Cómputo científico para probabilidad y estadística. Tarea 5. Simulación Estocástica, introducción.

Juan Esaul González Rangel

Octubre 2023

1. Definir la cdf inversa generalizada F_X^- y demostrar que en el caso de variables aleatorias continuas esta coincide con la inversa usual. Demostrar además que en general para simular de X podemos simular $u \sim U(0,1)$ y $F_X^-(u)$ se distribuye como X. [1 punto]

   Demostración. Sea F una función de distribución. La inversa generalizada F^- está definida como,

$$F^-(x) = \text{ínf}\{y : F(y) \geq x\}.$$

   Si F es la función de distribución de una variable aleatoria continua (cuya densidad es continua), entonces F es monótona creciente, y por lo tanto es invertible. Como F es monótona creciente, también lo es F^{-1}, de donde se tiene

$$F^-(x) = \text{ínf}\{y : F(y) \geq x\} = \text{ínf}\{y : y \geq F^{-1}(x)\} = F^{-1}(x).$$

   Lo anterior se cumple para todo $x \in \mathbb{R}$, es decir $F^-(x) = F^{-1}(x), \forall x \in \mathbb{R}$.

   Mostramos ahora que si $u \sim U(0,1)$ entonces F_X^- se distribuye como X. Primero notemos que por definición de F^- se satisface que

$$F_X(F_X^-(x)) \geq x.$$

   También tenemos que $x \in \{y : F_X(y) \geq F_X(x)\}$ por lo que

$$F_X^-(F_X(x)) = \text{ínf}\{y : F_X(y) \geq F_X(x)\} \leq x.$$

   Mostraremos la igualdad de los conjuntos $\{(y,x) : F_X^-(y) \leq x\} = \{(y,x) : F_X(x) \geq y\}$. Primero sean y, x tales que $F_X^-(y) \leq x$, por las propiedades anteriores,

$$y \leq F_X(F_X^-(x)) \leq F_X(x).$$

   Sean ahora x, y tales que $y \leq F_X(x)$, entonces

$$x \geq F_X^-(F_X(x)) \geq F_X^-(y).$$

   De las dos implicaciones anteriores tenemos que $\{(y,x) : F_X^-(y) \leq x\} = \{(y,x) : F_X(x) \geq y\}$. Sea $u \sim U(0,1)$

$$\mathbb{P}\left(F_X^-(U) \leq x\right) = \mathbb{P}\left(U \leq F_X(x)\right) = F_X(x).$$

Lo anterior se cumple para todo $x \in \mathbb{R}$. Como la función de distribución caracteriza la distribución, concluimos que $X \stackrel{d}{=} F_X^{-}(U)$.

$\square$

2. Implementar el siguiente algoritmo para simular variables aleatorias uniformes:

$$x_i = 107374182 x_{i-1} + 104420 x_{i-5} \mod 2^{31} - 1$$

regresa x_i y recorrer el estado, esto es $x_{j-1} = x_j; j = 1, 2, 3, 4, 5$; ¿parecen $U(0,1)$? [1 punto]

En el archivo `Tarea5.py` la función tiene el nombre `simulate_unif`. Esta función toma dos parámetros, el primero es la cantidad de variables a simular y el segundo que es opcional es la semilla a usar. En este caso la semilla es una lista con 5 números y su valor predeterminado es `[57,189,42,26,4]`.

