seed(1)
stat.dat <- fstatistic(dat)
stat.boot <- boot.bootstrap(dat, nboot, fstatistic)

res.boot <- c(stat.dat, mean(stat.boot)-stat.dat, sd(stat.boot))
names(res.boot) <- c("Estadístico", "Sesgo", "Err.Std")
res.boot

Estadístico Sesgo Err.Std
-0.144801929 0.005968729 0.119231743
```

#### 8.5.4 Paquetes R: bootstrap, boot

Ver Sección 1.4 de Cao y Fernández-Casal (2019).

```
library(boot)
?boot
```

Función estadístico:

```
boot.f <- function(data, indices){
 # data[indices] será la muestra bootstrap
 mean(data[indices])
}
```

Generación de las muestras

```
set.seed(1)
stat.boot <- boot(dat, boot.f, nboot)
stat.boot
```

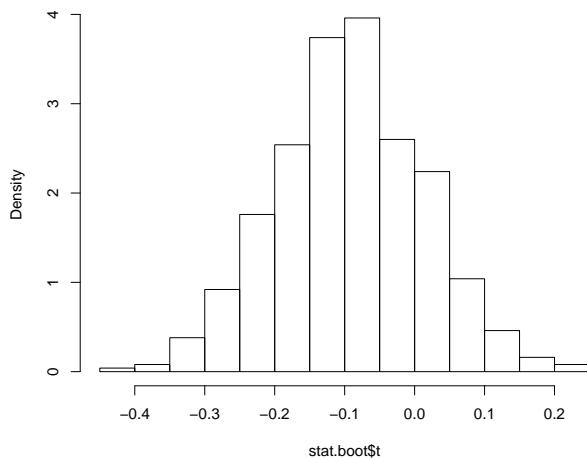
```
##
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP
##
##
Call:
boot(data = dat, statistic = boot.f, R = nboot)
##
##
Bootstrap Statistics :
original bias std. error
t1* -0.0933804 0.0006390906 0.1049474
names(stat.boot)

[1] "t0" "t" "R" "data" "seed" "statistic"
[7] "sim" "call" "stype" "strata" "weights"
```

### 8.5.5 Gráficos

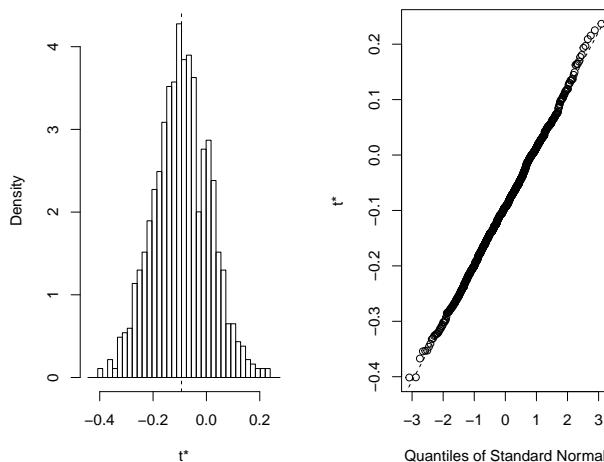
```
hist(stat.boot$t, freq=FALSE)
```

Histogram of stat.boot\$t

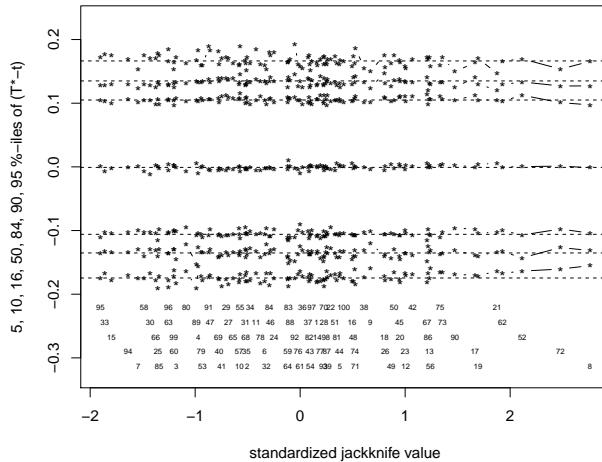


```
plot(stat.boot)
```

Histogram of t



```
jack.after.boot(stat.boot)
```



### 8.5.6 Intervalos de confianza bootstrap

```
boot.ci(stat.boot, type=c("norm", "basic", "perc", "bca"))

BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates
##
CALL :
boot.ci(boot.out = stat.boot, type = c("norm", "basic", "perc",
"bca"))
##
Intervals :
Level Normal Basic
95% (-0.2997, 0.1117) (-0.3028, 0.1147)

Level Percentile BCa
95% (-0.3015, 0.1161) (-0.2993, 0.1180)
Calculations and Intervals on Original Scale
```

#### Ejercicio 8.7.

Repetir el ejemplo anterior considerando la media recortada al 10% (ejemplo con parámetros adicionales).

```
boot.f <- function(data, indices, trim=0.1){
 mean(data[indices], trim)
}
```

```

set.seed(1)
boot(dat, boot.f, nboot, trim=0.2)

##
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP
##
##
Call:
boot(data = dat, statistic = boot.f, R = nboot, trim = 0.2)
##
##
Bootstrap Statistics :
original bias std. error
t1* -0.1448019 0.006095294 0.119021

```

**Ejercicio 8.8.** (propuesto)

En el tema 2 se propuso el análisis de la aleatoriedad de un generador de números pseudo-aleatorios mediante el test de rachas, que se podría implementar repetidamente. Sin embargo, la aproximación asintótica empleada por la rutina `runs.test` de la librería `tseries` no es adecuada para tamaños muestrales pequeños ( $n < 40$ ) y sería preferible utilizar la distribución exacta (o por lo menos utilizar una corrección por continuidad).

- Analizar el comportamiento del contraste empleando repetidamente el test de rachas, considerando 500 pruebas con muestras de tamaño 10 de una  $Bernoulli(0.5)$ . ¿Se observa algo extraño?
- Realiza un programa que permita aproximar por simulación la función de masa de probabilidad del estadístico número de rachas (a partir de valores de una  $Bernoulli(0.5)$ ). Representarla gráficamente y compararla con la densidad normal. Obtener los puntos críticos para contrastar la hipótesis nula de aleatoriedad para  $\alpha = 0.01, 0.05$  y  $0.1$ . ¿Es esta distribución adecuada para el contraste de aleatoriedad de variables continuas? ¿Cuál debería ser la probabilidad de obtener una única racha al aplicar el test a una variable continua?
- Diseñar una rutina que permita realizar el contraste de aleatoriedad de una variable continua approximando el  $p$ -valor por simulación. Asumir que la distribución del estadístico puede ser asimétrica, en cuyo caso el  $p$ -valor  $p = 2 \min \left\{ P(R \leq \hat{R} | H_0), P(R \geq \hat{R} | H_0) \right\}$ .
- Diseñar una rutina que permita realizar el contraste de aleatoriedad de una variable continua approximando el  $p$ -valor mediante bootstrap.

## Capítulo 9

# Integración y Optimización Montecarlo

Uno de los objetivos habituales de los estudios de simulación es la aproximación de una esperanza, es decir, se trataría de evaluar una integral, que en ocasiones puede ser compleja y de alta dimensión. Esto puede ser de interés en otros campos, aunque la integral no esté relacionada con procesos estocásticos. Adicionalmente, en muchos campos, incluido la Estadística, hay que resolver problemas de optimización. Para evitar problemas de mínimos locales se puede recurrir a herramientas que emplean búsquedas aleatorias.

### 9.1 Integración Monte Carlo (clásica)

La integración Monte Carlo se emplea principalmente para aproximar integrales multidimensionales:

$$I = \int \cdots \int h(x_1, \dots, x_d) dx_1 \cdots dx_d$$

donde puede presentar ventajas respecto a los métodos tradicionales de integración numérica (ver Apéndice C), ya que la velocidad de convergencia no depende del número de dimensiones.

Supongamos que nos interesa:

$$I = \int_0^1 h(x) dx$$

Si  $x_1, x_2, \dots, x_n$  i.i.d.  $\mathcal{U}(0, 1)$  entonces:

$$I = E(h(\mathcal{U}(0, 1))) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)$$

Si el intervalo de integración es genérico:

$$I = \int_a^b h(x) dx = (b-a) \int_a^b h(x) \frac{1}{(b-a)} dx = (b-a)E(h(\mathcal{U}(a,b))).$$

Si  $x_1, x_2, \dots, x_n$  i.i.d.  $\mathcal{U}(a, b)$ :

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)(b-a)$$

### Ejercicio 9.1.

Crear una función que implemente la integración Monte Carlo clásica para aproximar integrales del tipo:

$$I = \int_a^b h(x) dx.$$

```
mc.integral0 <- function(fun, a, b, n) {
 # Integración Monte Carlo de fun entre a y b utilizando una muestra de tamaño n
 # fun es una función de una sola variable (y que no es vectorial)
 # Se asume a < b y n entero positivo
 # -----
 x <- runif(n, a, b)
 fx <- sapply(x, fun) # Si fun fuese vectorial bastaría con: fx <- fun(x)
 return(mean(fx) * (b - a))
}
```

Emplearla para aproximar:

$$\int_0^1 4x^4 dx = \frac{4}{5},$$

y representar gráficamente la aproximación en función de  $n$ .

Función a integrar:

```
fun <- function(x) ifelse((x > 0) & (x < 1), 4 * x^4, 0)
return(4 * x^4)

curve(fun, 0, 1)
abline(h = 0, lty = 2)
abline(v = c(0, 1), lty = 2)

set.seed(1)
mc.integral0(fun, 0, 1, 20)

[1] 0.977663
```

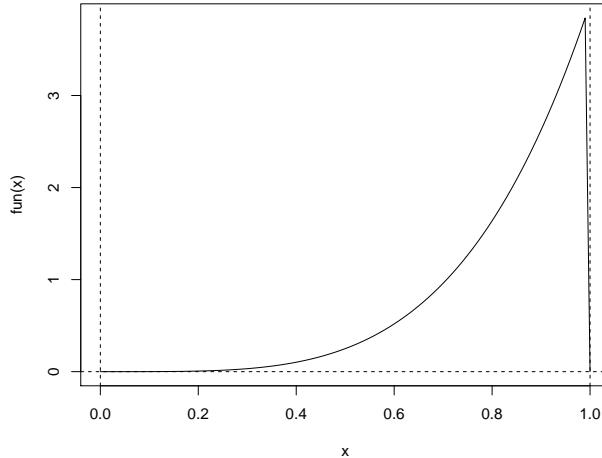


Figura 9.1: Ejemplo de integral en dominio acotado.

```
mc.integral0(fun, 0, 1, 100)
```

```
[1] 0.7311169
mc.integral0(fun, 0, 1, 100)

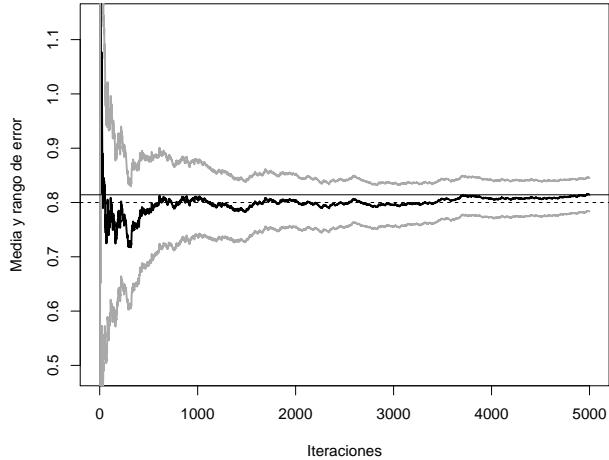
[1] 0.8304299
```

La función `mc.integral0` no es adecuada para analizar la convergencia de la aproximación por simulación. Una alternativa más eficiente para representar gráficamente la convergencia:

```
mc.integral <- function(fun, a, b, n, plot = TRUE) {
 fx <- sapply(runif(n, a, b), fun) * (b - a)
 if (plot) {
 estint <- cumsum(fx)/(1:n)
 esterr <- sqrt(cumsum((fx - estint)^2))/(1:n)
 plot(estint, ylab = "Media y rango de error", type = "l", lwd = 2, ylim = mean(fx) +
 2 * c(-esterr[1], esterr[1]), xlab = "Iteraciones")
 lines(estint + 2 * esterr, col = "darkgray", lwd = 2)
 lines(estint - 2 * esterr, col = "darkgray", lwd = 2)
 valor <- estint[n]
 abline(h = valor)
 return(list(valor = valor, error = 2 * esterr[n]))
 } else return(list(valor = mean(fx), error = 2 * sd(fx)/sqrt(n)))
}
```

```
set.seed(1)
mc.integral(fun, 0, 1, 5000)

$valor
[1] 0.8142206
##
$error
[1] 0.03087305
abline(h = 4/5, lty = 2)
```



Si sólo interesa la aproximación:

```
set.seed(1)
mc.integral(fun, 0, 1, 5000, plot = FALSE)
```

```
$valor
[1] 0.8142206
##
$error
[1] 0.0309005
```

**Nota:** Es importante tener en cuenta que la función `mc.integral` solo es válida para dominio finito.

### 9.1.1 Caso general

A partir a ahora consideraremos que interesa aproximar una integral de la forma:

$$\theta = E(h(X)) = \int h(x) f(x) dx$$

siendo  $X \sim f$ , entonces, si  $x_1, x_2, \dots, x_n$  i.i.d.  $X$ :

$$\theta \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)$$

Por ejemplo, como en el ejercicio anterior se considera de una función de densidad, se correspondería con el caso general de  $h(x) = x$  y  $f(x) = 4x^3$  para  $0 < x < 1$ . La idea es que, en lugar de considerar una distribución uniforme, es preferible generar más valores donde hay mayor “área” (ver Figura 9.1).

Los pasos serían simular  $x$  con densidad  $f$  y aproximar la integral por `mean(h(x))`. En este caso podemos generar valores de la densidad objetivo fácilmente mediante el método de inversión, ya que  $F(x) = x^4$  si  $0 < x < 1$ .

```
rfun <- function(nsim) runif(nsim)^^(1/4) # Método de inversión
nsim <- 5000
set.seed(1)
x <- rfun(nsim)
h <- function(x) x
res <- mean(h(x)) # Aproximación por simulación
res <- mean(x)
res

[1] 0.7967756
error <- 2*sd(h(x))/sqrt(nsim)
error <- 2*sd(x)/sqrt(nsim)
error

[1] 0.004728174
```

#### Ejercicio 9.2.

Aproximar:

$$\phi(t) = \int_t^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx,$$

para  $t = 4.5$ , empleando integración Monte Carlo (aproximación tradicional con dominio infinito).

```
h <- function(x) x > 4.5
f <- function(x) dnorm(x)
set.seed(1)
```

```

nsim <- 10^3
x <- rnorm(nsim)
mean(x > 4.5) # mean(h(x))

[1] 0
pnorm(-4.5) # valor teórico P(X > 4.5)

[1] 3.397673e-06

```

De esta forma es difícil que se generen valores (en este caso ninguno) en la región que interesaría para la aproximación de la integral:

```
any(x > 4.5)
```

```
[1] FALSE
```

Como ya se comentó anteriormente, sería preferible generar más valores donde hay mayor “área”, pero en este caso  $f$  concentra la densidad en una región que no resulta de utilidad. Por ese motivo puede ser preferible recurrir a una densidad auxiliar que solvente este problema.

## 9.2 Muestreo por importancia

Para aproximar la integral:

$$\theta = E(h(X)) = \int h(x) f(x) dx,$$

puede ser preferible generar observaciones de una densidad  $g$  que tenga una forma similar al producto  $hf$ .

Si  $Y \sim g$ :

$$\theta = \int h(x) f(x) dx = \int \frac{h(x) f(x)}{g(x)} g(x) dx = E(q(Y)).$$

siendo  $q(x) = \frac{h(x)f(x)}{g(x)}$ .

Si  $y_1, y_2, \dots, y_n$  i.i.d.  $Y \sim g$ :

$$\theta \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q(y_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w(y_i) h(y_i) = \hat{\theta}_g$$

con  $w(x) = \frac{f(x)}{g(x)}$ .

En este caso  $Var(\hat{\theta}_g) = Var(q(Y))/n$ , pudiendo reducirse significativamente respecto al método clásico si:

$$g(x) \underset{aprox.}{\propto} |h(x)| f(x),$$

ya que en ese caso  $|q(x)|$  sería aproximadamente constante (puede demostrarse fácilmente que la varianza es mínima si esa relación es exacta).

Para aplicar el TCL, la varianza del estimador  $\hat{\theta}_g$  es finita si:

$$E(q^2(Y)) = \int \frac{h^2(x) f^2(x)}{g(x)} dx = E\left(h^2(X) \frac{f(X)}{g(X)}\right) < \infty.$$

La idea básica es que si la densidad  $g$  tiene colas más pesadas que la densidad  $f$  con mayor facilidad puede dar lugar a “simulaciones” con varianza finita (podría emplearse en casos en los que no existe  $E(h^2(X))$ ; ver Sección 4.1 en el Tema 4 de Análisis de resultados).

La distribución de los pesos  $w(y_i)$  debería ser homogénea para evitar datos influyentes (inestabilidad).

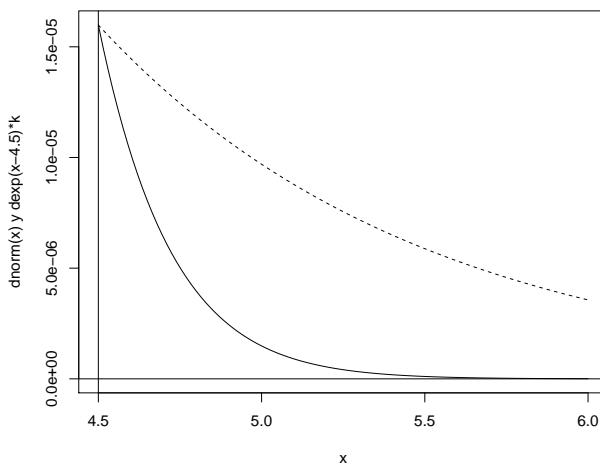
### Ejercicio 9.3.

Aproximar la integral del ejercicio anterior empleando muestreo por importancia considerando como densidad auxiliar una exponencial de parámetro  $\lambda = 1$  truncada en  $t$ :

$$g(x) = \lambda e^{-\lambda(x-t)}, x > t,$$

(emplear `rexp(n)+t` y `dexp(y-t)`). Comparar  $h(x)f(x)$  con  $g(x)f(4.5)$  y representar gráficamente la aproximación en función de  $n$ .

