

Sakari Uusitalo

KUINKA KONE OPPI TUNTEMAAN RAKENNUKSEN

Energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusten arviointi
Gaussin prosessin avulla

Informaatioteknologia ja viestintä
Diplomityö
Helmikuu 2021

TIIVISTELMÄ

Sakari Uusitalo: Kuinka kone oppi tuntemaan rakennuksen
Diplomityö
Tampereen yliopisto
Sovellettu matematiikka
Helmikuu 2021

Työn tavoitteena oli tarkastella sopiiko Gaussin prosessi koneoppimismenetelmänä rakennuksista kerättävän aikasarjadataan perusteella tehtävään mallintamiseen ja voidaanko sitä hyödyntää kolmeen kerrostaloon tehtyjen energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusten todentamiseen.

Työssä luotiin Gaussin prosessiregression avulla malli, jonka sisäänmenoina käytettiin ulkolämpötilaa sekä aikatieta. Aikatieta sisälsi tiedon viikonpäivästä sekä kuluvan vuorokauden tunnista. Vastaavasti mallin ulostulona pyrittiin arvioimaan näitä sisäänmenoja vastaavaa lämmityksen tuntitehon tarvetta, eli keskimääräistä tunnin aikana tarvittua lämmitystehoa. Luodun mallin antamia tuloksia käytettiin vertailukohtana, kun pyrittiin todentamaan kerrostaloyhtiöihin tehtyjen energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutuksia. Malli koulutettiin vuoden 2016 tuntidatalla. Vuoden 2017 dataa käytettiin testidatana arvioitaessa mallin toimivuutta. Energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusarviointi suoritettiin vuoden 2019 mitatulla datalla, jota verrattiin mallin antamiin tuloksiin.

Suoritettujen mallinnusten perusteella voidaan todeta, että Gaussin prosessia käyttämällä onnistuttiin kohtuullisen hyvin mallintamaan rakennusten tuntitehon tarvetta vähäisilläkin sisäänmenomuuttujilla. Voidaan olettaa, että suurin epävarmuustekijä mallinuksissa liittyy lämpimän käyttöveden kulutukseen ja siitä aiheutuvaan tehon tarpeeseen. Mittaamalla käyttöveden kulutusta voitaisiin mallinnustarkkuutta luultavasti parantaa huomattavasti.

Tarkastelujen perusteella voitiin myös todentaa, että tehdyillä energiatehokkuustoimenpiteillä on ollut vaikutusta kerrostaloyhtiöiden huipputehon tarpeisiin sekä kokonaisenergiakulutukseen. Kaikkien kolmen yhtiön osalta näyttää, että huipputehon tarpeet ovat vähentyneet ja kokonaisenergiankulutus on pienempi kuin se olisi ollut ilman tehtyjä toimenpiteitä.

Avainsanat: tekoäly, koneoppiminen, älyrakennus, talotekniikka, energiatehokkuus, energia, teho

Tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck -ohjelmalla.

ABSTRACT

Sakari Uusitalo: How the machine learned to know the building
Master of Science Thesis
Tampere University
Applied Mathematics
February 2021

The aim of this work was to examine whether the Gaussian process as a machine learning method is suitable for modeling time series data collected from buildings and whether it can be used to verify the effects of energy efficiency actions on three residential buildings.

A Gaussian process regression model was created using outdoor temperature and time information as inputs including information about the day of the week and the hour of the current day. Correspondingly, the output of the model was to estimate the hourly heating power demand corresponding to these inputs. The results provided by the created model were used as a reference point to verify the effects of energy efficiency actions taken on residential buildings.

The model was trained with 2016 hourly data. The 2017 data was used as test data to evaluate the functionality of the model. The impact assessment of the energy efficiency measures was performed with the measured data of 2019, which was compared with the results given by the model.

Based on the performed modelings, it can be stated that using the Gaussian process, the need for hourly power of buildings was reasonably well modeled with even small input variables. It can be assumed that the biggest uncertainty factor in the modelings is related to the hot water consumption and the resulting power requirement. By measuring hot water consumption, modeling accuracy could probably be significantly improved.

Based on the reviews, it could also be verified that the energy efficiency measures taken have had an impact on the peak power needs of residential buildings as well as on total energy consumption. For all three buildings, peak power needs appear to have decreased and overall energy consumption is lower than it would have been without the actions taken.

Keywords: artificial intelligence, machine learning, intelligent building, building services, energy efficiency, energy, power

The originality of this thesis has been checked using the Turnitin OriginalityCheck service.

ALKUSANAT

Tämä työ on laadittu osana diplomi-insinöörin tutkintoa Tampereen yliopistossa. Haluan kiittää koko Tampereen korkeakouluyhteisöä kannustuksesta jatkuvaan oppimiseen ja mahdollisuudesta tehdä työtä ja opiskella samanaikaisesti. Työn tekeminen on kestänyt luvattoman kauan ja sen keskeneräisyys on aiheuttanut ajoittaista stressiä, josta erityisesti lähipiirini on saanut kärsiä. Aivan erityisen kiitoksen ansaitseekin koko perheeni, joka ei välttämättä aina ole ymmärtänyt miksi ärsyyntymiskynnys on välillä ollut luvattoman matalalla. En ole sitä välttämättä aina itsekään ymmärtänyt. Nyt on aika hieman hengähtää opinnoissa ja keskittyä hevosen lannan luontiin sekä luistinten teroittamiseen.

Tampereella, 12. helmikuuta 2021

Sakari Uusitalo

SISÄLLYSLUETTELO

1	Johdanto	1
1.1	Rakennukset ovat täynnä tietoa	2
1.2	Rakennusalalla on kohtaanto-ongelma	3
1.3	Gaussin prosessi on yksi mahdollinen koneoppimisen menetelmä	4
1.4	Työn tavoite ja rakenne	4
2	Koneoppimisen maailma ja oppimisen ulottuuudet	6
2.1	Kyse on tietokoneohjelmasta	6
2.2	Valvottua ja valvomatonta	8
2.3	Kertaluenteisesta jatkuvaan	9
2.4	Ilmiöpohjaista ja malleihin perustuvaa	9
2.5	Koneoppiminen ei ole ongelmatonta	10
2.6	Opittua tulee testata	12
3	Perustesteista kohti moniulotteista normaalijakaumaa	13
3.1	Johdatusta todennäköisyyksiin	13
3.1.1	Diskreetit satunnaismuuttujat	13
3.1.2	Todennäköisyyksien perussääntöjä	14
3.1.3	Bayesin teoreema	15
3.1.4	Jatkuvat satunnaismuuttujat	16
3.1.5	Kvantiilit	17
3.1.6	Odotusarvo ja varianssi	18
3.1.7	Gaussin jakauma tai normaalijakauma	19
3.2	Yhdestä useampaan ulottuvuuteen	20
3.2.1	Satunnaisvektorit	21
3.2.2	Moniulotteinen odotusarvo ja kovarianssimatriisi	22
3.2.3	Moniulotteinen normaalijakauma	24
3.2.4	Ehdolliset normaalijakaumat	24
4	Linearisesta regressiosta Gaussin prosessiin	27
4.1	Lineaarinen regressio Bayesilaisesta näkökulmasta	28
4.2	Gaussin prosessimalli	30
4.2.1	Priorijakauma	33
4.2.2	Posteriorijakauma	34
4.2.3	Kovarianssifunktiot	34
4.2.4	Kovarianssifunktioiden yhdistäminen	36
4.2.5	Gaussin regressioprosessimallin kouluttaminen	36
4.3	Gaussin prosessin käytännön soveltaminen	37
5	Energiatehokkuustoimenpiteiden todentaminen Gaussin prosessin avulla	41

5.1	Kulutuksen normitus	42
5.2	Tarkastelussa käytetty data ja sen valmistelu	43
5.3	Gaussin prosessimallin rakentaminen	44
5.4	Mallinnusten tulokset	45
5.4.1	Virhetarkastelu	45
5.4.2	Lämmityksen tuntitehot vuosina 2017 ja 2019	47
5.4.3	Rakennusten energiankulutus vuosina 2017 ja 2019	52
6	Johtopäätökset	54
	Lähteet	56

KUVALUETTELO

1.1	Rakennuksesta kerättyä dataa visualisoituna.	1
1.2	Tampereen ammattikorkeakoulun liikuntatalon lämmönjakojärjestelmä. . . .	3
2.1	Ihminen laatii rakennuksen ominaisuuksien perusteella fysikaalisen mallin, jonka avulla voidaan ennakoida rakennuksen tulevaa käyttäytymistä.	7
2.2	Tekoäly oppii rakennuksen aiemmasta käyttäytymisestä kerätyn datan perusteella ennakoimaan tulevaa käyttäytymistä.	7
2.3	Koneoppimisen jaottelu valvottuun ja valvomattomaan oppimiseen. [18] . . .	8
2.4	Hyvä malli löytää datasta luontaiset riippuvuussuhteet, mutta ei häiriinny liikaa datassa esiintyvistä kohinasta.	11
3.1	Kertymäfunktion ja tiheysfunktion kuvaajia odotusarvon ollessa 0 ja varianssin vaihdellessa.	17
3.2	Normaalijakauman $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ häntätodennäköisyydet ja niiden väliin jäävä alue sekä mediaani.	18
3.3	Normaalijakauman tiheysfunktioiden kuvaajia eri odotusarvolla ja varianssilla.	19
3.4	Normaalijakauman kertymäfunktioiden kuvaajia eri odotusarvolla ja varianssilla.	20
4.1	Gaussin prosessin ideana on löytää tuntemattoman funktion tulosten todennäköisimmät arvot.	30
4.2	Viisi mahdollista funktiota, kun priorijakauman odotusarvona on nollavektori ja kovarianssifunktiona SE (Squared Exponential). Kovarianssifunktion hyperparametrit ovat: $\sigma_f^2 = 1$, $l = 1$ ja $\sigma_n^2 = 0$	33
4.3	Harjoitusdatan avulla muodostetun posteriorijakauman odotusarvovektorin kuvaaja (sininen), todellisen funktion kuvaaja (katkoviiva) sekä mallin 95 % luottamusväli.	34
4.4	Esimerkkejä yleisesti käytettyjen kovarianssifunktion rakenteista [6].	35
4.5	Esimerkki liikuntasalin huonelämpötilan mallintamisesta käyttäen Gaussin prosessia.	38
4.6	Esimerkki patteriverkoston kehittyneestä säätömenetelmästä.	39
4.7	Esimerkki Gaussin prosessin soveltamisesta energiansäästötoimenpiteiden todentamisessa.	39
5.1	Kohteen 1 kuukausittainen lämpöenergian kulutus sekä ulkoilman keskilämpötila vuosilta 2017, 2018 ja 2019.	42

5.2	Mallin sisäänmenoina käytettiin tietoa viikonpäivästä sekä kuluvan päivän tunnista ja ulkolämpötilan tuntikeskiarvoa. Vastaavasti ulostulona saatiin lämmityksen tuntitehon keskiarvo.	44
5.3	Kohteiden vuoden 2017 mitattujen ja mallinnettujen arvojen välisten residuaalien jakaumat.	46
5.4	Kohteiden vuoden 2017 mitattujen ja mallinnettujen teholumien lineaarinen riippuvuus toisistaan.	47
5.5	Kohteiden vuoden 2019 mitattujen ja mallinnettujen teholumien lineaarinen riippuvuus toisistaan.	47
5.6	Kohteiden mallinnetut ja mitatut tuntitehot vuodelta 2017.	48
5.7	Kohteiden mallinnetut ja mitatut tuntitehot vuodelta 2019.	48
5.8	Kohteiden laskutustehon määräytyminen vuonna 2017 mitattujen ja mallinnettujen arvojen perusteella.	50
5.9	Kohteiden laskutustehon määräytyminen vuonna 2019 mitattujen ja mallinnettujen arvojen perusteella.	51
5.10	Kohteiden mitattu ja mallinnettu kuukausittainen energiankulutus vuonna 2017.	52
5.11	Kohteiden vuosikulutukset 2017.	52
5.12	Kohteiden mitattu ja mallinnettu kuukausittainen energiankulutus vuonna 2019.	53
5.13	Kohteiden vuosikulutukset 2019.	53

TAULUKKOLUETTELO

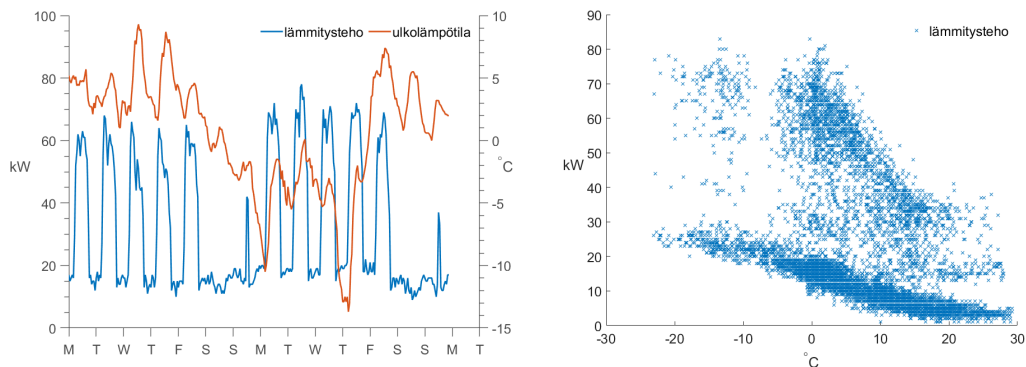
5.1 Vuoden 2017 mallinnusten RMSE-arvot.	46
--	----

LYHENTEET JA MERKINNÄT

\mathcal{G}	Gaussin prosessijakauma
σ	todennäköisyysjakauman keskihajonta
$\boldsymbol{\mu}$	odotusarvovektori
μ	todennäköisyysjakauman odotusarvo
σ^2	todennäköisyysjakauman varianssi
Σ	kovarianssimatriisi
Φ	normaalijakauman kertymäfunktio
θ_n	malliparametri
ϵ	mittausvirhe havainnossa y
\mathcal{D}	harjoitusjoukko ilmiön havainnoista y pisteissä \mathbf{X}
$\mathbb{E}[X]$	satunnaismuuttujan X odotusarvo
\mathbf{I}	identiteettimatriisi
IoT	Internet of Things
$k(\cdot, \cdot)$	kovarianssifunktio
\mathbf{K}	kovarianssimatriisi
$m(\cdot)$	odotusarvofunktio
\mathcal{N}	normaalijakauma
\mathbf{w}	lineaarisen mallin painokerroinvektori
\mathbf{X}	vektori satunnaismuuttujista tai matriisi mallin sisääntuloista
\mathbf{x}_*	ilmiön sisääntulo, josta halutaan mallintaa ulostulo y_*
\mathcal{X}	perusjoukko, otosavaruus
X	satunnaismuuttuja
\mathbf{Y}, \mathbf{Z}	vektoreita satunnaismuuttujista
\mathbf{x}_i	mallinnettavan ilmiön sisääntulo, josta on havainto y
\hat{y}	malliyhtälön antama ennuste tietyssä pisteessä
y_*	ilmiön tuntemattomat ulostulot pisteissä \mathbf{X}_*
y	mallinnettavasta ilmiöstä havaitut ulostulot pisteissä \mathbf{X}

1 JOHDANTO

IoT, tekoäly, bigdata, koneoppiminen ja älyrakennus ovat kaikki termejä, jotka esiintyvät entistä enemmän myös rakennus- ja talotekniikka-alan julkaisuissa. Alan yritykset ovat myös heränneet meneillään olevaan murrokseen. Vanhat perinteiset toimijat laajentavat palveluvalikoimiaan ja uusia yrityksiä syntyy kiihtyvällä tahdilla. Kun vielä joitakin vuosia sitten markkinointi rakentui vihreiden arvojen ja energiatehokkuuden ympärille, on nykyisin valttia digitalisaatio ja sen tuomat mahdollisuudet rakennuksille ja niiden hallinnalle. Mitä tämä sitten tarkoittaa? Mikä on älyrakennus ja miten esimerkiksi koneoppimista voidaan hyödyntää rakentamisessa?



(a) Rakennuksen lämmitysteho ja ulkolämpötila kahden viikon ajalta. **(b)** Rakennuksen lämmitystehon tarve tunneittain yhden vuoden ajalta.

Kuva 1.1. Rakennuksesta kerättyä dataa visualisoituna.

Yksinkertaisimmillaan tämä voi tarkoittaa, että koneoppimista hyödyntävä tekoäly oppii ymmärtämään jonkin rakennuksen osa-alueen toimintaa ja ennakoimaan sen tulevaa käyttäytymistä. Kuvassa 1.1a on esitetty rakennuksen lämmitystehontarve kahden viikon ajalta. Katso hetki kuvaa ja mieti Mitä voit päätellä kuvan perusteella rakennuksen lämmitystehontarpeesta? Arkipäivisin lämmitystehontarve näyttää kasvavan tiettyinä kellon aikana aamulla ja pienenevän jälleen iltaa kohden mentäessä. Viikonloppuisin lämmitystehontarve ei näytä kasvavan päiväaikaankaan samalla tavalla kuin arkena. Luultavasti tämä johtuu ilmanvaihtokoneiden käynnistymisestä. Kuvassa 1.1b näet rakennuksen tehontarpeen tunneittain ulkolämpötilan suhteen yhden kokonaisen vuoden ajalta. Huomaat siinä mahdollisesti kaksi erillistä joukkoa. Luultavasti toinen joukko kuvaa tehontarvetta kun ilmanvaihtokoneet ovat seis ja toinen tilannetta, jossa koneet ovat olleet käynnissä. Tarkastelemalla tämänkaltaista dataa rakennuksesta voisit ehkä ennakoida esimerkiksi tulevan viikon lämmitystehontarvetta sääennustuksen perusteella. Olet oppinut

tuntemaan rakennuksen käyttäytymistä siitä ja sen toimintaan vaikuttavista olosuhteista kerätyn datan perusteella. Samalla tavalla myös kone voi oppia tuntemaan rakennuksen käyttäytymistä.

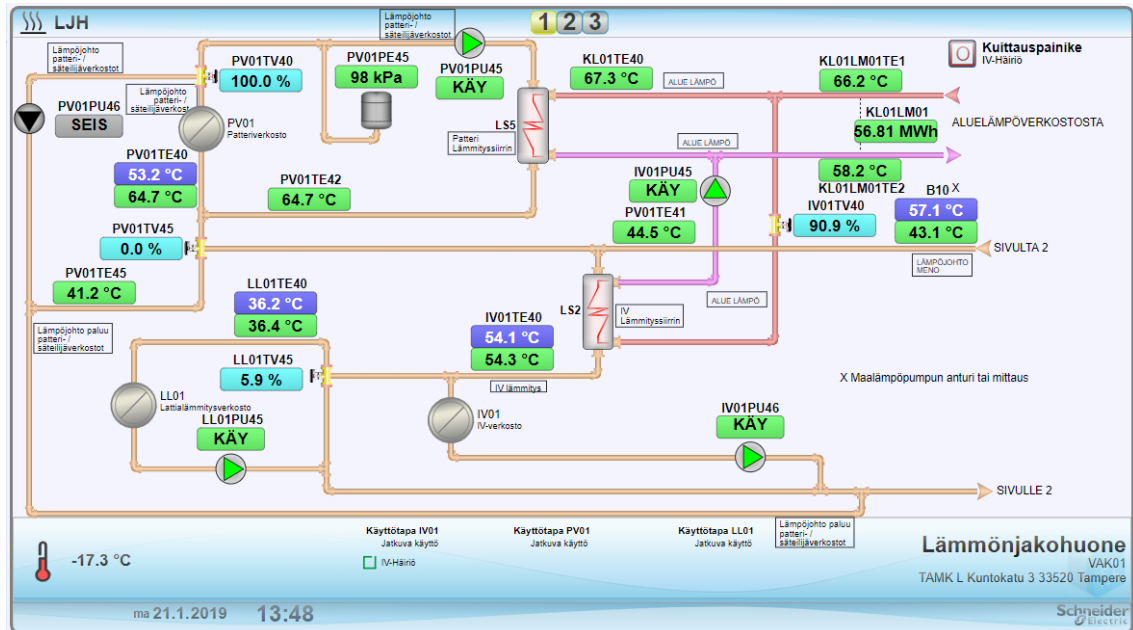
Kyse on rakennuksesta ja sen toimintaan vaikuttavista olosuhteista kerättävästä datasta ja sen perusteella opittavasta mallista. Voidaan esimerkiksi tarkastella rakennuksessa käytettävän sähköenergian, lämpöenergian tai olosuhteiden mallintamista koneoppimisen keinoin. Oletetaan, että tekoäly kerää dataa sääolosuhteista, rakennuksen sisäolosuhteista, käyttöasteesta ja energiankulutuksesta. Tekoäly voi oppia kuinka edellä mainitut sääolosuhteet ja käyttöaste vaikuttavat rakennuksen energiantarpeeseen tai rakennuksen sisäolosuhteisiin. Kun tekoäly on oppinut riittävän hyvin tuntemaan rakennuksen dynamiikkaa ja toimintaa, voidaan sen tuottamaa ennustetta hyödyntää esimerkiksi kehittyneissä säätömenetelmissä, rakennuksen käyttöönottoon liittyvässä toiminnan varmistamisessa tai energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusten arvioinnissa.

1.1 Rakennukset ovat täynnä tietoa

Tämän päivän rakennuksissa haasteena ei ole datan saatavuus. Esimerkiksi Tampereen yliopiston Kampusareenan rakennusautomaatiojärjestelmän kautta kerätään päivittäin n. 5.5 miljoonaa mittaustapahtumaa 2883 eri muuttujasta [13]. Suurempana haasteena onkin hahmottaa mikä tieto on oikeasti tärkeää, kuinka tiheästi tietoa pitää tallettaa ja mitä kaikella sillä kerätyllä tiedolla lopulta pitäisi tehdä. Pelkkä datan kerääminen ei luonnollisesti riitä, vaan se pitää myös valjastaa hyötykäyttöön.

