Tutkimustiedonhallinnan peruskurssi

Hannu Toivonen, Marko Salmenkivi, Inkeri Verkamo
hannu.toivonen, marko.salmenkivi, inkeri.verkamo@cs.helsinki.fi

Helsingin yliopisto – Tietojenkäsittelytieteen laitos

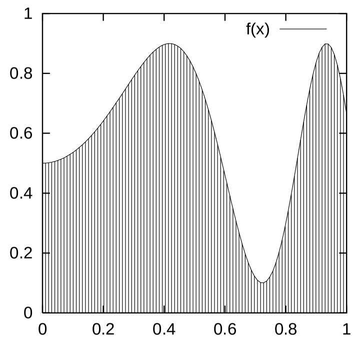
Johdatus Monte Carloon

Monte Carlo

- Monte Carlo -menetelmät perustuvat satunnaisuuden hyväksikäyttöön
- joidenkin laskennallisesti vaikeiden ongelmien ratkaisu
- satunnaisuudesta johtuen ratkaisut ovat likimääräisiä
- vrt. satunnaisotos, jonka perusteella arvioidaan muuttujan jakaumaa
  - koska *satunnainen* ja *otos*, tulos on likimääräinen
  - etu: otanta ja jakauman arviointi on tehokasta
- Monte Carlo usein: mallista generoitu joukko satunnaisia pisteitä (ei otos aineistosta)

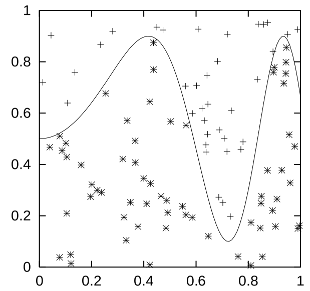
Monte Carlo -integrointi

- tyypillinen Monte Carlon sovellus: integrointi
- halutaan integroida funktio $f : [0,1] \to [0,1]$: $\int_0^1 f(x)dx = ?$



Monte Carlo -integrointi (2)

- generoidaan (tasaisesti jakautuneita) satunnaisia pisteitä alueelle $[0,1] \times [0,1]$
  - $x \in [0,1]$ (integroitava väli)
  - $y \in [0,1]$ ($f(x)$:n mahdolliset arvot kattava alue)
- kuvaajan alle osuneiden pisteiden osuus 0.63



Monte Carlo -integrointi (3)

- vähän yleisempi MC-integrointialgoritmi
  - ol. $f(x) \geq 0$
  - syöte: integroitavan välin alaraja AR ja yläraja ja YR, yläraja MAX $f(x)$:lle, satunnaispisteiden lkm K
- k = 0;
- for i = 1 to K
  - x = rand(AR, YR);
  - y = rand(0, MAX);
  - if $y \leq f(x)$ then $k++$;
- print k/K·(YR-AR)·MAX ;

Shakkiesimerkki

- kaksi shakkiohjelmaa, A ja B, pelaavat 15 ottelua
- A voittaa niistä 10 ja B voittaa 5 (oletetaan että peli ei voi päättyä tasan)
- onko A siis parempi kuin B?
- ajatuskoe: jos A ja B ovat yhtä hyviä, niin millä todennäköisyydellä A voittaa sattumalta 10 ottelua?
- Monte Carlo -toteutus ajatuskokeelle
  - simuloi 15 ottelun turnauksia
  - arvo A kunkin ottelun voittajaksi tn:llä 0.5
  - kuinka suuressa osassa turnauksista A voitti vähintään 10 ottelua?

Otannan peruskäsitteitä

- mihin edellinen esimerkki perustuu?
- hyödyllisiä tilastollisia käsitteitä
  - satunnaismuuttuja
  - otos vs. populaatio
  - tunnusluku vs. parametri
  - otosjakauma
  - riippumaton toistokoe

Satunnaismuuttuja

- *satunnaismuuttuja* X on suure, joka saa eri arvoja eri todennäköisyyksillä
  - esim. $X = 1$ jos A voitti pelin ja $X = 0$ jos A hävisi
- satunnaismuuttujalla voi olla tietty hyvin määritelty arvo $X = x$
  - X on muuttuja, x on sen arvo
  - kun peli on pelattu, X:llä on arvo 0 tai 1