```
curve(dnorm(x), 4.5, 6, ylab = "dnorm(x) y dexp(x-4.5)*k")
abline(v = 4.5)
abline(h = 0)
escala <- dnorm(4.5) # Reescalado para comparación...
curve(dexp(x - 4.5) * escala, add = TRUE, lty = 2)
```



Se generan los valores de la densidad auxiliar y se calculan los pesos:

```
set.seed(1)
nsim <- 10^3
y <- rexp(nsim) + 4.5 # Y ~ g
w <- dnorm(y)/dexp(y - 4.5)
```

La aproximación por simulación sería `mean(w * h(y))`:

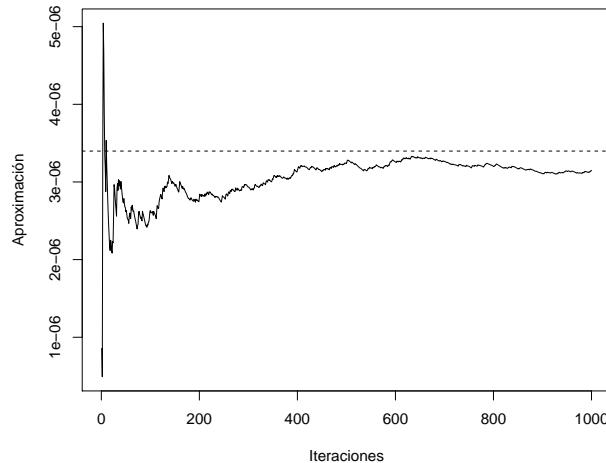
```
h(x) <- function(x) x > 4.5 # (1 si x > 4.5 => h(y) = 1)
mean(w) # w*h(y)
```

```
[1] 3.144811e-06
```

```
pnorm(-4.5) # valor teórico
```

```
[1] 3.397673e-06
```

```
plot(cumsum(w)/1:nsim, type = "l", ylab = "Aproximación", xlab = "Iteraciones")
abline(h = pnorm(-4.5), lty = 2)
```



El error estandar de la aproximación sería `sqrt(var(w * h(y))/nsim)`:

```
sqrt(var(w)/nsim) # sd(w*h(y))/sqrt(nsim)
```

```
[1] 1.371154e-07
```

Empleando la aproximación tradicional:

```
est <- mean(rnorm(nsim) > 4.5)
est
```

```
[1] 0
```

```
sqrt(est * (1 - est)/nsim)
```

```
[1] 0
```

**Ejercicio 9.4.**

Aproximar  $P(2 < X < 6)$  siendo  $X \sim Cauchy(0, 1)$  empleando muestreo por importancia y considerando como densidad auxiliar la normal estandar  $Y \sim N(0, 1)$ . Representar gráficamente la aproximación y estudiar los pesos  $w(y_i)$ .

**Nota:** En este caso van a aparecer problemas (la densidad auxiliar debería tener colas más pesadas que la densidad objetivo; sería adecuado si intercambiaramos las distribuciones objetivo y auxiliar, como en el ejercicio siguiente).

Se trata de aproximar  $pcauchy(6) - pcauchy(2)$ , i.e.  $f(y) = dcauchy(y)$  y  $h(y) = (y > 2) * (y < 6)$ , empleando muestreo por importancia con  $g(y) = dnorm(y)$ .

```
nsim <- 10^5
set.seed(4321)
y <- rnorm(nsim)
w <- dcauchy(y)/dnorm(y) # w <- w/sum(w) si alguna es una cuasidensidad
```

La aproximación por simulación es `mean(w(y) * h(y))`:

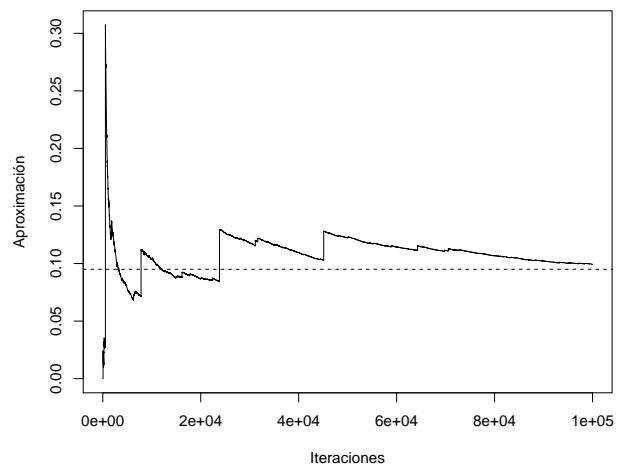
```
mean(w * (y > 2) * (y < 6))
```

```
[1] 0.09929348
pcauchy(6) - pcauchy(2) # Valor teórico
```

```
[1] 0.09501516
```

Si se estudia la convergencia:

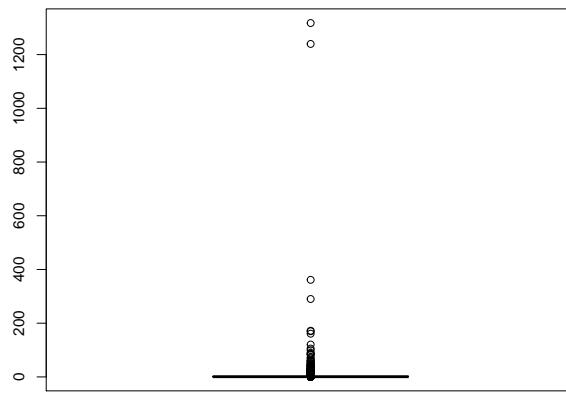
```
plot(cumsum(w * (y > 2) * (y < 6))/1:nsim, type = "l", ylab = "Aproximación", xlab = "Iteraciones"
abline(h = pcauchy(6) - pcauchy(2), lty = 2)
```



Lo que indica es una mala elección de la densidad auxiliar...

La distribución de los pesos debería ser homogénea. Por ejemplo, si los reescalamos para que su suma sea el número de valores generados, deberían tomar valores en torno a uno:

```
boxplot(nsim * w/sum(w))
```



### 9.2.1 Remuestreo (del muestreo) por importancia

Cuando  $f$  y/o  $g$  son quasi-densidades, para evitar calcular constantes normalizadoras, se emplea como aproximación:

$$\theta \approx \frac{\sum_{i=1}^n w(y_i)h(y_i)}{\sum_{i=1}^n w(y_i)}.$$

Adicionalmente, puede verse que con un muestreo de  $\{y_1, y_2, \dots, y_n\}$  ponderado por  $w(y_i)$  (prob. =  $w(y_i) / \sum_{i=1}^n w(y_i)$ ) se obtiene una simulación aproximada de  $f$  (*Sample importance resampling*, Rubin, 1987).

#### Ejercicio 9.5.

Generar 1000 simulaciones de una distribución (aprox.)  $N(0, 1)$  mediante remuestreo del muestreo por importancia de  $10^5$  valores de una  $Cauchy(0, 1)$ .

Se trata de simular una normal a partir de una Cauchy (Sampling Importance Resampling). En este caso  $f(y) = dnorm(y)$  y  $g(y) = dcauchy(y)$ , al revés del ejercicio anterior...

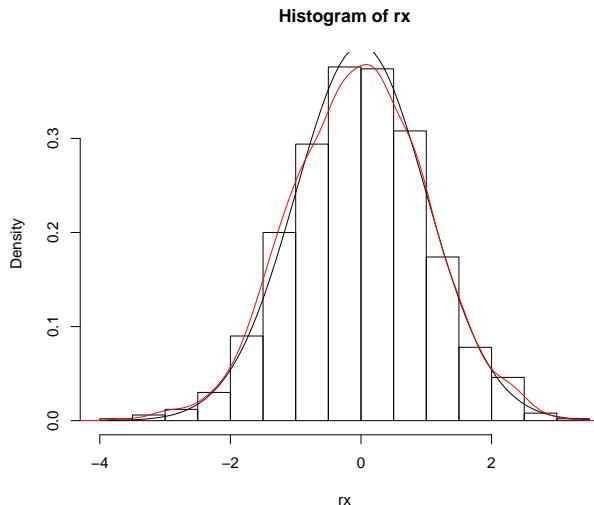
```
Densidad objetivo
f <- dnorm # f <- function(x)

nsim <- 10^3
El nº de simulaciones de la densidad auxiliar debe ser mucho mayor:
nsim2 <- 10^5
set.seed(4321)
y <- rcauchy(nsim2)
w <- dnorm(y)/dcauchy(y) # w <- w/sum(w) si alguna es una cuasidensidad

Si se pidiera aproximar una integral
h(y) = y si es la media # h <- function(y) y
mean(w * h(y))
```

Sampling Importance Resampling:

```
rx <- sample(y, nsim, replace = TRUE, prob = w/sum(w))
hist(rx, freq = FALSE)
curve(dnorm, add = TRUE)
lines(density(rx), col = "red")
```



**Nota:** Si  $f$  o  $g$  fuesen cuasidensidades y se pidiese aproximar la integral, habría que reescalar los pesos:  $w <- f(y)/g(y)$ ;  $w <- w/sum(w)$ , y la aproximación por simulación sería  $sum(w * h(y))$  y en el análisis de convergencia se emplearía  $cumsum(w * h(y))$  (sin dividir por el número de simulaciones).

### 9.3 Optimización Monte Carlo

Supongamos que estamos interesados en la minimización de una función:

$$\min_{\mathbf{x} \in D} f(\mathbf{x}).$$

Hay una gran cantidad de algoritmos numéricos para resolver problemas de optimización no lineal multidimensional, por ejemplo los basados en el método de Newton-Raphson.

La idea original consiste en buscar los ceros de su primera derivada (o del gradiente) empleando una aproximación iterativa:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - [Hf(\mathbf{x}_i)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x} = i),$$

donde  $Hf(\mathbf{x}_i)$  es el hessiano de la función (matriz de segundas derivadas) y  $\nabla f(\mathbf{x}_i)$  el gradiente (vector de primeras derivadas). Estos métodos normalmente funcionan muy bien cuando la función objetivo no tiene mínimos locales (ideal  $f$  cuadrática). Los resultados obtenidos pueden ser muy malos en caso contrario (especialmente en el caso multidimensional) y dependen en gran medida del punto inicial. Un ejemplo donde es habitual que aparezcan este tipo de problemas es en la estimación por máxima verosimilitud (la función objetivo puede ser multimodal).

**Ejercicio 9.6.**

La mixtura de distribuciones normales:

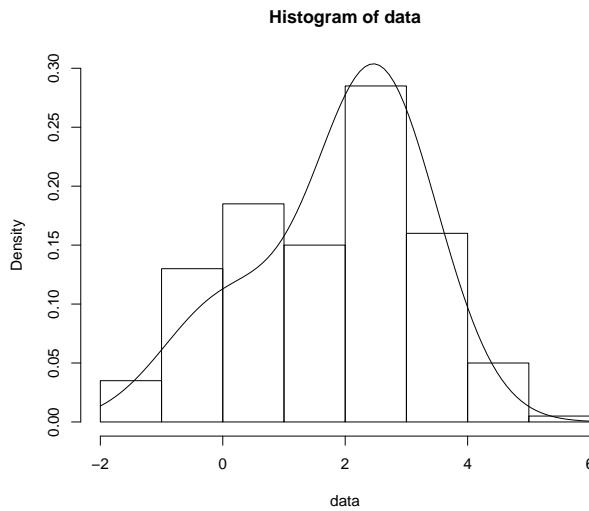
$$\frac{1}{4}N(\mu_1, 1) + \frac{3}{4}N(\mu_2, 1),$$

tiene una función de verosimilitud asociada bimodal. Generar una muestra de 200 valores de esta distribución con  $\mu_1 = 0$  y  $\mu_2 = 2.5$ , construir la correspondiente función de verosimilitud y representarla graficamente. Obtener la estimación por máxima verosimilitud de los parámetros empleando la rutina `nlm`. Muestra (simulación mixtura dos normales)

```
nsim <- 200
mu1 <- 0
mu2 <- 2.5
sd1 <- sd2 <- 1

set.seed(12345)
p.sim <- rbinom(nsim, 1, 0.25)
data <- rnorm(nsim, mu1*p.sim + mu2*(1-p.sim), sd1*p.sim + sd2*(1-p.sim))

hist(data, freq = FALSE, breaks = "FD", ylim = c(0, 0.3))
curve(0.25 * dnorm(x, mu1, sd1) + 0.75 * dnorm(x, mu2, sd2), add = TRUE)
```



Logaritmo (negativo) de la función de verosimilitud (para la estimación de las medias)

```
like <- function(mu)
 -sum(log((0.25 * dnorm(data, mu[1], sd1) + 0.75 * dnorm(data, mu[2], sd2))))
 # NOTA: Pueden aparecer NA/Inf por log(0)
```

Si queremos capturar los valores en los que se evalúa esta función, podemos proceder de forma similar a como se describe en el capítulo Function operators del libro “Advanced R” de Hadley Wickham: Behavioural FOs leave the inputs and outputs of a function unchanged, but add some extra behaviour.

```
tee <- function(f) {
 function(...) {
 input <- if(nargs() == 1) c(...) else list(...)
 output <- f(...)
 # Hacer algo ...
 # ... con output e input
 return(output)
 }
}
```

En este caso queremos representar los puntos en los que el algoritmo de optimización evalúa la función objetivo (especialmente como evoluciona el valor óptimo)

```
tee.optim2d <- function(f) {
 best.f <- Inf # Suponemos que se va a minimizar (opción por defecto)
 best.par <- c(NA, NA)
 function(...) {
 input <- c(...)
 output <- f(...)
 ## Hacer algo ...
 points(input[1], input[2], col = "lightgray")
 if(best.f > output) {
 lines(rbind(best.par, input), lwd = 2, col = "blue")
 best.f <- output
 best.par <- input
 # points(best.par[1], best.par[2], col = "blue", pch = 20)
 # cat("par = ", best.par, "value = ", best.f, "\n")
 }
 ## ... con output e input
 return(output)
 }
}
```

Representar la superficie del logaritmo de la verosimilitud, los puntos iniciales y las iteraciones en la optimización numérica con `nlm`:

```
mmu1 <- mmu2 <- seq(-2, 5, length = 128)
lli <- outer(mmu1, mmu2, function(x,y) apply(cbind(x,y), 1, like))

par(mar = c(4, 4, 1, 1))
```

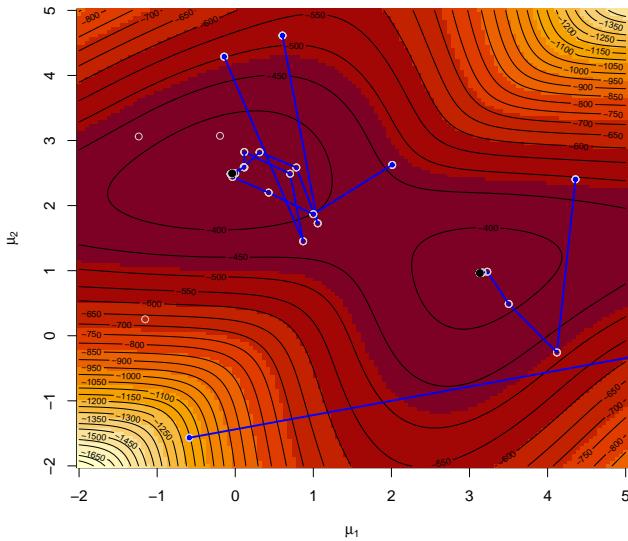
```

image(mmu1, mmu2, -lli, xlab = expression(mu[1]), ylab = expression(mu[2]))
contour(mmu1, mmu2, -lli, nlevels = 50, add = TRUE)

Valores iniciales aleatorios
nstarts <- 5
set.seed(1)
starts <- matrix(runif(2*nstarts, -2, 5), nrow = nstarts)
points(starts, col = "blue", pch = 19)

Minimización numérica con nlm
for (j in 1:nstarts){
 # Normalmente llamaríamos a nlm(like, start)
 res <- nlm(tee.optim2d(like), starts[j,]) # nlm(like, starts[j,])
 points(res$estimate[1],res$estimate[2], pch = 19)
 cat("par = ", res$estimate, "value =", res$minimum, "\n")
}

```



```

par = -0.03892511 2.494589 value = 361.5712
par = -0.03892501 2.494589 value = 361.5712
par = -0.03892507 2.494589 value = 361.5712
par = 3.132201 0.9628536 value = 379.3739
par = 20.51013 1.71201 value = 474.1414

```

### 9.3.1 Algoritmos de optimización Monte Carlo

Una alternativa sería tratar de generar valores aleatoriamente de forma que las regiones donde la función objetivo es menor tuviesen mayor probabilidad y

menor probabilidad las regiones donde la función objetivo es mayor. Por ejemplo, se podría pensar en generar valores de acuerdo a una densidad (transformación Boltzman-Gibbs):

$$g(x) \propto \exp(-f(x)/T),$$

donde  $T > 0$  es un parámetro (denominado temperatura) seleccionado de forma que se garantize la integrabilidad.

Entre los métodos de optimización Monte Carlo podríamos destacar:

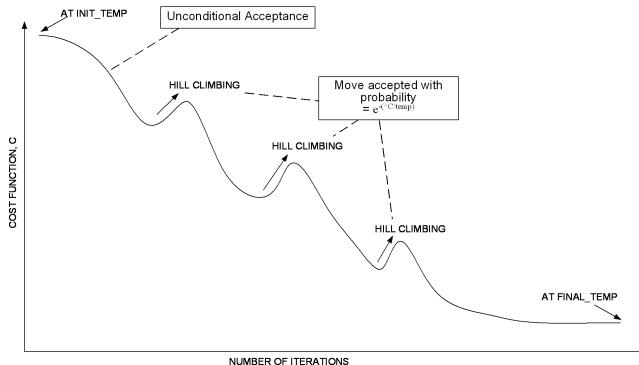
- Métodos con gradiente aleatorio.
- Temple simulado.
- Algoritmos genéticos.
- Montecarlo EM.
- ...

## 9.4 Temple simulado

Método inspirado en el templado de un metal (se calienta el metal a alta temperatura y se va enfriando lentamente). En cada paso se reemplaza la aproximación actual por un valor aleatorio “cercano”, elegido con una probabilidad que depende de la mejora en la función objetivo y de un parámetro  $T$  (denominado temperatura) que disminuye gradualmente durante el proceso.

- Cuando la temperatura es grande los cambios son bastante probables en cualquier dirección.
- Al ir disminuyendo la temperatura los cambios tienden a ser siempre “cuesta abajo”.

Al tener una probabilidad no nula de aceptar una modificación “cuesta arriba” se trata de evitar quedar atrapado en un óptimo local.



### 9.4.1 Algoritmo:

```

temp <- TEMP.INIT
place <- INIT.PLACEMENT()
cost.place <- COST(place)
while(temp < TEMP.FINAL) {
 while(LOOP.CRITERION()) {
 place.new <- PERTURB(place, temp)
 cost.new <- COST(place.new)
 cost.inc <- cost.new - cost.place
 temp <- SCHEDULE(temp)
 if ((cost.inc < 0) || (runif(1) > exp(-(cost.inc/temp)))) break
 }
 place <- place.new
 cost.place <- cost.new
 # temp <- SCHEDULE(temp)
}
COST <- function(place, ...) {...}
SCHEDULE <- function(temp, ...) {...}
INIT.PLACEMENT <- function(...) {...}
LOOP.CRITERION <- function(...) {...}

```

Adaptado de Premchand Akella (ppt).

Este algoritmo se puede ver como una adaptación del método de Metropolis-Hastings que veremos más adelante (Tema 11 Introducción a los métodos de cadenas de Markov Monte Carlo).

#### Ejercicio 9.7.

Repetir el ejercicio anterior empleando el algoritmo del temple simulado.

Minimización “SANN” con optim:

```

Representar la superficie del logaritmo de la verosimilitud
image(mmu1, mmu2, -lli, xlab = expression(mu[1]), ylab = expression(mu[2]))
contour(mmu1, mmu2, -lli, nlevels = 50, add = TRUE)
points(starts, col = "blue", pch = 19)

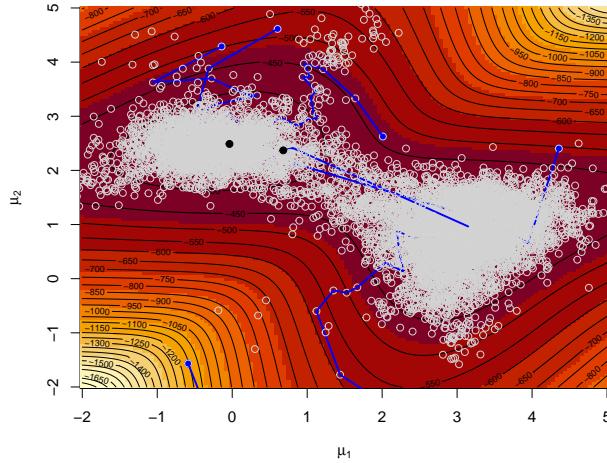
set.seed(1)
for (j in 1:nstarts){
 # Normalmente llamaríamos a optim(start, like, method = "SANN")
 # Note that the "SANN" method depends critically on the settings of the control parameters.
 # For "SANN" maxit gives the total number of function evaluations: there is no other stopping
 # Defaults to 10000.
 res <- optim(starts[j,], tee.optim2d(like), method = "SANN", control = list(temp = 100, maxit = 10000))
 points(res$par[1],res$par[2], pch = 19)
}

```

```

cat("par = ", res$par, "value =", res$value, "\n")
}

```



```

par = 0.0002023461 2.473437 value = 361.6372
par = -0.182735 2.45585 value = 362.0255
par = -0.0281341 2.484467 value = 361.5801
par = -0.03642928 2.488626 value = 361.5732
par = 0.6814165 2.370026 value = 374.839

```

Alternativa: función basada en el algoritmo empleado en el ejemplo 5.9 del libro: Robert y Casella, Introducing Monte Carlo Methods with R, Springer, 2010.

```

SA <- function(fun, pini, lower = -Inf, upper = Inf, tolerance = 10^(-4), factor = 1) {
 temp <- scale
 iter <- 1
 dif <- 1
 npar <- length(pini)
 the <- matrix(pini, ncol = npar)
 curfun <- hval <- fun(pini)
 while (dif > tolerance) {
 prop <- the[iter,] + rnorm(npar) * scale[iter]
 # Se decide si se acepta la propuesta
 if (any(prop < lower) || any(prop > upper) ||
 (temp[iter] * log(runif(1)) > -fun(prop) + curfun)) prop <- the[iter,]
 curfun <- fun(prop)
 hval <- c(hval, curfun)
 the <- rbind(the, prop)
 iter <- iter + 1
 temp <- c(temp, 1/log(iter + 1)) # Actualizar la temperatura
 # Se controla el nº de perturbaciones aceptadas
 }
}

```

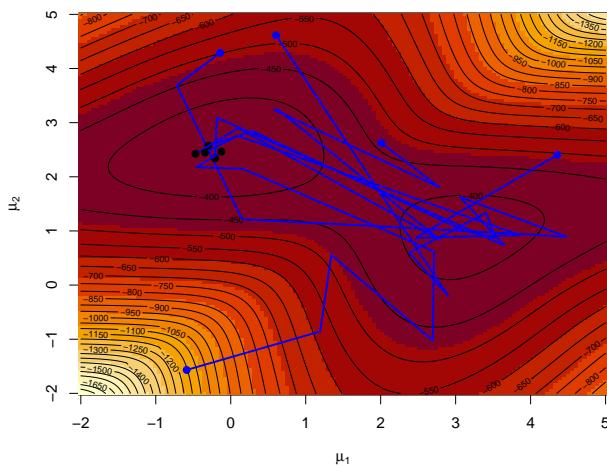
```

ace <- length(unique(the[(iter/2):iter, 1]))
if (ace == 1)
 # si es muy pequeño se disminuye la escala de la perturbación
 factor <- factor/10
if (2 * ace > iter)
 # si es muy grande se aumenta
 factor <- factor * 10
scale <- c(scale, max(2, factor * sqrt(temp[iter]))) # Actualizar la escala de la perturbación
dif <- (iter < 100) + (ace < 2) + (max(hval) - max(hval[1:(iter/2)]))
}
list(theta = the, val = hval, ite = iter)
}

Representar la superficie del logaritmo de la verosimilitud
image(mmu1, mmu2, -lli, xlab = expression(mu[1]), ylab = expression(mu[2]))
contour(mmu1, mmu2, -lli, nlevels = 50, add = TRUE)
points(starts, col = "blue", pch = 19)

set.seed(1)
for (j in 1:nstarts) {
 sar <- SA(like, starts[j,])
 lines(sar$the[, 1], sar$the[, 2], lwd = 2, col = "blue")
 points(sar$the[sar$it, 1], sar$the[sar$it, 2], pch = 19)
}

```



## 9.5 Algoritmos genéticos

Los algoritmos genéticos tratan de encontrar la mejor solución (entre un conjunto de soluciones posibles) imitando los procesos de evolución biológica:

- **Población:** formada por  $n$  individuos  $\mathbf{x}_i$  codificados en **cromosomas**.
- $f(\mathbf{x}_i)$  ajuste/capacidad/**adaptación** del individuo  $\mathbf{x}_i$ .
- **Selección:** los individuos mejor adaptados tienen mayor probabilidad de ser **padres**.
- **Cruzamiento:** los cromosomas de dos padres se combinan para generar hijos.
- **Mutación:** modificación al azar del cromosoma de los hijos (variabilidad).
- **Elitismo:** el mejor individuo pasa a la siguiente generación.

Los paquetes de R **DEoptim** y **gafit** implementan algunos de estos tipos de algoritmos.

### Ejercicio 9.8.

Repetir el ejercicio anterior empleando la función **DEoptim**.

Optimización con algoritmo genético implementado en **DEoptim**:

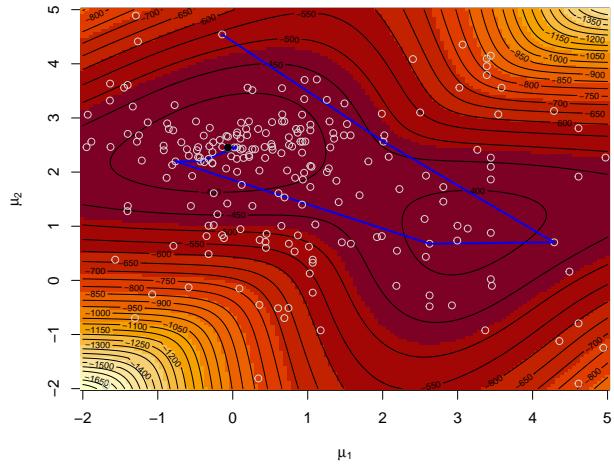
```
require(DEoptim)

Representar la superficie del logaritmo de la verosimilitud
image(mmu1, mmu2, -lli, xlab = expression(mu[1]), ylab = expression(mu[2]))
contour(mmu1, mmu2, -lli, nlevels = 50, add = TRUE)
Estos algoritmos no requieren valores iniciales (los generan al azar en el rango)

lower <- c(-2, -2)
upper <- c(5, 5)
set.seed(1)
DEoptim(like, lower, upper)
der <- DEoptim(tee.optim2d(like), lower, upper, DEoptim.control(itermax = 10))

Iteration: 1 bestvalit: 373.132461 bestmemit: -0.764103 2.196961
Iteration: 2 bestvalit: 367.580379 bestmemit: -0.430095 2.196961
Iteration: 3 bestvalit: 367.580379 bestmemit: -0.430095 2.196961
Iteration: 4 bestvalit: 367.580379 bestmemit: -0.430095 2.196961
Iteration: 5 bestvalit: 361.906887 bestmemit: 0.058951 2.455186
Iteration: 6 bestvalit: 361.906887 bestmemit: 0.058951 2.455186
Iteration: 7 bestvalit: 361.906887 bestmemit: 0.058951 2.455186
Iteration: 8 bestvalit: 361.657986 bestmemit: -0.064005 2.452184
Iteration: 9 bestvalit: 361.657986 bestmemit: -0.064005 2.452184
Iteration: 10 bestvalit: 361.657986 bestmemit: -0.064005 2.452184
```

```
Por defecto fija el tamaño de la población a NP = 10*npar = 20
Puede ser mejor dejar el valor por defecto itermax = 200
points(der$optim$bestmem[1], der$optim$bestmem[2], pch = 19)
```





## Capítulo 10

# Técnicas de reducción de la varianza

### 10.1 Reducción de la varianza

Éstas técnicas son aplicadas normalmente cuando se pretende ofrecer respuestas lo más precisas posibles (con menor costo computacional) y principalmente sobre cantidades medias.

- Supongamos que **estamos interesados en aproximar la media** de un estadístico mediante simulación y **no nos interesa aproximar su varianza**.

Existe un sinfín de técnicas encaminadas a reducir la varianza en un estudio de simulación (respecto a una aproximación estandar). Algunas de ellas son:

- Muestreo por importancia.
- Variables antitéticas.
- Muestreo estratificado.
- Variables de control.
- Números aleatorios comunes.
- Métodos de remuestreo.
- Condicionamiento.
- ...

## 10.2 Variables antitéticas

Supongamos que pretendemos aproximar

$$\theta = E(Z)$$

con  $Var(Z) = \sigma^2$ . Si generamos  $n$  pares  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  de  $X \sim Y \sim Z$  con  $Cov(X, Y) < 0$ , el estimador combinado tiene menor varianza:

$$\begin{aligned} Var\left(\frac{\bar{X} + \bar{Y}}{2}\right) &= \frac{1}{4} (Var(\bar{X}) + Var(\bar{Y}) + 2Cov(\bar{X}, \bar{Y})) \\ &= \frac{\sigma^2}{2n} + \frac{1}{2n} Cov(X, Y) \\ &= \frac{\sigma^2}{2n} (1 + \rho(X, Y)), \end{aligned}$$

que es equivalente a una muestra unidimensional independiente con el mismo número de observaciones  $2n$  (con una reducción del  $-100\rho(X, Y)\%$ ).

### 10.2.1 Ejemplo: Integración Monte Carlo

Para aproximar:

$$I = \int_0^1 h(x) dx,$$

a partir de  $x_1, x_2, \dots, x_n$  i.i.d.  $\mathcal{U}(0, 1)$ . Podemos emplear:

$$\begin{aligned} I &= E\left(\frac{h(U) + h(1-U)}{2}\right) \\ &\approx \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (h(x_i) + h(1-x_i)). \end{aligned}$$

### 10.2.2 Generación de variables antitéticas

Cuando se utiliza el método de inversión resulta sencillo obtener pares de variables con correlación negativa:

- $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$  para simular  $X$ .
- $1 - U$  para simular la variable antitética  $Y$ .

En el caso general, si  $X = h(U_1, \dots, U_d)$  y  $h$  es monótona puede verse (e.g. Ross, 1997) que  $Y = h(1 - U_1, \dots, 1 - U_d)$  está negativamente correlada con  $X$ .

Si  $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$  puede tomarse como variable antitética

$$Y = 2\mu - X$$

En general esto es válido para cualquier variable simétrica respecto a un parámetro  $\mu$ . (e.g.  $X \sim \mathcal{U}(a, b)$  e  $Y = a + b - X$ ).

**Ejercicio 10.1.** Variables antitéticas en integración Monte Carlo

Crear una función que implemente la técnica de variables antitéticas para aproximar integrales del tipo:

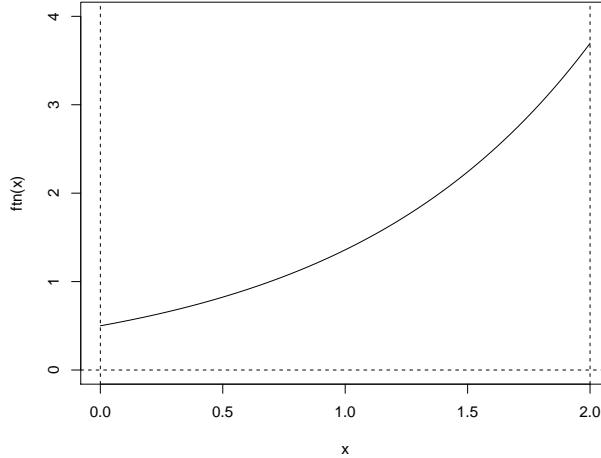
$$I = \int_a^b h(x) dx.$$

Emplearla para aproximar:

$$E(e^{\mathcal{U}(0,2)}) = \int_0^2 \frac{1}{2} e^x dx \approx 3.194,$$

y representar gráficamente la aproximación en función de  $n$ . Función objetivo:

```
a <- 0; b <- 2
ftn <- function(x) return(exp(x)/(b-a))
curve(ftn, a, b, ylim=c(0,4))
abline(h=0, lty=2)
abline(v=c(a,b), lty=2)
```



Se trata de calcular la media de  $e^{\mathcal{U}(0,2)}$ :

```
teor <- (exp(b)-exp(a))/(b-a)
teor
[1] 3.194528
```

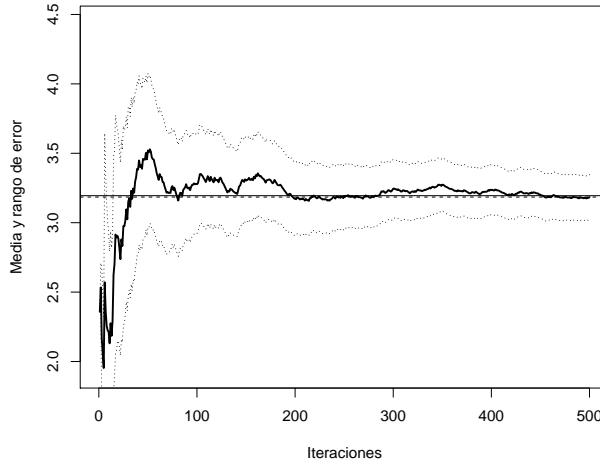
Para la aproximación por integración Monte Carlo podemos emplear la función del capítulo anterior:

```

mc.integral <- function(ftn, a, b, n, plot=TRUE) {
 fx <- sapply(runif(n, a, b), ftn)*(b-a)
 if (plot) {
 estint <- cumsum(fx)/(1:n)
 esterr <- sqrt(cumsum((fx-estint)^2))/(1:n)
 plot(estint, ylab="Media y rango de error", type="l", lwd= 2,
 ylim=mean(fx)+2*c(-esterr[1],esterr[1]), xlab="Iteraciones")
 abline(h = estint[n], lty=2)
 lines(estint+2*esterr, lty = 3)
 lines(estint-2*esterr, lty = 3)
 return(list(valor=estint[n], error=2*esterr[n]))
 } else return(list(valor=mean(fx), error=2*sd(fx)/sqrt(n)))
}

set.seed(54321)
res <- mc.integral(ftn, a, b, 500)
abline(h = theor)

```



```

res

$valor
[1] 3.184612
##
$error
[1] 0.1619886

```

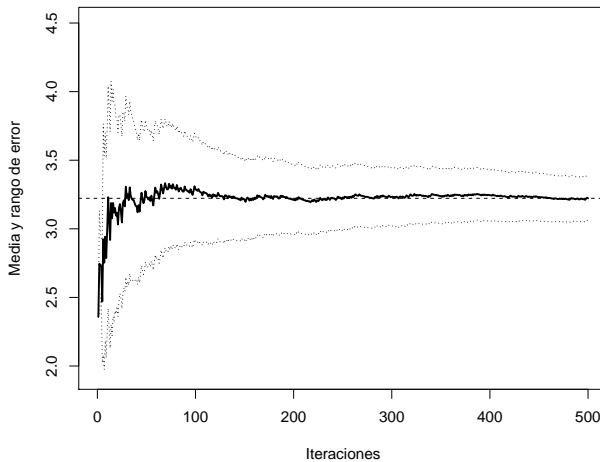
Para la integración Monte Carlo con variables antitéticas podríamos considerar:

```

mc.integrala <- function(ftn, a, b, n, plot=TRUE,...) {
 # n es el nº de evaluaciones de la función objetivo (para facilitar comparaciones, solo se genera una)
 x <- runif(n%/%2, a, b)
 # La siguiente linea solo para representar alternando
 x <- as.numeric(matrix(c(x,a+b-x),nrow=2,byrow=TRUE))
 # bastaría con emplear p.e. c(x,a+b-x)
 fx <- sapply(x, ftn)*(b-a)
 if (plot) {
 estint <- cumsum(fx)/(1:n)
 esterr <- sqrt(cumsum((fx-estint)^2))/(1:n)
 plot(estint, ylab="Media y rango de error",type="l", lwd = 2,
 ylim=mean(fx)+2*c(-esterr[1],esterr[1]),xlab="Iteraciones",...)
 abline(h = estint[n], lty=2)
 lines(estint+2*esterr, lty = 3)
 lines(estint-2*esterr, lty = 3)
 return(list(valor=estint[n],error=2*esterr[n]))
 } else return(list(valor=mean(fx),error=2*sd(fx)/sqrt(n)))
}

set.seed(54321)
res <- mc.integrala(ftn, a, b, 500)

```



```
res
```

```

$valor
[1] 3.222366
##
$error

```

```
[1] 0.1641059
```

Pero aunque aparentemente converge antes, parece no haber una mejora en la precisión de la aproximación. Si calculamos el porcentaje (estimado) de reducción del error:

```
100*(0.1619886-0.1641059)/0.1619886
```

```
[1] -1.307067
```

El problema es que en este caso se está estimando mal la varianza (asumiendo independencia). Hay que tener cuidado con las técnicas de reducción de la varianza si uno de los objetivos de la simulación es precisamente estimar la variabilidad. En este caso, una versión de la función anterior para integración Monte Carlo con variables antitéticas, con aproximación del error bajo dependencia podría ser:

```
mc.integrala2 <- function(ftn, a, b, n, plot = TRUE,...) {
 # n es el nº de evaluaciones de la función objetivo (para facilitar comparaciones, s
 x <- runif(n%/%2, a, b)
 # La siguiente linea solo para representar alternando
 x <- matrix(c(x,a+b-x),nrow=2,byrow=TRUE)
 # bastaría con emplear p.e. c(x,a+b-x)
 fx <- apply(x, 1, ftn)*(b-a)
 corr <- cor(fx[,1], fx[,2])
 fx <- as.numeric(fx)
 return(list(valor=mean(fx), error=2*sd(fx)/sqrt(n)*sqrt(1+corr)))
}

set.seed(54321)
res <- mc.integrala2(ftn, a, b, 500)
res

$valor
[1] 3.222366
##
$error
[1] 0.05700069
```

Porcentaje estimado de reducción del error:

```
100*(0.1619886-0.05700069)/0.1619886
```

```
[1] 64.81191
```

En este caso puede verse que la reducción teórica de la varianza es del 96.7%

## 10.3 Estratificación

Si se divide la población en estratos y se genera en cada uno un número de observaciones proporcional a su tamaño (a la probabilidad de cada uno) nos aseguramos de que se cubre el dominio de interés y se puede acelerar la convergencia.

- Por ejemplo, para generar una muestra de tamaño  $n$  de una  $\mathcal{U}(0, 1)$ , se pueden generar  $l = \frac{n}{k}$  observaciones ( $1 \leq k \leq n$ ) de la forma:

$$U_{j_1}, \dots, U_{j_k} \sim \mathcal{U}\left(\frac{(j-1)}{k}, \frac{j}{k}\right) \text{ para } j = 1, \dots, k.$$

Si en el número de obsevaciones se tiene en cuenta la variabilidad en el estrato se puede obtener una reducción significativa de la varianza.

**Ejemplo 10.1.** Muestreo estratificado de una exponencial (libro Ricardo)

Supóngase el siguiente problema (absolutamente artificial pero ilustrativo para comprender esta técnica). Dada una muestra de tamaño 10 de una población con distribución:

$$X \sim \exp(1),$$

se desea aproximar la media poblacional (es sobradamente conocido que es 1) a partir de 10 simulaciones. Supongamos que para evitar que, por puro azar, exista alguna zona en la que la exponencial toma valores, no representada en la muestra simulada de 10 datos, se consideran tres estratos. Por ejemplo, el del 40% de valores menores, el siguiente 50% de valores (intermedios) y el 10% de valores más grandes para esta distribución.

El algoritmo de inversión (optimizado) para simular una  $\exp(1)$  es:

1. Generar  $U \sim U(0, 1)$ .
2. Hacer  $X = -\ln U$ .

Dado que, en principio, simulando diez valores  $U_1, U_2, \dots, U_{10} \sim U(0, 1)$ , no hay nada que nos garantice que las proporciones de los estratos son las deseadas (aunque sí lo serán en media). Una forma de garantizar el que obtengamos **4, 5 y 1** valores, respectivamente, en cada uno de los tres estratos, consiste en simular:

- 4 valores de  $U[0.6, 1)$  para el primer estrato,
- 5 valores de  $U[0.1, 0.6)$  para el segundo y
- uno de  $U[0, 0.1)$  para el tercero.

Otra forma de proceder consistiría en rechazar valores de  $U$  que caigan en uno de esos tres intervalos cuando el cupo de ese estrato esté ya lleno (lo cual no sería computacionalmente eficiente).

El algoritmo con la estratificación propuesta sería como sigue:

1. Para  $i = 1, 2, \dots, 10$ :
2. Generar  $U_i$ :
  - 2a. Generar  $U \sim U(0, 1)$ .
  - 2b. Si  $i \leq 4$  hacer  $U_i = 0.4 \cdot U + 0.6$ .
  - 2c. Si  $4 < i \leq 9$  hacer  $U_i = 0.5 \cdot U + 0.1$ .
  - 2d. Si  $i = 10$  hacer  $U_i = 0.1 \cdot U$ .
3. Devolver  $X_i = -\ln U_i$ .

No es difícil probar que:

- $\text{Var}(X_i) = 0.0214644$  si  $i = 1, 2, 3, 4$ ,
- $\text{Var}(X_i) = 0.229504$  si  $i = 5, 6, 7, 8, 9$  y
- $\text{Var}(X_{10}) = 1$ .

Como consecuencia:

$$\text{Var}(\bar{X}) = \frac{1}{10^2} \sum_{i=1}^{10} \text{Var}(X_i) = 0.022338$$

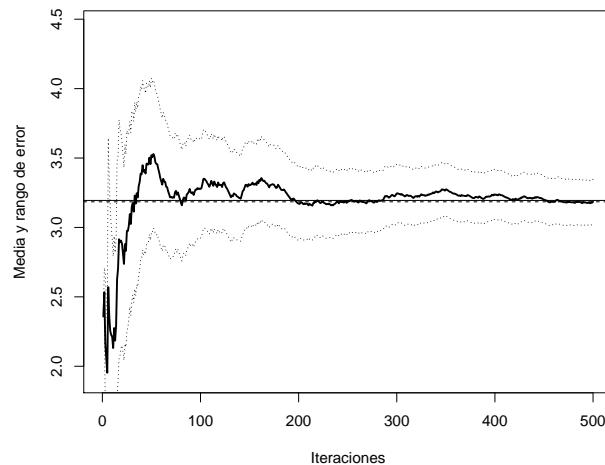
que es bastante menor que 1 (la varianza en el caso de muestreo aleatorio simple no estratificado).

### Ejercicio 10.2. Integración Monte Carlo con estratificación

Aproximar la integral anterior empleando la técnica de estratificación, considerando  $k$  subintervalos regularmente espaciados en el intervalo  $[0, 2]$ . ¿Cómo varía la reducción en la varianza dependiendo del valor de  $k$ ?

```
mc.integrale <- function(ftn, a, b, n, k) {
 # Integración Monte Carlo con estratificación
 l <- n%/%k
 int <- seq(a, b, len=k+1)
 x <- runif(l*k, rep(int[-(k+1)], each=1), rep(int[-1], each=1))
 # l uniformes en cada uno de los intervalos [(j-1)/k , j/k]
 fx <- sapply(x, ftn)*(b-a)
 return(list(valor=mean(fx), error=2*sd(fx)/sqrt(n))) # error mal calculado
}

set.seed(54321)
res <- mc.integral(ftn, a, b, 500)
abline(h = theor)
```



```
res
```

```
$valor
[1] 3.184612
##
$error
[1] 0.1619886
set.seed(54321)
mc.integrale(ftn, a, b, 500, 50)
```

```
$valor
[1] 3.193338
##
$error
[1] 0.1597952
set.seed(54321)
mc.integrale(ftn, a, b, 500, 100)
```

```
$valor
[1] 3.193927
##
$error
[1] 0.1599089
```

De esta forma no se tiene en cuenta la variabilidad en el estrato. El tamaño de las submuestras debería incrementarse hacia el extremo superior.

### Ejercicio 10.3.

Repetir el ejemplo anterior considerando intervalos regularmente espaciados en escala exponencial.

## 10.4 Variables de control

En este caso se trata de sacar partido tanto a una covarianza positiva como negativa. La idea básica es emplear una variable  $Y$ , con media conocida  $\mu_Y$ , para controlar la variable  $X$  (con media desconocida), de forma que ambas variables estén “suficientemente” correlacionadas. La versión “controlada” de  $X$  será:

$$X^* = X + \alpha(Y - \mu_Y)$$

con  $E(X^*) = E(X) = \theta$ . Puede verse que  $Var(X^*) = Var(X) + \alpha^2 Var(Y) + 2\alpha Cov(X, Y)$  es mínima para:

$$\alpha^* = -\frac{Cov(X, Y)}{Var(Y)},$$

con  $Var(X^*) = Var(X)(1 - \rho^2(X, Y))$  (lo que supone una reducción del  $100\rho^2(X, Y)\%$ ).

En la práctica normalmente  $\alpha^*$  no es conocida. Para estimarlo se puede realizar ajuste lineal de  $X$  sobre  $Y$  (a partir de los datos simulados  $X_i$  e  $Y_i$ ,  $1 \leq i \leq n$ ):

- Si  $\hat{x} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 y$  es la recta ajustada, con  $\hat{\beta}_1 = \frac{S_{XY}}{S_Y^2}$  y  $\hat{\beta}_0 = \bar{X} - \hat{\beta}_1 \bar{Y}$ , la estimación sería:

$$\hat{\alpha}^* = -\hat{\beta}_1$$

- Adicionalmente, para aproximar  $\theta$ :

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \bar{X}^* = \bar{X} - \hat{\beta}_1(\bar{Y} - \mu_Y) \\ &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \mu_Y\end{aligned}$$

- Si  $\mu_Y = 0 \Rightarrow \hat{\theta} = \bar{X}^* = \hat{\beta}_0$ .

**Ejercicio 10.4.** Integración Monte Carlo con variables de control

Aproximar la integral anterior empleando la variable  $U \sim \mathcal{U}(0, 2)$  para controlar la variable  $e^U$ .

Se trata de calcular la media de  $\exp(\mathcal{U}(a, b))$ :

```
a <- 0; b <- 2
teor <- (exp(b)-exp(a))/(b-a)
teor
```

```
[1] 3.194528
```

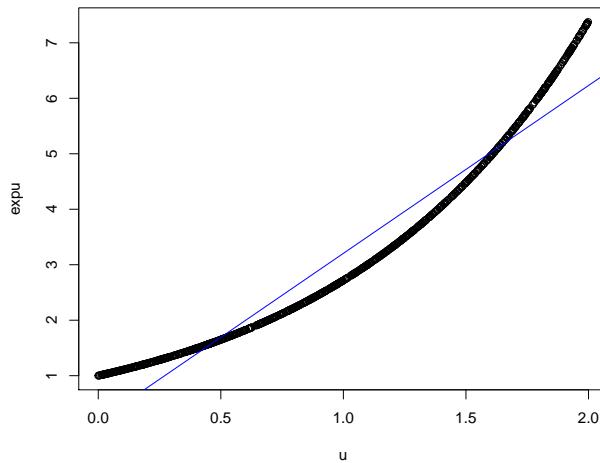
Aproximación clásica por simulación:

```
set.seed(54321)
nsim <- 1000
u <- runif(nsim, a, b)
expu <- exp(u)
mean(expu)
```

```
[1] 3.182118
```

Con variable control:

```
plot(u, expu)
reg <- lm(expu ~ u)$coef
abline(reg, col='blue')
```



```
summary(lm(expu ~ u)) # R-squared: 0.9392
reg[1]+reg[2] # Coincidirá con la solución mean(expuc)
```

```
(Intercept)
3.204933
```

Lo siguiente ya no sería necesario:

```
expuc <- expu - reg[2]*(u-1)
mean(expuc)
```

```
[1] 3.204933
```

Estimación del porcentaje de reducción en la varianza:

```
100*(var(expu)-var(expuc))/var(expu)
```

```
[1] 93.91555
```

## 10.5 Números aleatorios comunes

Se trataría de una técnica básica del diseño de experimentos: realizar comparaciones homogéneas (bloquear). Por ejemplo cuando se diseña un experimento para la comparación de la media de dos variables, se pueden emplear las denominadas muestras apareadas, en lugar de muestras independientes.

Supóngamos que estamos interesados en las diferencias entre dos estrategias (e.g. dos estimadores):

$$E(X) - E(Y) = E(X - Y).$$

Para ello se generan dos secuencias  $X_1, X_2, \dots, X_n$ , e  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  y se calcula:

$$\bar{X} - \bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)$$

- Si las secuencias se generan de modo independiente:

$$Var(\bar{X} - \bar{Y}) = \frac{1}{n} (Var(X) + Var(Y))$$

- Si se generan las secuencias empleando **la misma semilla**, los datos son dependientes:

$$Cov(X_i, Y_i) > 0$$

y tendríamos que:

$$\begin{aligned} Var(\bar{X} - \bar{Y}) &= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^N Var(X_i - Y_i) = \frac{1}{n} Var(X_i - Y_i) \\ &= \frac{1}{n} (Var(X_i) + Var(Y_i) - 2Cov(X_i, Y_i)) \\ &\leq \frac{1}{n} (Var(X_i) + Var(Y_i)) \end{aligned}$$

En el capítulo de aplicaciones de la simulación se empleó esta técnica para comparar distribuciones de estimadores...

## 10.6 Ejercicios fin de práctica

### Ejercicio 10.5.

Aproximar mediante integración Monte Carlo (clásica) la media de una distribución exponencial de parámetro 1/2:

$$I = \int_0^{\infty} \frac{x}{2} e^{-\frac{x}{2}} dx$$

y representar gráficamente la aproximación en función de  $n$ . Comparar los resultados con los obtenidos empleando variables antitéticas, ¿se produce una reducción en la varianza?

*Nota:* . Puede ser recomendable emplear el método de inversión para generar las muestras (antitéticas) de la exponencial.

MC clásico:

```
nsim <- 1000
lambda <- 0.5
set.seed(1)
x <- - log(runif(nsim)) / lambda
Aprox por MC da media
mean(x) # valor teor 1/lambda = 2

[1] 1.97439
Aprox da precisión
var(x)
```

## [1] 3.669456

MC con variables antitéticas:

```
xa <-
mean(xa) # Aprox por MC da media (valor teor 1/lambda = 2)
var(xa) # Aprox da precisión suponiendo independencia
corr <- cor(x1, x2)
var(xa)*(1 + corr) # Estimación varianza suponiendo dependencia
```

Estimación del porcentaje de reducción en la varianza