Rakennusautomaatiojärjestelmille on tyypillistä, että mitattavaa dataa voidaan esittää erillisen valvomo-ohjelmiston avulla. Valvomo-ohjelmisto toimii käyttöliittymänä järjestelmän ja sen käyttäjän välillä, jolloin käyttäjä voi visualisoida kerättyä dataa ja tehdä sen perusteella johtopäätöksiä rakennuksen toiminnasta. Kuvassa 1.2 nähdään esimerkiksi Tampereen ammattikorkeakoulun liikuntatalon lämmönjakojärjestelmän automaatiojärjestelmän visualisointi. Visualisoinnin lisäksi mittaustietoa käytetään hyväksi myös erilaisissa automatisoiduissa toiminnoissa kuten säädöissä ja hälytyksissä. Säättöpiirit, hälytykset ja visualisoinnit ovat jo vuosia käytössä olleita perustoimintoja, jotka ovat tuttuja alalla toimiville ammattilaisille. Erilaiset automaatiojärjestelmiin liittyvät säättöpiirien asetusarvot, aikaohjelmat ja raja-arvot määrittelee kuitenkin tällä hetkellä vielä järjestelmän käyttäjä edellä mainittua visualisointia hyödyntäen. Tämä tarkoittaa, että automaatiojärjestelmä pitää huolen, että säädettävien prosessien ulostulot pysyvät asetusarvoissaan, mutta järjestelmä ei ota kantaa ovatko asetusarvot oikeat rakennuksen toimivuuden kannalta. Samoin kerättävän datan perusteella tehtävät päätelmät ovat pääasiassa riippuvaisia niitä tekevän käyttäjän osaamisesta. Tulevaisuuden näkymänä on kuitenkin koneoppimisen ja sitä hyödyntävien kehittyneiden säätömenetelmien ja automatisoitujen raportointityökalujen tulo osaksi rakennusten hallintaa.

Rakennusautomaatiojärjestelmät eivät tietenkään ole ainoita tiedon lähteitä rakennuksis-



Kuva 1.2. Tampereen ammattikorkeakoulun liikuntatalon lämmönjakojärjestelmä.

ta. Toki niistä saatavan tiedon ja datan määrä on huomattavan suuri. Automaatiojärjestelmän lisäksi rakennuksista löytyy useita muitakin teknisiä järjestelmiä kuten esimerkiksi kulunvalvonta, valaistuksen ohjaus- ja paloilmoitinjärjestelmiä. Teknisten järjestelmien ja niistä saatavan tiedon lisäksi rakennusten rakentamiseen ja ylläpitoon liittyy myös paljon muuta tietoa ja dataa, jota voidaan hyödyntää. Esimerkiksi erilaiset työsuorituksiin, käytettyihin materiaaleihin ja niihin liittyviin kustannuksiin liittyvä tieto auttaa ymmärtämään rakennus- ja ylläpitoprosessien toimivuutta.

1.2 Rakennusalalla on kohtaanto-ongelma

Saatavissa olevan tiedon tehokas hyödyntäminen vaatii, että rakennusalan ammattilaiset tuntevat nykyaikaisten tiedonkäsittelymenetelmien mahdollisuuksia ja toisaalta, että digitalisaatioon työkaluja kehittävät tahot ymmärtävät minkälaisiin haasteisiin rakennus- ja kiinteistöalalla tarvitaan ratkaisuja. Rakennus- ja kiinteistöalalla onkin havaittavissa tietynlainen kohtaanto-ongelma esimerkiksi rakentamisen ja koneoppimisen asiantuntijoiden välillä. Rakentamisen asiantuntijat ymmärtävät kuinka rakennukset toimivat, mutta eivät välttämättä tiedä mitä koneoppiminen käytännössä tarkoittaa ja minkälaisia mahdollisuuksia sen hyödyntämiseen rakennusalalla on. Tällöin heidän on vaikeaa määritellä riittävän tarkkoja tavoitteita tulevalle ”älyrakennukselle”. Erilaiset menetelmät ja niiden tarjoamat hyödyt perustuvat usein rakennuksista kerättävän tiedon jalostamiseen ja tällöin riittävien tiedonkeräys- ja mittausmenetelmien ottaminen huomioon jo rakennuksen suunnitteluvaiheessa on edellytys uusien menetelmien käyttöönotolle ja kehittämiselle. Koneoppimisen osaajat taas eivät tunne riittävän hyvin rakennusten toimintaa tai niiden parissa toimivien tarpeita tiedon jalostamiselle. Toisaalta sekä rakentajilla, että tekoöly-

osaajilla voi olla myös liian optimistinen kuva tarjolla olevista mahdollisuuksista.

Tämän työn tarkoituksena on lisätä rakennusalan ammattilaisten ymmärrystä koneoppimisesta ja sen tuomista mahdollisuuksista rakennus- ja kiinteistöalalle. Toisaalta tarkoituksena on tuoda myös esiin niitä rajoitteita, joita koneoppimiseen liittyy. Tämän toivotaan antavan rakentamisen ja ylläpidon parissa toimiville varmuutta keskustella koneoppimisen ammattilaisten kanssa kehittää yhdessä uusia tulevaisuuden rakennuksia, joissa niistä saatavilla olevaa tietoa hyödynnetään maksimaalisesti.

1.3 Gaussin prosessi on yksi mahdollinen koneoppimisen menetelmä

Erilaisia menetelmiä koneoppimiseen on lukuisia, joista Gaussin prosessi on yksi vaihtoehto. Gaussin prosessi on tilastotieteellinen malli, joka esittää annettujen datapisteiden läpi kulkevien funktioiden jakauman. Gaussin prosessin avulla ei saada selville varsinaista ilmiötä kuvaavaa funktiota vaan todennäköisimmän funktion antamat arvot tietyissä pisteissä [1]. Monesti rakennuksiin liittyvissä mallinnusongelmissa tämä on aivan riittävää eikä varsinainen ilmiötä kuvaava funktio ole mitenkään erityisen kiinnostava. Sen sijaan kiinnostavaa on esimerkiksi mikä on rakennuksen lämmitystehon tarvetta kuvaavan malliyhtälön antama ulostulo tietyissä olosuhteissa. Gaussin prosessia käytettäessä mallintamisessa ei tarvitse tuntea ilmiötä kuvaavia fysikaalisia yhtälöitä ja etsiä niihin sopivia parametreja, mikä saattaa monesti helpottaa ilmiön mallintamista kun vain mallinnuksen lopputulos kiinnostaa. Edellä kuvatuista seikoista johtuen, tässä työssä käsiteltäväksi koneoppimisen menetelmäksi on valittu Gaussin prosessi.

1.4 Työn tavoite ja rakenne

Rakennuksiin tehtävät energiatehokkuustoimenpiteet kohdistetaan usein nimenomaan lämmitysjärjestelmään, mutta haasteeksi muodostuu tehtyjen toimenpiteiden vaikutusten arviointi. Koska ulkoilman olosuhteet ja rakennuksen käyttöaste saattavat vaihdella huomattavastikin tarvitaan tehtyjen toimenpiteiden vaikutusten tarkastelemiseksi malli, jonka avulla voidaan arvioida minkälainen tehon tarve rakennuksella olisi ollut ilman tehtyjä toimenpiteitä. Työssä tarkastellaan kuinka koneoppiminen soveltuu rakennusten lämmitystehontarpeen mallintamiseen tavoitteena hyödyntää Gaussin prosessia kolmeen Tampereella sijaitsevaan kerrostaloyhtiöön tehtyjen energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusten todentamisessa. Varsinaisia energiatehokkuustoimenpiteitä ei työssä esitellä, sillä ne ovat työn kannalta toisarvoisia. Niiden tarkoituksena on kuitenkin ollut pienentää rakennusten huipputehontarvetta sekä kokonaisenergiankulutusta.

Lisäksi työn tarkoituksena on tarjota rakennusalan ammattilaisille ymmärrettävä kuvaus koneoppimisesta ja antaa esimerkkejä käytännön sovelluksista, joissa sitä voi hyödyn-

tää. Tämän toivotaan edistävän uusien teknologioiden käyttöönottoa myös rakennus- ja kiinteistöalalla.

Luvussa 2 käsitellään koneoppimista yleisellä tasolla ja pyritään tarjoamaan kuvaus koneoppimisen peruskäsitteistä mahdollisimman monelle lukijalle tämän taustasta riippumatta. Luvuissa 3 ja 4 käsitellään tarkemmin todennäköisyyksiin ja Gaussin prosessiin liittyvää teoriaa ja ne edellyttävät lukijalta riittävää matemaattista osaamista. Lisäksi luvussa annetaan muutama esimerkki koneoppimisen hyödyntämisestä sisälämpötilojen ja energiankulutuksen mallintamisessa. Luvussa 5 käsitellään koneoppimisen käytännön soveltamista Tampereella sijaitsevien asuinkerrostalojen lämmitystehon tarpeen mallintamiseen ja niihin tehtyjen energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusten todentamiseen. Jos lukija on kiinnostunut pääasiassa ymmärtämään mistä koneoppimisesta on kyse ja millä tavalla sitä voisi hyödyntää rakennusalailla, voi hän hypätä huoletta lukujen 3 ja 4 yli ja lukea vain luvut 2 ja 5.

2 KONEOPPIMISEN MAAILMA JA OPPIMISEN ULOTTUUDEET

Tämän päivän muotisana, tekoäly, ei ole uusi käsite. Tekoälyllä tarkoitetaan yleensä ihmisaivojen toiminnan jäljittelemistä. Etenkin fiktiossa tekoäly on ollut läsnä kauan, mutta myös tiedemaailma on tuntenut käsitteen ja viimeaikoina tutkijat ovatkin ottaneet huomioon kehitysaskelaita siihen liittyvien innovaatioiden parissa. [17]

Yksi tekoälyn osa-alue on koneoppiminen, joka käyttää tilastollisia teknologioita mahdollistakseen koneiden oppimisen kokemuksista. Tässä luvussa käsitellään koneoppimista yleisesti ja siihen liittyviä käsitteitä. Lukija saa näin käsityksen mitä koneoppimisella tarkoitetaan ja yleiskuvan siitä mitä se vaatii toimiakseen.

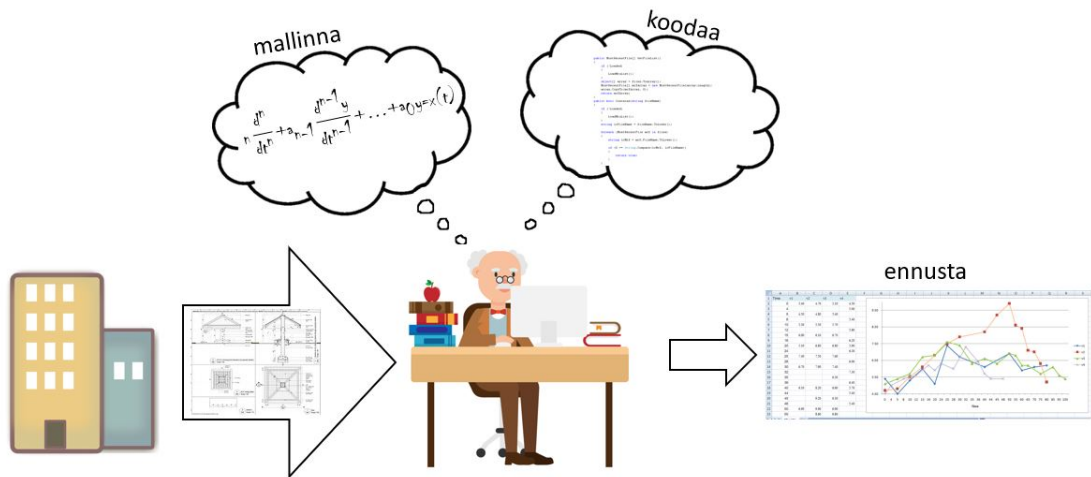
2.1 Kyse on tietokoneohjelmasta

Tom Mitchell on kirjassaan [19] määritellyt koneoppimisen seuraavasti:

"Tietokoneohjelman sanotaan oppivan kokemuksesta E jonkin tehtävän T ja jonkin suorituskykymittauksen P suhteen, jos sen toiminta T mitattuna P:llä paranee kokemuksesta E."

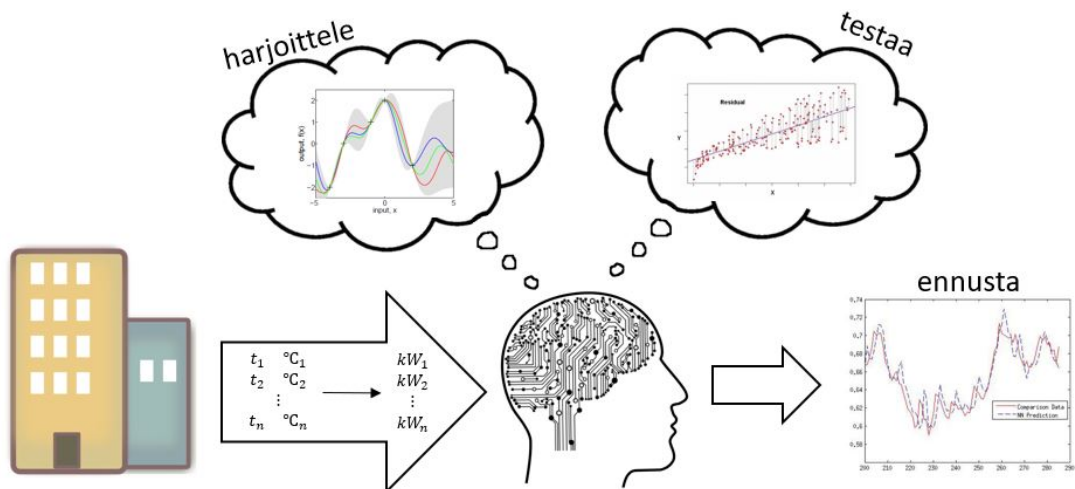
Nopeasti lukemalla tämä saattaa kuulostaa hankalalta. Käytännössä kyse on vain siitä, että tietokoneohjelma kykenee oppimaan jonkin ilmiön käyttäytymistä aikaisemman tiedon perusteella ja ennakoimaan ilmiön tulevaa käyttäytymistä. Ohjelmaa ei siis tarvitse ohjelmoida erikseen ymmärtämään ilmiötä, vaan se kykenee oppimaan sen itsenäisesti. Ajatellaan asiaa esimerkin kautta. Haluamme mallintaa rakennuksen keskimääräistä lämmitystehon tarvetta (tehtävä T) ulkolämpötilan ja ajan suhteen (kokemus E) ja mitaamme suorituskykyä vertaamalla mallinnettua lämmitystehon tarvetta toteutuneeseen (mittaus P).

Kuvassa 2.1 on kuvattu tilannetta ns. perinteisen mallintamisen näkökulmasta. Voimme laatia dynaamisen mallin rakennuksesta ja ohjelmoida tietokoneohjelman laskemaan sen avulla lämmitystehon tarpeen eri ulkolämpötiloilla. Mallin rakentamiseksi tarvitsemme kuitenkin huomattavan paljon tietoa rakennuksen dynamiikkaan vaikuttavista ominaisuuksista. Meidän tulee selvittää esimerkiksi seinien ja ikkunoiden rakenteet ja pinta-alat, rakenteiden u-arvot, kylmäsiltojen pituudet, ilmanvaihdon ilmavirrat, rakennuksen käyttöprofiili sekä lukuisia muita lämmitystehon tarpeeseen vaikuttavia ominaisuuksia. Näiden omi-



Kuva 2.1. Ihminen laatii rakennuksen ominaisuuksien perusteella fysikaalisen mallin, jonka avulla voidaan ennakoita rakennuksen tulevaa käyttäytymistä.

naisuuksien avulla meidän tulee muodostaa matemaattinen funktio, jonka sisääntuloina ovat ulkolämpötila ja aika. Ulostulonaan funktio antaa meille rakennuksen lämmitystehon kyseisellä ajanhetkellä ja ulkolämpötilalla. Mallin rakentaminen ja sen ohjelmoiminen tietokoneohjelmaksi voi vaatia siis todella suuren määrän työtä ja koodirivejä.

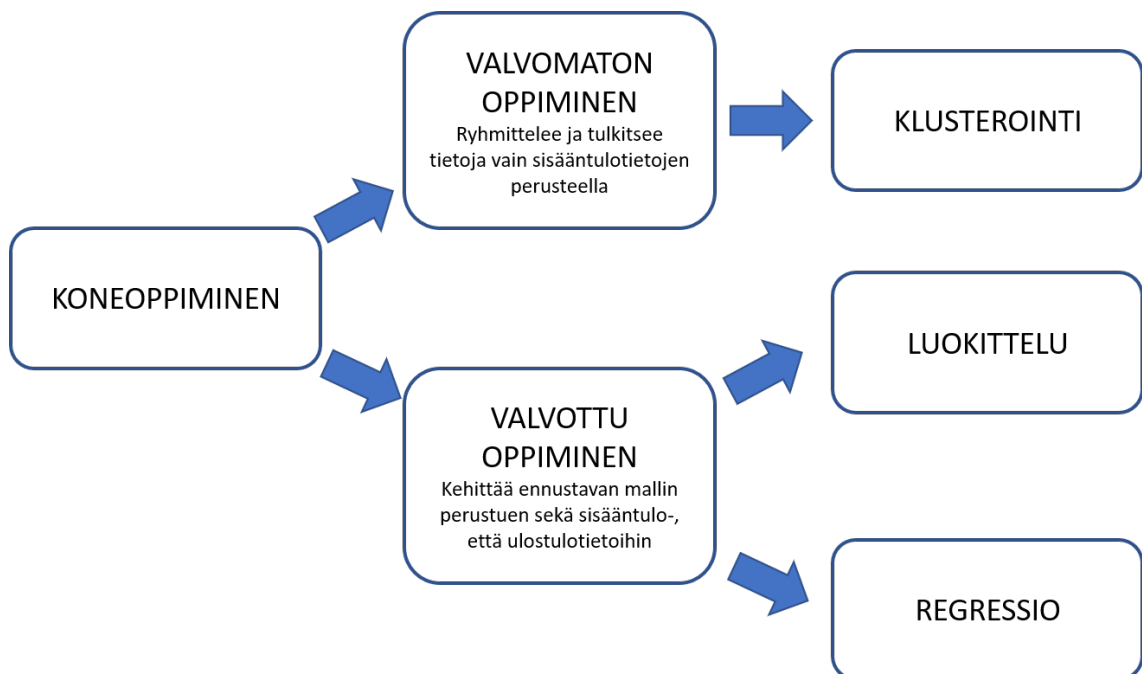


Kuva 2.2. Tekoäly oppii rakennuksen aiemmasta käyttäytymisestä kerätyn datan perusteella ennakoimaan tulevaa käyttäytymistä.

Toisaalta meillä voi olla käytössämme tietokoneohjelma, joka on ohjelmoitu oppimaan sille syötetyn datan perusteella. Kuvassa 2.2 on esitetty kuinka ohjelma saa kokemusperäistä tietoa ulkolämpötiloista eri ajanhetkillä sekä rakennuksen lämmitystehon tarpeesta kyseisillä ajanhetkillä. Tämän datan perusteella ohjelma oppii kuinka rakennus on käyttäytynyt eri ajanhetkillä niitä vastaavissa ulkolämpötiloissa. Toisin sanoen meidän ei tarvitse selvittää niin paljon lähtötietoja rakennuksesta, luoda matemaattista funktiota kuvaamaan fysikaalista toimintaa ja ohjelmoida sitä, vaan koneoppimiseen kykenevä ohjelmamme ikäänkuin tekee tämän meidän puolestamme. Toisaalta, että ohjelmamme voi oppia kuinka rakennuksen lämmitystehon tarve on riippuvainen ulkolämpötilasta ja

ajasta, tarvitsemme kokemusperäistä mitattua tietoa eli dataa ulkolämpötiloista ja lämmitystehon tarpeesta eri aikoina. Jos ohjelmamme oppii nyt mallintamaan lämmitystehon tarvetta (toiminta T) sille annetun datan avulla (kokemukset E) siten, että jatkossa sen mallintama lämmitystehon tarve vastaa toteutuneen tehon tarvetta ainakin jossain määrin (mittaus P), täyttää se Mitchellin antaman määritelmän koneoppimiselle. Luultavasti Rakennuksen lämmitystehon tarve on riippuvainen muistakin muuttujista kuin ulkolämpötilasta ja ajasta. Voimmekin antaa ohjelmallemme enemmän mitattua tietoa niistä seikoista joiden oletamme vaikuttavan lämmitystehon tarpeeseen ja tarkastella (mittaus P) oppiiko ohjelmamme mallintamaan tehon tarvetta entistä paremmin.

2.2 Valvottua ja valvomattonta



Kuva 2.3. Koneoppimisen jaottelu valvottuun ja valvomattomaan oppimiseen. [18]

Yleinen tapa luokitella koneoppimisen oppimismenetelmiä on tarkastella niiden tarvitseman valvonnan määrää [10]. Puhutaan valvotusta (supervised) ja valvomattomasta (unsupervised) oppimisesta. Karkea jaottelu näihin menetelmiin on esitetty kuvassa 2.3.

Valvotussa oppimisessä algoritmille syötetty data sisältää koulutuksessa käytettävien ominaisuuksien (features) tai ennustajien (predictors) lisäksi näiden ominaisuuksien perusteella toteutuneet ratkaisut (labels). Edellä kuvattu esimerkki rakennuksen tulevan energiankulutuksen mallintamisesta on luonteeltaan valvottua oppimista. Kyseessä on regressiotehtävä, jossa algoritmille syötetään tietoa energiankulutukseen vaikuttavista ominaisuuksista, kuten ulkoilman olosuhteista ja rakennuksen käyttöasteesta. Jotta algoritmi oppisi ennustamaan tulevaa energiankulutusta näiden ominaisuuksien perusteella, on sille tarvinnut antaa oppimateriaaliksi lukuisia esimerkkejä toteutuneesta energiankulutuksessa erilaisilla ominaisuuksien arvoilla. Näin tekoälyn on mahdollista oppia tunnis-

tamaan kuinka rakennus käyttäytyy erilaisissa tilanteissa ja olosuhteissa.

Valvomattomassa oppimisessa algoritmille ei tarjota ominaisuuksien perusteella toteutuneita ratkaisuja valmiiksi, vaan algoritmi pyrkii itsenäisesti löytämään vastaukset mitä tietyt ominaisuudet tarkoittavat. Monet ryhmittely (clustering) tehtävät voivat olla luen- teeltaan valvomattomia. Esimerkiksi rakennuksen käyttäjiä voidaan ryhmitellä erilaisiin käyttäjäryhmiin heidän ominaisuuksiensa ja käyttäytymisensä perusteella. Käyttäjistä ja heidän käyttötottumuksistaan kerätty data syötetään ryhmittelyalgoritmil- le, joka tunnistaa käyttäjissä ja heidän käyttötottumuksissaan yhteneväisiä piirteitä ja oppii luokittelemaan käyttäjiä näiden piirteiden perusteella. Algoritmi voi esimerkiksi huomata, että 90 % ra- kennuksen liikuntasalia käyttävistä miehistä haluaa salin lämpötilan olevan alle 18 °C.

