R per l'analisi statistica multivariata

Unità I: metodi Monte Carlo

Tommaso Rigon

Università Milano-Bicocca

Unità I

Argomenti affrontati

- Metodi Monte Carlo
- Approssimazione di un evento tramite Monte Carlo
- Integrazione Monte Carlo
- Istogrammi & densità

- Esercizi **R** associati: `https://tommasorigon.github.io/introR/exe/es_3.html`

I metodi Monte Carlo

- Nell'**unità H** abbiamo dedicato moltissime energie per cercare di capire come **simulare** dei valori (pseudo) casuali da variabili aleatorie continue e discrete.
- Ciò che tuttavia non abbiamo spiegato è l'**utilità** di queste tecniche.
- Il motivo è semplice: le **possibili applicazioni** sono talmente numerose che è necessario introdurle separatamente in questa lezione...
- ...e probabilmente scalfiremo solamente la superficie.

Metodo Monte Carlo

Definiamo **metodo Monte Carlo** una qualsiasi procedura che coinvolga l'utilizzo di **numeri (pseudo) casuali**.

Alcuni cenni storici

- I metodi Monte Carlo hanno una lunga storia; alcuni di essi sono stati usati perfino **prima** dell'invenzione dei **computer**.
- I primi utilizzi moderni, ovvero basati su numeri pseudo-casuali, sono stati condotti (tra gli altri) da Enrico Fermi, Nicholas Metropolis, Richard Feynman e John von Neumann tra gli anni '30 e '40.
- Il neonato metodo Monte Carlo aveva quindi delle importanti applicazioni in **fisica**. In particolare, importanti passi avanti furono fatti all'interno del **progetto Manhattan**.
- L'**algoritmo di Metropolis**, sviluppato in quegli anni, è tutt'oggi ampiamente usato. Purtroppo è prematuro presentarlo in questo corso: lo vederete più avanti!

Approfondimento

- Hitchcock (2003). A history of the Metropolis-Hastings algorithm. *The American Statistician* **57**(4), 254–257.

The Monte Carlo Method

JOURNAL OF THE AMERICAN STATISTICAL ASSOCIATION

Number 247 SEPTEMBER 1949 *Volume 44*

THE MONTE CARLO METHOD

NICHOLAS METROPOLIS AND S. ULAM
Los Alamos Laboratory

We shall present here the motivation and a general description of a method dealing with a class of problems in mathematical physics. The method is, essentially, a statistical approach to the study of differential equations, or more generally, of integro-differential equations that occur in various branches of the natural sciences.

Possibili applicazioni

- I metodi Monte Carlo hanno applicazioni in tutte le discipline scientifiche, incluse la fisica, biologia, medicina, genetica, informatica, matematica.
- Per ovvie ragioni, noi approfondiremo le applicazioni legate alla **probabilità** e alla **statistica**. Alcuni esempi sono riportati nel seguito.
- Il metodo **bootstrap** tramite Monte Carlo è valso il "Nobel per la Statistica" a Brad Efron nel 2019. Link: `https://en.wikipedia.org/wiki/International_Prize_in_Statistics`.
- La **statistica bayesiana** moderna fa uso intensivo dei metodi Monte Carlo.
- Concetti chiave di **data mining & machine learning**, come la suddivisione in insieme di stima & verifica o la convalida incrociata, sono per definizione basati sulla simulazione di numeri casuali.
- Infine, grazie alla simulazione è possibile verificare la validità dei risultati "asintotici" che vengono presentati nei corsi di **inferenza statistica**.

Approssimazione di una probabilità

- Si supponga di voler calcolare una determinata probabilità π di un certo **esperimento casuale**. Definiamo una variabile aleatoria di bernoulli Z tale che

$$\pi = \mathbb{P}(Z = 1),$$

ovvero un **indicatore binario** che denota se l'evento si è verificato o meno.

- In molti casi è **difficile** se non praticamente impossibile calcolare π analiticamente.

- **Esempio**. Si supponga che $X \sim \mathrm{N}(0, 1)$ e si ponga $Y = \cos(X)$. Il calcolo di

$$\pi = \mathbb{P}(Y > 0) = \mathbb{P}\{\cos(X) > 0\},$$

non è affatto semplice usando solo "carta e penna": provateci, se volete.

- **Esempio**. La probabilità di vittoria della tombola π si potrebbe calcolare "carta e penna", ma questa operazione sarebbe lunga e faticosa.

