Generointi yksinkertaisista diskreeteistä jakaumista

- Seuraavassa $U,\ U_1, \ldots,\ U_n$ tarkoittavat riippumattomia U(0,1)-jakautuneita sm:jia
- $\mathrm{int}(X) = \lfloor X \rfloor = X$:n kokonaisosa

Jakauma	Generointikaava
Symm. kaksiarvoinen {0,1} jakauma $\mathrm{P}\{X=0\} = \mathrm{P}\{X=1\} = 0.5$	$\mathrm{int}(2U)$ tai $\mathrm{int}(U+0.5)$
Kaksiarvoinen {0,1} jakauma $\mathrm{P}\{X=0\} = 1-p,\ \mathrm{P}\{X=1\} = p$	$\mathrm{int}(U+p)$
Kaksiarvoinen {-1,1} jakauma $\mathrm{P}\{X=0\} = 1-p,\ \mathrm{P}\{X=1\} = p$	$2\ \mathrm{int}(U+p)-1$
Kolmiarvoinen {0,1,2} jakauma tn:t $= \{1-p_1-p_2,\ p_1,\ p_2\}$	$\mathrm{int}(U+p_2)+\mathrm{int}(U+p_1+p_2)$
Tasainen diskreetti jakauma $\{0,\ 1,\ 2, \ldots, n-1\}$	$\mathrm{int}(n\,U)$
Tasainen diskreetti jakauma $\{1,\ 2,\ 3, \ldots, n\}$	$\mathrm{int}(n\,U)+1$
Binomijakauma $\mathrm{Bin}(n,p)$	$\sum_{i=1}^{n} \mathrm{int}(U_i+p)$

Generointi geometrisesta jakaumasta

- Geometrista jakaumaa Geom(p) noudattavan diskreetin satunnaismuuttujan X pistetodennäköisyydet ovat

$$\mathrm{P}\{X = i\} = p_i = p(1-p)^i \qquad i = 0, 1, 2, \ldots$$

- Satunnaismuuttujan X arvojen generointiin on käytettävissä seuraava yksinkertainen menetelmä
- Algoritmi

$$X = \left\lfloor \frac{\log U}{\log(1-p)} \right\rfloor$$

missä $U \sim \mathrm{U}(0, 1)$

- Kyseessä on itse asiassa Exp($-\log(1-p)$)-jakaumaa noudattavan jatkuvan satunnaismuuttujan arvojen diskretointi lähinnä alempiin kokonaislukuarvoihin

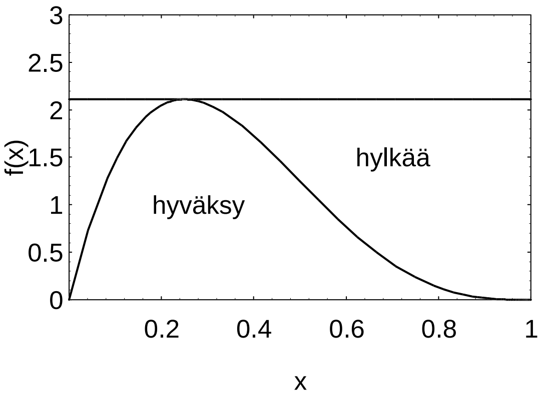
Hylkäysmenetelmä

- Tehtävänä on generoida sm:n X arvoja jakaumasta, jolla on tiheysfunktio $f(x)$
- Olkoon $g(x)$ toinen tiheysfunktio ja c jokin vakio siten, että
  - $c\,g(x)$ antaa ylärajan $f(x)$:lle, ts. $c\,g(x) \geq f(x)$ X:n koko arvoalueella
  - tiheysfunktiota $g(x)$ noudattavan satunnaismuuttujan arvoja osataan generoida (helposti)
- Tällöin X:n generointi voidaan suorittaa seuraavasti
- Algoritmi
  - Generoi X tiheysfunktiolla $g(x)$
  - Generoi Y tasaisesta jakaumasta $\mathrm{U}(0, c\,g(X))$
  - Jos $Y \leq f(X)$, niin hyväksy X
    - muutoin generoi edelläolevan mukaisesti uusia arvoja X ja Y, kunnes löytyy pari, joka täyttää hyväksymisehdon; tulosta X
- Todistus:

$$\mathrm{P}\{X \in (x, x+dx) \text{ ja } Y \leq f(X)\} = g(x)dx \cdot f(x)/cg(x) = f(x)dx/c$$
$$\mathrm{P}\{Y \leq f(X)\} = \int f(x)dx/c = 1/c$$
$$\mathrm{P}\{X \in (x, x+dx) \,|\, Y \leq f(X)\} = (f(x)dx/c)/(1/c) = f(x)dx$$

