Εισαγωγή στην Προσομοίωση Monte–Carlo

Η βασική ιδέα της μεθόδου Monte–Carlo είναι η εκτίμηση της μέσης τιμής μιας τυχαίας μεταβλητής μέσω προσομοίωσης ανεξάρτητων παρατηρήσεων από την κατανομή της μεταβλητής αυτής. Συγκεκριμένα έστω μια τυχαία μεταβλητή X με γνωστή κατανομή, και $Y = h(X)$ μια τυχαία μεταβλητή Y που εκφράζεται ως συνάρτηση της X. Το πρόβλημα είναι να υπολογισθεί η μέση τιμή της Y:

$$\theta = E(Y) = E(h(X))$$

Ο τύπος υπολογισμού της θεωρητικής μέσης τιμής θ εξαρτάται από τον τύπο της X, δηλαδή αν είναι διακριτή ή συνεχής. Συγκεκριμένα, αν η X είναι διακριτή τυχαία μεταβλητή με σύνολο δυνατών τιμών S και συνάρτηση πιθάνότητας $p(x), x \in S$, όπου $p(x) = P(X = x)$, τότε η παράμετρος θ υπολογίζεται μέσω του αθροίσματος

$$\theta = \sum_{x \in S} h(x)p(x).$$

Αν αντίθετα η X είναι συνεχής τυχαία μεταβλητή με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f(x)$, τότε

$$\theta = \int_{-\infty}^{\infty} h(x)f(x)dx.$$

Το πρόβλημα σε πολλές πραγματικές εφαρμογές είναι ότι είτε η κατανομή της X είναι πολύ δύσκολο ή αδύνατο να εκφραστεί αναλυτικά, ή ακόμα και αν αυτό είναι δυνατό, ο αναλυτικός υπολογισμός του αθροίσματος ή ολοκληρώματος είναι αδύνατος. Ενώ στη δεύτερη περίπτωση μπορεί κανείς να καταφύγει σε προσεγγιστικό υπολογισμό της μέσης τιμής με αριθμητικές μεθόδους, στην πρώτη περίπτωση ακόμα και αυτό μπορεί να μην είναι δυνατό, καθώς η συνάρτηση πιθανότητας ή η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας δεν έχουν αναλυτικές εκφράσεις.

Επίσης πρέπει να τονιστεί ότι το πρόβλημα αυτό είναι πολύ πιο γενικό από ότι μπορεί να φαίνεται εξ αρχής, καθώς μια μεγάλη κατηγορία προβλημάτων Πιθανοτήτων και Στατιστικής μπορούν να αναχθούν σε ισοδύναμα προβλήματα υπολογισμού μέσης τιμής. Για παράδειγμα η πιθανότητα ενός ενδεχομένου A μπορεί να εκφραστεί ως

$$P(A) = E(1(A)),$$

όπου $1(A)$ είναι η δείκτρια του A. Επίσης στη Στατιστική, οι περισσότερες ιδιότητες των στατιστικών μεθόδων (αμεροληψία, πιθανότητες απόρριψης, ισχύς ελέγχων κλπ) μπορούν να εκφραστούν χρησιμοποιώντας μέσες τιμές.

Σε περιπτώσεις που ο αναλυτικός υπολογισμός της ζητούμενης μέσης τιμής είναι αδύνατος ή πολύ δύσκολος, η μέθοδος Monte–Carlo δίνει μια εναλλακτική μέθοδο προσέγγισης με βάση την προσομοίωση. Συγκεκριμένα ας υποθέσουμε ότι μέσω κατάλληλου προγραμματισμού δημιουργούμε ένα δείγμα μεγέθους n από ψευδοτυχαίους αριθμούς $X_1, X_2, \ldots, X_n$ που ακολουθούν την κατανομή της X. Η δημιουργία των παρατηρήσεων αυτών μπορεί να είναι πολύ ευκολότερη από τον αναλυτικό ή αριθμητικό υπολογισμό της κατανομής. Τότε μια εκτίμηση για την παράμετρο θ είναι ο αριθμητικός μέσος

$$\hat{\theta}_n = \frac{\sum_{i=1}^{n} h(X_i)}{n}.$$

Η εκτίμηση αυτή είναι *συνεπής*, καθώς με βάση το νόμο μεγάλων αριθμών από τη θεωρία πιθανοτήτων έχουμε ότι

$$\lim_{n \to \infty} \hat{\theta}_n = \theta,$$

με πιθανότητα 1. Επομένως οριακά για μεγάλο αριθμό παρατηρήσεων n, είμαστε σίγουροι ότι, παρόλο που οι συγκεκριμένες τιμές που δημιουργούνται είναι πρακτικά τυχαίες, ο μέσος όρος τους παύει να είναι τυχαίος και συγκλίνει στην θεωρητική μέση τιμή.