Approssimazione di una probabilità

Approccio Monte Carlo (approssimazione di una probabilità)

- Il metodo Monte Carlo prevede di **simulare** tante volte l'esperimento casuale in questione e contare la frazione di volte che l'evento si è verificato (ovvero $Z = 1$).
- In altri termini, consideriamo delle variabili aleatorie binarie iid $Z_1, \ldots, Z_R$ aventi probabilità π. La probabilità π viene stimata tramite la frazione di successi.

- I metodo Monte Carlo è di estrema utilità perché permette di **approssimare** una determinata **probabilità** senza fare alcun conto analitico.
- **Nota**. Il punto cruciale è che spesso è possibile simulare un esperimento casuale senza conoscere π, che infatti è la probabilità che siamo interessati ad approssimare.

Esempio

- Si supponga nuovamente che $X \sim \mathrm{N}(0,1)$ e si ponga $Y = \cos(X)$. Siamo interessati a calcolare la probabilità:

$$\pi = \mathbb{P}(Y > 0) = \mathbb{P}\{\cos(X) > 0\}.$$

- Definiamo quindi la **variabile binaria**

$$Z = \mathbb{1}(Y > 0) = \mathbb{1}\{\cos(X) > 0\},$$

ovvero una variabile aleatoria bernoulliana che vale 1 se $\cos(X) > 0$ e vale 0 altrimenti.

- É facile verificare (fatelo per esercizio!) che

$$\pi = \mathbb{P}(Z = 1) = \mathbb{P}(Y > 0).$$

- **Risultato chiave**. Simulare delle copie iid dalla legge di Z è molto semplice, nonostante la probabilità π sia ignota.

Esempio (continua)

- Per **approssimare** la probabilità $\pi = \mathbb{P}(Z = 1) = \mathbb{P}\{\cos(X) > 0\}$ dobbiamo quindi generare tante copie iid da questa legge, ovvero $Z_1, \ldots, Z_R$.

```
R <- 5000 # Numero di repliche

set.seed(123)
X <- rnorm(R, 0, 1) # Ottengo R copie da una distribuzione gaussiana
Y <- cos(X) # Ottengo R copie dalla distribuzione di Y
Z <- Y > 0 # Vettore logico che verifica se Y > 0 o meno
Z[1:10]
#  [1]  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE FALSE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE
```

- Il numero R rappresenta il numero di **repliche** e determina, come vedremo, la precisione della nostra stima Monte Carlo.

- A questo punto, l'approssimazione si ottiene considerando la proporzione di successi

```
prop.table(table(Z)) # Considero la frequenza relativa
#  FALSE   TRUE
# 0.1158 0.8842
mean(Z) # Oppure, più semplicemente
# [1] 0.8842
```

Errare è l'unica certezza

- Come tutte le approssimazioni, anche il metodo Monte Carlo comporta un **errore**.
- La peculiarità delle **approssimazioni Monte Carlo** è che sono, per definizione, casuali.
- Questo significa che ogni volta che eseguiamo la procedura otteniamo un valore **leggermente diverso**. Ad esempio:

```
set.seed(100) # Imposto un seed diverso da prima
Z <- cos(rnorm(R, 0, 1)) > 0 # Calcolo gli indicatori (codice in forma compatta)
mean(Z)
# [1] 0.8878
```

- Per cui sia la **stima** ottenuta che l'**errore** commesso sono **aleatori**!
- Fortunatamente, questo è un contesto che dovreste conoscere molto bene. La nostra procedura Monte Carlo è infatti, a tutti gli effetti, uno **stimatore** di π.

Come mai funziona?

- Siano $Z_1, \ldots, Z_R$ delle variabili aleatorie binarie indipendenti ed identicamente distribuite, aventi la stessa distribuzione della variabile $Z \sim \text{Ber}(\pi)$. Lo **stimatore**

$$\hat{\pi} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} Z_r = (\text{"Proporzione di successi"}),$$

coincide con l'**approssimazione Monte Carlo**.

- Lo stimatore $\hat{\pi}$ ha delle ottime proprietà inferenziali, che si studiano in un qualsiasi corso di **inferenza statistica**. Ne descriviamo qui solamente alcune.