Hylkäysmenetelmä (esimerkki)

- Arvoalueen ollessa äärellinen väli (a, b) tiheysfunktioksi $g(x)$ voidaan valita kyseisellä välillä tasanjakauteneen sm:n tiheysfunktio: $g(x) = 1/(b - a)$, kun $x \in (a, b)$



- Oletetaan, että $X \in (0, 1)$ noudattaa betajakaumaa $\beta(2, 4)$ eli tiheysfunktio on

$$f(x) = 20x(1 - x)^3, \qquad 0 \le x < 1$$

- Funktio on rajoitettu suorakulmiossa, jonka korkeus on 2.11
  - valitaan $c = 2.11$ ja $g(x) = 1$, kun $0 \le x < 1$

- Algoritmi toimii nyt seuraavasti
  - Generoi X tasaisesta jakaumasta $\mathrm{U}(0, 1)$
  - Generoi Y tasaisesta jakaumasta $\mathrm{U}(0, 2.11)$
  - Jos $Y \le 20X(1 - X)^3$, hyväksy X ja lopeta, muutoin jatka alusta, kunnes löytyy hyväksyttävä pari

- Tässä tapauksessa generoitavat (X, Y) arvot edustavat tasanjakatunutta pistettä suorakulmiossa
  - on selvää, että hyväksyttyjen arvojen $X = x$ osuus on verrannollinen $f(x)$:ään
  - hyväksyttyjen X-arvojen tiheysfunktio on silloin $f(x)$

Yhdistelmämenetelmä (composition method)

- Oletetaan, että sen jakauman tiheysfunktio $f(x)$, josta sm X pitää arpoa, voidaan kirjoittaa (hajoittaa) muotoon
$$f(x) = \sum_{i=1}^{r} p_i f_i(x)$$
missä
  - p_i:t muodostavat diskreetin todennäköisyysjakauman, $\sum_i p_i = 1$
  - $f_i(x)$:t ovat tiheysfunktioita, $\int f_i(x)\, dx = 1$
- Tällaista jakaumaa kutsutaan sekoitusjakaumaksi (yhdistelmäjakauma, komposiittijakauma)
- Näytteenotto voidaan suorittaa seuraavasti
  - arvotaan ensin indeksi I jakaumasta $\{p_1, p_2, \ldots, p_r\}$
  - arvotaan tämän jälkeen X käyttäen tiheysfunktiota $f_I(x)$

Yhdistelmämenetelmä (jatkoa)

- Esimerkiksi menetelmää voidaan käyttää jakamalla X:n vaihtelualue (a, b) erillisiin intervalleihin $(a_1, b_1),\ (a_2, b_2), \ldots,\ (a_r, b_r)$
  - p_i on tällöin todennäköisyys, että X osuu intervalliin i

$$p_i = \int_{a_i}^{b_i} f(x)\, dx$$

  - $f_i(x)$ on ehdollinen tiheysjakauma intervallissa i

$$f_i(x) = \begin{cases} f(x)/p_i & x \in (a_i, b_i) \\ 0 & \text{muulloin} \end{cases}$$

Yhdistelmämenetelmä (esimerkki 1)

- Tehtävänä on generoida pisteitä X Exp(1)-jakaumasta
- Jaetaan väli $(0, \infty)$ intervalleihin $(i, i+1)$, $i = 0, 1, 2, \ldots$
- Välien todennäköisyydet

$$p_i = \mathrm{P}\{i \leq X < i+1\} = e^{-i} - e^{-(i+1)} = e^{-i}(1 - e^{-1})$$

  muodostavat geometrisen jakauman (alkaa 0:sta)

- Ehdolliset tiheysfunktiot ovat

$$f_i(x) = e^{-(x-i)}/(1 - e^{-1}) \qquad i \leq x < i+1$$

  eli intervallissa i $(X - i)$:llä on tiheysfunktio $e^{-x}/(1 - e^{-1}),\ 0 \leq x < 1$

- Algoritmi
  - arvotaan I geometrisesta jakaumasta $p_i = e^{-i}(1 - e^{-1})$, $i = 0, 1, 2, \ldots$
  - arvotaan Y tiheysfunktiolla $e^{-x}/(1 - e^{-1}),\ 0 \leq x < 1$ (esim. hylkäysmenetelmällä)
  - $X = I + Y$
- Etu: ei tarvita logaritmifunktiota niin kuin kertymäfunktion käännösmenetelmässä