```
100*(var(x) - var(xa))/var(x)
```



# Referencias

## Bibliografía básica

- Cao, R. (2002). *Introducción a la simulación y a la teoría de colas*. NetBiblo.
- Gentle, J.E. (2003). *Random number generation and Monte Carlo methods*. Springer-Verlag.
- Jones, O. et al. (2009). *Introduction to Scientific Programming and Simulation Using R*. CRC.
- Ripley, B.D. (1987). *Stochastic Simulation*. John Wiley & Sons.
- Robert, C.P. y G. Casella (2010). *Introducing Monte Carlo Methods with R*. Springer.
- Ross, S.M. (1999). *Simulación*. Prentice Hall.
- Suess, E.A. y Trumbo, B.E. (2010). *Introduction to probability simulation and Gibbs sampling with R*. Springer.

## Bibliografía complementaria

### Libros

- Azarang, M. R. y García Dunna, E. (1996). *Simulación y análisis de modelos estocásticos*. McGraw-Hill.
- Bratley, P., Fox, B.L. y Schrage L.E. (1987). *A guide to simulation*. Springer-Verlag.
- Devroye, L. (1986). *Non-uniform random variate generation*. Springer-Verlag.
- Evans, M. y Swartz, T. (2000). *Approximating integrals via Monte Carlo and deterministic methods*. Oxford University Press.

- Gentle, J.E. (1998). *Random number generation and Monte Carlo methods*. Springer-Verlag.
- Hörmann, W. et al. (2004). *Automatic Nonuniform Random Variate Generation*. Springer.
- Knuth, D.E. (1969). *The Art of Computer Programming*. Volume 2. Addison-Wesley.
- Knuth, D.E. (2002). *The Art of Computer Programming*. Volume 2, third edition, ninth printing. Addison-Wesley.
- Law, A.M. y Kelton, W.D. (1991). *Simulation, modeling and analysis*. McGraw-Hill.
- Moeschlin, O., Grycko, E., Pohl, C. y Steinert, F. (1998). *Experimental stochastics*. Springer-Verlag.
- Nelson, R. (1995). *Probability, stochastic processes, and queueing theory: the mathematics of computer performance modelling*. Springer-Verlag.
- Pardo, L. y Valdés, T. (1987). *Simulación. Aplicaciones prácticas a la empresa*. Díaz de Santos.
- Robert, C.P. y G. Casella (2004). *Monte Carlo statistical methods*. Springer.

## Artículos

- Demirhan, H. y Bitirim, N. (2016). CryptRndTest: an R package for testing the cryptographic randomness. *The R Journal*, 8(1), 233-247.
- Downham, D.Y. (1970). Algorithm AS 29: The runs up and down test. *Journal of the Royal Statistical Society. Series C (Applied Statistics)*, 19(2), 190-192.
- L'Ecuyer, P. (1999). Good parameters and implementations for combined multiple recursive random number generators. *Operations Research*, 47, 159–164.
- L'Ecuyer, P. y Simard, R. (2007). TestU01: A C library for empirical testing of random number generators. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 33(4), 1-40.
- Marsaglia, G. y Tsang, W.W. (2002). Some difficult-to-pass tests of randomness. *Journal of Statistical Software*, 7(3), 1-9.
- Marsaglia, G., Zaman, A. y Tsang, W.W. (1990). Toward a universal random number generator. *Stat. Prob. Lett.*, 9(1), 35-39.
- Matsumoto, M. y Nishimura, T. (1998). Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 8, 3–30.

Park, S.K. y Miller , K.W. (1988). Random number generators: good ones are hard to find. *Communications of the ACM*, 31(10), 1192-1201.

Park, S.K., Miller, K.W. y Stockmeyer, P.K. (1993). Technical correspondence. *Communications of the ACM*, 36(7), 108-110.



# Apéndice A

## Enlaces

### Recursos para el aprendizaje de R

A continuación se muestran algunos recursos que pueden ser útiles para el aprendizaje de R y la obtención de ayuda (basados en el post <https://rubenfcasal.github.io/post/ayuda-y-recursos-para-el-aprendizaje-de-r>, que puede estar más actualizado).

#### *Ayuda online:*

- Ayuda en línea sobre funciones o paquetes: RDocumentation
- Buscador RSeek
- StackOverflow

#### *Cursos:* algunos cursos gratuitos:

- Coursera:
  - Introducción a Data Science: Programación Estadística con R
  - Mastering Software Development in R
- DataCamp:
  - Introducción a R
- Stanford online:
  - Statistical Learning
- Curso UCA: Introducción a R, R-commander y shiny
- Udacity: Data Analysis with R
- Swirl Courses: se pueden hacer cursos desde el propio R con el paquete swirl.

Para información sobre cursos en castellano se puede recurrir a la web de R-Hispano en el apartado formación. Algunos de los cursos que aparecen en entradas antiguas son gratuitos. Ver: Cursos MOOC relacionados con R.

### *Libros*

- *Iniciación:*

- 2011 - The Art of R Programming. A Tour of Statistical Software Design, (No Starch Press)
- R for Data Science (online, online-castellano, O'Reilly)
- Hands-On Programming with R: Write Your Own Functions and Simulations, by Garrett Grolemund (O'Reilly)

- *Avanzados:*

- 2008 - Software for Data Analysis: Programming with R - Chambers (Springer)
- Advanced R by Hadley Wickham (online: 1<sup>a</sup> ed, 2<sup>a</sup> ed, Chapman & Hall)
- R packages by Hadley Wickham (online, O'Reilly)
- *Bookdown:* el paquete bookdown de R permite escribir libros empleando R Markdown y compartirlos. En <https://bookdown.org> está disponible una selección de libros escritos con este paquete (un listado más completo está disponible aquí). Algunos libros en este formato en castellano son:

- Técnicas de Remuestreo (disponible en el repositorio de GitHub rubenfcasal/book\_remuestreo).
- Introducción al Análisis de Datos con R (disponible en el repositorio de GitHub rubenfcasal/intror).
- Prácticas de Tecnologías de Gestión y Manipulación de Datos (disponible en el repositorio de GitHub gltaboada/tgdbook).
- Escritura de libros con bookdown (disponible en el repositorio de GitHub rubenfcasal/bookdown\_intro).
- R para profesionales de los datos: una introducción.
- Estadística Básica Edulcorada.

**Material online:** en la web se puede encontrar mucho material adicional, por ejemplo:

- CRAN: Other R documentation
- RStudio:
  - Online learning, Webinars

- tidyverse: dplyr, tibble, tidyr, stringr, readr.
- CheatSheets: RMarkdown, Shiny, dplyr, tidyr, stringr.
- Blogs en inglés:
  - <https://www.r-bloggers.com/>
  - <https://www.littlemissdata.com/blog/rstudioconf2019>
  - RStudio: <https://blog.rstudio.com>
  - Microsoft Revolutions: <https://blog.revolutionanalytics.com>
- Blogs en castellano:
  - <https://www.datanalytics.com>
  - <http://oscarperpinan.github.io/R>
  - <http://rubenfcasal.github.io>
- Listas de correo:
  - Listas de distribución de r-project.org: <https://stat.ethz.ch/mailman/listinfo>
  - Búsqueda en R-help: <http://r.789695.n4.nabble.com/R-help-f789696.html>
  - Búsqueda en R-help-es: <https://r-help-es.r-project.narkive.com>  
<https://grokbase.com/g/r/r-help-es>
  - Archivos de R-help-es: <https://stat.ethz.ch/pipermail/r-help-es>



## Apéndice B

# Bondad de Ajuste y Aleatoriedad

En los métodos clásicos de inferencia estadística es habitual asumir que los valores observados  $X_1, \dots, X_n$  (o los errores de un modelo) constituyen una muestra aleatoria simple de una variable aleatoria  $X$ . Se están asumiendo por tanto dos hipótesis estructurales: la independencia (aleatoriedad) y la homogeneidad (misma distribución) de las observaciones (o de los errores). Adicionalmente, en inferencia paramétrica se supone que la distribución se ajusta a un modelo paramétrico específico  $F_\theta(x)$ , siendo  $\theta$  un parámetro que normalmente es desconocido.

Uno de los objetivos de la inferencia no paramétrica es desarrollar herramientas que permitan verificar el grado de cumplimiento de las hipótesis anteriores<sup>1</sup>. Los procedimientos habituales incluyen métodos descriptivos (principalmente gráficos), contrastes de bondad de ajuste (también de homogeneidad o de datos atípicos) y contrastes de aleatoriedad.

En este apéndice se describen brevemente algunos de los métodos clásicos, principalmente con la idea de que pueden ser de utilidad para evaluar resultados de simulación y para la construcción de modelos del sistema real (e.g. para modelar variables que se tratarán como entradas del modelo general). Se empleará principalmente el enfoque de la estadística no paramétrica, aunque también se mostrarán algunas pequeñas diferencias entre su uso en inferencia y en simulación.

Los métodos genéricos no son muy adecuados para evaluar generadores aleatorios (e.g. L'Ecuyer y Simard, 2007). La recomendación sería emplear baterías de

---

<sup>1</sup>El otro objetivo de la inferencia estadística no paramétrica es desarrollar procedimientos alternativos (métodos de distribución libre) que sean válidos cuando no se verifica alguna de las hipótesis estructurales.

contrastos recientes, como las descritas en la Sección 3.2.2. No obstante, en la última sección se describirán, únicamente con fines ilustrativos, algunos de los primeros métodos diseñados específicamente para generadores aleatorios.

## B.1 Métodos de bondad de ajuste

A partir de  $X_1, \dots, X_n$  m.a.s. de  $X$  con función de distribución  $F$ , interesa realizar un contraste de la forma:

$$\begin{cases} H_0 : F = F_0 \\ H_1 : F \neq F_0 \end{cases}$$

En este caso interesaría distinguir principalmente entre hipótesis nulas simples (especifican un único modelo) y compuestas (especifican un conjunto o familia de modelos). Por ejemplo:

| $H_0$ simple                                                                              | $H_0$ compuesta                                                                                             |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\begin{cases} H_0 : F = \mathcal{N}(0, 1) \\ H_1 : F \neq \mathcal{N}(0, 1) \end{cases}$ | $\begin{cases} H_0 : F = \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \\ H_1 : F \neq \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \end{cases}$ |

Entre los métodos gráficos habituales estarían: histograma, gráfico de la densidad suavizada, gráfico de tallo y hojas, gráfico de la distribución empírica (o versión suavizada) y gráficos P-P o Q-Q.

Entre los métodos de contrastes de hipótesis generales ( $H_0 : F = F_0$ ) destacarían las pruebas: Chi-cuadrado de Pearson, Kolmogorov-Smirnov, Cramer-von Mises o Anderson-Darling. Además de los específicos de normalidad ( $H_0 : F = \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ ): Kolmogorov-Smirnov-Lilliefors, Shapiro-Wilks y los de asimetría y apuntamiento.

### B.1.1 Histograma

Se agrupan los datos en intervalos  $I_k = [L_{k-1}, L_k]$  con  $k = 1, \dots, K$  y a cada intervalo se le asocia un valor (altura de la barra) igual a la frecuencia absoluta de ese intervalo  $n_k = \sum_{i=1}^n \mathbf{1}(X_i \in [L_{k-1}, L_k])$ , si la longitud de los intervalos es constante, o proporcional a dicha frecuencia (de forma que el área coincida con la frecuencia relativa y pueda ser comparado con una función de densidad):

$$\hat{f}_n(x) = \frac{n_i}{n(L_k - L_{k-1})}$$

Como ya se ha visto anteriormente, en R podemos generar este gráfico con la función `hist()` del paquete base. Algunos de los principales parámetros (con

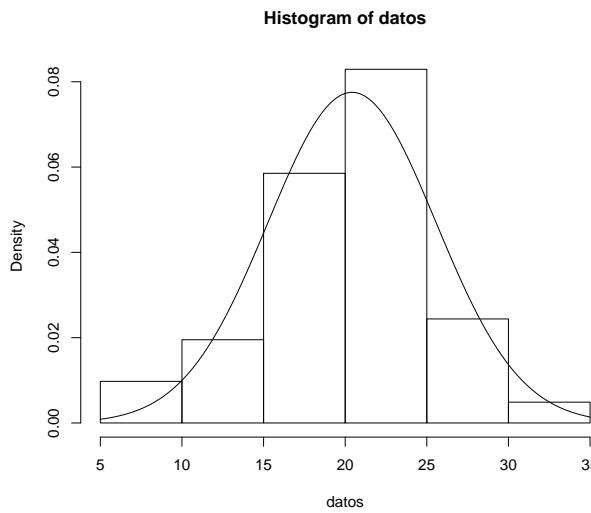
los valores por defecto) son los siguientes:

```
hist(x, breaks = "Sturges", freq = NULL, plot = TRUE, ...)
```

- **breaks**: puede ser un valor numérico con el número de puntos de discretización, un vector con los puntos de discretización, una cadena de texto que los determine (otras opciones son "Scott" y "FD"; en este caso llamará internamente a la función `nclass.xxx()` donde `xxx` se corresponde con la cadena de texto), o incluso una función personalizada que devuelva el número o el vector de puntos de discretización.
- **freq**: lógico (`TRUE` por defecto si los puntos de discretización son equidistantes), determina si en el gráfico se representan frecuencias o “densidades”.
- **plot**: lógico, se puede establecer a `FALSE` si no queremos generar el gráfico y solo nos interesan el objeto con los resultados (que devuelve de forma “invisible”, por ejemplo para discretizar los valores en intervalos).

Ejemplo:

```
datos <- c(22.56, 22.33, 24.58, 23.14, 19.03, 26.76, 18.33, 23.10,
 21.53, 9.06, 16.75, 23.29, 22.14, 16.28, 18.89, 27.48, 10.44,
 26.86, 27.27, 18.74, 19.88, 15.76, 30.77, 21.16, 24.26, 22.90,
 27.14, 18.02, 21.53, 24.99, 19.81, 11.88, 24.01, 22.11, 21.91,
 14.35, 11.14, 9.93, 20.22, 17.73, 19.05)
hist(datos, freq = FALSE)
curve(dnorm(x, mean(datos), sd(datos)), add = TRUE)
```



Si el número de valores es muy grande (por ejemplo en el caso de secuencias aleatorias), nos puede interesar establecer la opción `breaks = "FD"` para au-

mentar el número de intervalos de discretización. En cualquier caso, como se muestra en la Figura B.1, la convergencia del histograma a la densidad teórica se podría considerar bastante lenta. Alternativamente se podría considerar una estimación suave de la densidad, por ejemplo empleando la estimación tipo núcleo implementada en la función `density()`.

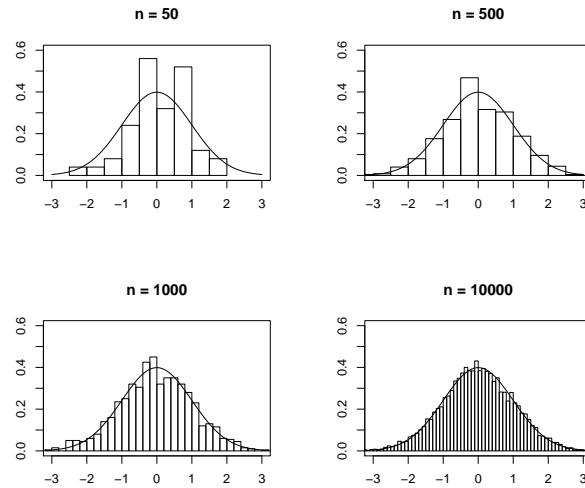


Figura B.1: Convergencia del histograma a la densidad teórica.

### B.1.2 Función de distribución empírica

La función de distribución empírica  $F_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}(X_i \leq x)$  asigna a cada número real  $x$  la frecuencia relativa de observaciones menores o iguales que  $x$ . Para obtener las frecuencias relativas acumuladas, se ordena la muestra  $X_{(1)} \leq X_{(2)} \leq \dots \leq X_{(n)}$  y:

$$F_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < X_{(1)} \\ \frac{i}{n} & \text{si } X_{(i)} \leq x < X_{(i+1)} \\ 1 & \text{si } X_{(n)} \leq x \end{cases}$$

Ejemplo:

```
fn <- ecdf(datos)
curve(ecdf(datos)(x), xlim = extendrange(datos), type = 's',
 ylab = 'distribution function', lwd = 2)
curve(pnorm(x, mean(datos), sd(datos)), add = TRUE)
```

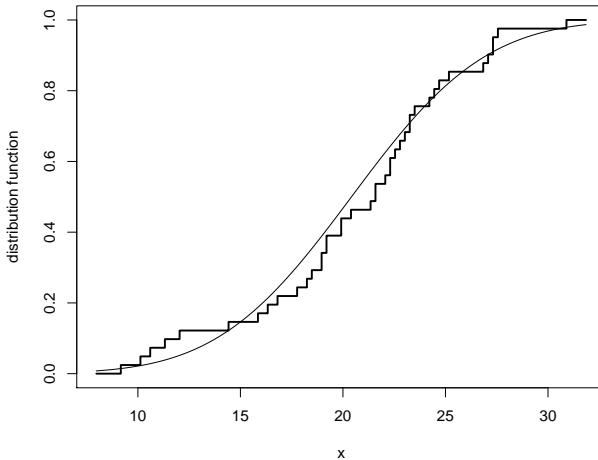


Figura B.2: Comparación de la distribución empírica de los datos de ejemplo con la función de distribución de la aproximación normal.

### B.1.3 Gráficos P-P y Q-Q

El gráfico de probabilidad (o de probabilidad-probabilidad) es el gráfico de dispersión de:

$$\{(F_0(x_i), F_n(x_i)) : i = 1, \dots, n\}$$

siendo  $F_n$  la función de distribución empírica y  $F_0$  la función de distribución bajo  $H_0$  (con la que desea comparar, si la hipótesis nula es simple) o una estimación bajo  $H_0$  (si la hipótesis nula es compuesta; e.g. si  $H_0 : F = \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ ,  $\hat{F}_0$  función de distribución de  $\mathcal{N}(\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2)$ ). Si  $H_0$  es cierta, la nube de puntos estará en torno a la recta  $y = x$  (probabilidades observadas próximas a las esperadas bajo  $H_0$ ).

El gráfico Q-Q (cuantil-cuantil) es equivalente al anterior pero en la escala de la variable:

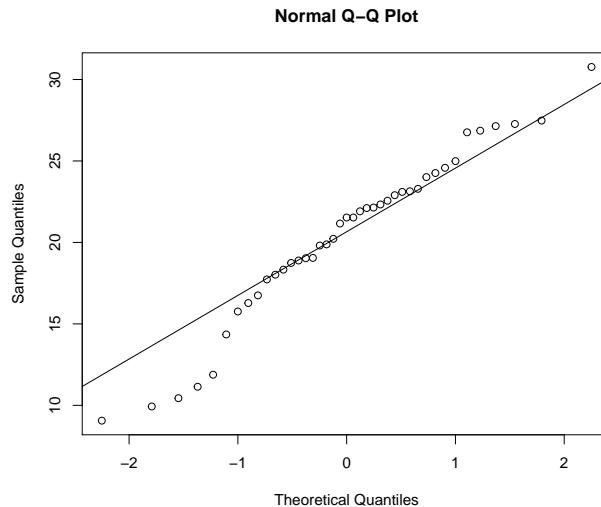
$$\{(q_i, x_{(i)}) : i = 1, \dots, n\}$$

siendo  $x_{(i)}$  los cuantiles observados y  $q_i = F_0^{-1}(p_i)$  los esperados<sup>2</sup> bajo  $H_0$ .

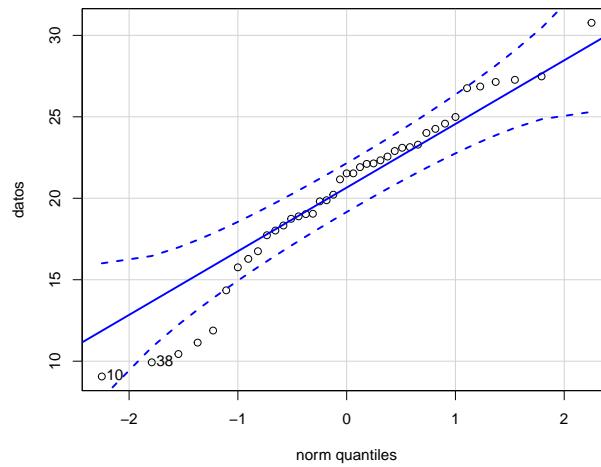
Ejemplo:

```
qqnorm(datos)
qqline(datos)
```

<sup>2</sup>Típicamente  $\{p_i = \frac{(i-0.5)}{n} : i = 1, \dots, n\}$ .