2.3 Kertaluenteisesta jatkuvaan

Koneoppimisen menetelmiä, kuten oppimista yleensäkin, yhdistää niiden tarve tiedolle eli datalle. Algoritmit tarvitsevat käyttöönsä dataa ilmiöstä, jonka perusteella ne pyrkivät op- pimaan mistä ilmiössä on kyse. Tarkoitukseen sopivan algoritmin valinnassa kannattaa tarkastella myös algoritmin kykyä käsitellä dataa jatkuvana virtana. Offline-oppimisessa tekoäly tulee kouluttaa kaikella saatavilla olevalla datalla, jonka jälkeen sitä voidaan pitää kaiken oppineena. Jos halutaan, että tämän kaltainen tekoäly päivittää oppimaansa tulee käytössä oleva järjestelmä pysäyttää, kouluttaa uudelleen päivitetyllä datalla ja käynnis- tää uudelleen. Tämä ei välttämättä tuota ongelmia, mutta on hyvä pitää mielessä, että suurten datamäärien käsitteleminen vaatii laskentatehoa ja aikaa. Tällöin uudelleen kou- luttaminen voi tapahtua vain tietyin ajoin, esimerkiksi kerran päivässä, riippuen käytettä- vän datan määrästä. [10]

Online-oppimisessa tekoälyjärjestelmä oppii vähitellen syöttämällä sille uutta tietoa me- neillään olevasta ilmiöstä. Kun järjestelmä voi oppia ns. lennosta, on jokainen oppimista- pahtuma nopea eikä vaadi niin paljon laskentatehoa kuin suurten datamäärien käsittely. Online-oppimisessa suuria datamääriä ei tarvitse pitää tallessa, jolloin säästyy muistiti- laa. Tämä voi kuitenkin muodostua myös ongelmaksi jos datassa alkaa esiintymään vir- heitä eikä aikaisempaa dataa ole enää saatavilla, jolloin tekoälyjärjestelmä saattaa oppia tulkitsemaan ilmiötä väärin. [10]

2.4 Ilmiöpohjaista ja malleihin perustuvaa

Koneoppimisessa on usein kyse tarpeesta tehdä ennusteita. Tämä tarkoittaa, että järjes- telmän tulee kyetä yleistämään oppimiseen käytettävästä datasta, eli harjoitusdatasta, tehtävät havainnot koskemaan uusia, ennen näkemättömiä tilanteita. Tämän kaltainen yleistäminen voi perustua joko ilmiöpohjaiseen tai valmiisiin malleihin [10].

Ilmiöpohjaisessa oppimisessa on kyse yksinkertaisesti siitä, että samankaltaisten ilmiöi-

den oletetaan johtavan samankaltaiseen lopputulokseen. Käytännössä oppimisessa käytetään tällöin jonkinlaista samankaltaisuutta mittaavaa tunnuslukua.

Malleihin perustuvassa oppimisessä kyse on nimensä mukaisesti jonkinlaisen mallin käytöstä. Käytetään esimerkkinä rakennuksen lämmitysenergian tarpeen mallintamista. Voidaan esimerkiksi tehdä oletus, että lämmitysenergian tarve olisi lineaarisesti riippuvainen ulkolämpötilasta. Tehdään siis päätös mallintaa lämmitysenergian tarvetta lineaarisella funktiolla ulkolämpötilan suhteen

$$\hat{y}_i = \theta_0 + \theta_1 x_i, \quad (2.1)$$

missä \hat{y}_i on ennustettava lämmitysenergian tarve tietyllä ulkolämpötilalla x_i . Parametrit θ_0 ja θ_1 ovat malliparametrit. Kyse on siis yksinkertaisesti sellaisten malliparametrien löytämisestä, että funktio mallintaa mahdollisimman hyvin lämmitysenergian tarvetta. Tämän kaltaisessa lineaarisessa regressiossa on tyypillistä asettaa kustannusfunktio, joka mittaa lineaarisen mallin ennustamien ja harjoitusdatan lukemien välisiä etäisyyksiä. Käytettävän koneoppimisalgoritmin tehtävänä on nyt etsiä sellaiset malliparametrit, jotka minimoivat kyseisen kustannusfunktion.

2.5 Koneoppiminen ei ole ongelmantonta

Jotta koneoppimista voidaan hyödyntää, tarvitaan sopiva algoritmi ja koulutukseen sopivaa dataa. Haasteet liittyvätkin juuri näihin kahteen vaiheeseen. Voidaan valita huono, tarkoitukseen sopimaton algoritmi tai koulutuksessa käytettävä data ei ole riittävän hyvälaatuista.

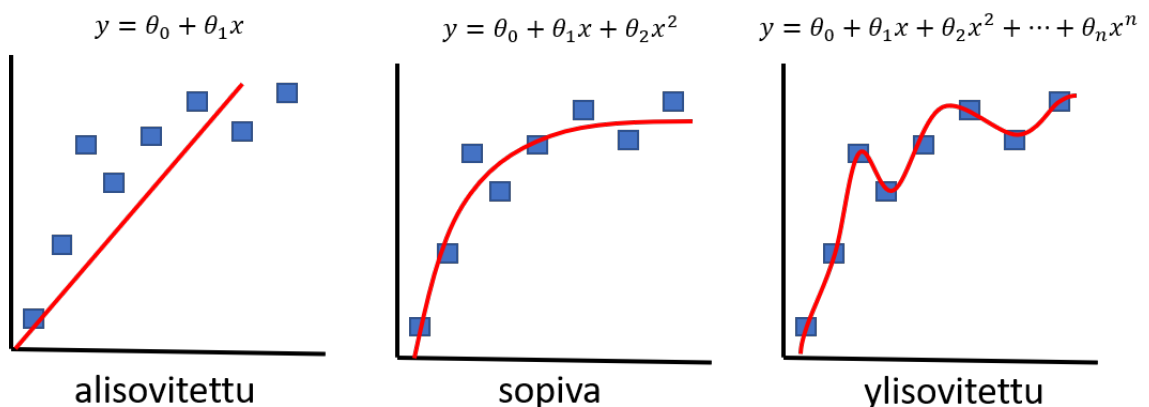
Yleisesti ottaen voidaan todeta, että toistaiseksi koneoppiminen tarvitsee vielä huomattavan määrän dataa, jotta oppiminen voi tapahtua riittävän luotettavasti [10]. Yksinkertaisissakin ongelmissa voidaan puhua tuhansista koulutukseen käytettävistä esimerkeistä ja monimutkaisissa ongelmissa jopa miljoonista esimerkeistä. Käytettävissä oleva harjoitusdata ja sen määrä ovat siis erittäin merkittävässä asemassa koulutuksen onnistumisen kannalta. Esimerkiksi Banko ja Brill [2] ovat osoittaneet, että hyvin erilaiset koneoppimisalgoritmit suoriutuivat luonnollisen kielen täsmentämiseen liittyvissä tehtävissä lähes yhtä hyvin, kunhan niiden kouluttamisessa käytettiin riittävän paljon dataa. Myös Peter Norvig ja muut ovat artikkelissaan [12] todenneet, että usein data ratkaisee enemmän kuin algoritmi. Datan määrän lisäksi tulee kuitenkin kiinnittää huomiota datan yleistettävyyteen. Toisin sanoen siihen kuinka hyvin data kuvaa esimerkiksi erilaisia tilanteita. Esimerkiksi edellä käsitellyissä, rakennuksen energiantarpeen mallintamiseen liittyvissä tehtävissä on tärkeää, että harjoitusdata kuvaa mahdollisimman kattavasti erilaisia olosuhteita. Algoritmi ei voi oppia millä tavalla rakennus käyttäytyy esimerkiksi hyvin kylmällä säällä, jos harjoitusdata ei sisällä esimerkkejä kuin lämpimän sään käyttäytymisestä.

Harjoitusdata saattaa sisältää myös mittauskohinaa, osittain vaillinnaista dataa tai täysin

virheellistä dataa. Etenkin pienillä datan määrillä kohinan merkitys mittauskohinan merkitys kasvaa. Monesti harjoitusdatan esikäsittelyyn menee paljon aikaa, ennen kuin se on valmista käytettäväksi koulutukseen. Esimerkiksi selkeästi virheellinen data tulee joko poistaa tai pyrkiä korjaamaan manuaalisesti. Mikäli datan keräämisessä on ollut katkos jonkun koulutuksessa käytettävän ominaisuuden osalta, tulee miettiä jätetäänkö huomiotta puuttuvat kohdat datasta, koulutetaanko malli kokonaan ilman kyseistä ominaisuutta vai pyritäänkö kenties täyttämään puuttuvat kohdat datasta esimerkiksi lineaarisella interpolaatiolla. [10]

Datan määrän ja laadun lisäksi myös koulutukseen käytettävien ominaisuuksien valinnalla on merkitystä. Onnistuneen lopputuloksen kannalta on tärkeää, että koulutukseen valitaan riittävästi mallinnettavan ominaisuuden kannalta merkittäviä ominaisuuksia, mutta vähän merkityksettömiä ominaisuuksia. Haasteena onkin ymmärtää, mitkä ominaisuuden lopulta ovat merkityksellisiä ja mitkä vähemmän merkityksellisiä [10]. Jos mallintamisessa halutaan ottaa huomioon esimerkiksi rakennuksen käyttöaste ja tiedetään, että rakennuksen käyttö on hyvin säännöllistä, voi riittää pelkästään kellonajan käyttäminen ominaisuutena. Tällöin ei tarvita mitään erillistä ominaisuutta, kuten läsnäolotietoa, kuvaamaan rakennuksen käyttöastetta.

Datan laadun ja ominaisuuksien valinnan lisäksi haasteeksi saattaa muodostua mallin yli- tai alisovittaminen. Mikäli käytettävissä oleva data on määrältään vähäinen ja sisältää paljon mittausvirheitä, on mahdollista, että oppimisessa käytettävä algoritmi kuvittelee löytävänsä säännönmukaisuuksia mittausvirheistä. Tämä saattaa johtaa mallin ylisovittamiseen. Malli näyttää tällöin toimivan hienosti harjoitusdatan mallintamisessa, mutta se saattaa olla täysin kelvoton uusien tapahtumien ennakoinnissa. Alisovittamisessa kyse on päinvastaisesta. Algoritmillä ei ole välttämättä riittävästi vapauksia mallin luomiseksi, jolloin mallista tulee liian yksinkertainen. [10]



Kuva 2.4. Hyvä malli löytää datasta luontaiset riippuvuussuhteet, mutta ei häiriinny liikaa datassa esiintyvistä kohinasta.

Ajatellaan esimerkiksi aiemmin käsiteltyä suoraa. Suoralla on kaksi parametriä: Vakiotermi θ_0 ja kulmakerroin θ_1 . Jos koneoppimisalgoritmillä on tavoitteena etsiä mahdollisimman hyvin ilmiötä kuvaava suora, on sillä nyt käytettävissä kaksi vapausastetta. Jos toi-

nen parametreista lukitaan johonkin tiettyyn arvoon, vähentää se algoritmin vapausasteita ja yksinkertaistaa näin mallin rakennetta. Toisaalta se samalla myös vaikeuttaa mallin sovittamista dataan. Sama voidaan ajatella toisin päin. Lisäämällä algoritmile vapausasteita, saattaa mallin sovittaminen harjoitusdataan helpottua, mutta samalla mallista saattaa tulla liian monimutkainen. Loppujen lopuksi kyse on siitä, että onnistutaan mallintamaan ilmiötä riittävän tarkasti, mutta samalla yksinkertaisesti. Kuvassa 2.4 on havainnollistettu näitä erilaisia vaihtoehtoja.

2.6 Opittua tulee testata

Ainoa tapa selvittää kuinka hyvin valittu algoritmi ja sen oppima malli toimivat tarkasteltavan ilmiön mallintamisessa on kokeilla sitä. Tähän tarvitaan testidataa, joka on algoritmile entuudestaan tuntematonta dataa. Kuvassa 2.4 nähtiin esimerkki ylisovitusta mallista. Tarkastelemalla mallin toimivuutta ainoastaan sen kouluttamisessa käytetyllä harjoitusdatalla saattaa malli näyttää toimivan todella hyvin, vaikka se todellisuudessa on ylisovitettu. Kouluttamiseen käytettävän datan lisäksi tarvitaan siis aina testidataa, jota voidaan käyttää mallin toimivuuden todentamiseen. Tyypillisesti käytettävä data jaetaan siten, että vain osaa siitä käytetään kouluttamiseen, jolloin osa datasta jää mallille "tuntemattomaksi" ja näin ollen sitä voidaan käyttää vertailudatana mallin antamille tuloksille. Tyypillinen suhde jakaa data harjoitus- ja testidataksi on esimerkiksi 80%/20% [10].

3 PERUSTESTEISTA KOHTI MONIULOTTEISTA NORMAALIJAKAUMAA

Tämä luku johdattaa lukijan todennäköisyyksiin liittyvien peruskäsitteiden äärelle, mikä on olennaista koneoppimisen syvällisemmän ymmärryksen saavuttamiseksi. Aluksi luvussa käsitellään satunnaismuuttujan käsitettä sekä tiettyjä todennäköisyysjakaumiin liittyviä perusteita kuten odotusarvoa ja varianssia. Jakaumista luvussa käsitellään ainoastaan Gaussin normaalijakaumaa. Erilaisia todennäköisyysjakaumia on lukuisia muitakin, mutta niiden käsittely ei ole oleellista tämän työn ymmärtämisen kannalta. Lopuksi todennäköisyyksien ja jakaumien käsittelyä laajennetaan yhdestä ulottuvuudesta useampaan ulottuvuuteen siinä määrin kuin sen katsotaan olevan tarpeen työn ymmärtämiseksi.

3.1 Johdatusta todennäköisyyksiin

Yksi tärkeimmistä todennäköisyyksiin liittyvistä huomioista on kyky mitata ja käsitellä epävarmuutta numeraalisesti. Tämän päivän modernien tekoälymenetelmien yksi suurimmista vahvuuksista onkin niiden kyky käsitellä epävarmuutta ja monissa nykyisissä tekoälymentelmissä kyky epävarmuuden hallintaan perustuu todennäköisyyksien hyödyntämiseen. [8] Lienee hyvä pitää myös mielessä, että aina ilmiön todennäköisyyden ollessa $0 < p(X) < 1$, liittyy siihen jonkinlainen epävarmuus, joka saattaa realisoitua, vaikka todennäköisyys sille äärimmäisen pieni olisikin.

Todennäköisyyksistä ja niihin liittyvistä perussäännöistä on kirjoitettu lukuisia teoksia ja monissa koneoppimiseen keskittyvissä kirjoissakin käsitellään aluksi todennäköisyyksiä. Esimerkiksi Murphyn [20] kirjassa on käyty kattavasti ja syvällisesti läpi niin todennäköisyyksien perusteita kuin eri koneoppimisen menetelmiä. Kyseinen kirja on ollut myös pääasiallisena lähteenä tässä työssä esiteltujen todennäköisyyksien perusasioiden esitelyssä.

3.1.1 Diskreetit satunnaismuuttujat

Merkinnällä $p(A)$ kuvataan tapahtuman A todennäköisyyttä. Tapahtuma A voi olla esimerkiksi looginen kuvaus "huomenna sataa vettä". Todennäköisyydeltä edellytetään, että $0 \leq p(A) \leq 1$, missä $p(A) = 0$ tarkoittaa, että tapahtuma A ei toteudu. Mikäli tapah-

tuma A tapahtuu varmasti, niin $p(A) = 1$. Jos halutaan kuvata tapahtuman A vasta-tapahtumaa kuten todennäköisyyttä, että "huomenna ei sada vettä", voidaan määritellä $p(\bar{A}) = 1 - p(A)$. Määritellään vielä, että $p(A) = 1$ tarkoittaa, että tapahtuma on tosi ja $p(A) = 0$, että tapahtuma on epätosi. [20]

Loogisten tapahtumien lisäksi todennäköisyydet voidaan laajentaa koskemaan diskreettejä tapahtumia määrittelemällä satunnaismuuttuja X . Käytännössä satunnaismuuttuja X kuvaa jonkin satunnaisilmiön määräämää reaali lukua. Nyt satunnaismuuttuja X voisi kuvata esimerkiksi luokassa olevien oppilaiden lukumäärää x . Kuvataan todennäköisyyttä, että luokassa on 20 oppilasta ($X = 20$) kirjoittamalla $p(X = 20)$ tai lyhyemmin $p(20)$. Funktiota $p(\cdot)$ kutsutaan diskreetissä tapauksessa todennäköisyyden massafunktioksi. Funktiolle on ominaista, että $0 \leq p(x) \leq 1$ ja $\sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) = 1$. [20]

3.1.2 Todennäköisyyksien perussääntöjä

Olkoon A ja B nyt kaksi tapahtumaa ja määritellään todennäköisyydeksi A tai B

$$p(A \cup B) = p(A) + p(B) - p(A \cap B) \quad (3.1)$$

Jos tapahtumat A ja B ovat toisensa poissulkevia, voidaan edellinen kirjoittaa muotoon

$$p(A \cup B) = p(A) + p(B) \quad (3.2)$$

Toisaalta tapahtumien A ja B yhdistetyksi todennäköisyydeksi voidaan määritellä

$$p(A, B) = p(A \cap B) = p(A|B)p(B) \quad (3.3)$$

missä $p(A|B)$ tarkoittaa ehdollista todennäköisyyttä, eli mikä on tapahtuman A todennäköisyys ehdolla, että tapahtuma B toteutuu. Määritellään ehdollinen todennäköisyys seuraavasti

$$p(A|B) = \frac{p(A, B)}{p(B)}, p(B) > 0 \quad (3.4)$$

Jos tapahtumat A ja B ovat toisistaan riippumattomat, voidaan yhtälö (3.3) kirjoittaa muodossa $p(A, B) = p(A)p(B)$, mitä kutsutaan usein myös tulosäännöksi.

Kahden tapahtuman yhdistetystä jakaumasta $p(A, B)$ (joint distribution) saamme tapahtuman A *marginaali-* tai *reunajakaumaksi* (marginal distribution)

$$p(A) = \sum_b p(A, B) = \sum_b p(A|B = b)p(B = b) \quad (3.5)$$

Yhtälössä (3.5) käydään läpi kaikki mahdolliset tapahtuman B tilat. Samalla tavalla voimme määritellä myös tapahtuman B reunajakauman $p(B)$. Yhtälöä (3.5) kutsutaan myös kokonaistodennäköisyyden säännöksi tai summasäännöksi.

Soveltamalla tulosääntöä useampaan kertaan, saadaan todennäköisyyksien ketjusääntö

$$p(X_{1:D}) = p(X_1)p(X_2|X_1)p(X_3|X_2, X_1)p(X_4|X_3, X_2, X_1) \cdots p(X_D|X_{1:d-1}) \quad (3.6)$$

missä $1 : D$ ilmaisee joukkoa $\{1, 2, \dots, D\}$.

3.1.3 Bayesin teoreema

Yhdistämällä ehdollisen todennäköisyyden määritelmä (3.4) tulo- ja summasääntöihin saadaan englantilaisen matemaatikon Thomas Bayesin kuuluisa Bayesin sääntö, joka julkaistiin vasta hänen kuolemansa jälkeen vuonna 1763 teoksessa [3], josta tuli perusta tilastollisille menetelmille, joita nykyään kutsutaan Bayesilaiseksi tilastotieteeksi [9].

$$p(X|Y) = \frac{p(X, Y)}{p(Y)} = \frac{p(Y|X)p(X)}{p(Y)} \quad (3.7)$$

Bayesin teoreeman liittyvät vahvasti termit *priori* ja *posteriori*. Priorilla viitataan lähtöoletukseen esimerkiksi todennäköisyysjakaumasta, ennen kuin on saatu todennäköisyyksiä tarkentavia lisähavaintoja. Kun tarkasteltavasta ilmiöstä on saatu havaintoja joiden avulla tapahtumien todennäköisyyksien jakaumaa voidaan tarkentaa, puhutaan posteriorijakaumasta.

Kaavassa (3.9) termiä $p(X|Y)$ kutsutaan posterioritodennäköisyydeksi, eli tapahtuman X todennäköisyydeksi kun on saatu ilmiötä tarkentavia havaintoja A . $p(Y|X)$ on tapahtuman Y uskottavuus, eli Y :n todennäköisyys ehdolla X . Reunatodennäköisyys $p(Y)$ ei ole riippuvainen tapahtumasta x , vaan se kuvaa tehtyjen havaintojen kokonaistodennäköisyyttä.

$$\text{posteriori} = \frac{\text{uskottavuus} \times \text{priori}}{\text{reunatodennäköisyys}} \quad (3.8)$$

Käytännön sovelluksissa riittää usein tieto, että

$$p(X|Y) \propto p(Y|X)p(X), \quad (3.9)$$

jolloin todennäköisyyden $p(Y)$ arvioiminen ei ole välttämätöntä.

3.1.4 Jatkuvat satunnaismuuttujat

Satunnaismuuttujat voivat olla myös jatkuvia. Esimerkiksi Jaynes on esittänyt kirjassaan [16] selkeästi, kuinka todennäköisyyden käsite laajennetaan koskemaan myös jatkuvia suureita.

Oletetaan, että X on jokin epävarma jatkuva suure. Tarkastellaan todennäköisyyttä sille, että X :n arvo osuu tietylle alueelle $a \leq X \leq b$. Määritellään tapahtumat $A = (X \leq a)$, $B = (X \leq b)$ ja $W = (a < X \leq b)$. Nyt $B = A \cup W$ ja koska A ja W ovat toisensa poissulkevia tapahtumia, saadaan yhtälön (3.2) perustella

$$p(B) = p(A) + p(W) \quad (3.10)$$

ja siten

$$p(W) = p(B) - p(A). \quad (3.11)$$

Määritellään nyt X :n kertymäfunktiksi (cdf)

$$F(q) \triangleq p(X \leq q) \quad (3.12)$$

joka on selvästi monotonisesti kasvava funktio. Tätä on havainnollistettu Kuvassa 3.1a, missä nähdään normaalijakauman kertymäfunktion kuvaajia eri varianssin (ks. kpl 3.1.6) arvoilla.