Yhdistelmämenetelmä (esimerkki 2)

- Tiheysfunktioiden asemesta yhdistelmämenetelmässä voidaan yhtä hyvin toimia kertymäfunktioiden avulla
- Olkoon X:n kertymäfunktio

$$\begin{aligned} F(x) &= 1 - \alpha e^{-\beta_1 x} - (1-\alpha)e^{-\beta_2 x} \\ &= \alpha(1 - e^{-\beta_1 x}) + (1-\alpha)(1 - e^{-\beta_2 x}) \end{aligned}$$

- <u>Algoritmi</u>
  - valitse käytettävä jakauma I: $\mathrm{P}\{I = 1\} = \alpha$, $\mathrm{P}\{I = 2\} = 1 - \alpha$
  - arvo X asianomaisesta jakaumasta $F_I(x)$

$$F_1(x) = 1 - e^{-\beta_1 x} \qquad F_2(x) = 1 - e^{-\beta_2 x}$$

  - eli jos $I = 1$ niin $X = -\frac{1}{\beta_1}\log U$; jos $I = 2$ niin $X = -\frac{1}{\beta_2}\log U$
- Kertymäfunktion käännösmenetelmän käyttö olisi tässä tapauksessa hankalaa
  - käänteisfunktiota ei voi kirjoittaa analyyttisesti

Jakauman karakterisointiin perustuva menetelmä

- Monet jakaumat on määritelty muodossa X on jakautunut kuten n:n riippumattoman sm:n summa, joista kukin noudattaa annettua jakaumaa "Dist"
- Tällöin X voidaan generoida kirjaimellisesti arpomalla riippumattomasti arvot n:lle muuttujalle Z_i jakaumasta "Dist", jolloin $X = Z_1 + Z_2 + \cdots + Z_n$ noudattaa haluttua jakaumaa
- Esimerkkejä tällaisista jakaumista ovat binomijakauma, gammajakauma (Erlangin jakauma) sekä χ^2-jakauma

Jakauman karakterisointi (esim. binomijakauma)

- Binomijakauma $\mathrm{Bin}(n,p)$ on n:n riippumattoman Bernoulli(p)-jakautuneen muuttujan summan jakauma

$$X = \sum_{i=1}^{n} B_i, \quad B_i \sim \mathrm{Bernoulli}(p) \quad \Rightarrow \quad X \sim \mathrm{Bin}(n,p)$$

  - Bernoulli(p)-jakautunut muuttuja saa arvon 1 tn:llä p ja arvon 0 tn:llä $1-p$
  - $B_i = \mathrm{int}(p+U_i) = \lfloor p+U_i \rfloor, \quad U_i \sim \mathrm{U}(0,1) \qquad$ (kokonaisosa)

- <u>Algoritmi</u>

$$X = \sum_{i=1}^{n} \lfloor p+U_i \rfloor, \quad U_i \sim \mathrm{U}(0,1)$$

Jakauman karakterisointi (esim. gammajakauma)

- Kokonaislukuarvoilla n saadaan $\Gamma(n,\lambda)$-jakauma n:n riippumattoman Exp(λ)-jakautuneen muuttujan summan jakaumana

$$X = \sum_{i=1}^{n} Y_i, \quad Y_i \sim \mathrm{Exp}(\lambda) \quad \Rightarrow \quad X \sim \Gamma(n,\lambda)$$

- Ottamalla huomioon, miten eksponenttijakautunut sm voidaan generoida tasanjakautuneen muuttujan U avulla, saadaan
- Algoritmi

$$X = -\frac{1}{\lambda} \log \prod_{i=1}^{n} U_i, \qquad U_i \sim \mathrm{U}(0,1)$$

- Logaritmien summa kirjoitettu logaritmina tulosta
  - tämä on edullista, koska logaritmifunktio joudutaan laskemaan vain kerran

Jakauman karakterisointi (esim. χ^2-jakauma)

- $\chi^2(\nu)$-jakauma ν:llä vapausasteella (kokonaisluku) on ν:n $\mathrm{N}(0,1)$-jakautuneen muuttujan summa