Αν εκτός από το δειγματικό μέσο των τυχαίων παρατηρήσεων υπολογίσουμε και τη δειγματική τυπική απόκλιση, μπορούμε με βάση το κεντρικό οριακό θεώρημα να κατασκευάσουμε και διαστήματα εμπιστοσύνης για την άγνωστη μέση τιμή, τα οποία δίνουν και ένα μέτρο του πόσο κοντά βρίσκεται η εκτίμηση στη θεωρητική τιμή του θ. Η ανάλυση αυτή θα γίνει στην ενότητα Ανάλυση Αποτελεσμάτων Προσομοίωσης.

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, η μέθοδος Monte–Carlo μπορεί να εφαρμοστεί και για τον υπολογισμό πιθανοτήτων που σχετίζονται με την τυχαία μεταβλητή X. Στην πραγματικότητα, η πιθανότητα οποιουδήποτε γεγονότος που αφορά την τυχαία μεταβλητή X μπορεί να εκφραστεί ως μέση τιμή μιας κατάλληλα ορισμένης συνάρτησης της X, γεγονός που επιτρέπει άμεση εφαρμογή της παραπάνω μεθόδου για την εκτίμηση της πιθανότητας αυτής μέσω προσομοίωσης.

Συγκεκριμένα, έστω ότι απαιτείται ο υπολογισμός της πιθανότητας

$$p = P(h(X) > a),$$

όπου h είναι γνωστή συνάρτηση της X και a μια γνωστή σταθερά. Ορίζουμε μια νέα τυχαία μεταβλητή Y, επίσης συνάρτηση της X, ως εξής:

$$Y = \begin{cases} 1, & \text{αν } h(X) > a \\ 0, & \text{αν } h(X) \leq a \end{cases}$$

Σημειώνουμε ότι συνοπτικά η παραπάνω έκφραση της Y γράφεται ως $Y = 1(h(X) > a)$ και η Y αναφέρεται ως *δείκτρια* του γεγονότος $h(X) > a$. Είναι προφανές ότι η μέση τιμή της Y είναι ίση με $E(Y) = 1 \cdot P(h(X) > a) + 0 \cdot P(h(X) \leq a) = p$, επομένως η πιθανότητα p μπορεί να εκφραστεί ως μέση τιμή της δείκτριας Y. Αυτή η παρατήρηση μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε άμεσα την προσομοίωση Monte Carlo για εκτίμηση του p. Συγκεκριμένα, δημιουργούμε n ανεξάρτητες και ισόνομες παρατηρήσεις από την κατανομή της X, και από αυτές μια εκτίμηση του p είναι

$$\hat{p}_n = \frac{\sum_{i=1}^{n} Y_i}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} 1(h(X_i) > a)}{n}.$$

Παρατηρούμε τώρα ότι στο άθροισμα $\sum_{i=1}^{n} Y_i$ κάθε όρος ισούται με 1 ή 0, ανάλογα με το αν ισχύει ότι για την αντίστοιχη παρατήρηση X_i, $h(X_i) > a)$ ή όχι. Επομένως το άθροισμα θα είναι ίσο με τον αριθμό των παρατηρήσεων για τις οποίες ισχύει το ενδεχόμενο που θέλουμε. Βλέπουμε λοιπόν ότι η εκτίμηση του p που προκύπτει από τη μέθοδο Monte Carlo είναι το ποσοστό των παρατηρήσεων για τις οποίες ισχύει το ενδεχόμενο αυτό, δηλαδή η εκτίμηση που αναμένουμε και διαισθητικά.

Η μέθοδος Monte–Carlo έχει γνωρίσει πληθώρα εφαρμογών σε πολύ διαφορετικούς κλάδους όπως π.χ. Στατιστική, Οικονομικά, Χρηματοοικονομικά, Βιολογία, Οργάνωση και Διοίκηση Επιχειρήσεων, κλπ. Ο λόγος είναι ότι σε πολλές ρεαλιστικές εφαρμογές όπου υπάρχει αβεβαιότητα, οι σχετικές κατανομές πιθανότητας είναι συνήθως υπερβολικά πολύπλοκες για αναλυτικούς υπολογισμούς.