Käyttämällä nyt hyväksi kertymäfunktioita $F(q)$, voidaan kirjoittaa

$$p(a < X \leq b) = F(b) - F(a) \quad (3.13)$$

Olettaen, että F on derivoituva, saadaan määriteltyä tiheysfunktio (pdf)

$$f(x) = \frac{d}{dx} F(x) \quad (3.14)$$

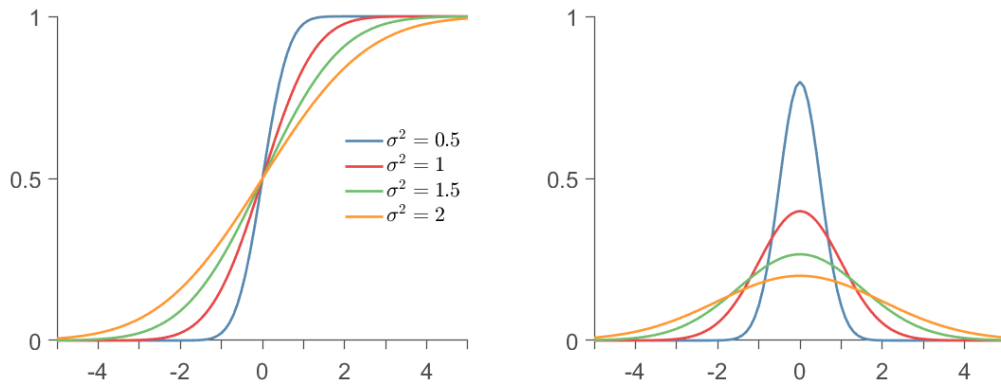
Kuvassa 3.1b nähdään esimerkkejä normaalijakauman tiheysfunktion kuvaajista eri varianssin arvoilla. Tämän tiheysfunktion avulla saadaan nyt laskettua jatkuvan muuttujan todennäköisyys jollain äärellisellä välillä seuraavasti

$$p(a < X \leq b) = \int_a^b f(x) dx \quad (3.15)$$

Välin, jolta todennäköisyyttä lasketaan pienentyessä aina vain pienemmäksi ja pienem-

mäksi, voidaan kirjoittaa

$$p(x \leq X \leq x + dx) \approx p(x)dx \quad (3.16)$$



(a) Kertymäfunktion kuvaaja eri varianssin arvoilla. **(b)** Tiheysfunktion kuvaaja eri varianssin arvoilla.

Kuva 3.1. Kertymäfunktion ja tiheysfunktion kuvaaja odotusarvon ollessa 0 ja varianssin vaihdellessa.

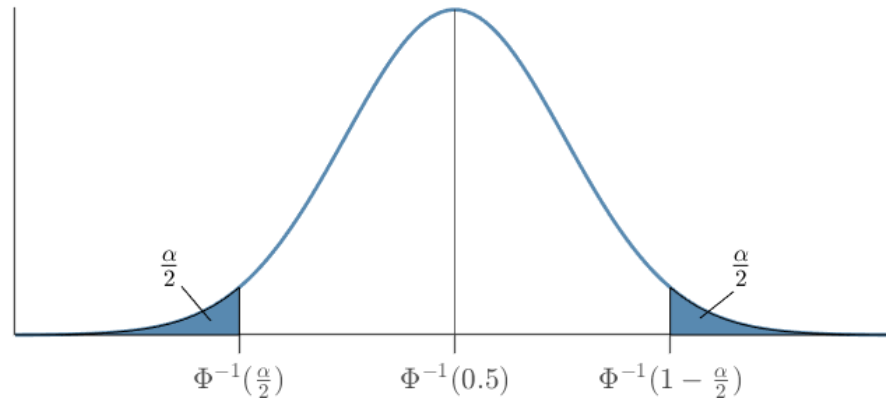
3.1.5 Kvantiilit

Kertymäfunktion ollessa monotonisesti kasvava, on sillä olemassa käänteisfunktio F^{-1} . Mikäli F on X :n kertymäfunktio, on $F^{-1}(\alpha)$ piste x_α siten, että $P(X \leq x_\alpha) = \alpha$. Pistettä x_α kutsutaan F :n α kvantiiliksi. Jakauman mediaaniksi kutsutaan pistettä $F^{-1}(0.5)$, jolloin puolet todennäköisyysmassasta sijoittuu sen vasemmalle ja puolet oikealle puolelle. [20]

Kertymäfunktion käänteisfunktioita voidaan käyttää myös jakauman häntäalueiden todennäköisyyksien laskemiseen. Olkoon Φ normaalijakauman $\mathcal{N}(0, 1)$ kertymäfunktio. Tällöin pisteen $\Phi^{-1}(\alpha/2)$ vasemmalle puolen jäävä alue sisältää $\alpha/2$ suuruisen osuuden todennäköisyysmassasta. Vastaavan osuuden todennäköisyysmassasta kattaa tällöin myös pisteen $\Phi^{-1}(1 - \alpha/2)$ oikealle puolelle jäävä alue. Tällöin väli $(\Phi^{-1}(\alpha/2), \Phi^{-1}(1 - \alpha/2))$ kattaa $1 - \alpha$ suuruisen osuuden koko alueen keskeltä. Esimerkiksi asettamalla $\alpha = 0.5$ kattaa kyseinen alue 95 % jakauman keskeltä. [20]

$$(\Phi^{-1}(0.025), \Phi^{-1}(0.975)) = (-1.96, 1.96) \quad (3.17)$$

Todennäköisyysjakauman ollessa $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, muodostuu 95 % luottamusväliksi $(\mu - 1.96\sigma, \mu + 1.96\sigma)$. Usein 95 % luottamusväliksi pyöristetään pisteiden $\mu \pm 2\sigma$ rajaama alue.



Kuva 3.2. Normaalijakauman $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ häntätodennäköisyydet ja niiden väliin jäävä alue sekä mediaani.

3.1.6 Odotusarvo ja varianssi

Ehkä tunnetuin todennäköisyysjakaumiin liittyvä ominaisuus on niiden odotusarvo μ . Diskreeteille satunnaismuuttujille se on määritelty ehdolla

$$\mathbb{E}[X] \triangleq \sum_{x \in \mathcal{X}} xp(x), \quad (3.18)$$

ja jatkuville satunnaismuuttujille ehdolla

$$\mathbb{E}[X] \triangleq \int_{\mathcal{X}} xp(x)dx. \quad (3.19)$$

Jos integraali ei ole äärellinen, odotusarvoa ei ole määritelty.

Varianssi σ^2 kuvaa jakauma "leveyttä" ja on määritelty

$$\begin{aligned} \text{var}[X] &\triangleq \mathbb{E}(X - \mu)^2 \\ &= \int (x - \mu)^2 p(x) dx \\ &= \int x^2 p(x) dx + \mu^2 \int p(x) dx - 2\mu \int xp(x) dx \\ &= \mathbb{E}[X^2] - \mu^2, \end{aligned} \quad (3.20)$$

mistä saadaan hyödyllinen tulos

$$\mathbb{E}[X^2] = \mu^2 + \sigma^2. \quad (3.21)$$

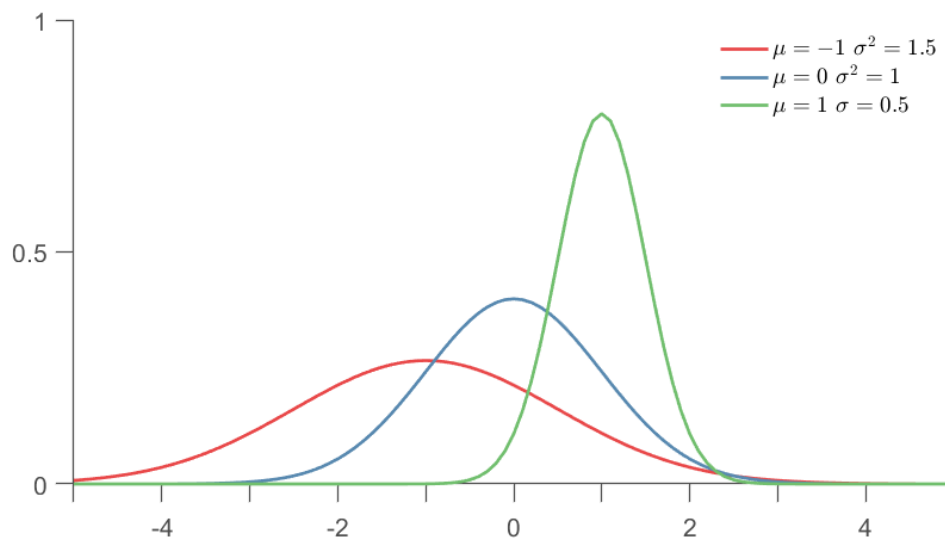
Jakauman keskihajonta σ on myös monesti käyttökelpoinen, koska sillä on sama yksikkö

kuin satunnaismuuttujalla. Keskihajonta määritellään seuraavasti:

$$\text{std}[X] \triangleq \sqrt{\text{var}[X]}. \quad (3.22)$$

3.1.7 Gaussin jakauma tai normaalijakauma

Koneoppimisessa yleisimmin käytetty tilastollinen jakauma on Gaussin jakauma eli normaalijakauma [20]. Tähän on useampia syitä, joita esimerkiksi Jaynes [16] on kuvannut teoksessaan. Ensinnäkin normaalijakaumalla on kaksi parametria, odotusarvo sekä varianssi, jotka kuvaavat jakauman perusominaisuuksia ja ovat helposti tulkittavissa. Toiseksi, keskeisen raja-arvolauseen mukaan keskiarvo riittävän suuresta määrästä toisistaan riippumattomia satunnaismuuttujia on tietyn edellytyksin likipitään normaalisti jakautunut riippumatta kunkin satunnaismuuttujan omasta jakaumasta [24]. Tämä tekee normaalijakaumasta erityisen hyvän valinnan esimerkiksi mittauksissa esiintyvien virheiden mallintamisessa. Kolmanneksi, normaalijakauma tekee vähiten oletuksia joihin liittyy jokin tietty odotusarvo ja varianssi, jolloin se on monesti hyvä oletusvalinta. Lopuksi sillä on kohtuullisen yksinkertainen matemaattinen muoto, jonka tulokset ovat helposti sovellettavissa tehokkaisiin menetelmiin.



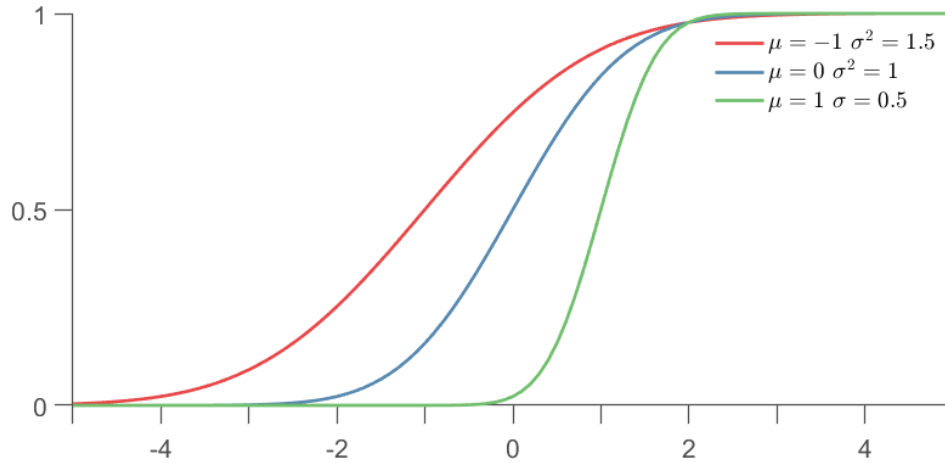
Kuva 3.3. Normaalijakauman tiheysfunktioiden kuvaajia eri odotusarvolla ja varianssilla.

Normaalijakauman määrittelevä tiheysfunktio on

$$f(x|\mu, \sigma^2) \triangleq \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad (3.23)$$

missä $\mu = \mathbb{E}[X]$ on odotusarvo ja $\sigma^2 = \text{var}[X]$ on varianssi. Normalisointitermin $\sqrt{2\pi\sigma^2}$ tarkoituksena on varmistaa, että funktio integroituu arvoon 1. Esitysmuoto $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ tarkoittaa, että $p(X = x) = f(x|\mu, \sigma^2)$. Jos $X \sim \mathcal{N}(0, 1)$ sanotaan, että X on standardi-

normaalijakautunut. Kuvassa 3.3 on esitetty tällaisen standardinormaalijakautuneen satunnaismuuttujan tiheysfunktion kuvaaja. Kuvasta nähdään myös minkälainen vaikutus odotusarvon ja varianssin muutoksella on kuvaajaan. Odotusarvo siirtää kuvaajan huipua eri kohtaan, varianssin muutoksen vaikuttaessa kuvaajan leveyteen.



Kuva 3.4. Normaalijakauman kertymäfunktioiden kuvaajia eri odotusarvolla ja varianssilla.

Normaalijakauman kertymäfunktio on määritelty seuraavasti

$$\Phi \triangleq \int_{-\infty}^x f(z|\mu, \sigma^2) dz. \quad (3.24)$$

Kuvassa 3.4 on esitetty esimerkkejä kertymäfunktion kuvaajista, kun jakauman odotusarvo ja varianssi vaihtelevat.

3.2 Yhdestä useampaan ulottuvuuteen

Gaussin prosessin toimintaperiaatteiden ja työn ymmärtämisen kannalta on syytä laajentaa todennäköisyysjakaumiin liittyviä käsitteitä koskemaan useampaa kuin yhtä ulottuvuutta. Tämän luvun tarkoituksena on tarkastella työn kannalta tarpeelliseksi katsottuja, todennäköisyyksiin ja jakaumiin liittyviä käsitteitä useamman ulottuvuuden näkökulmasta. Tässä tarkastelussa on ollut huomattavasti apua etenkin Izenmanin [15] oivasta kirjasta.

3.2.1 Satunnaisvektorit

Olkoot X_1, X_2, \dots, X_n satunnaismuuttujia. Ne voidaan nyt esittää n -ulotteisena sarakevektorina

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Kutsutaan vektoria 3.25 n -ulotteiseksi *satunnaisvektoriksi*. Nyt satunnaisvektorin \mathbf{X} yhdistetty kertymäfunktio on

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}) &= F(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &= p(X_1 \leq x_1, X_2 \leq x_2, \dots, X_n \leq x_n) \\ &= p(\mathbf{X} \leq \mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.26)$$

missä \mathbf{x} on mikä tahansa reaalityyppisiä sisältävä vektori $(x_1, x_2, \dots, x_n)^T$. Jos $F(\mathbf{x})$ on absoluuttisesti jatkuva, voidaan satunnaisvektorin \mathbf{X} tiheysfunktio kirjoittaa

$$f(\mathbf{X}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{\partial^n F(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1 \partial x_2 \dots \partial x_n} \quad (3.27)$$

Tällöin kertymäfunktiolla pätee myös

$$F(\mathbf{X}) = \int_{-\infty}^{x_n} \dots \int_{-\infty}^{x_1} f(u_1, u_2, \dots, u_n) du_1, du_2, \dots, du_n \quad (3.28)$$

Otetaan nyt osajoukko X_1, X_2, \dots, X_k ($k < n$) vektorista \mathbf{X} . Tämän osajoukon marginaaliksi tai *reunajakauma* on

$$\begin{aligned} F(x_1, x_2, \dots, x_k) &= F(x_1, x_2, \dots, x_k, \infty, \dots, \infty) \\ &= p(X_1 \leq x_1, X_2 \leq x_2, \dots, X_k \leq x_k, X_{k+1} \leq \infty, \dots, X_n \leq \infty) \end{aligned} \quad (3.29)$$

ja marginaalitiheys

$$f(x_1, x_2, \dots, x_k) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(u_1, u_2, \dots, u_n) du_{k+1}, \dots, du_n \quad (3.30)$$

Esimerkiksi jos $n = 2$, on yhdistetty tiheysfunktio tällöin $f(x_1, x_2)$ ja marginaalitiheydet

puolestaan

$$f(x_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2) dx_2 \quad (3.31)$$

$$f(x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2) dx_1 \quad (3.32)$$

Samaan tapaan kuin yksiulotteisessa tapauksessa, mikäli satunnaisvektori on tilastollisesti riippumaton, voidaan yhdistetty jakauma osittaa sen marginaalien tuloksi

$$F(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n F_i(x_i), \quad (3.33)$$

missä $F_i(x_i)$ on satunnaismuuttujan X_i marginaalijakauma. Tällöin pätee myös tiheysfunktiolle

$$f(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n f_i(x_i) \quad (3.34)$$

kaikilla reaalilukujoukoilla $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$.

3.2.2 Moniulotteinen odotusarvo ja kovarianssimatriisi

Olkoon \mathbf{X} n -ulotteinen satunnaisvektori, jonka arvot kuuluvat joukkoon \mathbb{R}^n . Tällöin n -ulotteinen vektori on sen odotusarvo

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} = \mathbb{E}[\mathbf{X}] = \begin{pmatrix} \mathbb{E}[X_1] \\ \mathbb{E}[X_2] \\ \vdots \\ \mathbb{E}[X_n] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_n \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

ja $n \times n$ matriisi sen kovarianssimatriisi

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{\mathbf{X}\mathbf{X}} &= \text{cov}[\mathbf{X}, \mathbf{X}] \\
 &= \mathbb{E}[(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}})(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}})^T] \\
 &= \mathbb{E}[(X_1 - \mu_1, \dots, X_n - \mu_n)(X_1 - \mu_1, \dots, X_n - \mu_n)^T] \\
 &= \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_n^2 \end{pmatrix}, \tag{3.36}
 \end{aligned}$$

missä

$$\sigma_i^2 = \text{var}[X_i] = \mathbb{E}[(X_i - \mu_i)^2] \tag{3.37}$$

on satunnaismuuttujan X_i varianssi, kun $i = 1, 2, \dots, n$ ja

$$\sigma_{ij} = \text{cov}[X_i, X_j] = \mathbb{E}[(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)] \tag{3.38}$$

on satunnaismuuttujien X_i ja X_j välinen kovarianssi, kun $i, j = 1, 2, \dots, n$ ($i \neq j$). Kovarianssimatriisi Σ ilmaisee kunkin ulottuvuuden varianssin ja määrittelee miten eri satunnaismuuttujat korreloivat keskenään. Kovarianssimatriisi on aina symmetrinen ja positiivisesti semidefiniitti matriisi [15].

Oletetaan nyt, että \mathbf{X} ja \mathbf{Y} ovat r - ja s -ulotteisia satunnaisvektoreita. Olkoon \mathbf{Z} nyt $(r+s)$ -ulotteinen satunnaisvektori

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix}, \tag{3.39}$$

jolloin satunnaisvektorin \mathbf{Z} odotusarvo on

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}} = \mathbb{E}[\mathbf{Z}] = \begin{pmatrix} \mathbb{E}[\mathbf{X}] \\ \mathbb{E}[\mathbf{Y}] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} \\ \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} \end{pmatrix} \tag{3.40}$$

ja kovarianssimatriisi on ositettu $((r + s) \times (r + s))$ -matriisi

$$\begin{aligned}\Sigma_{ZZ} &= \mathbb{E}[(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z)(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z)^T] \\ &= \begin{pmatrix} \text{cov}[\mathbf{X}, \mathbf{X}] & \text{cov}[\mathbf{X}, \mathbf{Y}] \\ \text{cov}[\mathbf{Y}, \mathbf{X}] & \text{cov}[\mathbf{Y}, \mathbf{Y}] \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Sigma_{XX} & \Sigma_{XY} \\ \Sigma_{YX} & \Sigma_{YY} \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{3.41}$$

missä

$$\Sigma_{XY} = \text{cov}[(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_X)(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_Y)^T] = \Sigma_{YX}^T\tag{3.42}$$

on $(r \times s)$ -matriisi.

3.2.3 Moniulotteinen normaalijakauma

Moniulotteinen normaalijakauma (Gaussin jakauma) on yleistys yksiulotteisesta normaalijakaumasta kahteen tai useampaan ulottuvuuteen. Aivan kuten yksiulotteisen satunnaismuuttujan normaalijakauma voitiin esittää sen odotusarvon μ ja varianssin σ^2 avulla (ks. 3.1.7), voidaan satunnaisvektorin jakauma esittää odotusarvovektorin $\boldsymbol{\mu}$ ja kovarianssimatriisin Σ avulla.

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma).\tag{3.43}$$

Normaalijakautuneen satunnaisvektorin tiheysfunktioiksi voidaan nyt määritellä

$$f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \Sigma) \triangleq \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right], \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\tag{3.44}$$

3.2.4 Ehdolliset normaalijakaumat

Tarkastellaan $(r + s)$ -ulotteista satunnaisvektoria \mathbf{Z} (3.39) ja sen odotusarvovektoria $\boldsymbol{\mu}_Z$ (3.40) ja kovarianssimatriisia Σ_{ZZ} (3.41). Oletetaan, että \mathbf{Z} on normaalijakautunut. Nyt

eksponentti yhtälöstä (3.44) saa muodon

$$-\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_z)^T \boldsymbol{\Sigma}_{zz}^{-1} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_z) \quad (3.45)$$

Käyttämällä hyväksi Schurin komplementtiä [21]

$$\boldsymbol{\Sigma}_S^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}_{xx} - \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{yx} \quad (3.46)$$

voidaan lohkomatriisin käänteismatriisi kirjoittaa muotoon [4]

$$\boldsymbol{\Sigma}_{zz}^{-1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{xx} & \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{yx} & \boldsymbol{\Sigma}_{yy} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.47)$$

missä

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{11} &= \boldsymbol{\Sigma}_S^{-1} \\ \mathbf{A}_{12} &= -\boldsymbol{\Sigma}_S^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1} \\ \mathbf{A}_{21} &= -\boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{yx} \boldsymbol{\Sigma}_S^{-1} \\ \mathbf{A}_{22} &= \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_S^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Käyttämällä nyt tätä hyväksi saadaan

$$\begin{aligned} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_z)^T \boldsymbol{\Sigma}_{zz}^{-1} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_z) &= \begin{pmatrix} \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x \\ \mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x \\ \mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y \end{pmatrix} \\ &= (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x)^T \mathbf{A}_{11} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x) + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x)^T \mathbf{A}_{12} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y) \\ &\quad + (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y)^T \mathbf{A}_{21} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x) + (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y)^T \mathbf{A}_{22} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y) \\ &= (\mathbf{x} - (\boldsymbol{\mu}_x + \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y)))^T \boldsymbol{\Sigma}_S^{-1} (\mathbf{x} - (\boldsymbol{\mu}_x + \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y))) \\ &= (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_{y|x})^T \boldsymbol{\Sigma}_{y|x}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_{y|x}), \end{aligned} \quad (3.49)$$

missä

$$\boldsymbol{\mu}_{y|x} = \boldsymbol{\mu}_y + \boldsymbol{\Sigma}_{y|x} \boldsymbol{\Sigma}_{xx}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x) \quad (3.50)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{y|x} = \boldsymbol{\Sigma}_{yy} - \boldsymbol{\Sigma}_{yx} \boldsymbol{\Sigma}_{xx}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{xy}. \quad (3.51)$$

Todetaan lopuksi vielä, että ehdollinen jakauma on myös moniulotteinen normaalijakauma edellä todetuilla ehdollisella odotusarvovektorilla $\boldsymbol{\mu}_{y|x}$ ja kovarianssimatriisilla $\boldsymbol{\Sigma}_{y|x}$.

$$\begin{aligned}
 p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_{zz}) &\propto p(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_{zz}) \\
 &= \mathcal{N}(\mathbf{z}|\boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_{zz}) \\
 &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_z)^T \boldsymbol{\Sigma}_{zz}^{-1}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_z)\right) \\
 &= \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_{y|x})^T \boldsymbol{\Sigma}_{y|x}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_{y|x})\right) \\
 &\propto \mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_{y|x}, \boldsymbol{\Sigma}_{y|x})
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

Kyseinen ehdollinen odotusarvovektori ja kovarianssimatriisi esittelevät merkittävää roolia Gaussin prosessimallissa, jossa tavoitteena on mallintaa ilmiön tuntematonta käytöstä siitä tehtyjen havaintojen ehdolla.