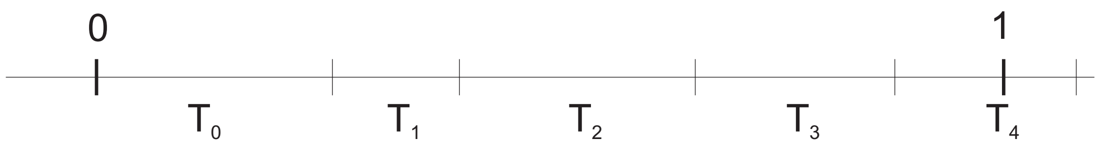
$$X = \sum_{i=1}^{\nu} Y_i, \quad Y_i \sim \mathrm{N}(0,1) \quad \Rightarrow \quad X \sim \chi^2(\nu)$$

Jakauman karakterisointi (esim. Poisson-jakauma)

- Toisen tyyppisen esimerkin karakterisoinnista tarjoaa Poisson-jakauma
- Poisson-prosessista (intensiteetti a) välille $(0, 1)$ tulevien saapumisten lukumäärä N on Poisson-jakautunut parametrilla a, $N \sim \text{Poisson}(a)$
- Arvotaan väliaikoja T_i, $i = 0, 1, 2, \ldots$ Exp(a)-jakaumasta, $T_i = -(1/a) \log U_i$
- N on välille (0,1) "mahtuvien" väliaikojen lukumäärä eli $N = \min \left\{ n : \sum_{i=0}^{n} T_i > 1 \right\}$
- Algoritmi

$$N = \min \left\{ n : \prod_{i=0}^{n} U_i < e^{-a} \right\}$$

  - kerrotaan lukuja $U_i \sim \text{U}(0, 1)$, $i = 0, 1, 2, \ldots$ keskenään
  - N on ensimmäinen i:n arvo, jolla tulo on pienempi kuin e^{-a}



Poisson-jakauma: numeerinen esimerkki

- Olkoon keskiarvoparametri $a = 0.2$
- Vertailuarvo $u = e^{-0.2} = 0.8187$

i	U_i	$U_0 \cdots U_i$	accept/continue	Tulos
0	0.4357	0.4357	$< u$, accept	$N = 0$
0	0.4146	0.4146	$< u$, accept	$N = 0$
0	0.8353	0.8353	$\geq u$, continue	
1	0.9952	0.8313	$\geq u$, continue	
2	0.8004	0.6654	$< u$, accept	$N = 2$

- Suurilla a:n arvoilla menetelmästä tulee hidas; N:n arvot ovat tällöin tyypillisesti suuria, ja joudutaan generoimaan monta lukua U_i
- Tällöin on parempi käyttää diskretointimenetelmää (diskreetin kf:n käännös)
- Hyvin suurilla a:n arvoilla voidaan myös käyttää normaaliapproksimaatiota (merk. $Z \sim \mathrm{N}(0,1)$)

$$\text{Poisson}(a) \approx \mathrm{N}(a, a) \Rightarrow N \approx \lceil a + \sqrt{a}Z - 0.5 \rceil$$

Jakauman karakterisointi (muita esimerkkejä)

- a:nneksi pienin luvuista $U_1, U_2, \ldots, U_{a+b+1}$, missä U_i:t ovat riippumattomia tasanjakautuneita sm:ia, $U_i \sim \mathrm{U}(0,1)$, noudattaa $\beta(a,b)$-jakaumaa
- Kahden $N(0,1)$-jakautuneen muuttujan suhde noudattaa Cauchy$(0,1)$-jakaumaa
- $\chi^2(\nu)$-jakauma parillisilla vapausasteilla ν on sama kuin $\Gamma(\nu/2, 1/2)$-jakauma
- Kahden riippumattoman gamma-jakautuneen muuttujan avulla voidaan konstruoida beta-jakautunut muuttuja

$$X_1 \sim \Gamma(b,a) \quad X_2 \sim \Gamma(c,a) \quad \Rightarrow \quad \frac{X_1}{X_1 + X_2} \sim \beta(b,c)$$

- Jos $X \sim N(0,1)$ on normaalijakautunut sm, niin $e^{\mu+\sigma X}$ on lognormaalinen(μ, σ) sm