El siguiente ejemplo corto muestra el uso del algoritmo,

```
simulate_unif(20)
```

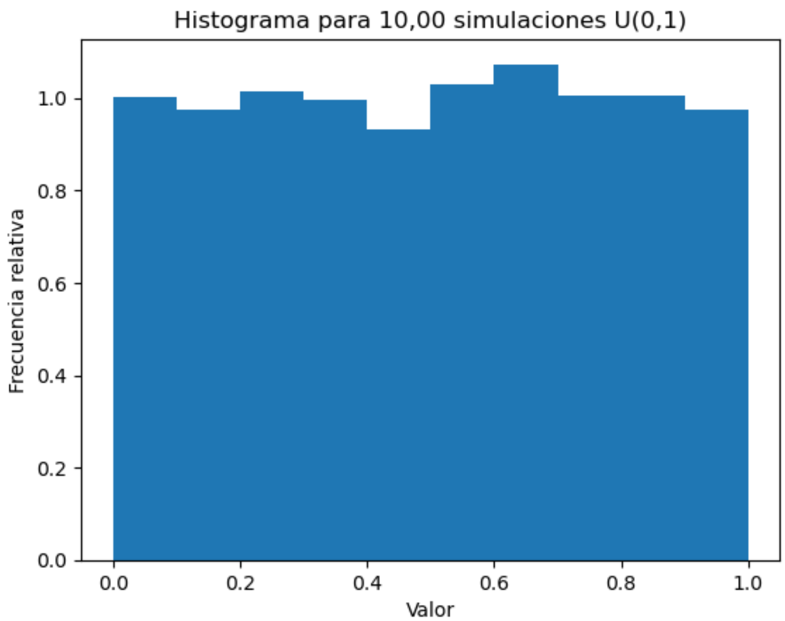
La salida es una lista con 20 simulaciones uniformes en $(0, 1)$. Notemos que no hace falta especificar la semilla porque hay valores preasignados, pero si lo preferimos es posible hacerlo.

```
array([[0.20277159],
    [0.33821995],
    [0.33366523],
    [0.5844814 ],
    [0.14562601],
    [0.15818634],
    [0.02168181],
    [0.61616571],
    [0.48205825],
    [0.89928987],
    [0.50309849],
    [0.98820393],
    [0.67741769],
    [0.08572004],
    [0.16774989],
    [0.03575408],
    [0.69187728],
    [0.06325333],
    [0.91457816],
    [0.47367591]])
```

Para verificar si los valores simulados son próximos a muestras uniformes en $(0, 1)$ podemos usar varios métodos, pero es necesario obtener una muestra más grande.

Al realizar 10,000 simulaciones con nuestro algoritmo, encontramos que la media es 0.5010, la varianza es 0.082790 y los límites superior e inferior son 0.00006 y 0.99995. En todos los casos, estos están próximos a lo que se esperaría encontrar de una muestra de variables aleatorias uniformes en $(0, 1)$.

Podemos apreciar mejor el comportamiento de la muestra al usar un histograma de frecuencia relativa.



Como podemos notar, el histograma de las simulaciones es muy parecido a una densidad uniforme en $(0, 1)$.

Una manera más precisa de evaluar la proximidad de la distribución empírica de los valores simulados a la distribución objetivo es mediante el uso de una prueba de bondad de ajuste. Al aplicar la prueba de Kolmogorov-Smirnov para evaluar si la muestra proviene de una distribución uniforme en $(0, 1)$ encontramos un p-valor de 0.4329928620961334, es decir, no hay evidencia suficiente para rechazar que la prueba provenga de esta distribución.

Con lo anterior, evaluamos que para propósitos sencillos, la muestra que obtuvimos se comporta como una muestra de v. a. i. i. d. uniformes en $(0, 1)$. Sin embargo, existen pruebas más sofisticadas que se aplican a diversos algoritmos con el propósito de verificar con cuál de ellos se pueden encontrar simulaciones que mejor aproximen muestras aleatorias. Se podría dar el caso de que al usar una prueba más compleja, la muestra ya no presente el comportamiento característico de la distribución uniforme.