4 LINEAARISESTA REGRESSIOSTA GAUSSIN PROSESSIIN

Tämä luku esittelee Gaussin prosessiregression periaatteet, tarkoituksena antaa lukijalle käsitys sen toiminnasta. Tavoitteena on mallintaa ilmiön tuntematonta tilaa y_* , kun ilmiöön vaikuttavat ominaisuudet ovat tilassa \mathbf{x}_* . Oppiakseen mallintamaan ilmiön käyttäytymistä tarvitaan n havaintoa sisältävää harjoitusjoukko \mathcal{D}

$$\mathcal{D} = \{\mathbf{x}_i, y_i | i = 1, \dots, n\} \quad (4.1)$$

missä \mathbf{x} kuvaa D -ulotteista ominaisuusvektoria ilmiöön vaikuttavista ominaisuuksista ja y ilmiön tilaa kuvaavaa skalaaria, tietyillä ominaisuuksien arvoilla. Mallinnettavan ilmiön voidaan ajatella olevan prosessi, jonka lopputulokseen vaikuttavat tietyt ominaisuudet. Kutsutaankin jatkossa ominaisuusvektoria mallinnettavan ilmiön tai prosessin *sisääntulovektoriksi* ja ilmiön tilaa kuvaavaa skalaaria *ulostuloksi*. Sisääntulovektorit kootaan yhteen $D \times n$ mallimatriisiksi \mathbf{X} . Mallimatriisin jokaista sisääntuloriviä \mathbf{x}_i vastaavat ulostulot kootaan yhteen vektoriin \mathbf{y} , jolloin voidaan kirjoittaa $\mathcal{D} = (\mathbf{X}, \mathbf{y})$.

Työssä käsitellään Gaussin prosessia regression näkökulmasta, mutta lukijan on hyvä tiedostaa, että Gaussin prosessi soveltuu myös erilaisiin luokittelutehtäviin. Regressio-tehtävässä ulostulot ovat reaaliarvoja ja kiinnostuksen kohteena on sisääntulojen ja ulostulojen välisen yhteyden löytäminen. Esimerkiksi tavoitteena voi olla löytää ulostulojen ehdollinen todennäköisyysjakauma annetuilla sisäänmenoilla.

Luvun pääasiallisena lähteenä ovat toimineet C. E. Rasmussenin vuonna 2004 kirjoittama artikkeli [22] sekä hänen yhdessä K. I. Williamssin vuonna 2006 julkaisema kirja [23]. Myös M. Ebden on kirjoittanut mainion artikkelin [7] Gaussin prosessin perusteista. Lukijaa kannustetaan tutustumaan myös mainioihin internetsivuihin [1], [11] ja [26]. Etenkin Konstanzin yliopiston Görtlerin ja kumppaneiden tekemä visuaalinen ja vuorovaikutteinen sivusto [11] auttaa ymmärtämään mistä Gaussin prosessissa on kyse.

4.1 Lineaarinen regressio Bayesilaisesta näkökulmasta

Tarkastellaan lineaarista regressiomallia

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{w}, \quad y = f(\mathbf{x}) + \epsilon, \quad (4.2)$$

missä \mathbf{x} on sisääntulovektori, \mathbf{w} on lineaarisen mallin painokerroinvektori, f on funktion arvo ja y on havaintoarvo. Oletetaan, että havainnot y sisältävät kohinaa ϵ , jolloin y eroaa jonkin verran funktion arvoista $f(\mathbf{x})$. Kohinan oletetaan noudattavan normaalijakaumaa

$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_n^2). \quad (4.3)$$

Oletetaan havaintojen olevan toisistaan riippumattomia, jolloin mittauskohinasta tehdyn oletuksen ja mallin perusteella voidaan määrittää havaintojen ehdollinen todennäköisyysjakauma (ks. yhtälö (3.6))

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) &= p(y_1|\mathbf{x}_1, \mathbf{w})p(y_2|\mathbf{x}_2, \mathbf{w})\dots p(y_n|\mathbf{x}_n, \mathbf{w}) \\ &= \prod_{i=1}^n p(y_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) \\ &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_n \sqrt{2\pi}} \exp -\frac{(y_i - \mathbf{x}_i^T \mathbf{w})^2}{2\sigma_n^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma_n^2)^{n/2}} \exp -\frac{|\mathbf{y} - \mathbf{X}^T \mathbf{w}|^2}{2\sigma_n^2}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

missä $|\cdot|$ kuvaa Euklidista etäisyyttä ja voidaan kirjoittaa

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{X}^T \mathbf{w}, \sigma_n^2) \quad (4.5)$$

Hyödyntämällä nyt Bayesin teoreemaa (ks. kappale 3.1.3) pyritään selvittämään regressiomallin painokertoimien posteriorijakauma

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{X}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathbf{y}|\mathbf{X})}. \quad (4.6)$$

Muodostamalla aluksi ennakkokäsitys ja olettamalla painokerrointen noudattavan normaalijakaumaa odotusarvolla 0 ja kovarianssimatriisilla Σ_p saadaan painokertoimien priorijakaumaksi

$$p(\mathbf{w}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma_p). \quad (4.7)$$

Normalisointivakio (reunatodennäköisyys)

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w})d\mathbf{w} \quad (4.8)$$

on painokertoimista riippumaton (ks. luvut 3.1.2 ja 3.2.1). Jättämällä se pois voidaan mittausten uskottavuuden (likelihood) (4.5) ja painokertoimista tehdyn ennako-oletuksen (priori) yhdistävä Bayesin yhtälö (4.6) posteriorijakaumasta esittää muodossa

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{X}) &\propto p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_n^2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}^T\mathbf{w})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}^T\mathbf{w})\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{w}^T\Sigma_p^{-1}\mathbf{w}\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{w} - \bar{\mathbf{w}})^T\left(\frac{1}{\sigma_n^2}\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \Sigma_p^{-1}\right)(\mathbf{w} - \bar{\mathbf{w}})\right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

missä $\bar{\mathbf{w}} = \sigma_n^{-2}(\sigma_n^{-2}\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \Sigma_p^{-1})^{-1}\mathbf{X}\mathbf{y}$ [23]. Priori- ja uskottavuusjakauman ollessa normaalijakautuneita, myös parametrien posteriorijakauma noudattaa normaalijakaumaa odotusarvolla $\bar{\mathbf{w}}$ ja kovarianssimatriisilla \mathbf{A}^{-1}

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{y}) \sim \mathcal{N}(\bar{\mathbf{w}} = \frac{1}{\sigma_n^2}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}\mathbf{y}, \mathbf{A}^{-1}) \quad (4.10)$$

missä $\mathbf{A} = \sigma_n^{-2}\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \Sigma_p^{-1}$. On huomioitavaa, että edellä kuvatun ehdollisen mallin, kuten kaikkien Gaussisten posteriorijakaumien, keskiarvo on samalla sen moodi. Tätä kutsutaan myös *painokertoimien w maksimi-posterioriksi*. [23]

Painokerroinparametrien posteriorijakauman avulla, voidaan nyt arvioida pistettä \mathbf{x}_* vastaava tuntematon arvo $y_* = f(\mathbf{x}_*)$ laskemalla sen reunajakauma

$$p(y_*|\mathbf{x}_*, \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \int p(y_*|\mathbf{w}, \mathbf{x}_*)p(\mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{y})d\mathbf{w} \quad (4.11)$$

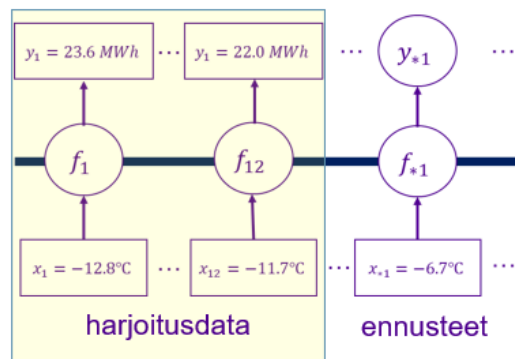
Saatu ennustejakauma on myös normaalijakautunut, jolloin tuntemattoman arvon y_* odotusarvo saadaan kertomalla painokertoimien posteriorijakauman odotusarvo $\bar{\mathbf{w}}$ yhtälöstä (4.10) testipisteellä \mathbf{x}_* . Varianssi on testipisteen neliön ja posteriorin kovarianssimatriisin tulo, osoittaen arvion epävarmuuden kasvavan testipisteen suuruuden mukana. [23]

$$p(y_*|\mathbf{x}_*, \mathbf{X}, \mathbf{y}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}_*^T\bar{\mathbf{w}}, \mathbf{x}_*^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}_*) \quad (4.12)$$

Kyseinen odotusarvo kuvaa nyt mallin antamaa todennäköisintä arviota tuntemattomasta arvosta y_* pisteessä \mathbf{x}_* , kun mallinnettavasta ilmiöstä on tehty havaintoja \mathbf{y} pisteissä \mathbf{X} .

4.2 Gaussin prosessimalli

Kappaleessa 4.1 kuvatun lineaarisen regression tavoitteena on löytää suoran kulmakerrointa ja vakiotermin kuvaavat parametrit w sillä oletuksella, että suora yhtälönä kuvastaisi tarkasteltavaa prosessia mahdollisimman hyvin. Bayesilainen lähestymistapa tarjosi todennäköisyysjakauman parametreista, jota voidaan päivittää kun uutta dataa kertyy. Kyseessä on parametrinen malli, jossa mallinnettavaa ilmiötä kuvaavan funktion muoto on tunnettu. Tämän kaltaiset parametriset mallit ovat perinteisiä regressiossa ja luokittelussa käytettyjä malleja. Niille tyypillistä on, että harjoitusvaiheessa harjoitusdatan sisältämä informaatio sisällytetään funktion parametreihin, eikä harjoitusdataa enää tarvita sopivien parametrien löydyttyä. Usein mallintamisen käytännön sovellusten kannalta ollaan kuitenkin kiinnostuneempia mallin antamasta lopputuloksesta ja tarkkuudesta varsinaisen yhtälön ja siinä esiintyvien parametrien sijaan. Tätä on havainnollistettu kuvassa 4.1, jossa harjoitusdatana on tietoa rakennuksen lämmitystehon tarpeesta tietyissä ulkolämpötiloissa ja näistä tiedoista opitun mallin avulla pyritään mallintamaan tuntemattomat tehon tarvetta.



Kuva 4.1. Gaussin prosessin ideana on löytää tuntemattoman funktion tulosten todennäköisimmät arvot.

Lineaarisen regression tavoin Gaussin prosessi on menetelmä, jonka tavoitteena on etsiä pisteissä X tehtyjen havaintojen y avulla paras arvio ilmiön tuntemattomista tapahtumista y_* pisteissä X_* . Yksittäisen funktion parametrien etsimisen sijaan Gaussin prosessissa kuitenkin pyritään löytämään havaintoihin sopivien funktioiden $f(x_*)$, tai oikeastaan funktioiden arvojen y_* ehdollinen todennäköisyysjakauma. Paras arvio tuntemattomista tapahtumista on tällöin kyseisen jakauman odotusarvovektori μ_* . Arvion epävarmuus taas on kuvattu jakauman varianssiin $var[y_*]$.

Rasmussen ja Williams [23] kuvaavat Gaussin prosessia kokoelmaksi satunnaismuuttujia, joista jokainen noudattaa yhteisnormaalijakaumaa. Ideana on siis, että kun etsittävä funktion jokainen arvo on normaalijakautunut, omaa se näin tietyn odotusarvon ja varianssin. Gaussin prosessia voidaan ajatella yleistykseenä moniulotteisesta normaalijakaumasta [23]. Siinä missä moniulotteinen normaalijakauma on vektorijakauma, on Gaussin prosessissa kyse funktioiden jakaumasta ja satunnaismuuttujana on nyt funk-

tion $f(\mathbf{x})$ arvo pisteessä \mathbf{x} . Havainnollistetaan asiaa seuraavalla esitystavalla:

$$\begin{pmatrix} f(\mathbf{x}_1) \\ f(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ f(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{pmatrix} m(\mathbf{x}_1) \\ m(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ m(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{pmatrix} \right) \quad (4.13)$$

missä $m(\mathbf{x})$ ja $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ ovat odotusarvofunktio ja kovarianssifunktio (kernel). Teoksessaan [23] Rasmussen ja Williams ovat määrittelleet Gaussin prosessijakauman seuraavasti:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &\sim \mathcal{GP}(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \\ m(\mathbf{x}) &= \mathbb{E}[f(\mathbf{x})] \\ k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \text{cov}[\mathbf{f}, \mathbf{f}'] = \mathbb{E}[(f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x}))(f(\mathbf{x}') - m(\mathbf{x}')^T)] \end{aligned} \quad (4.14)$$

Samaan tapaan kuin lineaarisen regression painokertoimien tapauksessa (ks. yhtälö (4.9)) Bayesin teoreemaa hyödyntäen etsitään ensin funktoiden posteriorijakauma, jonka jälkeen voidaan tehdä ennuste laskemalla ennustejakauma. Posteriorijakauma

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{X}, \mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{f})p(\mathbf{f}|\mathbf{X}) \quad (4.15)$$

on verrannollinen satunnaisen funktion \mathbf{f} antamien havaintojen \mathbf{y} uskottavuuden (likelihood) ja funktion priorin tuloon. Yhtälön (4.13) mukaisesti priorin on jakautunut seuraavasti

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{X}) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}(\mathbf{X}), \mathbf{K}(\mathbf{X}, \mathbf{X})), \quad (4.16)$$

missä $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{X})$ on odotusarvovektori odotusarvofunktion tuloksista harjoituspisteissä, $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{X}) = [m(\mathbf{x}_1), \dots, m(\mathbf{x}_D)]^T$. Vastaavasti $\mathbf{K}(\mathbf{X}, \mathbf{X})$ on kovarianssimatriisi, jonka elementit vastaavat kovarianssifunktion arvoja kaikkien harjoituspisteiden välillä, $\mathbf{K}(\mathbf{X}, \mathbf{X})_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$.

Prosessin yksinkertaistamiseksi priorin odotusarvo asetetaan usein nolllaksi, Gaussin prosessin ollessa riittävän joustava mallintamaan ilmiötä vain kovarianssifunktiolla [23], jolloin

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{X}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}(\mathbf{X}, \mathbf{X})). \quad (4.17)$$

Havaintojen uskottavuusjakauma on samanlainen kuin lineaarisen regression tapaukses-

sa (yhtälö (4.5))

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{f}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{y}, \sigma_N^2 \mathbf{I}) \quad (4.18)$$

Sekä priori-, että uskottavuusjakauma ovat normaalijakaumia, joten myös funktioiden posteriorijakauma on normaalijakautunut

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{X}, \mathbf{y}) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_*, \boldsymbol{\Sigma}) \quad (4.19)$$

Nyt voidaan muodostaa ennustejakauma testipisteitä \mathbf{X}_* vastaaville funktion arvoille \mathbf{y}_* samaan tapaan kuin lineaarisen regression tapauksessa (yhtälö 4.11)

$$p(\mathbf{y}_*|\mathbf{X}_*, \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \int p(\mathbf{y}_*|\mathbf{X}_*, \mathbf{f}, \mathbf{X})p(\mathbf{f}|\mathbf{X}, \mathbf{y})d\mathbf{f} \quad (4.20)$$

Perusoletus Gaussin prosessiin liittyen oli, että data voidaan esittää otoksena moniulotteisesta normaalijakaumasta. Kun oletuksena oli lisäksi, että odotusarvofunktio $m(\mathbf{x}) = 0$ saadaan yhdistetty jakauma (ks. luku 3.2.3):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}_* \end{pmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{K}_*^T \\ \mathbf{K}_* & \mathbf{K}_{**} \end{pmatrix} \right) \quad (4.21)$$

Tavoitteena on saada selville estimoitavana olevan funktion f_* todennäköisimmät arvot \mathbf{y}_* testipisteissä \mathbf{X}_* . Tämän selvittämiseksi tulee laskea yhtälössä 4.21 näkyvät kaikkien mahdollisten pisteiden väliset kovarianssimatriisit \mathbf{K} , \mathbf{K}_* ja \mathbf{K}_{**} . Matriisi \mathbf{K} on harjoituspisteiden välinen kovarianssimatriisi, \mathbf{K}_* testipisteiden ja harjoituspisteiden välinen ja \mathbf{K}_{**} testipisteiden välinen kovarianssimatriisi. Koska tiedossa on havaintoja funktion arvoista \mathbf{y} harjoituspisteissä \mathbf{X} , saadaan nyt laskettua testihavaintojen ehdollisen jakauman odotusarvot ja varianssit (ks. luku 3.2.4)

$$p(\mathbf{y}_* | \mathbf{X}_*, \mathbf{X}, \mathbf{y}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_* + \mathbf{K}_* \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{m}_*), \mathbf{K}_{**} - \mathbf{K}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{K}_*^T) \quad (4.22)$$

Oletuksen perusteella $\mathbf{m}_* = \mathbf{0}$, jolloin paras arvio funktion f_* saamista arvoista \mathbf{y}_* on nyt jakauman (4.22) odotusarvovektori

$$\mathbb{E}[\mathbf{y}_*] = \boldsymbol{\mu}_* = \mathbf{K}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} \quad (4.23)$$

ja kyseisen arvion epävarmuutta kuvaa jakauman varianssi

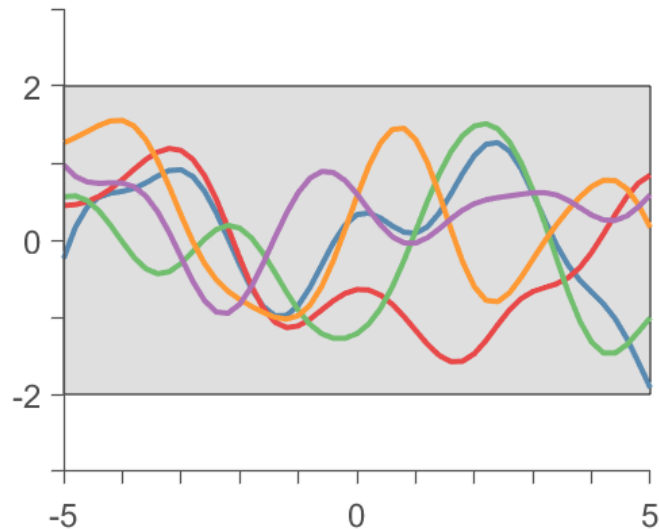
$$\text{var}[\mathbf{y}_*] = \mathbf{K}_{**} - \mathbf{K}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{K}_*^T. \quad (4.24)$$

4.2.1 Priorijakauma

Jo aiemmin mainitulla priorijakaumalla tarkoitetaan ennakko-oletusta tuntemattomasta arvosta. Tavoitteena voi olla esimerkiksi löytää funktion $f(\mathbf{x})$ arvot välillä $x \in [-5, 5]$ ja ennakko-oletus voi olla, että arvot heilahtelevat nollan ympärillä sopivasti, mutta eivät liikaa. Tämän kaltaisen ennakkokäsityksen mukainen priorijakauma voi olla nyt esimerkiksi

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}). \quad (4.25)$$

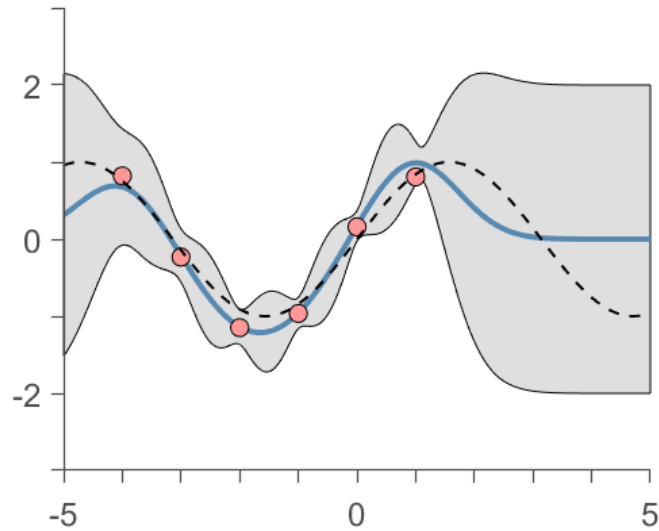
missä kovarianssimatriisi \mathbf{K} muodostuu käytetyn kovarianssifunktion mukaisesti. Käytettävä kovarianssifunktio voi olla esimerkiksi kappaleessa 4.2.3 esiteltävä SE-kovarianssifunktio, jolloin ennakkokäsityksen mukaisia funktion kuvaajia voisivat esittää kuvassa 4.2 esitetyt kuvaajat.



Kuva 4.2. Viisi mahdollista funktiota, kun priorijakauman odotusarvona on nollavektori ja kovarianssifunktiona SE (Squared Exponential). Kovarianssifunktion hyperparametrit ovat: $\sigma_f^2 = 1$, $l = 1$ ja $\sigma_n^2 = 0$.