- In primo luogo, lo stimatore $\hat{\pi}$ è **non distorto**, infatti:

$$\mathbb{E}(\hat{\pi}) = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} \mathbb{E}(Z_r) = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} \mathbb{P}(Z = 1) = \mathbb{P}(Z = 1) = \pi.$$

- Inoltre, lo stimatore $\hat{\pi}$ è **consistente**, infatti per la legge (forte) dei grandi numeri si ottiene che:

$$\hat{\pi} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} Z_r \xrightarrow{\text{q.c.}} \mathbb{P}(Z = 1) = \pi, \qquad R \to \infty.$$

La varianza dello stimatore I

- Possiamo infine calcolare la **varianza** di $\hat{\pi}$, che risulta pari alla seguente quantità

$$\text{var}(\hat{\pi}) = \frac{1}{R^2}\sum_{r=1}^{R}\text{var}(Z_r) = \frac{1}{R^2}\sum_{r=1}^{R}\pi(1-\pi) = \frac{\pi(1-\pi)}{R}.$$

- Da questa equazione è evidente il ruolo chiave del numero di repliche R.

- Il numero di **repliche** R si può interpretare come se fosse una sorta di **numerosità campionaria**, che idealmente noi possiamo aumentare a piacere.

- Un numero di repliche elevato aumenta quindi la **precisione** ma ha un costo in termini di risorse computazionali (= il computer impiega più tempo).

- **Nota**. La varianza $\text{var}(\hat{\pi})$ dipende dal valore di π, che è ignoto. Per cui una stima della varianza si ottiene rimpiazzando π con la sua stima $\hat{\pi}$.

La varianza dello stimatore II

- Vogliamo valutare l'impatto della scelta di R ed implementiamo quindi la funzione `MonteCarlo`, che calcola sia l'approssimazione che la sua **deviazione standard**.

```
MonteCarlo <- function(R){
  Z <- cos(rnorm(R, 0, 1)) > 0
  estimate <- mean(Z)
  std.error <- sqrt(estimate * (1 - estimate) / R)
  out <- c(estimate, std.error)
  names(out) <- c("estimate", "std.error") # Aggiungo solo per ragioni estetiche
  out
}
```

- Proviamo con alcuni valori diversi di R. Si nota un progressivo miglioramento:

```
MonteCarlo(100) # R = 100 conduce a uno std.error elevato
#   estimate  std.error
# 0.92000000 0.02712932
MonteCarlo(5000) # R = 5000 conduce a uno std.error ragionevole
#   estimate  std.error
# 0.88420000 0.00452527
MonteCarlo(10^6) # R = 10^6 conduce a uno std.error basso
#    estimate   std.error
# 0.883676000 0.000320613
```

Esercizio riassuntivo I

- Sia X una normale standard. Si approssimi tramite Monte Carlo la probabilità seguente

$$\pi = \mathbb{P}(1 < X < 2).$$

- Si ottenga quindi una stima Monte Carlo dell'errore commesso.
- Si ripeta la procedura per diversi valori del numero di repliche R.
- Si confrontino i risultati con il **vero valore** di $\mathbb{P}(1 < X < 2)$. Le approssimazioni Monte Carlo migliorano al crescere di R?
- **Esercizio difficile**. Si ottenga un intervallo di confidenza (**?!**) per lo stimatore $\hat{\pi}$ di livello approssimato $1 - \alpha = 0.95$.

Schema della soluzione

```r
MonteCarlo <- function(R){
  X <- rnorm(R)
  Z <- (X > 1) & (X < 2)
  estimate <- mean(Z)
  std.error <- sqrt(estimate * (1 - estimate) / R)
  out <- c(estimate, std.error)
  names(out) <- c("estimate", "std.error")
  out
}
# Vero valore
pnorm(2) - pnorm(1)
# [1] 0.1359051

MonteCarlo(100) # R = 100 conduce a std.error elevato
#  estimate std.error
# 0.1400000 0.0346987
MonteCarlo(5000) # R = 5000 conduce a std.error ragionevole
#    estimate   std.error
# 0.133600000 0.004811466
MonteCarlo(10^6) # R = 10^6 conduce a std.error basso
#     estimate    std.error
# 0.1360790000 0.0003428724
```

Integrazione Monte Carlo

- L'idea di approssimare una probabilità tramite simulazione può essere **generalizzata**.
- In particolare, supponiamo di voler calcolare un generico **integrale** del tipo

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{X}} g(x) f(x) \mathrm{d}x = \mathbb{E}\{g(X)\},$$

  dove $f(x)$ è la densità una variabile aleatoria X avente supporto $\mathcal{X}$.
- La **probabilità di un evento** è un **caso particolare** di questo contesto. Infatti se $g(x) = \mathbb{1}(x \in B)$ si ottiene

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{X}} g(x) f(x) \mathrm{d}x = \int_{B} f(x) \mathrm{d}x = \mathbb{P}(X \in B).$$

- Esattamente come per la probabilità di un evento, vogliamo usare la simulazione per ottenere un'**approssimazione** di $\mathcal{I}$.