```
require(car)
qqPlot(datos, "norm")
```



```
[1] 10 38
```

### B.1.4 Contraste ji-cuadrado de Pearson

Se trata de un contraste de bondad de ajuste:

$$\begin{cases} H_0 : F = F_0 \\ H_1 : F \neq F_0 \end{cases}$$

desarrollado inicialmente para variables categóricas. En el caso general, podemos pensar que los datos están agrupados en  $k$  clases:  $C_1, \dots, C_k$ . Por ejemplo, si la variable es categórica o discreta, cada clase se puede corresponder con una modalidad. Si la variable es continua habrá que categorizarla en intervalos.

Si la hipótesis nula es simple, cada clase tendrá asociada una probabilidad  $p_i = P(X \in C_i)$  bajo  $H_0$ . Si por el contrario es compuesta, se trabajará con una estimación de dicha probabilidad (y habrá que corregir la distribución aproximada del estadístico del contraste).

| Clases   | Discreta | Continua         | $H_0$ simple | $H_0$ compuesta |
|----------|----------|------------------|--------------|-----------------|
| $C_1$    | $x_1$    | $[L_0, L_1)$     | $p_1$        | $\hat{p}_1$     |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$         | $\vdots$     | $\vdots$        |
| $C_k$    | $x_k$    | $[L_{k-1}, L_k)$ | $p_k$        | $\hat{p}_k$     |

$\sum_i p_i = 1$      $\sum_i \hat{p}_i = 1$

Se realizará un contraste equivalente:

$$\begin{cases} H_0 : \text{Las probabilidades son correctas} \\ H_1 : \text{Las probabilidades no son correctas} \end{cases}$$

Si  $H_0$  es cierta, la frecuencia relativa  $f_i$  de la clase  $C_i$  es una aproximación de la probabilidad teórica,  $f_i \approx p_i$ . Equivalentemente, las frecuencias observadas  $n_i = n \cdot f_i$  deberían ser próximas a las esperadas  $e_i = n \cdot p_i$  bajo  $H_0$ , sugiriendo el estadístico del contraste (Pearson, 1900):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(n_i - e_i)^2}{e_i} \underset{\text{aprox.}}{\sim} \chi^2_{k-r-1}, \text{ si } H_0 \text{ cierta}$$

siendo  $k$  el número de clases y  $r$  el número de parámetros estimados (para aproximar las probabilidades bajo  $H_0$ ).

|          | $n_i$      |                  |                  |                             |
|----------|------------|------------------|------------------|-----------------------------|
| Clases   | observadas | $p_i$ bajo $H_0$ | $e_i$ bajo $H_0$ | $\frac{(n_i - e_i)^2}{e_i}$ |
| $C_1$    | $n_1$      | $p_1$            | $e_1$            | $\frac{(n_1 - e_1)^2}{e_1}$ |
| $\vdots$ | $\vdots$   | $\vdots$         | $\vdots$         | $\vdots$                    |

| $n_i$             |                  |                  |                             |                                                   |
|-------------------|------------------|------------------|-----------------------------|---------------------------------------------------|
| Clases observadas | $p_i$ bajo $H_0$ | $e_i$ bajo $H_0$ | $\frac{(n_i - e_i)^2}{e_i}$ |                                                   |
| $C_k$             | $n_k$            | $p_k$            | $e_k$                       | $\frac{(n_k - e_k)^2}{e_k}$                       |
| Total             | $\sum_i n_i = n$ | $\sum_i p_i = 1$ | $\sum_i e_i = n$            | $\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(n_i - e_i)^2}{e_i}$ |

Cuando  $H_0$  es cierta el estadístico tiende a tomar valores pequeños y grandes cuando es falsa. Por tanto se rechaza  $H_0$ , para un nivel de significación  $\alpha$ , si:

$$\sum_{i=1}^k \frac{(n_i - e_i)^2}{e_i} \geq \chi^2_{k-r-1, 1-\alpha}$$

Si realizamos el contraste a partir del p-valor o nivel crítico:

$$p = P \left( \chi^2_{k-r-1} \geq \sum_{i=1}^k \frac{(n_i - e_i)^2}{e_i} \right)$$

rechazaremos  $H_0$  si  $p \leq \alpha$  (y cuanto menor sea se rechazará con mayor seguridad) y aceptaremos  $H_0$  si  $p > \alpha$  (con mayor seguridad cuanto mayor sea).

Este método está implementado en la función `chisq.test()` para el caso discreto (no corrige los grados de libertad). Ejemplo:

```
x <- trunc(5 * runif(100))
chisq.test(table(x)) # NOT 'chisq.test(x)'!

##
Chi-squared test for given probabilities
##
data: table(x)
X-squared = 9.2, df = 4, p-value = 0.05629
```

La distribución exacta del estadístico del contraste es discreta (se podría aproximar por simulación, por ejemplo empleando los parámetros `simulate.p.value = TRUE` y `B = 2000` de la función `chisq.test()`; ver también el Ejercicio 7.2 de la Sección 7.7.3 para el caso del contraste chi-cuadrado de independencia). Para que la aproximación continua  $\chi^2$  sea válida:

- El tamaño muestral debe ser suficientemente grande (p.e.  $n > 30$ ).
- La muestra debe ser una muestra aleatoria simple.
- Los parámetros deben estimarse (si es necesario) por máxima verosimilitud.
- Las frecuencias esperadas  $e_i = n \cdot p_i$  deberían ser todas  $\geq 5$  (realmente esta es una restricción conservadora, la aproximación puede ser adecuada si no hay frecuencias esperadas inferiores a 1 y menos de un 20% inferiores a 5).

Si la frecuencia esperada de alguna clase es  $< 5$ , se suele agrupar con otra clase (o con varias si no fuese suficiente con una) para obtener una frecuencia esperada  $\geq 5$ :

- Cuando la variable es nominal (no hay una ordenación lógica) se suele agrupar con la(s) que tiene(n) menor valor de  $e_i$ .
- Si la variable es ordinal (o numérica) debe juntarse la que causó el problema con una de las adyacentes.

Si la variable de interés es continua, una forma de garantizar que  $e_i \geq 5$  consiste en tomar un número de intervalos  $k \leq \lfloor n/5 \rfloor$  y de forma que sean equiprobables  $p_i = 1/k$ , considerando los puntos críticos  $x_{i/k}$  de la distribución bajo  $H_0$ .

Por ejemplo, se podría emplear la siguiente función (que imita a las incluídas en R):

```
#-----
chisq.test.cont(x, distribution, nclasses, output, nestpar,...)
#-----
Realiza el test ji-cuadrado de bondad de ajuste para una distribución continua
discretizando en intervalos equiprobables.
Parámetros:
distribution = "norm", "unif", etc
nclasses = floor(length(x)/5)
output = TRUE
nestpar = 0= nº de parámetros estimados
... = parámetros distribución
Ejemplo:
chisq.test.cont(x, distribution="norm", nestpar=2, mean=mean(x), sd=sqrt((nx-1)/nx)*sd(x))
#-----
chisq.test.cont <- function(x, distribution = "norm", nclasses = floor(length(x)/5),
 output = TRUE, nestpar = 0, ...) {
 # Funciones distribución
 q.distrib <- eval(parse(text = paste("q", distribution, sep = "")))
 d.distrib <- eval(parse(text = paste("d", distribution, sep = "")))
 # Puntos de corte
 q <- q.distrib((1:(nclasses - 1))/nclasses, ...)
 tol <- sqrt(.Machine$double.eps)
 xbreaks <- c(min(x) - tol, q, max(x) + tol)
 # Gráficos y frecuencias
 if (output) {
 xhist <- hist(x, breaks = xbreaks, freq = FALSE, lty = 2, border = "grey50")
 curve(d.distrib(x, ...), add = TRUE)
 } else {
 xhist <- hist(x, breaks = xbreaks, plot = FALSE)
 }
 # Cálculo estadístico y p-valor
```

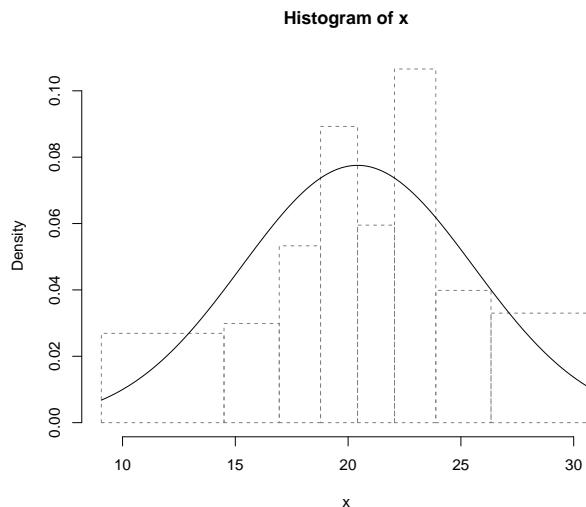
```

O <- xhist$counts # Equivalente a table(cut(x, xbreaks)) pero más eficiente
E <- length(x)/nclasses
DNAME <- deparse(substitute(x))
METHOD <- "Pearson's Chi-squared test"
STATISTIC <- sum((O - E)^2/E)
names(STATISTIC) <- "X-squared"
PARAMETER <- nclasses - nestpar - 1
names(PARAMETER) <- "df"
PVAL <- pchisq(STATISTIC, PARAMETER, lower.tail = FALSE)
Preparar resultados
classes <- format(xbreaks)
classes <- paste("(", classes[-(nclasses + 1)], ",",
 classes[-1], "]", sep = "")
RESULTS <- list(classes = classes, observed = O, expected = E, residuals = (O -
 E)/sqrt(E))
if (output) {
 cat("\nPearson's Chi-squared test table\n")
 print(as.data.frame(RESULTS))
}
if (any(E < 5))
 warning("Chi-squared approximation may be incorrect")
structure(c(list(statistic = STATISTIC, parameter = PARAMETER, p.value = PVAL,
 method = METHOD, data.name = DNAME), RESULTS), class = "htest")
}

```

Continuando con el ejemplo anterior, podríamos contrastar normalidad mediante:

```
chisq.test.cont(datos, distribution = "norm", nestpar = 2, mean=mean(datos), sd=sd(datos))
```



```

Pearson's Chi-squared test table
classes observed expected residuals
1 (9.06000,14.49908] 6 5.125 0.3865103
2 (14.49908,16.94725] 3 5.125 -0.9386680
3 (16.94725,18.77800] 4 5.125 -0.4969419
4 (18.77800,20.41732] 6 5.125 0.3865103
5 (20.41732,22.05663] 4 5.125 -0.4969419
6 (22.05663,23.88739] 8 5.125 1.2699625
7 (23.88739,26.33556] 4 5.125 -0.4969419
8 (26.33556,30.77000] 6 5.125 0.3865103

Pearson's Chi-squared test

data: datos
X-squared = 3.6829, df = 5, p-value = 0.5959
```

### B.1.5 Contraste de Kolmogorov-Smirnov

Se trata de un contraste de bondad de ajuste diseñado para distribuciones continuas (similar a la prueba de Cramer-von Mises o a la de Anderson-Darling, implementadas en el paquete `goftest` de R, que son en principio mejores). Se basa en comparar la función de distribución  $F_0$  bajo  $H_0$  con la función de dis-

distribución empírica  $F_n$ :

$$\begin{aligned} D_n &= \sup_x |F_n(x) - F_0(x)|, \\ &= \max_{1 \leq i \leq n} \{|F_n(X_{(i)}) - F_0(X_{(i)})|, |F_n(X_{(i-1)}) - F_0(X_{(i)})|\} \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que  $F_n(X_{(i)}) = \frac{i}{n}$ :

$$\begin{aligned} D_n &= \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{i}{n} - F_0(X_{(i)}), F_0(X_{(i)}) - \frac{i-1}{n} \right\} \\ &= \max_{1 \leq i \leq n} \{D_{n,i}^+, D_{n,i}^-\} \end{aligned}$$

Si  $H_0$  es simple y  $F_0$  es continua, la distribución del estadístico  $D_n$  bajo  $H_0$  no depende  $F_0$  (es de distribución libre). Esta distribución está tabulada (para tamaños muestrales grandes se utiliza la aproximación asintótica). Se rechaza  $H_0$  si el valor observado  $d$  del estadístico es significativamente grande:

$$p = P(D_n \geq d) \leq \alpha.$$

Este método está implementado en la función `ks.test()` del paquete base de R:

```
ks.test(x, y, ...)
```

donde `x` es un vector que contiene los datos, `y` es una función de distribución (o una cadena de texto que la especifica; también puede ser otro vector de datos para el contraste de dos muestras) y `...` representa los parámetros de la distribución.

Continuando con el ejemplo anterior, para contrastar  $H_0 : F = \mathcal{N}(20, 5^2)$  podríamos emplear:

```
ks.test(datos, pnorm, mean = 20, sd = 5) # One-sample
```

```

One-sample Kolmogorov-Smirnov test

data: datos
D = 0.13239, p-value = 0.4688
alternative hypothesis: two-sided
```

Si  $H_0$  es compuesta, el procedimiento habitual es estimar los parámetros desconocidos por máxima verosimilitud y emplear  $\hat{F}_0$  en lugar de  $F_0$ . Sin embargo, al proceder de esta forma es de esperar que  $\hat{F}_0$  se aproxime más que  $F_0$  a la distribución empírica, por lo que los cuantiles de la distribución de  $D_n$  pueden ser demasiado conservativos (los  $p$ -valores tenderán a ser mayores de lo que deberían) y se tenderá a aceptar la hipótesis nula (puede ser preferible aproximar

el  $p$ -valor mediante simulación; como se muestra en el Ejercicio 8.5 de la Sección 8.3).

Para evitar este problema, en el caso de contrastar normalidad se desarrolló el test de Lilliefors, implementado en la función `lillie.test()` del paquete `nortest` (también hay versiones en este paquete para los métodos de Cramer-von Mises y Anderson-Darling).

Por ejemplo:

```
ks.test(datos, pnorm, mean(datos), sd(datos)) # One-sample Kolmogorov-Smirnov test

##
One-sample Kolmogorov-Smirnov test
##
data: datos
D = 0.097809, p-value = 0.8277
alternative hypothesis: two-sided

library(nortest)
lillie.test(datos)

##
Lilliefors (Kolmogorov-Smirnov) normality test
##
data: datos
D = 0.097809, p-value = 0.4162
```

## B.2 Diagnosis de la independencia

Los métodos “clásicos” de inferencia estadística se basan en suponer que las observaciones  $X_1, \dots, X_n$  son una muestra aleatoria simple (m.a.s.) de  $X$ . Por tanto suponen que las observaciones son independientes (o los errores, en el caso de un modelo de regresión).

- La ausencia de aleatoriedad es difícil de corregir y puede influir notablemente en el análisis estadístico.
- Si existe dependencia entre las observaciones muestrales (e.g. el conocimiento de  $X_i$  proporciona información sobre los valores de  $X_{i+1}, X_{i+2}, \dots$ ), los métodos “clásicos” no serán en principio adecuados (pueden conducir a conclusiones erróneas).
  - Esto es debido principalmente a que introduce un sesgo en los estimadores de las varianzas (diseñados asumiendo independencia).
  - Los correspondientes intervalos de confianza y contrastes de hipótesis tendrán una confianza o una potencia distinta de la que deberían

(aunque las estimaciones de los parámetros pueden no verse muy afectadas).

Si  $X_1$  e  $X_2$  son independientes ( $Cov(X_1, X_2) = 0$ ):

$$Var(X_1 + X_2) = Var(X_1) + Var(X_2)$$

En el caso general (dependencia):

$$Var(X_1 + X_2) = Var(X_1) + Var(X_2) + 2Cov(X_1, X_2)$$

Típicamente  $Cov(X_1, X_2) > 0$  por lo que con los métodos “clásicos” (basados en independencia) se suelen producir subestimaciones de las varianzas (IC más estrechos y tendencia a rechazar  $H_0$  en contrastes).

**Ejemplo:** datos simulados

Consideramos un proceso temporal estacionario con dependencia exponencial (la dependencia entre las observaciones depende del “salto” entre ellas; ver Ejemplo 7.4 en la Sección 7.3).

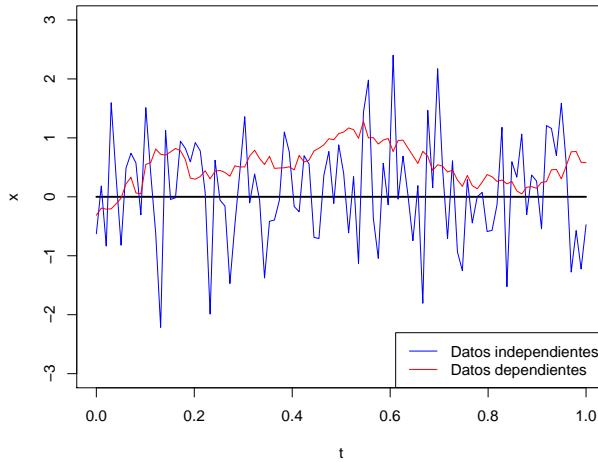
```
n <- 100 # N° de observaciones
t <- seq(0, 1, length = n)
mu <- rep(0, n) # Media
mu <- 0.25 + 0.5*t
mu <- sin(2*pi*t)

Matriz de covarianzas
t.dist <- as.matrix(dist(t))
t.cov <- exp(-t.dist)
str(t.cov)
num [1:100, 1:100] 1 0.99 0.98 0.97 0.96 ...