Sopivan kovarianssifunktion valinta on mallinnustehtävän kannalta keskeisessä roolissa, mahdollisten funktioiden muodon ollessa riippuvainen kyseisestä kovarianssifunktiosta ja sen hyperparametreista. Etenkin käytännön sovelluksissa ja todellisia ilmiöitä mallinnettaessa ilmiön tunteminen etukäteen helpottaa sopivan kovarianssifunktion valintaa. Kuvassa 4.2 on esitetty viisi mahdollista priorijakauman mukaista funktiota ja koska mahdollisia funktioita on ääretön määrä, tarvitaan mallinnettavasta ilmiöstä nyt dataa, jota voidaan käyttää Gaussin prosessin kouluttamisessa. Harjoitusdatan avulla Gaussin prosessialgoritmi oppii tuntemaan mallinnettavaa ilmiötä ja päivittää priorijakauman posteriorijakaumaksi.

4.2.2 Posteriorijakauma



Kuva 4.3. Harjoitusdatan avulla muodostetun posteriorijakauman odotusarvovektorin kuvaaja (sininen), todellisen funktion kuvaaja (katkoviiva) sekä mallin 95 % luottamusväli.

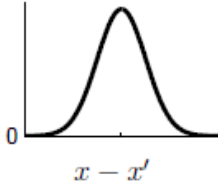
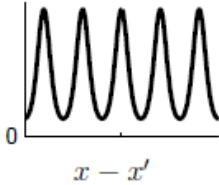
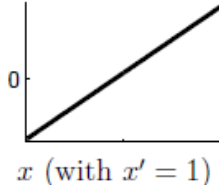
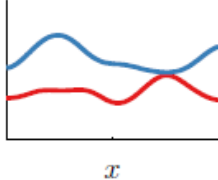
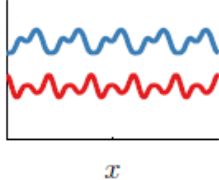
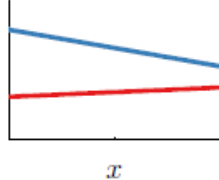
Oletetaan, että mallinnettavasta ilmiöstä saadaan tietoon kuusi kohinaista mittausarvoa pisteistä \mathbf{X} . Nyt tiedossa on harjoitusdatana käytettävät pisteet \mathbf{X} sekä niitä vastaavat mittausarvot $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) + \epsilon$. Valitaan testipisteiksi $n = 1000$ tasaisesti jakautuneen pisteen otos \mathbf{X}_* väliltä $[-5, 5]$. Näiden tietojen perusteella voidaan laskea kappaleessa 4.2 kuvatulla tavalla estimoitavan funktion arvojen \mathbf{y}_* posteriorijakauman odotusarvovektori μ_* ja varianssi $\text{var}(\mathbf{y}_*)$. Odotusarvovektori kuvaa nyt käytettävissä olevan harjoitusdatan perusteella saatua arviota estimoitavan funktion saamista arvoista testipisteissä \mathbf{X}_* . Saadun mallin epävarmuutta taas kuvaa posteriorijakauman varianssi.

Kuvassa 4.3 nähdään punaisina pisteinä harjoitusdatan mittausarvot ja sinisellä värillä posteriorijakauman odotusarvovektorin pisteiden avulla piirretty kuvaaja estimoidusta funktiosta. Mustalla katkoviivalla on esitetty todellinen funktio, jota Gaussin prosessi-regressiolla pyrittiin mallintamaan. Harmaa alue kuvaa mallin 95 % luottamusväliä.

4.2.3 Kovarianssifunktiot

Gaussin prosessissa käytettävä kovarianssifunktio tai -funktiot määrittelevät lähes täysin menetelmän tuottaman mallin ominaisuudet [22]. Tästä syystä tarkoituksenmukaisen kovarianssifunktion valinta käsillä olevaan mallinnsuongelmaan on ratkaisevassa osassa koko mallinnuksen onnistumisen kannalta. Jotta tehtävään osataan valita oikeanlaiset kovarianssifunktiot, tulee mallintajalla olla käsitys ja intuitio mallinnettavan ilmiön käyttäytymisestä, tai ainakin se helpottaa ja nopeuttaa suuresti tehtävässä. Kolme yleisesti käytettävää kovarianssifunktiota, joita käyttämällä pääsee hyvin alkuun ovat SE-kovarianssifunktio (Squared Exponential), jaksollinen kovarianssifunktio (Periodic) ja li-

neaarinen kovarianssifunktio (Linear) [6].

Kernel name:	Squared-exp (SE)	Periodic (Per)	Linear (Lin)
$k(x, x') =$	$\sigma_f^2 \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2l^2}\right)$	$\sigma_f^2 \exp\left(-\frac{2}{p^2} \sin^2\left(\pi \frac{x-x'}{p}\right)\right)$	$\sigma_f^2(x-c)(x'-c)$
Plot of $k(x, x')$:			
Functions $f(x)$ sampled from GP prior:			
Type of structure:	local variation	repeating structure	linear functions

Kuva 4.4. Esimerkkejä yleisesti käytettyjen kovarianssifunktioiden rakenteista [6].

SE-kovarianssifunktiossa

$$k(x, x') = \sigma_f^2 \exp\left(\frac{-(x-x')^2}{2l^2}\right) \quad (4.26)$$

hyperparametri σ_f^2 määrittelee kovarianssifunktion antaman maksimikovarianssin ja sitä kautta keskimääräisen etäisyyden, jonka estimoitava funktion arvo poikkeaa odotusarvostaan. Kun piste x lähestyy pistettä x' , niin $k(x, x')$ lähestyy kyseistä maksimia tarkoittaen, että $f(x)$ ja $f(x')$ korreloivat vahvasti toistensa kanssa. Toiseen suuntaan mentäessä, pisteen x etääntyessä pisteestä x' , lähestyy $k(x, x')$ nollaa. Pituuskaala l määrittelee esitmoitavan funktion aaltoilun pituuden. Käytännössä estimoitavan funktion arvot eivät voi poiketa harjoitusdatan arvoista l yksikköä pidempää matkaa. Pieni pituuskaala saa kovarianssin lähestymään nollaa nopeasti pisteiden välisen etäisyyden kasvaessa, jolloin sen avulla on mahdollista kuvata nopeasti muuttuvia tapahtumia. Vastaavasti suuri pituuskaala saa aikaan rauhallisempia muutoksia ja sitä kautta sen avulla voi kuvata hitaammin muuttuvia ilmiöitä. Pituuskaala esittelee tärkeitä roolia ilmiötä kuvaavan mallin rakentamisessa. Mitä nopeampia muutoksia ilmiössä ilmenee, sitä pienempi pituuskaala tulee valita.

Jaksollinen kovarianssifunktio

$$k(x, x') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{\sin^2(\pi(x-x')/p)}{2l^2}\right) \quad (4.27)$$

mahdollistaa nimensä mukaisesti sellaisten ilmiöiden mallintamisen, joissa esiintyy selvää jaksollisuutta. Hyperparametri p määrittelee funktion toistojen välisen etäisyyden, kun

taas parametrit σ_f^2 ja l toimivat samalla tavalla kuin SE funktiossa [6]. Suurempi p saa aikaan hitaampaa värähtelyä, kun taas pienempi p aiheuttaa suurempaa nopeampaa värähtelyä

Kolmas esiteltävä kovarianssifunktio on lineaarinen funktio

$$k(x, x') = \sigma_f^2(x - c)(x' - c), \quad (4.28)$$

jota käytetään lineaarisen ilmiön mallintamisessa. Poikkeama c määrittelee pisteen, jonka kautta kaikki posteriorijakaumasta muodostettujen funktioiden arvot kulkevat. Varianssitermi σ_f^2 taas vastaa epävarman vakio-poikkeaman lisäämistä malliin [6].

Kuvassa 4.4 esitetään esimerkit näiden kolmen kovarianssifunktion kuvaajista sekä sellaisten priorijakaumien tuottamien funktioiden kuvaajista, joissa kovarianssi on muodostettu kyseisiä funktioita käyttäen.

4.2.4 Kovarianssifunktioiden yhdistäminen

Monimutkaisempien funktioiden mallintamiseksi kovarianssifunktioita on mahdollista yhdistellä. On kuitenkin muistettava, että yhdistelmän tuloksena saatavan kovarianssimatriisin tulee olla positiivisesti semidefiniitti [23]. Tyypillisiä tapoja yhdistää kovarianssifunktioita ovat niiden yhteenlasku ja kertolasku.

$$k(x, x') = k_1(x, x') + k_2(x, x'), \quad (4.29)$$

$$k(x, x') = k_1(x, x')k_2(x, x'). \quad (4.30)$$

4.2.5 Gaussin regressioprosessimallin kouluttaminen

Gaussin regressioprosessimallin kouluttaminen tarkoittaa käytettävän kovarianssifunktion optimaalisten hyperparametrien löytämistä. Jos tunnetaan tarpeeksi hyvin hyperparametrien vaikutus kovarianssifunktion toimintaan ja saatavaan lopputulokseen, voidaan sopivat hyperparametrit yrittää löytää manuaalisesti. Manuaalisen etsimen sijaan yksi vaihtoehto optimaalisten hyperparametrien löytämiseksi on maksimoida marginaalitodennäköisyys [20]

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{f}, \mathbf{X})p(\mathbf{f}|\mathbf{X})d\mathbf{f}. \quad (4.31)$$

Koska (ks. yhtälö (4.17))

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{X}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}) \quad (4.32)$$

ja

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{f}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{f}, \sigma^2 \mathbf{I}), \quad (4.33)$$

saadaan [20]

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} - \frac{1}{2} \log |\mathbf{K}| - \frac{N}{2} \log(2\pi). \quad (4.34)$$

Yhtälössä 4.34 ensimmäinen termi on datan sopivuustermi, toinen on mallin kompleksisuustermi ja kolmas termi on vain vakiotermi. Tarkastellaan kahden ensimmäisen termin osalta aiemmin kuvattua SE-kovarianssifunktiota muuttaen pituuskaalaa l ja pitäen hyperparametri σ_f^2 vakiona. Pienillä pituuskaalan arvoilla sovitettu malli kulkee tarkasti läheltä havaintopisteitä, jolloin $\mathbf{y}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}$ on pieni. Sen sijaan $\log |\mathbf{K}|$, eli mallin kompleksisuus, on suuri. Suurilla pituuskaalan arvoilla sovitukset poikkeaa enemmän havaintopisteistä, mutta mallin kompleksisuus on pienempi. [20]

Marginaalitodennäköisyyden maksimoimiseksi muodostetaan sen osittaisderivaatat hyperparametrien θ suhteen, jolloin saadaan [20]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) &= -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{K}^{-1} \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \theta_j} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} - \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbf{K}^{-1} \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \theta_j}) \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left((\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\alpha}^T - \mathbf{K}^{-1}) \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \theta_j} \right), \end{aligned} \quad (4.35)$$

missä θ_j on käsiteltävä hyperparametri ja $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}$.

Nyt voidaan hyödyntää jotain standardia gradientin laskentaan perustuvaa optimointimenetelmää hyperparametrien estimointiin. Tarvitaan $O(N^3)$ aikaa \mathbf{K}^{-1} laskemiseksi ja $O(N^2)$ jokaisen hyperparametrin gradienttia kohden. [20]

4.3 Gaussin prosessin käytännön soveltaminen

Tarkastellaan vielä muutamaa käytännön esimerkkiä mallinnustehtävistä, joissa Gaussin prosessia voidaan hyödyntää.

Ensimmäisen esimerkin tavoitteena on mallintaa rakennuksen huonelämpötilaa $f(\mathbf{x}_i)$ olettaen, että se on riipuvainen ulkolämpötilasta x_{i1} , patteriverkoston lämpötilasta x_{i2} ,

kuukaudesta x_{i3} , viikonpäivästä x_{i4} ja vuorokauden tunnista x_{i5} . Kutsutaan näitä tapahtuman sisäänmenoiksi. Nyt x_i on tietyllä ajanhetkellä tapahtuman sisäänmenoja kuvaava rivivektori. Vastaavasti $y_i = f(x_i)$ on kyseisellä ajanhetkellä vallinnut huonelämpötila, eli tapahtuman ulostulo. Edellä mainituista sisäänmenoista ja niitä vastaavista ulostuloista on kerätty dataa vuoden ajalta tunnin välein. Kerätystä datasta muodostuu matriisi $\mathbf{X}^{8760 \times 5}$, joka vastaa kerättyä tietoa sisäänmenoista sekä vektori \mathbf{y}^{8760} , joka kuvaa näitä sisäänmenoja vastaavia ulostuloja eli huonelämpötiloja. Kutsutaan kerättyä dataa harjoitusdataksi, jota käytetään Gaussin prosessimallin kouluttamisessa. Lopullisena tavoitteena voi olla esimerkiksi ennustaa jonkun tietyn viikon huonelämpötilat \mathbf{y}_*^{167} . Tarvitaan siis sääennuste kyseisen viikon ulkolämpötiloista tunneittain sekä tieto näitä ulkolämpötiloja vastaavista patteriverkoston menoveden lämpötiloista. Nyt voidaan muodostaa matriisi $\mathbf{X}_*^{167 \times 5}$ niistä sisäänmenoista, joita vastaavat ulostulot halutaan mallintaa.

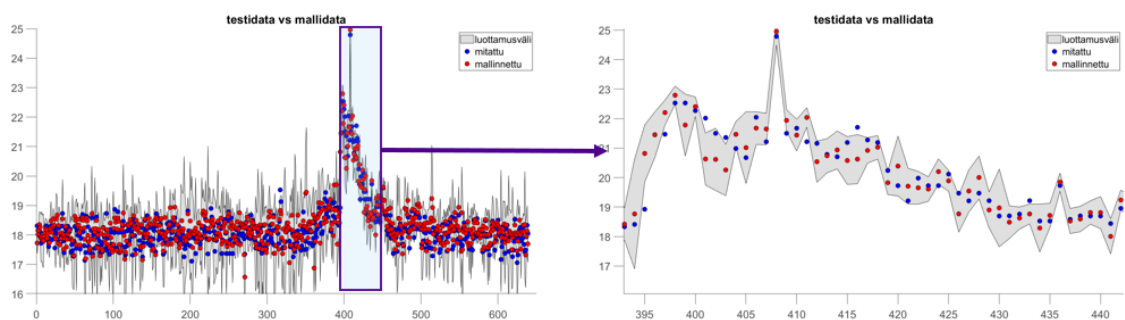
Yhdistämällä nyt \mathbf{y} ja \mathbf{y}_* , saadaan (ks. kappale 3.2.2)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}_* \end{pmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{pmatrix} \mathbf{m}_X \\ \mathbf{m}_{X_*} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{XX} & \mathbf{K}_{X_*X} \\ \mathbf{K}_{X_*X} & \mathbf{K}_{X_*X_*} \end{pmatrix} \right) \quad (4.36)$$

Koska \mathbf{y} on havaittua dataa voidaan muodostaa moniulotteinen jakauma mallintamaan tulevia sisälämpötiloja seuraavasti (ks. yhtälö 4.22):

$$p(\mathbf{y}_* | \mathbf{X}_*, \mathbf{X}, \mathbf{f}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_* + \mathbf{K}_* \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{m}_*), \mathbf{K}_{**} - \mathbf{K}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{K}_*^T) \quad (4.37)$$

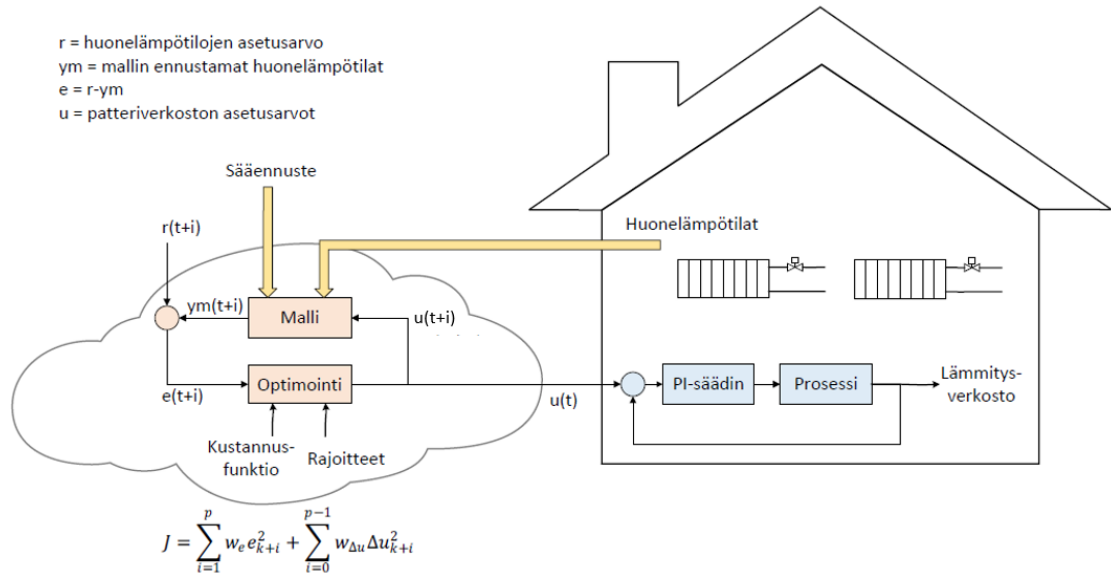
Tällä tavoin saatu odotusarvovektori kuvaa nyt lähtötietojen perusteella tehtyä parasta arvausta tulevista huonelämpötiloista. Kuvassa 4.5 nähdään esimerkki, jossa liikuntasalin lämpötilaa on mallinnettu kyseisellä menetelmällä.



Kuva 4.5. Esimerkki liikuntasalin huonelämpötilan mallintamisesta käyttäen Gaussin prosessia.

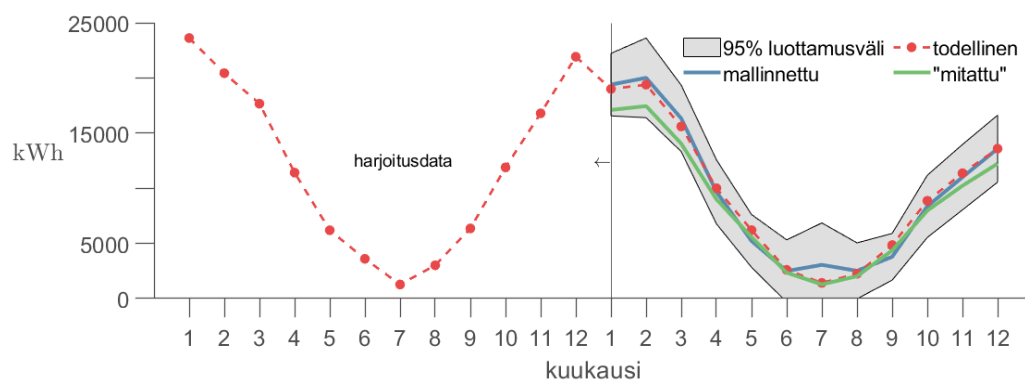
Tämänkaltaista mallintamista voidaan hyödyntää esimerkiksi älykkäässä lämmityksen säädössä, optimoimalla patteriverkoston menoveden lämpötila siten, että huonelämpötilat pysyisivät mahdollisimman tasaisesti tavoitellussa arvossaan. Rakennusten lämmityksen säätäminen on perustunut jo vuosia ajatukseen lineaarisesta riippuvuudesta ulkolämpötilaan nähden. Tämä on saattanut johtaa siihen, että rakennuksen sisälämpötila-

lat ovat vaihdelleet tai lämmitysverkostossa on esiintynyt turhia häviöitä. Kehittyneiden malliprediktiivisten säätömenetelmien tehokas käyttäminen lämmityksen säätämisessä edellyttää toimivaa, mutta mahdollisimman vähän laskentatehoa vaativaa mallia rakennuksen millä tavoin ulkolämpötila ja lämmitysverkoston lämpötila vaikuttavat sisälämpötilaan.



Kuva 4.6. Esimerkki patteriverkoston kehittyneestä säätömenetelmästä.

Kuvassa 4.6 on havainnollistettu tämän tyyppisen kehittyneen säätömenetelmän toimintaa rakennuksen patteriverkoston menoveden lämpötilan säädössä. Mallin ja sääennusteen avulla luodaan ennuste tulevista huonelämpötiloista ja verrataan sitä tavoiteltuun huonelämpötilaan, jolloin säädin voi optimoida patteriverkostolle parhaat mahdolliset asetusarvot.



Kuva 4.7. Esimerkki Gaussin prosessin soveltamisesta energiansäästötoimenpiteiden todentamisessa.

Toinen sovelluskohde mallintamiselle on jo aiemmin esitetty esimerkki energiatehokkuustoimenpiteiden todentamisesta. Kuvassa 4.7 on havainnollistettu tätä. Edellisen vuoden kuukausikulutuksia on käytetty mallin harjoitusdatana. Syntyneen mallin perusteella on mallinnettu seuraavan vuoden kuukausikulutuksia keskimääräisen ulkolämpötilan perus-

teella. Verrattaessa sinistä mallinnusta kuvaavaa viivaa ja punaista todellista kulutusta kuvaavaa viivaa voidaan nähdä, että mallinnus on onnistunut kohtuullisen hyvin. Vihreä viiva esittää kuvitteellista tilannetta, että rakennukseen olisi tehty toimenpiteitä, joilla on vaikutusta sen energiankulutukseen. Tällaisessa tilanteessa mallinnettuja kulutustietoja voitaisiin käyttää vertailukohtana tähän kulutukseen ja todentaa sillä tavoin tehtyjen toimenpiteiden vaikutuksia. Tämän kaltaista esimerkkiä on käsitelty tarkemmin seuraavassa luvussa, jossa koneoppimista hyödyntäen pyritään todentamaan kolmeen kerrostaloyhtiöön tehtyjen energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutuksia.