Approccio Monte Carlo (Integrazione)

- Sia $X \sim f(x)$. Per approssimare l'integrale

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{X}} g(x) f(x) \mathrm{d}x = \mathbb{E}\{g(X)\}$$

si **simulano** dei valori $X_1, \ldots, X_R$ da $f(x)$. Si calcolano quindi i valori $g(X_1), \ldots, g(X_R)$ ed infine si considera la loro **media campionaria**.

- La stima Monte Carlo $\hat{\mathcal{I}}$ è tale che

$$\hat{\mathcal{I}} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} g(X_r) \approx \mathbb{E}\{g(X)\} = \mathcal{I}.$$

- **Nota**. Il metodo descritto può essere in realtà usato per approssimare un qualsiasi valore atteso $\mathbb{E}\{g(X)\}$, anche quando la variabile aleatoria X è **discreta**.

Esempio

- **Esempio**. Supponiamo di voler calcolare il valore del seguente integrale

$$\mathcal{I} = \int_0^1 [\cos(50x) + \sin(20x)]^2 \mathrm{d}x.$$

- Si noti che questo integrale coincide con il valore atteso di una trasformazione di una variabile aleatoria uniforme U, ovvero

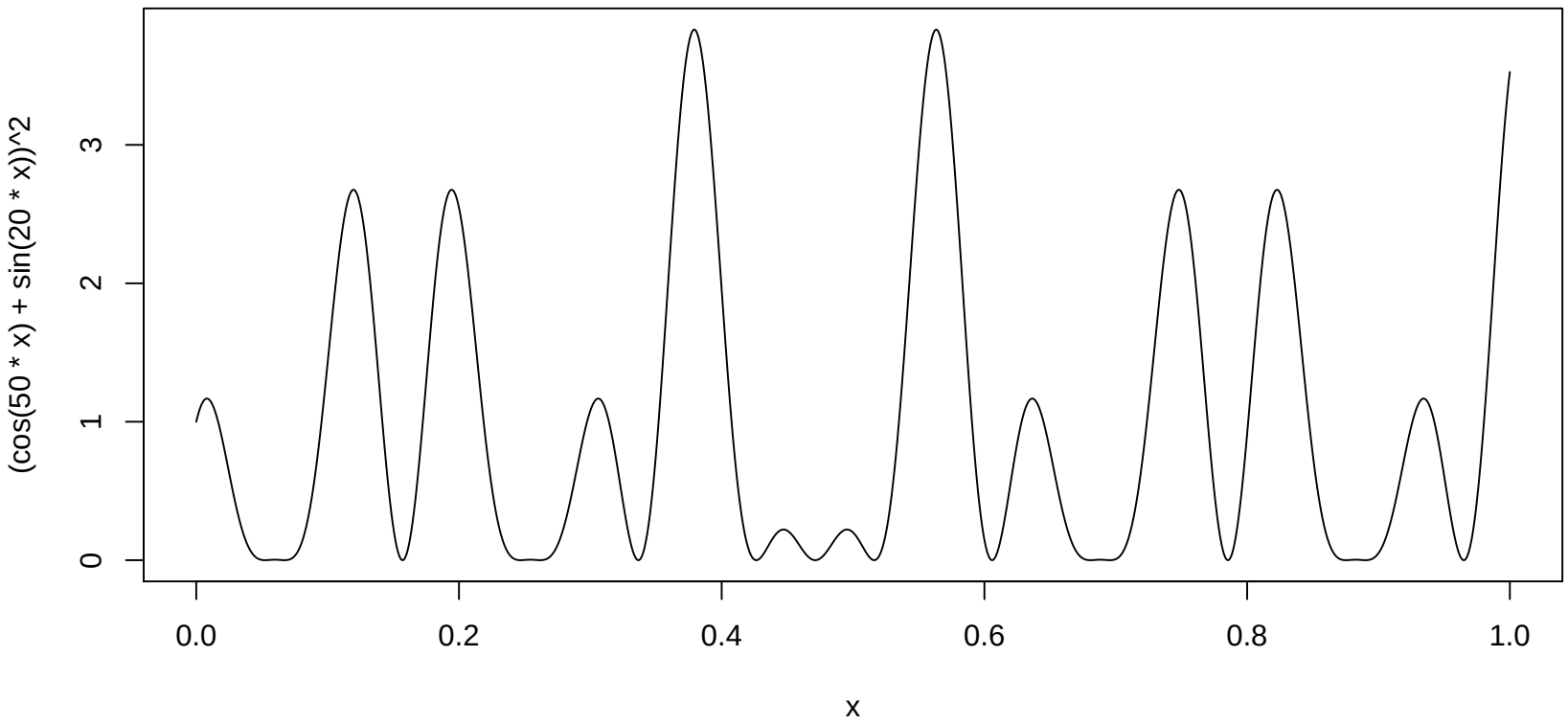
$$\mathcal{I} = \mathbb{E}[\{\cos(50U) + \sin(20U)\}^2], \qquad U \sim \text{Unif}(0, 1).$$