Simulación de las observaciones
set.seed(1)
library(MASS)

z <- rnorm(n)
x1 <- mu + z # Datos independientes
x2 <- mvrnorm(1, mu, t.cov) # Datos dependientes

plot(t, mu, type="l", lwd = 2, ylim = c(-3,3), ylab = 'x')
lines(t, x1, col = 'blue')
lines(t, x2, col = 'red')
legend("bottomright", legend = c("Datos independientes", "Datos dependientes"), col = c('blue', 'red'))
```



En el caso anterior la varianza es uno con ambos procesos. Las estimaciones suponiendo independencia serían:

```
var(x1)
[1] 0.8067621
var(x2)
[1] 0.1108155
```

En el caso de datos dependientes se produce una clara subestimación de la varianza

### B.2.1 Métodos para detectar dependencia

Es de esperar que datos cercanos en el tiempo (o en el espacio) sean más parecidos (dependientes) que datos más alejados, hablaríamos entonces de dependencia temporal (espacial o espacio-temporal).

En esta sección nos centraremos en el caso de dependencia temporal (unidimensional). Entre los métodos para detectar este tipo de dependencia destacaríamos:

- Gráficos:
  - Secuencial / Dispersión frente al tiempo
  - Dispersión retardado
  - Correlograma
- Contrastes:

- Tests basados en rachas
- Test de Ljung-Box

### B.2.2 Gráfico secuencial

El gráfico de dispersión  $\{(i, X_i) : i = 1, \dots, n\}$  permite detectar la presencia de un efecto temporal (en la tendencia o en la variabilidad).

- Es importante mantener/guardar el orden de recogida de los datos.
- Si existe una tendencia los datos no son homogéneos (debería tenerse en cuenta la variable índice, o tiempo, como variable explicativa). Podría indicar la presencia de un “efecto aprendizaje”.
- Comandos R: `plot(as.ts(x))`

Ejemplo:

```
old.par <- par(mfrow = c(1, 2))
plot(datos, type = 'l')
plot(as.ts(datos))
```

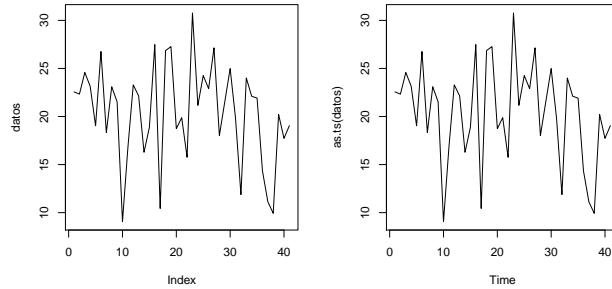


Figura B.3: Ejemplos de gráficos secuenciales.

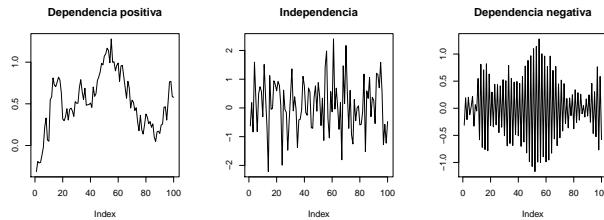
```
par(old.par)
```

Es habitual que este tipo de análisis se realice sobre los residuos de un modelo de regresión (e.g. `datos <- residuals(modelo)`)

Este gráfico también podría servir para detectar dependencia temporal:

- Valores próximos muy parecidos (valores grandes seguidos de grandes y viceversa) indicarían una posible dependencia positiva.
- Valores próximos dispares (valores grandes seguidos de pequeños y viceversa) indicarían una posible dependencia negativa.

```
old.par <- par(mfrow = c(1, 3))
plot(x2, type = 'l', ylab = '', main = 'Dependencia positiva')
plot(x1, type = 'l', ylab = '', main = 'Independencia')
x3 <- x2 * c(1, -1)
plot(x3, type = 'l', ylab = '', main = 'Dependencia negativa')
```



```
par(old.par)
```

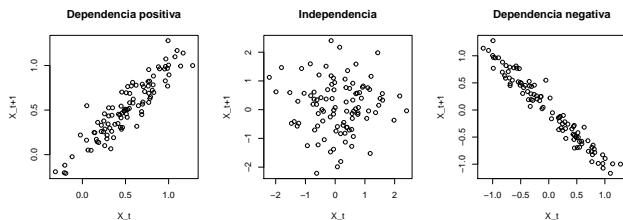
pero suele ser preferible emplear un gráfico de dispersión retardado.

### B.2.3 Gráfico de dispersion retardado

El gráfico de dispersión  $\{(X_i, X_{i+1}) : i = 1, \dots, n-1\}$  permite detectar dependencias a un retardo (relaciones entre valores separados por un instante)

- Comando R: `plot(x[-length(x)], x[-1], xlab = "X_t", ylab = "X_t+1")`

```
old.par <- par(mfrow = c(1, 3))
plot(x2[-length(x2)], x2[-1], xlab = "X_t", ylab = "X_t+1", main = 'Dependencia positiva')
plot(x1[-length(x1)], x1[-1], xlab = "X_t", ylab = "X_t+1", main = 'Independencia')
plot(x3[-length(x3)], x3[-1], xlab = "X_t", ylab = "X_t+1", main = 'Dependencia negativa')
```

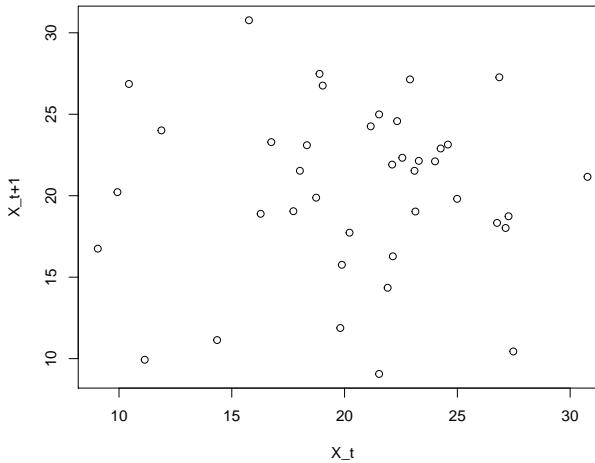


```
par(old.par)
```

Se puede generalizar al gráfico  $\{(X_i, X_{i+k}) : i = 1, \dots, n-k\}$  que permite detectar dependencias a  $k$  retardos (separadas  $k$  instantes).

### Ejemplo

```
Gráfico de dispersión retardado
plot(datos[-length(datos)], datos[-1], xlab = "X_t", ylab = "X_{t+1}")
```



El correspondiente coeficiente de correlación es una medida numérica del grado de relación lineal (denominado autocorrelación de orden 1).

```
cor(datos[-length(datos)], datos[-1])
```

```
[1] 0.01344127
```

**Ejemplo:** Calidad de un generador aleatorio

En el caso de una secuencia muy grande de número pseudoaleatorios (supuestamente independientes), sería muy difícil distinguir un patrón a partir del gráfico anterior. La recomendación en R sería utilizar puntos con color de relleno:

```
plot(u[-length(u)], u[-1], xlab="U_t", ylab="U_{t+1}", pch=21, bg="white")
```

Si se observa algún tipo de patrón indicaría dependencia (se podría considerar como una versión descriptiva del denominado “Parking lot test”). Se puede generalizar también a  $d$ -uplas ( $X_{t+1}, X_{t+2}, \dots, X_{t+d}$ ) (ver ejemplo del generador RANDU en Figura 3.1 de la Sección 3.1).

#### B.2.4 El correlograma

Para estudiar si el grado de relación (lineal) entre  $X_i$  e  $X_{i+k}$  podemos utilizar el coeficiente de correlación:

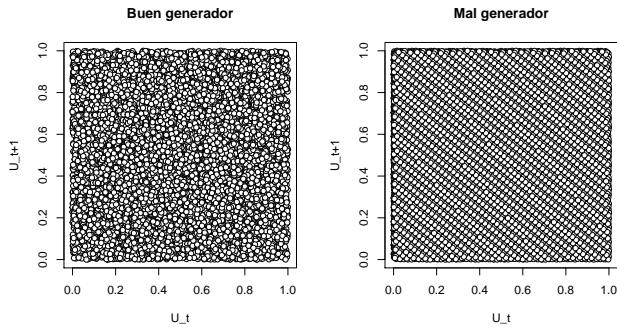


Figura B.4: Ejemplos de gráficos de dispersión retardados de dos secuencias de longitud 10000.

$$\rho(X_i, X_{i+k}) = \frac{\text{Cov}(X_i, X_{i+k})}{\sigma(X_i)\sigma(X_{i+k})}$$

- En el caso de datos homogéneos (estacionarios) la correlación sería función únicamente del salto:

$$\rho(X_i, X_{i+k}) \equiv \rho(k)$$

denominada función de autocorrelación simple (fas) o correlograma.

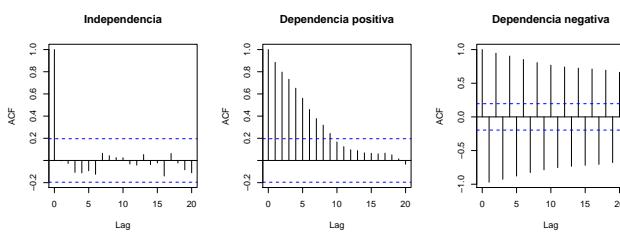
- Su estimador es el correlograma muestral:

$$r(k) = \frac{\sum_{i=1}^{n-k} (X_i - \bar{X})(X_{i+k} - \bar{X})}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$$

- Comando R:acf(x)

En caso de independencia es de esperar que las autocorrelaciones muestrales sean próximas a cero (valores “grandes” indicarían dependencia positiva o negativa según el signo).

```
old.par <- par(mfrow = c(1, 3))
acf(x1, main = 'Independencia')
acf(x2, main = 'Dependencia positiva')
acf(x3, main = 'Dependencia negativa')
```



```
par(old.par)
```

Suponiendo normalidad e independencia, asintóticamente:

$$r(k) \underset{aprox.}{\sim} N\left(\rho(k), \frac{1}{n}\right)$$

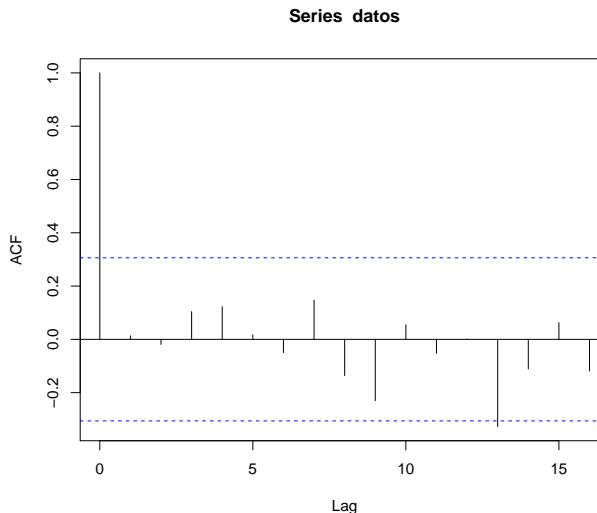
- Si el tamaño muestral es grande, podríamos aceptar  $H_0 : \rho(k) = 0$  si:

$$|r(k)| < \frac{2}{\sqrt{n}}$$

- En el *gráfico de autocorrelaciones muestrales* (también denominado correlograma) se representan las estimaciones  $r(k)$  de las autocorrelaciones correspondientes a los primeros retardos (típicamente  $k < n/4$ ) y las correspondientes bandas de confianza (para detectar dependencias significativas).

### Ejemplo

```
acf(datos) # correlaciones
```

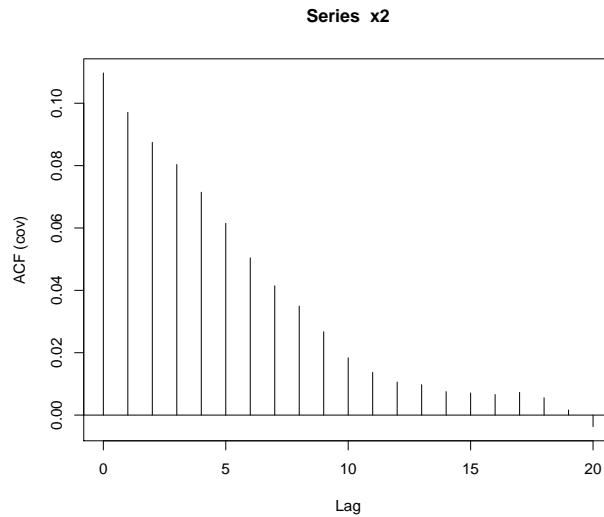


La función `acf` también permite estimar el covariograma<sup>3</sup>.

```
covar <- acf(x2, type = "covariance")
```

---

<sup>3</sup>En algunos campos, como en estadística espacial, en lugar del covariograma se suele emplear el semivariograma  $\gamma(k) = C(0) - C(k)$ .



### B.2.5 Test de rachas

Permite contrastar si el orden de aparición de dos valores de una variable dicotómica es aleatorio. Supongamos que  $X$  toma los valores + y - y que observamos una muestra del tipo:

+ + + + - - - + + + - - + + + + + - - - -

y nos interesa contrastar:

$$\begin{cases} H_0 : \text{La muestra es aleatoria} \\ H_1 : \text{La muestra no es aleatoria} \end{cases}$$

Una *racha* es una secuencia de observaciones iguales (o similares):

$\underbrace{+ + + +}_{1} \underbrace{- - -}_{2} \underbrace{+ + +}_{3} \underbrace{- -}_{4} \underbrace{+ + + + + +}_{5} \underbrace{- - -}_{6}$

- Una muestra con “muchas” o “pocas” rachas sugeriría que la muestra no es aleatoria (con dependencia negativa o positiva, respec.).
- Estadístico del contraste:

$$R = \text{"Número total de rachas en la muestra"}$$

- Bajo la hipótesis nula de aleatoriedad:

$$R \underset{\text{aprox.}}{\sim} N \left( 1 + \frac{2n_1 n_2}{n}, \frac{2n_1 n_2 (2n_1 n_2 - n)}{n^2(n-1)} \right)$$

siendo  $n_1$  y  $n_2$  el nº de signos + y - en la muestra, respectivamente ( $n_1 + n_2 = n$ ). Para tamaños muestrales pequeños ( $n < 40$ ), esta aproximación no es buena y conviene utilizar la distribución exacta (o utilizar corrección por continuidad). Los valores críticos de esta distribución están tabulados.

Este contraste se emplea también para variables continuas, se fija un punto de corte para dicotomizarlas. Normalmente se toma como punto de corte la mediana.

- En este caso si  $k = n_1$  ( $\simeq n_2$ ):

$$R \underset{aprox.}{\sim} N \left( k + 1, \frac{k(k-1)}{2k-1} \right)$$

- Se rechaza la hipótesis nula de aleatoriedad si el número de rachas es significativamente pequeño o grande.
- Si el tamaño muestral es grande, el  $p$ -valor será:

$$p \simeq 2P \left( Z \geq \left| \frac{R - E(R)}{\sqrt{Var(R)}} \right| \right)$$

- Comandos R: `tseries::runs.test(as.factor(x > median(x)))`

### Ejemplo

```
library(tseries)
runs.test(as.factor(datos > median(datos)))

##
Runs Test
##
data: as.factor(datos > median(datos))
Standard Normal = -0.4422, p-value = 0.6583
alternative hypothesis: two.sided
```

Alternativamente, para evitar el cálculo del punto de corte (la mediana), requerido para dicotomizar la variable continua, se podría emplear una modificación de este contraste, el denominado test de rachas ascendentes y descendentes, en el que se generan los valores + y - dependiendo de si el valor de la secuencia es mayor o menor que el anterior (ver e.g. Downham, 1970). Este contraste es más adecuado para generadores aleatorios.

### B.2.6 El contraste de Ljung-Box

Es un test muy utilizado (en series de tiempo) para contrastar la hipótesis de independencia. Se contrasta la hipótesis nula de que las primeras  $m$  autocorre-

laciones son cero:

$$\begin{cases} H_0 : \rho_1 = \rho_2 = \dots = \rho_m = 0 \\ H_1 : \rho_i \neq 0 \text{ para algún } i \end{cases}$$

- Se elige un  $m$  tal que la estimación  $r(m)$  de  $\rho_m = \rho(m)$  sea “fiable” (e.g.  $10 \log_{10} n$ ).
- El estadístico del contraste:

$$Q = n(n+2) \sum_{k=1}^m \frac{r(k)^2}{n-k} \underset{\text{aprox.}}{\sim} \chi_m^2, \text{ si } H_0 \text{ es cierta.}$$

- Se rechaza  $H_0$  si el valor observado es grande ( $Q \geq \chi_{m,1-\alpha}^2$ ):

$$p = P(\chi_m^2 \geq Q)$$

- Comandos R:

```
Box.test(x, type=Ljung)
Box.test(x, lag, type=Ljung)
```

### Ejemplo

```
Box.test(datos, type="Ljung") # Contrasta si la primera autocorrelación es nula

##
Box-Ljung test
##
data: datos
X-squared = 0.0078317, df = 1, p-value = 0.9295

Box.test(datos, lag=5, type="Ljung") # Contrasta si las 5 primeras autocorrelaciones son nulas

##
Box-Ljung test
##
data: datos
X-squared = 1.2556, df = 5, p-value = 0.9394
```

NOTA: Cuando se trabaja con residuos de un modelo lineal, para contrastar que la primera autocorrelación es cero, es preferible emplear el test de Durbin-Watson implementado en la función `dwttest()` del paquete `lmtest`.

## B.3 Contrastes específicos para generadores aleatorios

Los contrastes generales anteriores pueden ser muy poco adecuados para testear generadores de números pseudoaleatorios (ver e.g. L'Ecuyer y Simard, 2007).

Por ese motivo se han desarrollado contrastes específicos, principalmente con el objetivo de encontrar un generador con buenas propiedades criptográficas.

Muchos de estos contrastes están basados en la prueba chi-cuadrado y trabajan con enteros en lugar de los valores uniformes. El procedimiento habitual consiste en fijar un entero positivo  $K$ , y discretizar los valores uniformes  $U_1, U_2, \dots, U_n$ , de la forma:

$$X_i = \lfloor K \cdot U_i \rfloor + 1,$$

donde  $\lfloor u \rfloor$  denota la parte entera de  $u$ . De esta forma se consigue una sucesión de enteros aleatorios supuestamente independientes con distribución uniforme en  $\{1, \dots, K\}$ .

En esta sección se describirán algunos de los métodos tradicionales en este campo con fines ilustrativos. Si realmente el objetivo es diagnosticar la calidad de un generador, la recomendación sería emplear las baterías de contrastes más recientes descritas en la Sección 3.2.2.

### B.3.1 Contraste de frecuencias

Empleando la discretización anterior se simplifica notablemente el contraste chi-cuadrado de bondad de ajuste a una uniforme, descrito en la Sección B.1.4 e implementado en la función `chisq.test.cont()`. En este caso bastaría con contrastar la equiprobabilidad de la secuencia de enteros (empleando directamente la función `chisq.test()`) y este método de denomina *contraste de frecuencias* (frequency test). Por ejemplo:

```
set.seed(1)
u <- runif(1000)

k <- 10
x <- floor(k*u) + 1
Test chi-cuadrado
f <- table(factor(x, levels = seq_len(k)))
chisq.test(f)