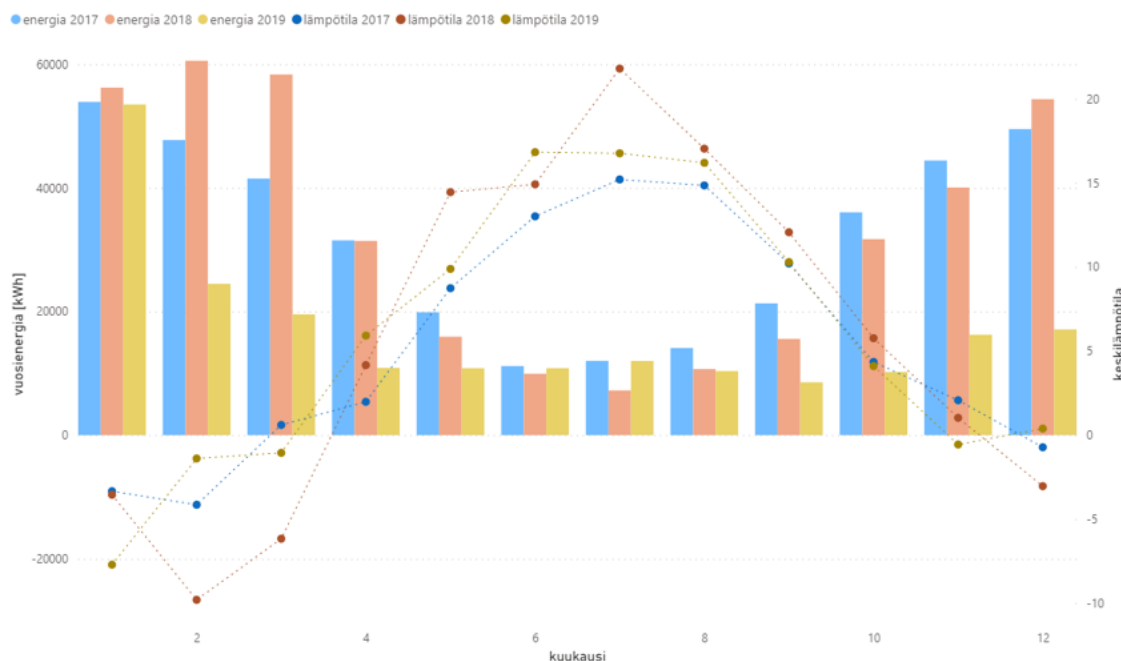
5 ENERGIATEHOKKUUSTOIMENPITEIDEN TODENTAMINEN GAUSSIN PROSESSIN AVULLA

Tässä työssä käsiteltävän varsinaisen tarkastelun tavoitteena oli hyödyntää koneoppimista kolmeen kerrostaloyhtiöön tehtyjen energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusten todentamisessa. Varsinaisia energiatehokkuustoimenpiteitä ei työssä esitellä, sillä ne ovat työn kannalta toisarvoisia. Tehdyillä toimenpiteillä on tavoiteltu yhtiöiden lämmitysteho- huippujen pienentämistä ja vähentämistä sekä energian kulutuksen vähentämistä. Koneoppimista hyödyntäen pyritään mallintamaan tilanne, missä energiatehokkuustoimenpiteitä ei ole tehty, jolloin todellista mitattua kutusta voidaan verrata tähän. Vertailun kohteena ovat olleet yhtiöiden tuntitehontarpeet sekä kuukausittainen energiankulutus. Tuntitehoja vertailemalla on pyritty tarkastelemaan, onko tehdyillä toimenpiteillä kyetty leikkaamaan yhtiöiden suurimpia tehontarpeita. Tämä on tarpeen sillä kaukolämmön laskutuksessa perusmaksu määräytyy monesti suurimman tarvittavan lämmitystehon perusteella. Energiankulutuksen vähentäminen sen sijaan vaikuttaa suoraan yhtiön lämmityksestä aiheutuvaan hiilijalanjälkeen sekä lämmityskustannuksiin.

Kuvassa 5.1 on esitetty yhden tarkasteltavan kohteen kuukausittainen lämpöenergian kulutus sekä ulkoilman keskilämpötila vuosilta 2017, 2018 ja 2019. Kuvasta nähdään, että vuonna 2019 lämpöenergian kuukausikulutukset ovat huomattavasti alhaisempia kuin vuonna 2017. Koska lämpöenergian tarpeeseen vaikuttaa pääasiassa sisä- ja ulkolämpötilan välinen ero sekä käyttöveden tarve, ei vuosia voida verrata suoraan keskenään. Verrattaessa esimerkiksi vuosien 2017 ja 2019 helmikuun kulutuksia, on kulutus ollut huomattavasti alhaisempi vuonna 2019. Osittain vähäisempi kulutus vuoden 2019 helmikuussa johtuu kyseisen kuukauden korkeammasta ulkoilman keskilämpötilasta, jolloin ei voida sanoa kuinka paljon energian tarpeen pienentymisestä johtuu ulkolämpötilasta ja kuinka paljon rakennuksen teknisistä ja käyttötapaan tehdyistä muutoksista. Syyskuussa 2017 ja 2019 sen sijaan näyttäisi olevan ulkoilman keskilämpötila lähes sama molempina vuosina. Kyseisen kuukauden osalta voidaan tällöin vertailla kulutuksia olettaen, että ulkolämpötilalla ei ole niin suurta merkitystä syntyneeseen eroon energian tarpeessa. Tämän perusteella voidaan jo sanoa, että tehdyillä toimenpiteillä on ollut jotain vaikutuksia ainakin kyseisen kuukauden osalta.

Yhtiöihin tehdyt toimenpiteet ovat ajoittuneet vuoteen 2018 ja mahdollisesti vuoteen 2019. Tarkastelussa käytettiin dataa vuosilta 2016, 2017 ja 2019. Vuoden 2016 dataa on käytetty mallin kouluttamisessa kun taas vuotta 2017 on käytetty testivuotena mallin ja mitatun

Kohde 1 vuosienenergia ja keskilämpötila



Kuva 5.1. Kohteen 1 kuukausittainen lämpöenergian kulutus sekä ulkoilman keskilämpötila vuosilta 2017, 2018 ja 2019.

datan välillä. Koska yhtiöiden tekniikka ja käyttö on ollut hyvin samankaltaista vuosina 2016 ja 2017 tulisi mallinnetun datan vastata vuoden 2017 osalta mitattua dataa melko hyvin. Toimenpiteitä on tehty yhtiöihin vuoden 2018 aikana. Vuonna 2019 toimenpiteet ovat vaikuttaneet koko vuoteen, joten vertailtaessa vuoden 2019 osalta mallinnettua ja mitattua dataa, pitäisi siinä alkaa näkyä tehtyjen toimenpiteiden vaikutuksia vähentyneinä ja pienentyneinä huipputehoina sekä vähentyneenä energiankulutuksena.

5.1 Kulutuksen normitus

Yleisesti erilaisten korjaus- ja muutostoimenpiteiden vaikutusten todentaminen on haastavaa, koska vertailukohtaa muuttumattomasta tilanteesta ei ole. Vertailukohtana saataan käyttää esimerkiksi edellisen vuoden normeerattua kulutusta. Lämmitysenergian normeeraus perustuu rakennuksen sisälämpötilan ja ulkolämpötilan erotukseen verrannolliseen lämmitystarvelukuun. Normeerauksessa käytettävä lämmitystarveluku ei kuitenkaan ota huomioon rakennuksen yksilöllisiä ominaisuuksia. Kuukausittainen lämmitystarveluku saadaan laskemalla yhteen oletetun sisälämpötilan ja ulkolämpötilan vuoro-kausikeskiarvojen erotukset. Yleisimmin käytetään lämmitystarvelukua S17, jossa sisälämpötilan rakennuksessa oletetaan olevan $+17^{\circ}\text{C}$. [14]

Koneoppimiseen perustuvassa mallintamisessa normeeraus tehdään yksilöllisemmin juuri kyseisen rakennuksen ominaisuudet, kuten todelliset huonelämpötilat, ja käyttäytymisen huomioon ottaen. Näin saadaan vertailuarvot energian kulutukselle tai tehon tar-

peelle. Vertailuarvot kuvaavat tilannetta, jossa rakennuksen käytössä tai järjestelmissä ei ole tapahtunut muutosta. Vertaamalla mitatattuja kulutuslukemia näihin vertailulukuihin saadaan arvio tehtyjen teknisten- ja käyttötoimenpiteiden vaikutuksesta rakennuksen energiatehokkuuteen.

5.2 Tarkastelussa käytetty data ja sen valmistelu

Rakennuksen lämmitystehon tarve on riippuvainen sisä- ja ulkolämpötilan välisestä lämpötilaerosta, joten ulkolämpötilatieto on erittäin merkittävässä asemassa. Tarkastelussa ulkolämpötilana käytettiin ilmatieteenlaitoksen Tampereen Härmälän mittausaseman tuntikeskiarvoja. Myös tuulen voimakkuudella voi tietyissä tilanteissa olla suurikin vaikutus lämmitystehontarpeelle, mutta koska tuulen suunta ja voimakkuus voi vaihdella hyvinkin paljon riippuen rakennusta ympäröivien esteiden ja maastonmuotojen mukaan eikä saatavilla ollut tarkempaa tietoa tuulen voimakkuudesta juuri kyseisten rakennusten osalta, päätettiin se jättää tarkastelun ulkopuolelle.

Käyttöveden lämmittämiseen tarvittava lämmitysteho riippuu tietenkin siitä kuinka paljon ja milloin vettä käytetään. Lähtökohtaisesti tämä voi siis olla täysin satunnaista. Oletettavaa on kuitenkin, että lämmitystehon tarpeella on jonkinlainen korrelaatio viikonpäivän ja kellonajan suhteen. Tämä perustuu oletukseen, että kerrostalojen asukkaiden rutiinit, kuten suihkussa käynti ja ruoanlaitto, pysyvät kohtuullisen samanlaisina. On kuitenkin selvää, että juuri käyttöveden lämmittämiseen tarvittavan tehon arviointiin liittyy tarkastelun suurin epävarmuus.

Tarkastelussa rakennetun mallin sisäänmenoina käytettiin ulkolämpötilaa sekä aikatieta, joka sisälsi tiedon viikonpäivästä sekä kuluvaan vuorokauden tunnista. Vastaavasti mallin ulostulona pyrittiin arvioimaan näitä sisäänmenoja vastaavaa lämmityksen tuntitehontarvetta, joka kuvaa keskimääräistä tunnin aikana tarvittua lämmitystehoa.

Koska aika on syklistä, tulee aikatieta muuttua muotoon, mistä myös käytetty algoritmi ymmärtää sen syklisen luonteen. Algoritmin tulee siis käytännössä ymmärtää esimerkiksi, että vuorokauden viimeinen tunti on lähellä seuraavan vuorokauden ensimmäistä tuntia. Tämän vuoksi aikatieta käytetty sisäänmeno on tarkastelussa muutettua sykliseksi laskemalla \sin ja \cos muunnokset yhtälöillä (5.1) ja (5.2), joissa h_i on kuluva tunti. Molemmat muunnokset tarvitaan, jotta kaikki ajat voidaan erottaa toisistaan. Näiden muunnoksien käyttämisestä ja tarpeellisuudesta voi lukea enemmän esimerkiksi *Towards Data Science* verkkosivulta [5].

$$h_{\sin} = \sin\left(\frac{2\pi h_i}{24}\right), \quad (5.1)$$

$$h_{\cos} = \cos\left(\frac{2\pi h_i}{24}\right). \quad (5.2)$$

Kuvassa 5.2 näkyy osa taulukosta, johon tarkastelussa käytettävät lähtötiedot koottiin. Ennen varsinaista mallin rakentamista lähtötietoja siivottiin poistamalla mm. selvästi virheellisiä lukemia sekä sellaiset ajanhetket, joista puuttui oleellista tietoa kuten ulkolämpötila tai jonkin kohteen lämmitystehotieto. Monesti tämänkaltaisissa mallinnustehtävissä data on kerättyä monesta eri lähteestä, jolloin se saattaa olla joiltain osin puutteellista ja sisältää virheellisiä lukemia. Datan saattaminen käyttökelpoiseksi onkin monesti yksi suurimpia ja aikaavievimpiä töitä ennen varsinaista analysointi ja mallinnustyötä.

	A	B	C	D	E	F	G	K	L	M	R	S	T	U
1	kalenteri	vuosi	kuukausi	pvm	tunti	viikonpv	ulkoT	kohde1	kohde2	kohde3	sin_p	cos_p	sin_tun	cos_tun
6127	1.1.2016 0:00	2016	1	1	0	6	-5.8	76	129	186	-0.782	0.623	0	1
6128	1.1.2016 1:00	2016	1	1	1	6	-5.6	76	149	175	-0.782	0.623	0.259	0.966
6129	1.1.2016 2:00	2016	1	1	2	6	-5.1	79	135	179	-0.782	0.623	0.500	0.866
6130	1.1.2016 3:00	2016	1	1	3	6	-4.7	87	134	171	-0.782	0.623	0.707	0.707
6131	1.1.2016 4:00	2016	1	1	4	6	-4.7	76	119	169	-0.782	0.623	0.866	0.500
6132	1.1.2016 5:00	2016	1	1	5	6	-4.3	75	118	169	-0.782	0.623	0.966	0.259
6133	1.1.2016 6:00	2016	1	1	6	6	-4	77	119	167	-0.782	0.623	1	0.000
6134	1.1.2016 7:00	2016	1	1	7	6	-4.3	81	120	178	-0.782	0.623	0.966	-0.259
6135	1.1.2016 8:00	2016	1	1	8	6	-4.4	89	122	181	-0.782	0.623	0.866	-0.500
6136	1.1.2016 9:00	2016	1	1	9	6	-4.2	96	124	193	-0.782	0.623	0.707	-0.707
6137	1.1.2016 10:00	2016	1	1	10	6	-4.4	95	125	200	-0.782	0.623	0.500	-0.866
6138	1.1.2016 11:00	2016	1	1	11	6	-4.9	98	143	199	-0.782	0.623	0.259	-0.966
6139	1.1.2016 12:00	2016	1	1	12	6	-5.3	109	148	218	-0.782	0.623	0.000	-1
6140	1.1.2016 13:00	2016	1	1	13	6	-5.2	107	146	227	-0.782	0.623	-0.259	-0.966
6141	1.1.2016 14:00	2016	1	1	14	6	-5.4	93	154	221	-0.782	0.623	-0.500	-0.866
6142	1.1.2016 15:00	2016	1	1	15	6	-5.8	92	133	228	-0.782	0.623	-0.707	-0.707
6143	1.1.2016 16:00	2016	1	1	16	6	-7.1	95	154	216	-0.782	0.623	-0.866	-0.500
6144	1.1.2016 17:00	2016	1	1	17	6	-7.6	105	137	217	-0.782	0.623	-0.966	-0.259

Kuva 5.2. Mallin sisäänmenoina käytettiin tietoa viikonpäivästä sekä kuluvan päivän tunti- ja ulkolämpötilan tuntikeskiarvoa. Vastaavasti ulostulona saatiin lämmityksen tunti-tehon keskiarvo.

5.3 Gaussin prosessimallin rakentaminen

Gaussin prosessimallin rakentamisessa käytettiin Matlab-ohjelmistolle tehtyä GPstuff funktiokirjastoa [27]. Ohessa on esitetty esimerkki kirjaston käyttämisestä Matlab-ohjelmistolla kyseisissä tarkasteluissa:

```
lik = lik_gaussian('sigma2', 0.2^2);
gpcf_se = gpcf_sexp('lengthScale', 1, 'magnSigma2', 0.2^2)
gpcf_p = gpcf_periodic('lengthScale', 3.4, 'magnSigma2', 1, ...
    'period', 5, 'lengthScale_sexp', 4, 'decay', 1, ...
    'lengthScale_prior', pt, 'magnSigma2_prior', pt, ...
    'lengthScale_sexp_prior', pt);
gp = gp_set('lik', lik, 'cf', {gpcf_se, gpcf_p});
opt=optimset('TolFun',1e-3,'TolX',1e-3,'Display','iter');
gp=gp_optim(gp,x,y,'optimf',@fminscg,'opt',opt);
[Ef, Varf] = gp_pred(gp, x, y, xt);
```

Esimerkin ensimmäisellä rivillä määritellään tarkastelussa käytettävä gaussinen havaintomalli ja sen prioriparametrit `lik_gaussian` funktiolla. Seuraavaksi on määritelty käytettävät kovarianssifunktiot sekä niiden hyperparametrit `gpcf_sexp` ja `gpcf_periodic` funktioita käyttäen. Kyseisissä tarkasteluissa kovarianssifunktiona käytettiin SE-funktiota sekä jaksollista funktiota (ks. kappale 4.2.3).

Kun käytettävä havaintomalli ja tarvittavat kovarianssifunktiot on määritelty, luodaan Gaussin prosessirakenne `gp_set` funktiolla. Prosessirakennetta luotaessa määriteltiin käytettäväksi edellä mainittujen kovarianssifunktioiden summaa. Jaksollinen kovarianssifunktio lisättiin tarkasteluihin mukaan, johtuen oletuksesta, että käyttöveden lämmittämiseen käytettävä lämmitysteho noudattelee jonkin asteista jaksollisuutta. Myös muita variaatioita kovarianssifunktiosta kokeiltiin, mutta niillä ei havaittu olevan merkittävää vaikutusta mallinnusten lopputuloksiin. On kuitenkin hyvä huomioida, että oikeanlaisen kovarianssifunktion tai niiden yhdistelmän käyttämisellä saattaa olla huomattava vaikutus mallinnusten onnistumiseen.

Prosessirakenteen luomisen jälkeen optimoitiin jokaiselle kohteelle erikseen mallin hyperparametrit `gp_optim` funktiota käyttäen. Funktio käyttää harjoitusdatan sisääntuloja ja ulostuloja palauttaen prosessirakenteen, jonka hyperparametrit on optimoitu niiden MAP-estimaattiin (maksimi a posteriori). Oletuksena `gp_optim` funktio käyttää Matlabin `fminscg` funktiota, mutta myös vaihtoehtoisia tapoja voidaan käyttää. Optimoinninnissa käytettävät asetukset määritellään `optimset` funktiolla. [27]

Lopuksi ennusteen luominen tapahtuu `gp_pred` funktiolla, joka palauttaa ehdollisen posteriorijakauman odotusarvovektorin $\mathbb{E}[\mathbf{y}_* | \mathbf{X}_*, \mathbf{X}, \mathbf{y}, \Theta]$ ja varianssin $\text{var}[\mathbf{y}_* | \mathbf{X}_{\text{ast}}, \mathbf{X}, \mathbf{y}, \Theta]$ testipisteissä \mathbf{X}_* ja hyperparametreillä Θ .

5.4 Mallinnusten tulokset

Seuraavaksi esitetään mallinnusten tuloksia ja verrataan niitä mitattuihin arvoihin. Vertailujen tarkoituksena on selvittää kuinka hyvin mallinuksissa onnistuttiin ja minkälaisia vaikutuksia rakennuksiin tehdyillä energiatehokkuustoimenpiteillä on ollut rakennusten huipputehon tarpeeseen sekä kokonaisenergian kulutukseen.

5.4.1 Virhetarkastelu

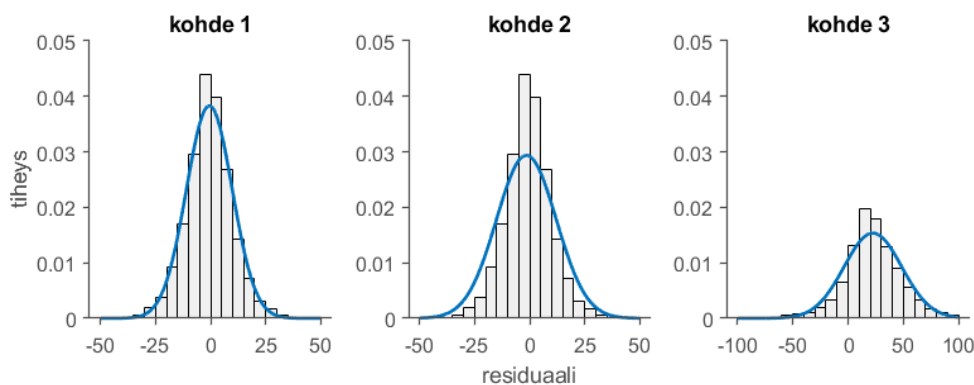
Tarkastelun lähtöoletuksena oli, että vuosi 2017 olisi kohteiden teknisten järjestelmien ja käytön osalta hyvin samankaltainen kuin vuosi 2016. Tästä johtuen vuoden 2017 mitattuja lukemia käytettiin mallinnuksen testidatana.

Taulukossa 5.1 on esitetty Kohteiden mallinnusten RMSE-arvot vuodelta 2017 kuukausitasolla. RMSE-arvot kuvaavat ikään kuin ennuste- ja havaintovektorin välistä etäisyyttä, eikä niiden perusteella sinällään voida tehdä johtopäätöksiä mallin hyvydestä. Tässä tarkastelussa RMSE-arvoja käytettiin lähinnä käytettävän Gaussin prosessimallin määrittelyssä, kun kokeiltiin erilaisten kovarianssifunktioiden, ja niiden yhdistelmien, vaikutusta mallinnustuloksiin. Taulukosta 5.1 nähdään kuitenkin, että kohteen 1 RMSE-arvot ovat pienimmät. Kohteen 2 arvot ovat hieman suuremmat ja kohteen 3 arvot selkeästi korkeammat kuin kahdella muulla kohteella. Tämä on sinällään luontevaa, sillä itse tunti-

Taulukko 5.1. Vuoden 2017 mallinnusten RMSE-arvot.

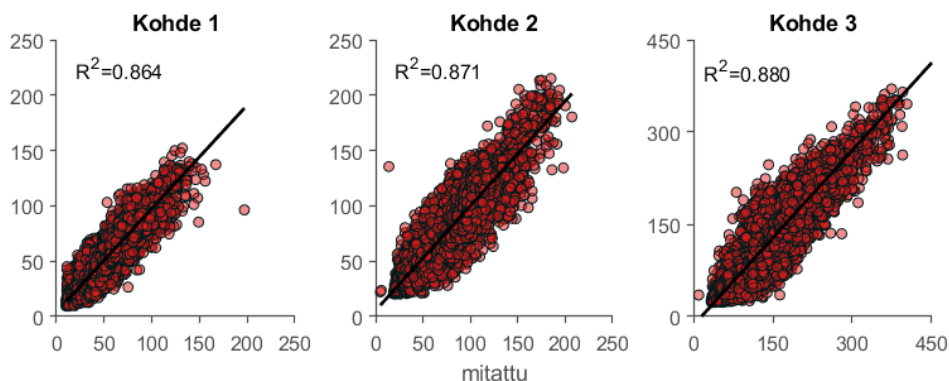
	kohde 1	kohde 2	kohde 3
tammi	10.5	13.5	32.8
helmi	10.6	16.0	27.9
maalis	10.3	12.9	25.1
huhti	12.3	16.5	27.7
touko	12.4	16.5	34.5
kesä	8.7	9.5	25.9
heina	6.4	7.0	19.6
elo	6.7	7.9	29.9
syys	10.6	12.1	49.2
loka	11.0	13.6	46.4
marras	11.0	17.6	40.5
joulu	12.4	15.8	34.0
vuosi	10.4	13.7	34.3

tehotkin ovat suurempia kohteilla 2 ja 3. Kohde 3 erottuu myös varsinaisessa tehontarpeessa huomattavasti 1. ja 2. kohteesta, sen maksimitehontarpeen ollessa parhaimmillaan n. $400 \frac{kWh}{h}$, kun taas kahdella muulla maksimitehontarve on hieman alla ja hieman yli $200 \frac{kWh}{h}$. Tällöin suhteellisesti samansuuruiset virheet mallinnuksessa saattavat näkyä suurempana absoluuttisena virheenä niissä kohteissa, joissa tehoaluekin on suurempi.