- In **R** pertanto possiamo calcolare $\hat{\mathcal{I}}$ come segue

```
U <- runif(10^6)
I_hat <- mean((cos(50 * U) + sin(20 * U))^2)
I_hat
# [1] 0.9650047
```

- Questa funzione in realtà può essere integrata analiticamente: vale che $\mathcal{I} \approx 0.965201$. Pertanto, l'approssimazione Monte Carlo sembra essere accurata.

Esempio (continua)



- Grafico della funzione integranda nell'intervallo $(0, 1)$.

Come mai funziona? Procediamo come prima...

- Siano $X_1, \ldots, X_R$ delle copie iid aventi densità $f(x)$. Consideriamo quindi lo **stimatore** seguente

$$\hat{\mathcal{I}} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} g(X_r),$$

ovvero l'**approssimazione Monte Carlo** di $\mathcal{I}$ che abbiamo descritto.

- Anche in questo caso, otteniamo che $\hat{\mathcal{I}}$ è uno stimatore di $\mathcal{I}$ con ottime proprietà inferenziali.

- Come in precedenza, lo stimatore $\hat{\mathcal{I}}$ risulta essere **non distorto**, infatti:

$$\mathbb{E}(\hat{\mathcal{I}}) = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} \mathbb{E}\{g(X_r)\} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} \mathbb{E}\{g(X)\} = \mathbb{E}\{g(X)\} = \mathcal{I}.$$

- Inoltre, lo stimatore $\hat{\mathcal{I}}$ è **consistente**. Infatti per la legge (forte) dei grandi numeri

$$\hat{\mathcal{I}} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} \mathbb{E}\{g(X_r)\} \xrightarrow{\text{q.c.}} \mathbb{E}\{g(X)\} = \mathcal{I}, \qquad R \to \infty.$$

La varianza dello stimatore I

- Anche in questo caso possiamo calcolare la **varianza** dello stimatore $\hat{\mathcal{I}}$:

$$\text{var}(\hat{\mathcal{I}}) = \frac{1}{R^2} \sum_{r=1}^{R} \text{var}\{g(X_r)\} = \frac{1}{R} \text{var}\{g(X)\},$$

  con $X \sim f(x)$.

- La varianza $\text{var}\{g(X)\}$ è tipicamente ignota, ma può essere stimata utilizzando gli stessi valori usati per stimare $\mathcal{I}$, ad esempio tramite la **varianza campionaria**:

$$\widehat{\text{var}\{g(X)\}} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} g(X_r)^2 - \left(\frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} g(X_r) \right)^2.$$

- Come in precedenza, un numero di repliche R elevato aumenta quindi la **precisione** ma ha un **costo computazionale**.