3. ¿Cuál es el algoritmo que usa `scipy.stats.uniform` para generar números aleatorios? ¿Cómo se pone la semilla? ¿y en `R`? [1 punto]

   De acuerdo con la documentación de Scipy, la generación de números aleatorios se realiza llamando a las funciones `Random State` o `Random Generator` de Numpy. En la documentación de Numpy se menciona que hasta la versión 1.17.3, el algoritmo por defecto para la generación de números aleatorios era el algoritmo de Mersenne Twister, pero a partir de la versión 1.17.4 se cuenta con el algoritmo PCG64 que ofrece varias ventajas, entre ellas un mejor desempeño estadístico.

   En cuanto a la semilla, hay dos formas principales de agregarla en Scipy, la primera es agregarla directamente dentro del parámetro `random_state` de una función `rvs`, la segunda forma es modificar directamente la semilla de Numpy, ya que Scipy llama a Numpy para crear las simulaciones. En Numpy hay dos maneras de cambiar la semilla, la primera es a través de la instrucción `numpy.random.seed()` que modifica la semilla global para cada vez que se llame a `numpy.random`, la segunda forma es instanciando un generador de números pseudoaleatorios y modificando directamente la semilla en él, lo que se logra mediante `rg = np.random.default_rng(seed=semilla)`. La diferencia es que cuando se trabaja con una instancia del generador, la modificación de la semilla únicamente afecta a las simulaciones que se realicen desde este generador (con `rg.uniform(size=10)`, por ejemplo).

   En `R`, el algoritmo predeterminado es también Mersenne Twister, aunque en la documentación se puede encontrar una lista de otros algoritmos que se pueden usar, entre ellos están Super-Duper, Wichmann-Hill, Marsaglia-Multicarry, Knuth-TAOCP-2002, Knuth-TAOCP y L'Ecuyer-CMRG.

Es posible modificar con qué algoritmo se trabaja en `R` cuando se ejecuta la instrucción usual `runif()`. Para modificar la semilla en `R` se utiliza el comando `set.seed()`.

Referencias de la documentación:

`https://justinbois.github.io/bootcamp/2020/lessons/l23_random_number_generation.html`

`https://github.com/numpy/numpy/blob/7ccf0e08917d27bc0eba34013c1822b00a66ca6d/numpy/random/mtrand/mtrand.pyx`

`https://consultglp.com/wp-content/uploads/2016/12/r-techniques-in-generating-random-numbers.pdf`

`https://numpy.org/devdocs/reference/random/generator.html`

`https://numpy.org/devdocs/reference/random/bit_generators/pcg64.html#numpy.random.PCG64`

4. ¿En `scipy` que funciones hay para simular una variable aleatoria genérica discreta? ¿tienen preproceso? [1 punto]

   Existe una amplia lista de variables aleatorias discretas que pueden ser simuladas con Scipy. Concretamente en su página se mencionan

   > Bernoulli Distribution, Beta-Binomial Distribution, Binomial Distribution, Boltzmann (truncated Planck) Distribution, Planck (discrete exponential) Distribution, Poisson Distribution, Geometric Distribution, Negative Binomial Distribution, Hypergeometric Distribution, Fisher's Noncentral Hypergeometric Distribution, Wallenius' Noncentral Hypergeometric Distribution, Negative Hypergeometric Distribution, Zipf (Zeta) Distribution, Zipfian Distribution, Logarithmic (Log-Series, Series) Distribution, Discrete Uniform (randint) Distribution, Discrete Laplacian Distribution, Yule-Simon Distribution.

   Todas estas distrbuciones son instancias específicas de la clase más general `rv_discrete` que permite definir para cualquier conjunto de valores y sus probabilidades asociadas, un generador de números aleatorios con esa distribución. La ventaja de que Scipy sea orientado a objetos es que al crear unan ueva instancia de la clase `rv_discrete`, esta hereda todos los atributos de la clase madre, y por lo tanto al especificar una nueva distribución discreta, ya se cuenta con todas las herramientas usuales de las distribuciones que vienen implementadas en Scipy, como pmf, rvs, cdf, etcétera.