Otos vs. populaatio

- käytettävissä oleva aineisto on *otos* ilmiöstä
- n havaintoa: $X_1 = x_1, X_2 = x_2, \ldots, X_n = x_n$
- koko ilmiön perusjoukkoa, josta otos on peräisin, nimitetään usein *populaatioksi*
- X_i:n jakaumasta käytetään usein nimitystä *populaatiojakauma*
- *tilastollinen päättely*: populaation ominaisuuksien arviointi otoksen perusteella

Tunnusluku vs. parametri

- populaatiojakauman tunnuslukuja kutsutaan usein *parametreiksi*, tällöin
  - tunnusluvun arvo on otoksen funktio
    - esim. otoskeskiarvo $\bar{x}$, otoskeskihajonta σ_x
  - parametrin arvo on koko populaation funktio ("todellinen" tunnusluku)
    - esim. satunnaismuuttujan odotusarvo $EX = \mu_X$ ja keskihajonta $VX = \sigma_X$
- käsitteellisesti siis kaksi eri asiaa, vaikkakin lähella toisiaan

Otosjakauma

- mielivaltainen tunnusluku t
- tietty otoksen koko n
- t:n *otosjakauma* = tunnusluvun t (teoreettinen) jakauma kaikissa n:n kokoisissa otoksissa (iid)
- otosjakauma **ei** viittaa otoksen arvojen jakaumaan (engl. *sampling distribution* = otosjakauma, *sample distribution* = (yksittäisen) otoksen arvojen jakauma
- sanat vaarallisen lähellä toisiaan, kysymys aivan eri asioista

Otosjakauma (2)

- tunnusluku t on myös satunnaismuuttuja
  - määritellään perusjoukoksi eli populaatioksi kaikki mahdolliset n:n kokoiset otokset
  - tarkastellaan satunnaismuuttujaa $Y = t$
  - Y:n populaatiojakauma = t:n otosjakauma
- edelleen voidaan tarkastella t:n (otos)jakauman tunnuslukuja (p-arvo tulee olemaan esimerkki tästä)

Jakaumien parametreja

- muuttujan *odotusarvo* EX on sen keskimääräinen arvo:

$$EX = \sum_x xP(X = x) \text{ tai } \int_x xf(x)dx$$

- *varianssi* σ_X^2 kuvaa jakauman leveyttä:

$$\sigma_X^2 = E(X - EX)^2$$

- *hajonta* eli standardipoikkeama:

$$\sigma = \sqrt{\sigma_X^2}$$

Iid-oletus

- *iid-oletus* (independent and identically distributed)
  - *riippumaton toistokoe*
  - kaikki X_i:t noudattavat samaa jakaumaa ja ovat toisistaan riippumattomia
- iid-oletus on yleinen
  - tämän kurssin MC-menetelmät tuottavat iid otoksia
- jos iid-oletus on voimassa, niin erityisesti
  - $E(\bar{x}) = EX$
  - $E(\sigma_x) = \sigma_X$
  - eli otoskeskiarvo ja -hajonta ovat harhattomia estimaatteja vastaaville parametreille

Shakkiesimerkki (2)

- mihin aiempi shakkiesimerkki siis perustui?
- satunnaismuuttuja X_i = 1, jos A voitti pelin i, muuten 0
- ajatuskokeessa X_i:n populaatiojakauma tunnettu: voiton ja tappion todennäköisyys $P(X = 1) = P(X = 0) = 0.5$
- tunnusluku $t = \sum_{i=1}^{15} X_i$, eli A:n voittamien otteluiden määrä 15 ottelusta
- t:n otosjakauman approksimointi
  - satunnaismuuttuja t:n populaatio: 15 ottelun turnaukset
  - t:n (otos)jakaumaa approksimoidaan tuottamalla satunnaisotoksia iid 15 ottelun turnauksista

Shakkiesimerkki (3)

- Monte Carlo -approksimaatio: otoksista laskettujen tunnusluvun arvojen jakauma
- voimakas abstraktio
  - 15 ottelun otos kaikkien mahdollisten pelien äärettömästä populaatiosta helppo toteuttaa
  - ei mitään oletuksia pelin tai pelaajien luonteesta, pelien jakaumista, tms.
- Monte Carlo on *parametriton* menetelmä (ei käytä oletuksia jakaumien muodoista)
- lisäämällä otosten määrää päästään mielivaltaisen tarkkaan approksimaatioon (suurten lukujen laki)