Generointi monidimensioisesta jakaumasta

- Tehtävä: generoi arvoja muuttujille $X_1, \ldots, X_n$, joilla on yhteistiheysfunktio $f(x_1, \ldots, x_n)$
- Kirjoitetaan tämä tf muotoon $f(x_1, \ldots, x_n) = f_1(x_1) f_2(x_2 \mid x_1) \ldots f_n(x_n \mid x_1, \ldots, x_{n-1})$ missä $f_1(x_1)$ on X_1:n reunajakauma ja $f_k(x_k \mid x_1, \ldots x_{k-1})$ on X_k:n ehdollinen jakauma ehdolla $X_1 = x_1, \ldots, X_{k-1} = x_{k-1}$
- Ideana on generoida muuttujat yksi kerrallaan: ensin generoidaan X_1 oman reunajakaumansa mukaisesti, sitten generoidaan X_2 ehdollisesta jakaumasta käyttäen ehtona jo arvottua X_1:n arvoa jne
- Merkitään F_k:lla ehdollista tf:ta f_k vastaavaa ehdollista kertymäfunktiota ja käytetään kertymäfunktion käännösmenetelmää
- Algoritmi
  - generoi sm:t $U_1, \ldots, U_n$ tasaisesta jakaumasta $\mathrm{U}(0,1)$
  - ratkaise yhtälöt (käännä kertymäfunktiot)

$$\begin{aligned} F_1(X_1) &= U_1 \\ F_2(X_2 \mid X_1) &= U_2 \\ &\vdots \\ F_n(X_n \mid X_1, \ldots, X_{n-1}) &= U_n \end{aligned}$$

Monidimensioinen jakauma: esimerkki

- Tehtävänä on generoida pisteitä (X, Y) yksikköneliössä, jonka vasen alakulma on origossa, käyttäen diagonaalin suunnassa kasvavaa tiheysfunktiota (integraali neliön yli on ykkönen)

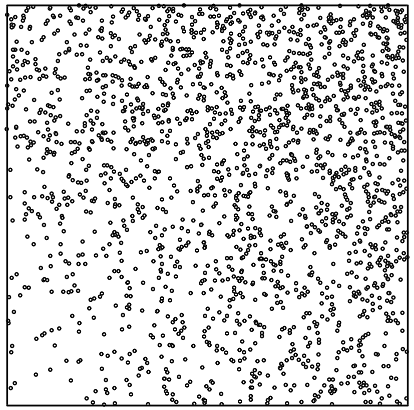
$$f(x, y) = x + y$$

- X:n reunajakauman tiheys ja kertymäfunktiot ovat

$$f(x) = \int_0^1 f(x, y)\, dy = x + \frac{1}{2}, \qquad F(x) = \int_0^x f(x')\, dx' = \frac{1}{2}(x^2 + x)$$

- Y:n ehdolliset tiheys- ja kertymäfunktiot ovat

$$f(y \mid x) = \frac{f(x, y)}{f(x)} = \frac{x + y}{x + \frac{1}{2}}, \qquad F(y \mid x) = \int_0^y f(y' \mid x)\, dy' = \frac{xy + \frac{1}{2}y^2}{x + \frac{1}{2}}$$



- Kertymäfunktioiden käännökset antavat laskentakaavat

$$\begin{aligned} X &= \tfrac{1}{2}(\sqrt{8U_1 + 1} - 1) \\ Y &= \sqrt{X^2 + U_2(1 + 2X)} - X \end{aligned}$$

Generointi monidimensioisesta normaalijakaumasta

- Satunnaisvektorilla $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_n)$, joka noudattaa monidimensioista normaalijakaumaa (multinormaalijakauma) on tiheysfunktio

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\mathbf{\Sigma}|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m})^T \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{m})}$$

  missä $\mathbf{m}$ on keskiarvovektori ja $\mathbf{\Sigma}$ on kovarianssimatriisi

- Koska $\mathbf{\Sigma}$ on positiividefiniitti ja symmetrinen matriisi, voidaan aina löytää yksikäsitteinen alakolmiomatriisi (vaihtoehtoisesti symmetrinen matriisi) $\mathbf{C}$ siten, että $\mathbf{\Sigma} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T$
- Arvoja $\mathbf{X}$:lle voidaan nyt generoida seuraavasti
- <u>Algoritmi</u>

$$\mathbf{X} = \mathbf{C}\mathbf{Z} + \mathbf{m}$$

  missä vektorin $\mathbf{Z} = (Z_1, \ldots, Z_n)$ komponentit ovat riippumattomia normaalijakautuneita satunnaismuuttujia, $Z_i \sim \mathrm{N}(0, 1)$

  - kaavan oikeellisuus todetaan suorittamalla muuttujien vaihto tiheysfunktiossa, jolloin $\mathbf{Z}$:n tiheysfunktioksi saadaan $(2\pi)^{-n/2} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}}$