   Otra manera de simular variables aleatorias discretas genéricas es mediante la función de Numpy `numpy.random.choice`. Como su nombre lo indica, esta función permite especificar un vector de valores posibles y sus probabilidades. La principal diferencia es que esta función no genera un objeto, por lo que únicamente sirve para simulaciones puntuales y no para realizar más operaciones con la distribución.

   En cuanto al preproceso, las implementaciones de las variables aleatorias comunes (Bernoulli, Poisson, Geométrica, etcétera) sustituyen la implementación genérica de `rvs` por una versión ad hoc, lo que posiblmente resulta en mayor eficacia y menor tiempo de ejecución. En el caso de las variables que toman una cantidad infinita de valores (como Poisson), el preproceso o método ad hoc también permite hacer esto que no sería posible usando únicamente la lista de valores y probabilidades.

   Referencias de la documentación:

   `https://github.com/scipy/scipy/blob/v1.11.3/scipy/stats/_discrete_distns.py#L111-L173`

   `https://numpy.org/doc/stable/reference/random/generated/numpy.random.choice.html`

   `https://docs.scipy.org/doc/scipy/tutorial/stats/discrete.html#discrete-distributions-in-scipy-stats`

5. Implementar el algoritmo Adaptive Rejection Sampling y simular de una Gama(2, 1) 10,000 muestras. ¿cuando es conveniente dejar de adaptar la envolvente? (vea alg. A.7, p. 54 Robert y Casella, 2da ed.) [6 puntos]

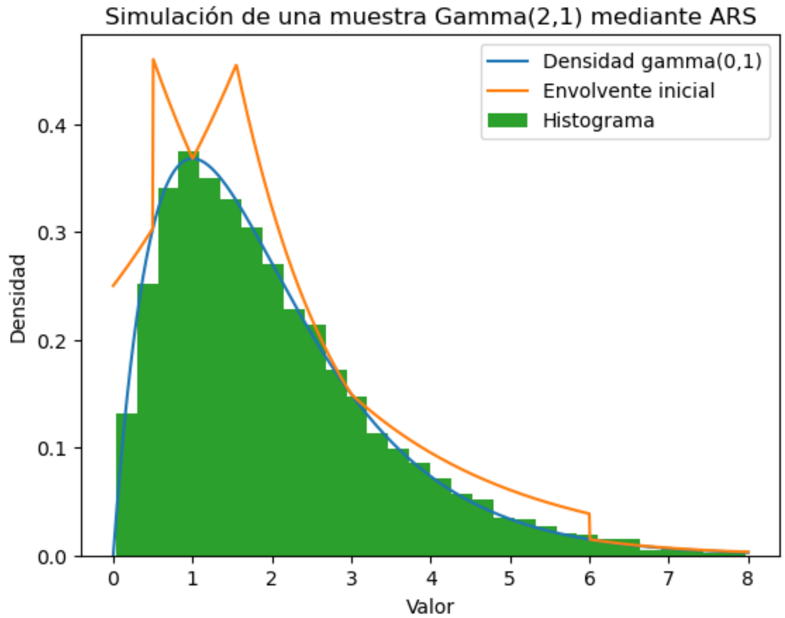
   Para la implementación completa del algoritmo se crearon varias funciones en el archivo `Tarea 5.py`, A continuación una descripción sencilla de cada una,

   - `log_gamma_dens(point,alpha=2,beta=1)`: Esta función calcula el logaritmo de una densidad gamma con parámetros dados (por defecto 2 y 1) evaluada en un punto x.