La varianza dello stimatore II

- L'implementazione in **R** si ottiene come segue:

```
MonteCarlo <- function(R){
  U <- runif(R)
  hU <- (cos(50 * U) + sin(20 * U))^2
  estimate <- mean(hU)
  std.error <- sd(hU) / sqrt(R)
  out <- c(estimate, std.error)
  names(out) <- c("estimate", "std.error") # Aggiungo solo per ragioni estetiche
  out
}
```

- Proviamo con alcuni valori diversi di R. Si nota un progressivo miglioramento:

```
MonteCarlo(100) # R = 100 conduce a uno std.error elevato
#  estimate std.error
# 0.9420754 0.1062872
MonteCarlo(5000) # R = 5000 conduce a uno std.error ragionevole
#  estimate std.error
# 0.9808332 0.0150004
MonteCarlo(10^6) # R = 10^6 conduce a uno std.error basso
#    estimate   std.error
# 0.964881973 0.001044959
```

Esercizio riassuntivo I

- Si calcoli tramite Monte Carlo il valore del seguente integrale e se ne quantifichi l'incertezza

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2(x) e^{-x^2/2} \mathrm{d}x.$$

- Si confronti il risultato con la funzione `integrate`.

- **Schema della soluzione**.

```
X <- rnorm(10^5)
hX <- sin(X)^2
mean(hX) # Estimate
sd(hX) / sqrt(10^5) # Std.error

# Integrazione numerica
integrate(function(x) sin(x)^2 * dnorm(x), -Inf, Inf)
```

Esercizio riassuntivo II

- Si supponga di voler approssimare tramite Monte Carlo il seguente valore atteso

$$\mathbb{E}(X^2), \qquad X \sim \text{Ga}(3, 3).$$

- Si dica, motivando la risposta, quale codice produce il risultato corretto.

- Codice 1

```
mean(rgamma(10^5, 3, 3) * rgamma(10^5, 3, 3))
```

- Codice 2

```
X <- rgamma(10^5, 3, 3)
mean(X * X)
```

Esercizi aggiuntivi (non risolti)

- **Esercizio**. Si ottenga un'approssimazione Monte Carlo del seguente integrale

$$\int_0^\infty x^4 e^{-x} \mathrm{d}x$$

e si quantifichi l'errore commesso. Si confronti il risultato con la funzione `integrate`.

- **Esercizio**. Si ottenga un'approssimazione Monte Carlo del seguente integrale

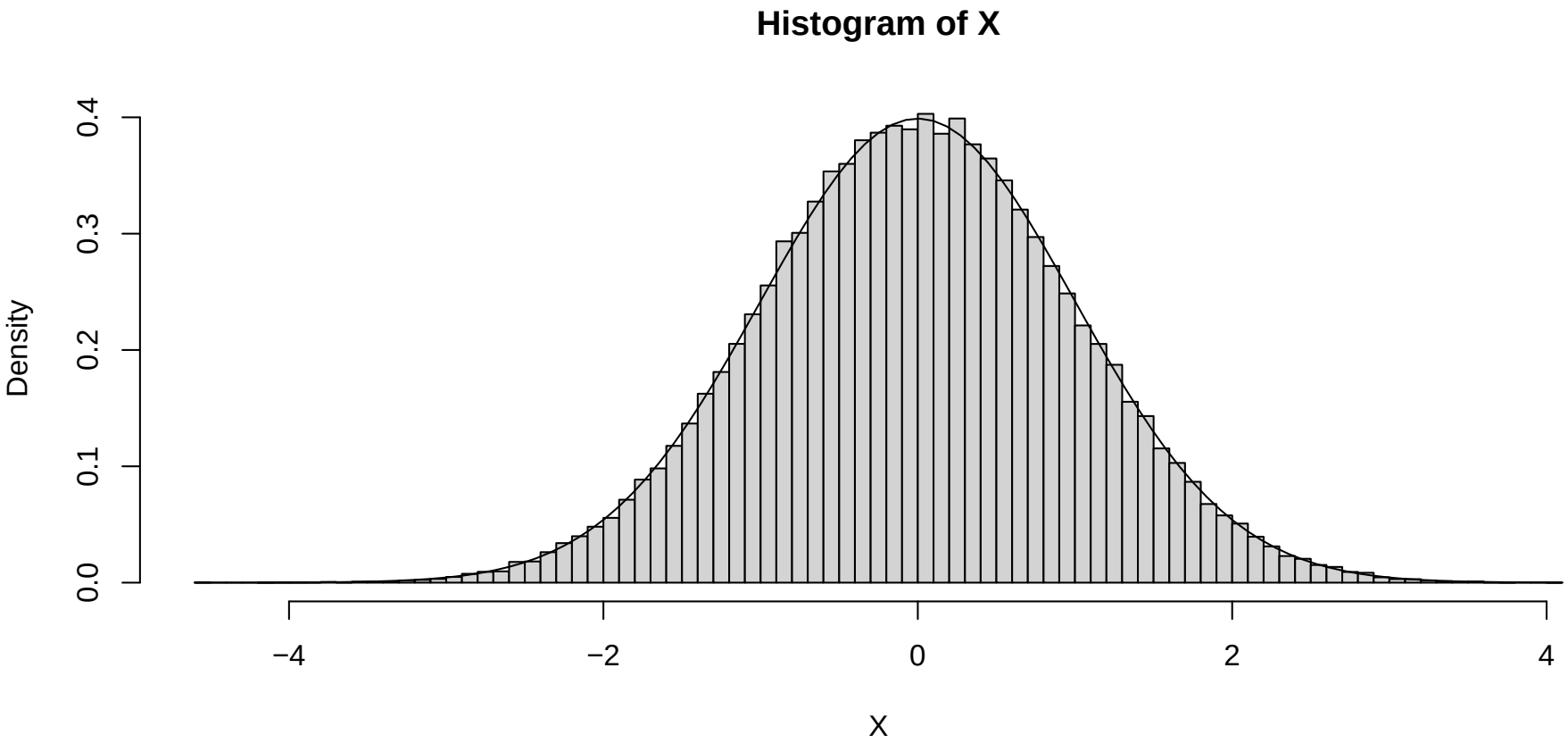
$$\int_0^1 x^{1/2}(1-x)^{1/2} \mathrm{d}x$$