##
Chi-squared test for given probabilities
##
data: f
X-squared = 10.26, df = 9, p-value = 0.3298
Equivalente a
source("Test Chi-cuadrado continua.R")
chisq.test.cont(u, distribution = "unif", nclasses = k, output = FALSE, min = 0, max
```

### B.3.2 Contraste de series

El contraste anterior se puede generalizar a contrastar la uniformidad de las  $d$ -uplas  $(X_{t+1}, X_{t+2}, \dots, X_{t+d})$  con  $t = (i-1)d$ ,  $i = 1, \dots, m$  siendo  $m = \lfloor n/d \rfloor$ . La idea es que troceamos el hipercubo  $[0, 1]^d$  en  $K^d$  celdas equiprobables. Considerando como categorías todos los posibles valores de las  $d$ -uplas, podemos emplear el estadístico chi-cuadrado para medir la discrepancia entre las frecuencias observadas en  $y$  y las esperadas, iguales todas a  $\frac{m}{K^d}$ . Las elecciones más frecuentes son  $d = 2$  (contraste de pares seriados) y  $K = 8, 10$  ó  $20$ . Por ejemplo, la función `serial.test()` del paquete `randtoolbox` implementa este contraste para  $d = 2$ .

Para que la prueba chi-cuadrado sea fiable el valor de  $n$  debería ser grande en comparación con el número de categorías  $K^d$  (e.g.  $n \geq 5dK^d$ ). Si se considera un valor  $d \geq 3$  puede ser necesario reducir considerablemente el valor de  $K$  para evitar considerar demasiadas categorías. Alternativamente se podrían emplear pruebas menos precisas como el contraste del poker o del coleccionista descritos a continuación.

### B.3.3 El contraste del poker

En el contraste del poker “clásico” se consideran conjuntos sucesivos de cinco enteros y, para cada uno, se determina cuál de las siguientes posibilidades se da:

1. Un mismo entero se repite cinco veces (abreviadamente,  $AAAAA$ ).
2. Un mismo entero se repite cuatro veces y otro distinto aparece una vez ( $AAAAB$ ).
3. Un entero se repite tres veces y otro distinto se repite dos ( $AAABB$ ).
4. Un entero se repite tres veces y otros dos distintos aparecen una vez cada uno ( $AAABC$ ).
5. Un entero se repite dos veces, otro distinto se repite también dos veces y un tercer entero diferente aparece una sola vez ( $AABBC$ ).
6. Un entero se repite dos veces y otros tres distintos aparecen una vez cada uno ( $AABCD$ ).
7. Los cinco enteros que aparecen son todos distintos ( $ABCDE$ ).

Bajo las hipótesis de aleatoriedad y uniformidad, se pueden calcular las probabilidades de estas modalidades. Por ejemplo para  $K = 10$  obtendríamos:

$$\begin{aligned} P(AAAA) &= 0.0001, P(AAAAB) = 0.0045, P(AAABB) = 0.0090, \\ P(AAABC) &= 0.0720, P(AABBC) = 0.1080, P(AABCD) = 0.5040, \\ P(ABCDE) &= 0.3024. \end{aligned}$$

Es frecuente que las clases *AAAAA* y *AAAAB* se agrupen a la hora de aplicar el test chi-cuadrado, ya que, en caso contrario, la restricción habitual  $e_i \geq 5$  llevaría a que  $0.0001 \cdot \frac{n}{5} \geq 5$ , es decir,  $n \geq 250\,000$ .

Es habitual simplificar el contraste anterior para facilitar su implementación definiendo las categorías según el número de enteros distintos de entre los cinco observados. Así obtendríamos:

$$\begin{aligned} P(1 \text{ entero diferente}) &= 0.0001, P(2 \text{ enteros diferentes}) = 0.0135, \\ P(3 \text{ enteros diferentes}) &= 0.1800, P(4 \text{ enteros diferentes}) = 0.5040, \\ P(5 \text{ enteros diferentes}) &= 0.3024, \end{aligned}$$

procediendo también a agrupar las dos primeras modalidades.

En el caso general de considerar  $d$ -uplas (manos de  $d$  cartas con  $K$  posibilidades cada una), la probabilidad de obtener  $c$  valores (cartas) diferentes es (e.g. Knuth, 2002, Sección 3.3.2, p. 64):

$$P(C = c) = \frac{K!}{(K - c)!K^d} S(d, c),$$

donde  $S(d, c)$  es el número de Stirling de segunda clase, definido como el número de formas que existen de hacer una partición de un conjunto de  $d$  elementos en  $c$  subconjuntos:

$$S(d, c) = \frac{1}{c!} \sum_{i=0}^c (-1)^i \binom{c}{i} (c - i)^d.$$

Por ejemplo, la función `poker.test()` del paquete `randtoolbox` implementa este contraste para el caso de  $d = K$ .

### B.3.4 El contraste del coleccionista

Por simplicidad describiremos el caso de  $d = 1$  (con  $K$  categorías). Considerando la sucesión de enteros aleatorios se procede (como un coleccionista) a contabilizar cuál es el número,  $Q$ , (aleatorio) de valores consecutivos hasta que se completa la colección de todos los enteros entre 1 y  $K$ . Obviamente, bajo las hipótesis de aleatoriedad y uniformidad, cada posible entero entre 1 y  $K$  tiene la misma probabilidad de aparecer en cada generación y, por tanto, resulta posible calcular la distribución de probabilidad de  $Q$ . De esta forma podemos utilizar los valores calculados de las probabilidades

$$P(Q = K), P(Q = K + 1), \dots, P(Q = M - 1), P(Q \geq M),$$

para obtener las frecuencias esperadas de cada clase y confrontarlas con las observadas vía el estadístico chi-cuadrado (e.g. Knuth, 2002, Sección 3.3.2, p. 65).

Existen varias elecciones comunes de  $K$  y  $M$ . Tomando  $K = 5$  con clases  $Q = 5, Q = 6, \dots, Q = 19, Q \geq 20$ , las probabilidades vendrían dadas por:

$$\begin{aligned} P(Q = 5) &= 0.03840000, & P(Q = 6) &= 0.07680000, \\ P(Q = 7) &= 0.09984000, & P(Q = 8) &= 0.10752000, \\ P(Q = 9) &= 0.10450944, & P(Q = 10) &= 0.09547776, \\ P(Q = 11) &= 0.08381645, & P(Q = 12) &= 0.07163904, \\ P(Q = 13) &= 0.06011299, & P(Q = 14) &= 0.04979157, \\ P(Q = 15) &= 0.04086200, & P(Q = 16) &= 0.03331007, \\ P(Q = 17) &= 0.02702163, & P(Q = 18) &= 0.02184196, \\ P(Q = 19) &= 0.01760857, & P(Q \geq 20) &= 0.07144851. \end{aligned}$$

Para  $K = 10$  se podrían considerar las siguientes categorías (con sus correspondientes probabilidades):

$$\begin{aligned} P(10 \leq Q \leq 19) &= 0.17321155, & P(20 \leq Q \leq 23) &= 0.17492380, \\ P(24 \leq Q \leq 27) &= 0.17150818, & P(28 \leq Q \leq 32) &= 0.17134210, \\ P(33 \leq Q \leq 39) &= 0.15216056, & P(Q \geq 40) &= 0.15685380. \end{aligned}$$



## Apéndice C

# Integración numérica

En muchos casos nos puede interesar la aproximación de una integral definida. En estadística, además del caso de Inferencia Bayesiana (que se trató en el Capítulo 11 empleando Integración Montecarlo y MCMC), nos puede interesar por ejemplo aproximar mediante simulación el error cuadrático integrado medio (MISE) de un estimador. En el caso de una densidad univariante sería de la forma:

$$MISE \left\{ \hat{f} \right\} = E \int (\hat{f}(x) - f(x))^2 dx$$

Cuando el numero de dimensiones es pequeño, nos puede interesar emplear un método numérico para aproximar este tipo de integrales.

### C.1 Integración numérica unidimensional

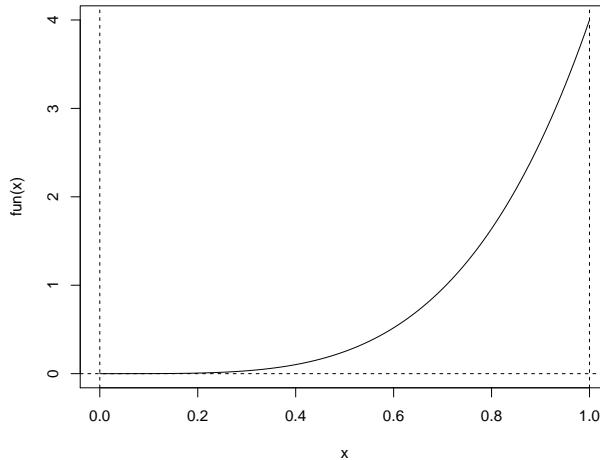
Supongamos que nos interesa aproximar una integral de la forma:

$$I = \int_a^b h(x)dx.$$

Consideraremos como ejemplo:

$$\int_0^1 4x^4 dx = \frac{4}{5}$$

```
fun <- function(x) return(4 * x^4)
curve(fun, 0, 1)
abline(h = 0, lty = 2)
abline(v = c(0, 1), lty = 2)
```



### C.1.1 Método del trapezoide

La regla de los trapecios es una forma de aproximar la integral utilizando  $n$  trapecios. Si se consideran  $n$  subintervalos en  $[a, b]$  de longitud  $h = \frac{b-a}{n}$  (i.e.  $n + 1$  puntos regularmente espaciados cubriendo el dominio), y se approxima linealmente la función en cada subintervalo, se obtiene que:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} [f(a) + 2f(a+h) + 2f(a+2h) + \dots + f(b)]$$

```
trapezoid.vec <- function(f.vec, h = 0.01) {
 # Integración numérica unidimensional entre a y b
 # utilizando el método del trapezoide
 # (se approxima f linealmente en cada intervalo)
 n <- length(f.vec)
 return(h*(f.vec[1]/2 + sum(f.vec[2:(n-1)]) + f.vec[n]/2))
}

trapezoid <- function(fun, a = 0, b = 1, n = 100) {
 # Integración numérica de fun (función unidimensional) entre a y b
 # utilizando el método del trapezoide con n subdivisiones
 # (se approxima f linealmente en cada intervalo)
 # Se asume a < b y n entero positivo
 h <- (b-a)/n
 x.vec <- seq(a, b, by = h)
 f.vec <- sapply(x.vec, fun)
```

```

 return(trapezoid.vec(f.vec, h))
}

trapezoid(fun, 0, 1, 20)

[1] 0.8033325

```

El error en esta aproximación se corresponde con:

$$\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi),$$

para algún  $a \leq \xi \leq b$  (dependiendo del signo de la segunda derivada, i.e. de si la función es cóncava o convexa, el error será negativo ó positivo). El error máximo absoluto es  $\frac{(b-a)^3}{12n^2} \max_{a \leq \xi \leq b} |f''(\xi)|$ . En el caso general multidimensional sería  $O(n^{-\frac{2}{d}})$ .

### C.1.2 Regla de Simpson

Se divide el intervalo  $n$  subintervalos de longitud  $h = \frac{b-a}{n}$  (con  $n$  par), considerando  $n+1$  puntos regularmente espaciados  $x_i = a + ih$ , para  $i = 0, 1, \dots, n$ . Aproximando de forma cuadrática la función en cada subintervalo  $[x_{j-1}, x_{j+1}]$  (considerando 3 puntos), se obtiene que:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[ f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{(n/2)-1} f(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(x_n) \right],$$

```

simpson <- function(fun, a, b, n = 100) {
 # Integración numérica de fnt entre a y b
 # utilizando la regla de Simpson con n subdivisiones
 # (se aproxima fun de forma cuadrática en cada par de intervalos)
 # fnt es una función de una sola variable
 # Se asume a < b y n entero positivo par
 n <- max(c(2*(n %% 2), 4))
 h <- (b-a)/n
 x.vec1 <- seq(a+h, b-h, by = 2*h)
 x.vec2 <- seq(a+2*h, b-2*h, by = 2*h)
 f.vec1 <- sapply(x.vec1, fun)
 f.vec2 <- sapply(x.vec2, fun)
 return(h/3*(fun(a) + fun(b) + 4*sum(f.vec1) + 2*sum(f.vec2)))
 # Una cota del error en valor absoluto es:
 # h^4*(b-a)*max(c(f.vec1, fvec.2))^4/180.
}

simpson(fun, 0, 1, 20)

```

```
[1] 0.8000033
```

El máximo error (en el caso unidimensional) viene dado por la expresión:

$$\frac{(b-a)^5}{180n^4} \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(4)}(\xi)|.$$

En el caso general multidimensional sería  $O(n^{-\frac{4}{d}})$ .

### C.1.3 Cuadratura adaptativa

En lugar de evaluar la función en una rejilla regular (muestrear por igual el dominio), puede interesar ir añadiendo puntos sólo en los lugares donde se mejore la aproximación (en principio donde hay mayor área).

```
quadrature <- function(fun, a, b, tol=1e-8) {
 # numerical integration using adaptive quadrature

 simpson2 <- function(fun, a, b) {
 # numerical integral using Simpson's rule
 # assume a < b and n = 2
 return((b-a)/6 * (fun(a) + 4*fun((a+b)/2) + fun(b)))
 }

 quadrature_internal <- function(S.old, fun, a, m, b, tol, level) {
 level.max <- 100
 if (level > level.max) {
 cat ("recursion limit reached: singularity likely\n")
 return (NULL)
 }
 S.left <- simpson2(fun, a, m)
 S.right <- simpson2(fun, m, b)
 S.new <- S.left + S.right
 if (abs(S.new-S.old) > tol) {
 S.left <- quadrature_internal(S.left, fun,
 a, (a+m)/2, m, tol/2, level+1)
 S.right <- quadrature_internal(S.right, fun,
 m, (m+b)/2, b, tol/2, level+1)
 S.new <- S.left + S.right
 }
 return(S.new)
 }

 level = 1
 S.old <- (b-a) * (fun(a) + fun(b))/2
 S.new <- quadrature_internal(S.old, fun,
```

```

 a, (a+b)/2, b, tol, level+1)
 return(S.new)
}

quadrature(fun, 0, 1)

[1] 0.8

```

Fuente: r-blogger Guangchuang Yu

#### C.1.4 Comandos de R

```

integrate(fun, 0, 1) # Permite límites infinitos

0.8 with absolute error < 8.9e-15
Cuidado: fun debe ser vectorial...

require(MASS)
area(fun, 0, 1)

[1] 0.8000001

```

## C.2 Integración numérica bidimensional

Supongamos que nos interesa aproximar una integral de la forma:

$$I = \int_{a_x}^{b_x} \int_{a_y}^{b_y} f(x, y) dy dx$$

Consideraremos como ejemplo:

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (x^2 - y^2) dx dy = 0$$

```
f2d <- function(x,y) x^2 - y^2
```

Es habitual (especialmente en simulación) que la función se evalúe en una rejilla:

```

ax = -1
ay = -1
bx = 1
by = 1

```

```

nx = 21
ny = 21
x <- seq(ax, bx, length = nx)
y <- seq(ay, by, length = ny)
z <- outer(x, y, f2d)

hx <- x[2] - x[1]
hy <- y[2] - y[1]

```

### C.2.1 Representación gráfica

Puede ser de utilidad las herramientas de los paquetes `plot3D` y `plot3Drgl` (también se pueden utilizar las funciones `spersp`, `simage`, `spoints` y `splot` del paquete `npsp`).

```

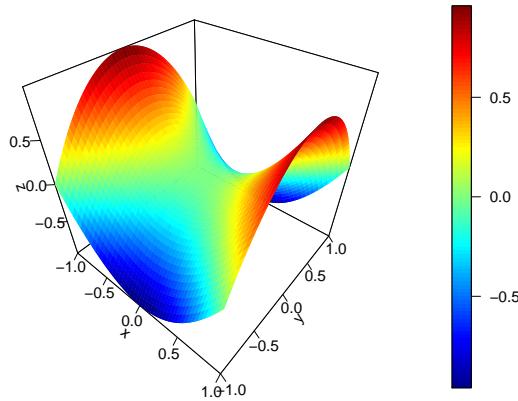
if(!require(plot3D)) stop('Required package `plot3D` not installed.')

persp3D(z = z, x = x, y = y)

persp3D.f2d <- function(f2d, ax=-1, bx=1, ay=-1, by=1, nx=21, ny=21, ...) {
 x <- seq(ax, bx, length = nx)
 y <- seq(ay, by, length = ny)
 hx <- x[2] - x[1]
 hy <- y[2] - y[1]
 z <- outer(x, y, f2d)
 persp3D(x, y, z, ...)
}

persp3D.f2d(f2d, -1, 1, -1, 1, 50, 50, 1, ticktype = "detailed")

```



### C.2.2 Método del trapezoide

Error  $O(n^{-\frac{2}{d}})$ .

```

trapezoid.mat <- function(z, hx, hy) {
 # Integración numérica bidimensional
 # utilizando el método del trapezoide (se aproxima f linealmente)
 f.vec <- apply(z, 1, function(x) trapezoid.vec(x, hx))
 return(trapezoid.vec(f.vec, hy))
}

trapezoid.mat(z, hx, hy)

trapezoid.f2d <- function(f2d, ax=-1, bx=1, ay=-1, by=1, nx=21, ny=21) {
 x <- seq(ax, bx, length = nx)
 y <- seq(ay, by, length = ny)
 hx <- x[2]-x[1]
 hy <- y[2]-y[1]
 z <- outer(x, y, f2d)
 trapezoid.mat(z, hx, hy)
}

trapezoid.f2d(f2d, -1, 1, -1, 1, 101, 101)

[1] -8.881784e-18

```

### C.2.3 Comandos de R

Suponiendo que la función es vectorial, podemos emplear:

```
integrate(function(y) {
 sapply(y, function(y) {
 integrate(function(x) f2d(x,y), ax, bx)$value }) },
 ay, by)
```

```
-2.775558e-17 with absolute error < 1.1e-14
```

Si la función no es vectorial y solo admite parámetros escalares:

```
integrate(function(y) {
 sapply(y, function(y) {
 integrate(function(x) {
 sapply(x, function(x) f2d(x,y)) }, ax, bx)$value }) },
 ay, by)
```

Fuente: [tolstoy.newcastle.edu.au](http://tolstoy.newcastle.edu.au).

Alternativamente se podría emplear la función `adaptIntegrate` del paquete `cubature`.