- `gamma_dens(point,alpha=2,beta=1)`: Esta función calcula una densidad gamma con parámetros dados (por defecto 2 y 1) evaluada en un punto x.
- `create_line(start,end,point_to_evaluate)`: Eta función encuentra la ecuación de una recta que pase por los puntos `start` y `end` y la evalúa en un punto especificado.
- `envelope(points,x)`: Esta función encuentra la envolvente del logaritmo de una densidad gamma(2,1), con un conjunto de puntos dados y la evalúa en un x especificado.
- `exp_envelope(x_values,grid)`: Esta función encuentra la exponencial de la envolvente logarítmica de la función anterior. Es decir, la envolvente encontrada por esta función domina a la densidad gamma.
- `sp_envelope_cdf(grid,lim)`: Esta función usa la integración numérica de `scipy` para evaluar la integral de la envolvente de la densidad gamma. Como tiene cierto error de precisión y además es algo lenta, al final sólo se usó para corroborar los cálculos de una función de integración ad-hoc que se implementó más adelante.
- `exp_integral(liminf,limsup,a,b)`: Esta función encuentra la integral de una función exponencial de la forma $f(x) = \exp\{mx - b\}$ en los límites a y b indicados. Se usó para encontrar las integrales por piezas de la envolvente.
- `envelope_cdf(grid,x)`: Esta función calcula la función de distribución acumulada de la envolvente dado un conjunto de puntos para crearla y un punto dónde evaluarla. La integral se obtiene mediante recursión y llamando a la función `exp_integral()` en cada intervalo en que la función tiene la forma de una exponencial.
- `generalized_inverse(distr,values,x)`: Esta función encuentra la inversa generalizada de un punto con respecto a una función de distribución. Para hacerla más eficiente, toma como argumento un conjunto de puntos donde la función de distribución fue evaluada para buscar el ínfimo entre ellos en lugar de calcular la función de distribución cada vez que es llamada.
- `ars_gamma(n_simul,grid=[0.5,1,3,6])`: Esta función hace uso de las anteriores para implementar el algoritmo *Adaptive Rejection Sampling*. Utiliza un conjunto inicial de puntos para calcular una envolvente y con esta muestrea mediante el método de tranformada inversa de probabilidad. A continuación acepta o rechaza para el muestreo de la gamma y añade puntos a la envolvente, adaptandola cada vez hasta que se llega a un total de 10 simulaciones aceptadas, una vez que ocurre esto, el muestreo continua sin actualizar la envolvente.

Para realizar las 10,000 simulaciones que se solicitaron, usé el conjunto inicial de puntos $[0.5, 1, 3, 6]$ debido a su distribución alrededor de la media de la densidad gamma(2,1). Al implementar el algoritmo noté que hay dos problemas importantes si se actualiza la envolvente demasiadas veces. El primero es que al calcular la envolvente y su integral de nuevo cada vez, se pierde mucho tiempo, lo que resulta en un desempeño peor que si se dejara de actualizar la envolvente en pasos previos. El segundo problema es que cuando muchos puntos son agregados, algunos de ellos pueden ser demasiado cercanos entre sí, lo que ocasiona que los errores de precisión numéricos terminen causando fallas (por ejemplo, cuando la pendiente de una recta de la envolvente es casi cero). Con base en estas dos situaciones, noté que lo mejor era establecer una cantidad máxima de modificaciones a la envolvente y a partir de ahí muestrear con la envolvente fija. Establecí el límite de modificaciones como 10 porque noté que con esta cantidad se podían obtener los muestreos en un tiempo razonable y sin ocasionar errores de aproximación.

A continuación se muestra un histograma de las 10,000 simulaciones realizadas comparadas contra la densidad gamma(2,1). En la gráfica también se incluye la envolvente inicial.



Por lo menos visualmente, el ajuste del histograma a la densidad parece ser adecuado. Podemos obtener la media y varianza de los datos muestrados para compararlos con los de la distribución objetivo. La media y varianza muestrales son, respectivamente, 2.0203555 y 1.9114250, mientras que las teóricas son 2 y 2. La prueba de Kolmogorov-Smirnov para la muestra simulada y una gamma(2,1) nos arroja un p-valor de 0.1313849, por lo que no hay evidencia estadística suficiente para rechazar la hipótesis nula de que la muestra proviene de una distribución gamma(2,1).