e si quantifichi l'errore commesso. Si confronti il risultato con la funzione `integrate`.

Istogrammi e densità

- Supponiamo di simulare delle variabili aleatorie continue $X_1, \ldots, X_R$, aventi una certa **densità** $f(x)$.
- Se disegniamo l'**istogramma** di tali numeri, intuitivamente ci aspetteremo un'alta densità nell'istogramma in corrispondenza dei valori molto probabili.
- In realtà, il legame tra istogrammi e densità è molto più stretto.
- Consideriamo $\lambda = 1/R$ (si veda **unità D** per la definizione), ovvero il valore che rende la somma delle aree dei rettangoli pari a 1.
- In tale contesto, l'istogramma costituisce un'approssimazione della densità.
- In termini più precisi, diremo che l'**istogramma** è uno **stimatore** nonparametrico (**!?**) della **densità** $f(x)$.

Istogrammi e densità




```r
X <- rnorm(10^5)
hist(X, freq = FALSE, breaks = 100)
curve(dnorm(x), add = TRUE) # add = TRUE Aggiunge la curva al grafico precedente
```

Istogrammi e densità: qualche intuizione

- L'idea è approssimare la funzione $f(x)$ con dei **rettangoli**. Quanti più rettangoli consideriamo, tanto più accurata sarà l'approssimazione.

- Ricordiamo che se $X \sim f(x)$ allora vale che

$$\mathbb{P}(a < X < b) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x.$$

- Quindi idealmente l'altezza del rettangolo di base (a, b) dev'essere tale che

$$(\text{“Altezza rettangolo”}) = \frac{\mathbb{P}(a < X < b)}{b - a},$$

  in maniera tale che l'**area del rettangolo** risulti pari a $\mathbb{P}(a < X < b)$.

- Le probabilità $\mathbb{P}(a < X < b)$ sono ulteriormente **approssimate** tramite Monte Carlo e sono poste pari alla proporzioni di valori $X_1, \ldots, X_R$ contenuti nell'intervallo (a, b).

Approssimazione di una distribuzione discreta

- Un principio simile a visto per istogrammi / densità vale anche nel **caso discreto**.
- Sia X una variabile aleatoria discreta. In questo contesto, possiamo direttamente approssimare la **funzione di probabilità**

$$p(x) = \mathbb{P}(X = x),$$

utilizzando un metodo Monte Carlo.

- Supponendo di poter simulare $X_1, \ldots, X_R$. Allora, una stima per $p(x)$ è semplicemente pari alla proporzione di valori pari x che abbiamo ottenuto.

```
X <- rpois(10^5, 10) # Simulazione di R variabili Poisson con media 10
freq_rel <- table(X) / n # Calcolo delle frequenze relative

par(mfrow = c(1, 2)) # Grafici
plot(freq_rel, ylab = "P(X = k)", xlab = "k", main = "Distribuzione empirica")
plot(0:28, dpois(0:28, 10), type = "h", ylab = "P(X = k)",
     xlab = "k", main = "Distribuzione teorica")
```

Approssimazione di una distribuzione discreta