**Kuva 5.3.** Kohteiden vuoden 2017 mitattujen ja mallinnettujen arvojen välisten residuaalien jakaumat.

Kuvassa 5.3 on kuvattuna vuoden 2017 mallinnusten jäännösarvojen jakaumat. Jakamista nähdään, että kohteiden 1 ja 2 jäännösarvojen odotusarvot ($\mu_1 = -0.57$ ja $\mu_2 = -1.50$) ovat lähellä nollaa, mitä voidaan pitää yhtenä onnistuneen regressiomallin ominaisuutena. Sen sijaan kohteen 3 jäännösarvot ovat painottuneet hieman nollan oikealle puolella ($\mu_3 = 22.40$) mikä viittaa, että mallinnetut arvot vaikuttaisivat jäävän pienemmiksi kuin mitatut arvot.

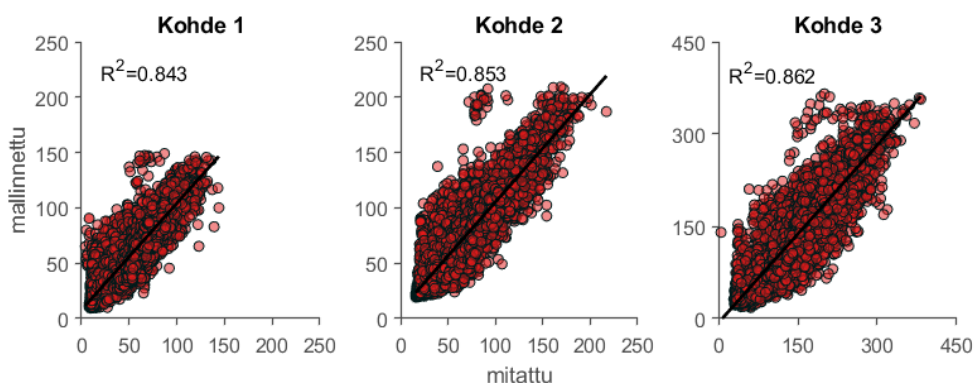
5.4.2 Lämmityksen tuntitehot vuosina 2017 ja 2019



Kuva 5.4. Kohteiden vuoden 2017 mitattujen ja mallinnettujen teholukemien lineaarinen riippuvuus toisistaan.

Tiedossa oli, että kohteisiin on tehty toimenpiteitä, joiden tavoitteena on vähentää kohteiden huipputehontarvetta. Oletuksena oli, että toimenpiteet on tehty kohteisiin vuoden 2018 aikana, mutta täyttä varmuutta tästä ei ollut. Vertailukohtaksi vuodelle 2017 valittiin vuosi 2019, jolloin tehtyjen toimenpiteiden vaikutusten pitäisi näkyä mitatuissa lukemisissa. Mallinnusten tavoitteena on tällöin toimia vertailukohtana ja kuvata tilannetta, jossa toimenpiteitä ei ole tehty. Tällä tavoin pyritään todentamaan toimenpiteiden vaikutus kohteiden huipputehon tarpeeseen.

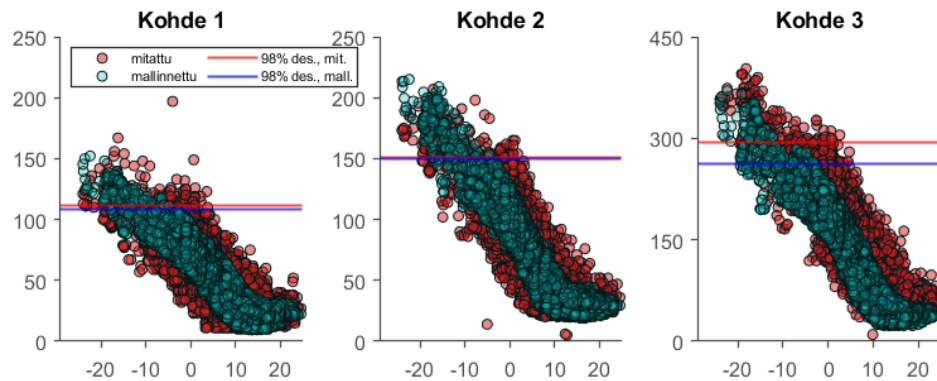
Kuvassa 5.4 on esitetty vuoden 2017 lineaarinen riippuvuus mitattujen ja mallinnettujen tuntitehon välillä. Kuvasta huomataan, että lukemat kertyvät regressiosuoran ympärille, joka osaltaan viittaa mallinnuksen onnistumiseen. Toki on huomattava, että hajontaa lukemisissa esiintyy ja regressiosuorat eivät lähde aivan origosta. Kohteen kolme osalta havaitaan, että regressiosuora ja sen ympärillä oleva pistepilvi ovat siirtyneet hieman origon oikealle puolelle, mikä osaltaan vahvistaa käsitystä, että vuoden 2017 mallinnetut tuntitehot ovat keskimäärin vastaavia mitattuja tuntitehoja pienempiä.



Kuva 5.5. Kohteiden vuoden 2019 mitattujen ja mallinnettujen teholukemien lineaarinen riippuvuus toisistaan.

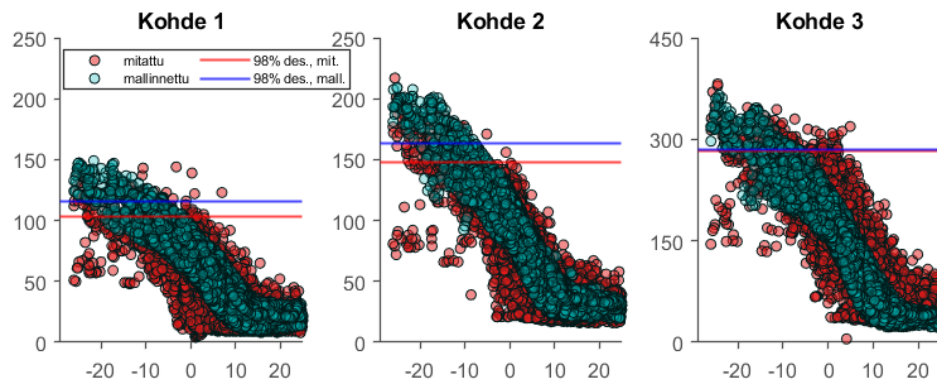
Kuvassa 5.5 on esitetty sama asia vuoden 2019 osalta. Kuvasta havaitaan jokaisen kohteen kohdalla pienet pistepilvet, jotka ovat ikään kuin irronneet isommasta pilvestä va-

semmlle. Näyttäisi siis, että tietyillä tunneilla mallinnetut tuntitehot ovat olleet huomattavasti suurempia kuin todelliset mitatut lukemat. Tämä taas indikoi rakennuksiin tehtyjen toimenpiteiden vaikutuksista, kun yhtenä tavoitteena oli rajoittaa suurimpia tehontarpeita.



Kuva 5.6. Kohteiden mallinnetut ja mitatut tuntitehot vuodelta 2017.

Kuvaan 5.6 on piirretty kohteiden mallinnetut ja mitatut tuntitehot ulkolämpötilan suhteen vuonna 2017. Kuvassa näkyy myös viivat, jotka ilmaisevat tason, jonka alapuolella on 98% kaikista tuntitehoarvoista. Kuten kuvasta näkyy kohteiden 1 ja 2 osalta sekä mallinnettujen, että mitattujen arvojen kohdalla viivat ovat hyvin lähellä toisiaan. Tämä viittaa siihen, että mallinnus on onnistunut kohtuullisen hyvin ja vuonna 2017 rakennuksen tekniset järjestelmät ja käyttäjät ovat toimineet samankaltaisesti kuin vuonna 2016. Sen sijaan kohteen 3 osalta voidaan tehdä sama havainto kuin aiemmin. Mallinnettujen arvojen viiva on alempana kuin mitattujen arvojen, eli mallinnetut arvot näyttäisivät olevan alhaisempia kuin mitatut. Tämä näkyy selvästi myös pisteitä katsomalla. Mallin tuottamat pisteet näyttäisivät pakkaantuvan mitattujen arvojen pistepilven vasempaan reunaan.

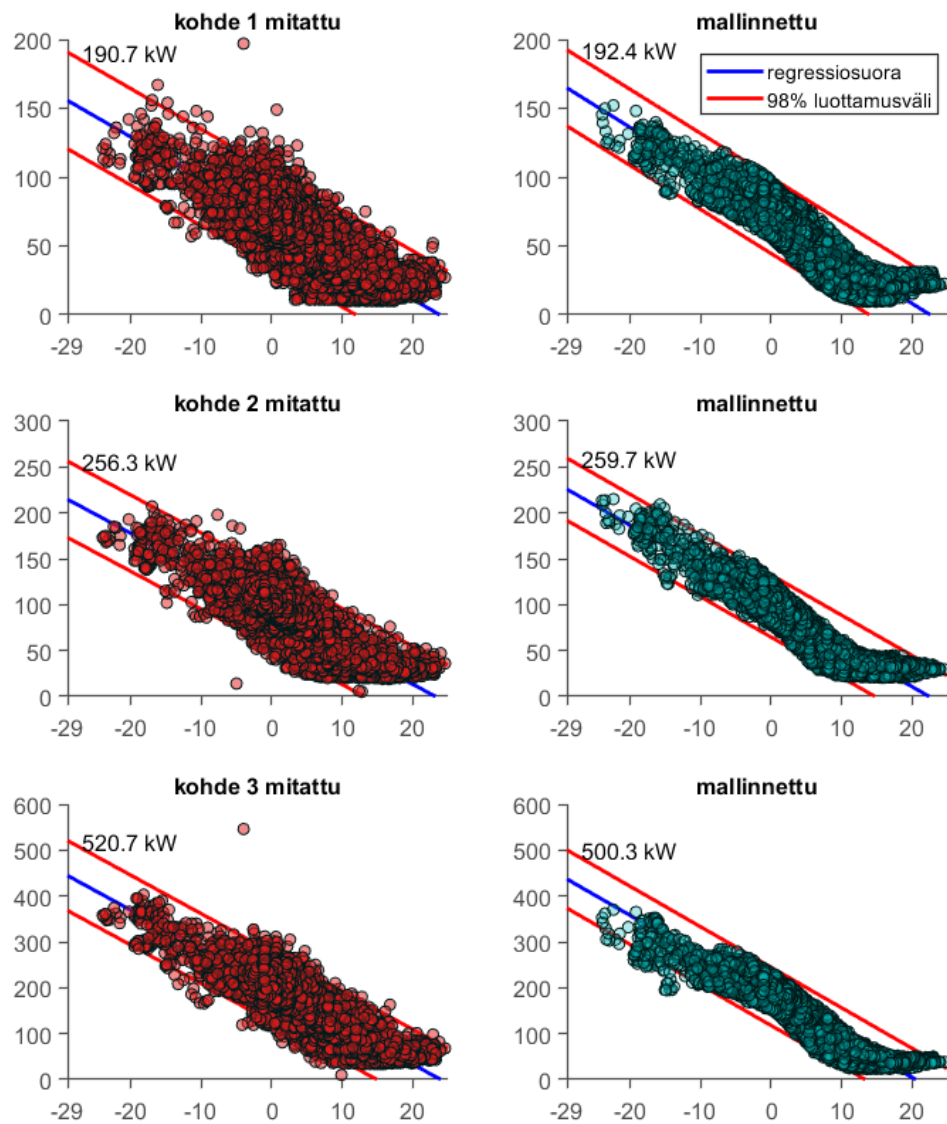


Kuva 5.7. Kohteiden mallinnetut ja mitatut tuntitehot vuodelta 2019.

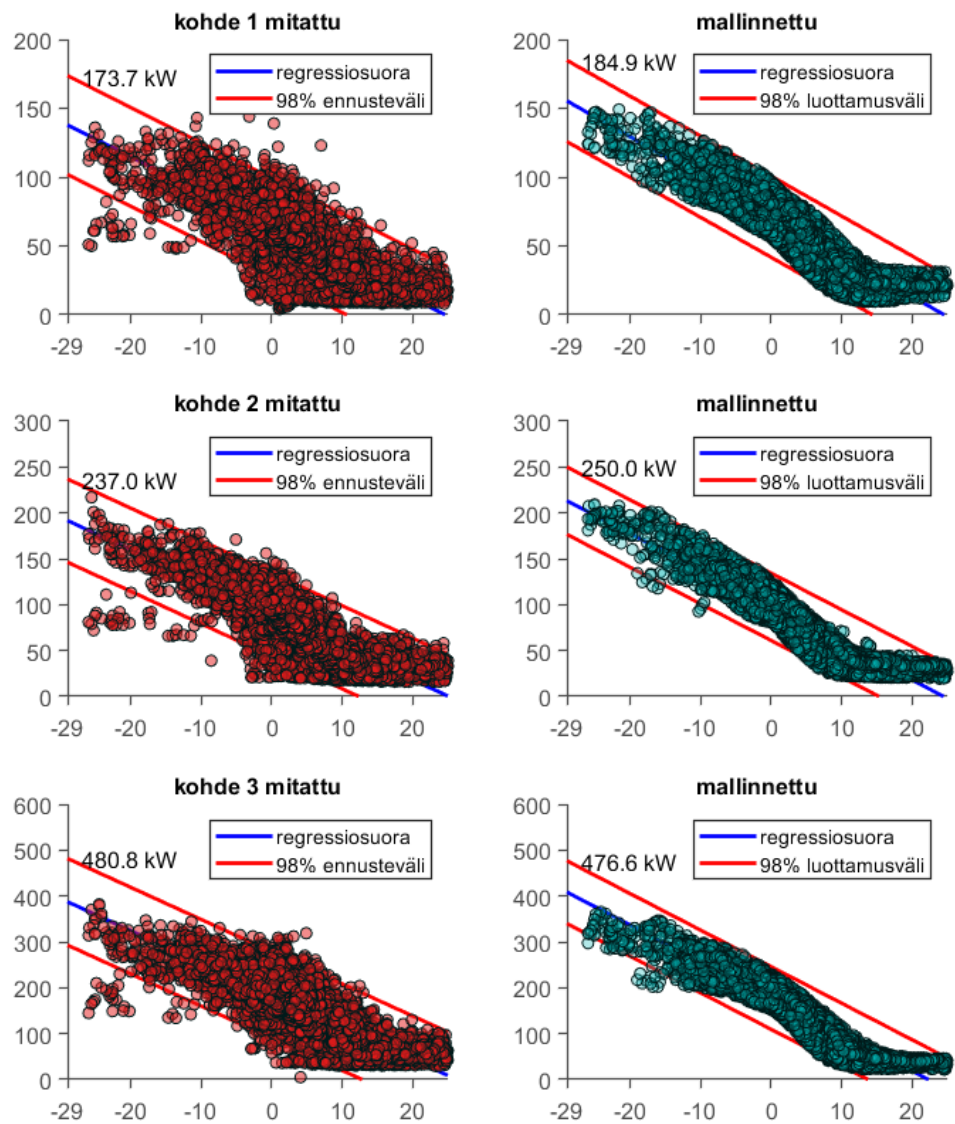
Sama vertailu vuoden 2019 osalta on esitetty kuvassa 5.7. Kuvasta nähdään kaksi asiaa. Ensinnä kuvassa näkyy myös kuinka osa kovimpien pakkasten todellisista tuntitehoista on laskenut alemmas muodostaen oman pienen erillisen pistepilven. Lisäksi mitattujen arvojen 98%:n raja on tippunut kaikissa kolmessa kohteessa alemmas. Nämä havainnot tukevat väitettä, että rakennuksiin tehdyillä muutoksilla on onnistuttu rajoittamaan suurimpia tuntitehoja.

Yksi tapa tarkistaa rakennuksen kaukolämmön laskutuksen sopimusvesivirran suuruus on regressiolaskentamentelmä [25]. Menetelmässä muodostetaan regressiosuorat mitoituskolämpötilaa vastaavan tehontarpeen ja kaukolämpöveden jäähtymän selvittämiseksi. Tehontarpeen määrittämisessä käytetään 98%:n luottamusvälin ylärajaa $-29\text{ }^{\circ}\text{C}$ lämpötilassa. Kuvaan 5.8 on muodostettu kyseiset regressiosuorat vuoden 2017 osalta. Tästä tehtävät havainnot tukevat edellisiä havaintoja. Kohteiden 1 ja 2 osalta maksimitehontarve osuu hyvin lähelle mallinnettujen ja mitattujen lukemien välillä, kun taas kohteen 3 osalta mallinnus antaa pienemmän maksimitehontarpeen kuin mitatut lukemat.

Tarkasteltaessa maksimitehon tarvetta vuoden 2019 osalta voidaan kuvasta 5.9 havaita, että mitattujen arvojen perusteella määriteltynä maksimitehon tarve on jonkin verran alhaisempi kuin mallinnettujen arvojen perusteella määritelty maksimitehon tarve. Kohteen 3 osalta ero mitattujen ja mallinnettujen arvojen välillä on kaventunut. Nämä havainnot tukevat aikaisempia päätelmiä tehtyjen toimenpiteiden vaikutuksista maksimitehontarpeeseen.



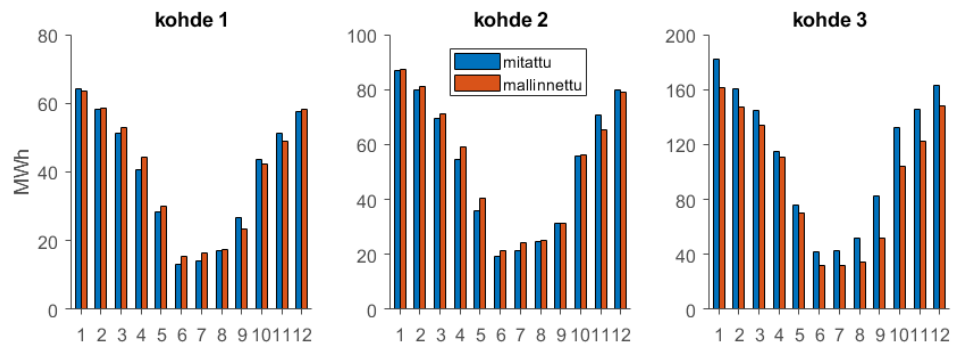
Kuva 5.8. Kohteiden laskutustehon määräytyminen vuonna 2017 mitattujen ja mallinnettujen arvojen perusteella.



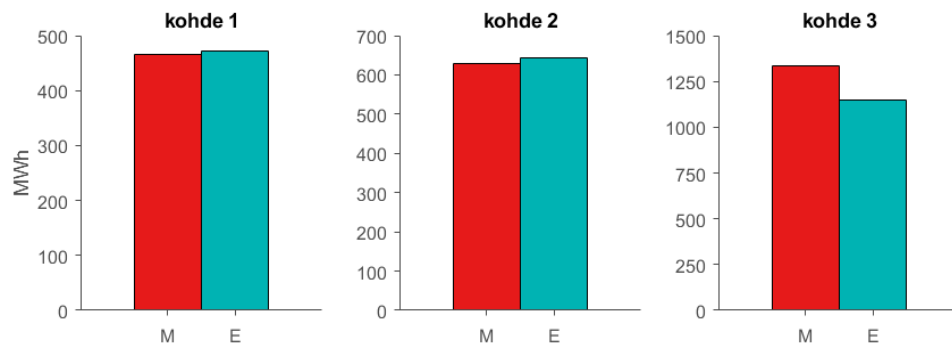
Kuva 5.9. Kohteiden laskutustehon määräytyminen vuonna 2019 mitattujen ja mallinnettujen arvojen perusteella.

5.4.3 Rakennusten energiankulutus vuosina 2017 ja 2019

Maksimitehontarpeen rajoittamisen lisäksi rakennuksiin tehdyillä toimenpiteillä tavoiteltiin kokonaisuudessaan pienempää energiankulutusta, jonka vaikutus lämmityksestä aiheutuviin kustannuksiin on vielä toistaiseksi huomattavasti suurempi kuin pienentyneen maksimitehon tarpeen. Kuvassa 5.10 on esitetty kohteiden kuukausittaiset energiankulutukset vuodelta 2017 ja kuvassa 5.11 koko vuoden osalta. Kuvista voidaan havaita, että mitatut ja mallinnetut kulutukset vastaavat melko hyvin toisiaan, mutta pieniä poikkeamia etenkin kuukausitasolla esiintyy. Kohteen 3 osalta erot ovat suurempia ja noudattavat jo aiemmin havaittua säännönmukaisuutta.

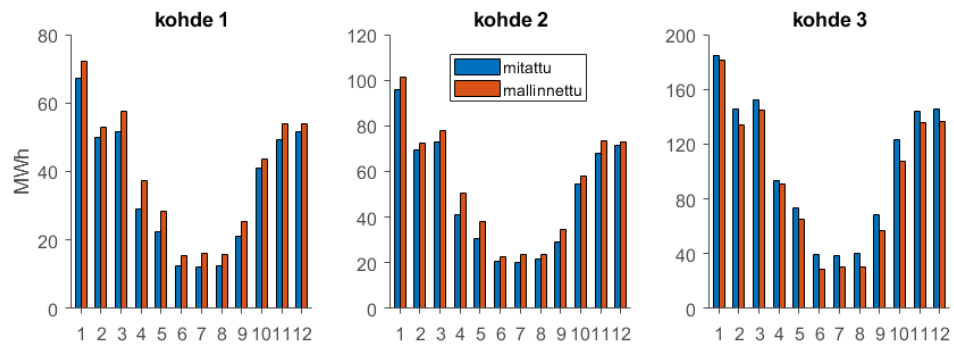


Kuva 5.10. Kohteiden mitattu ja mallinnettu kuukausittainen energiankulutus vuonna 2017.

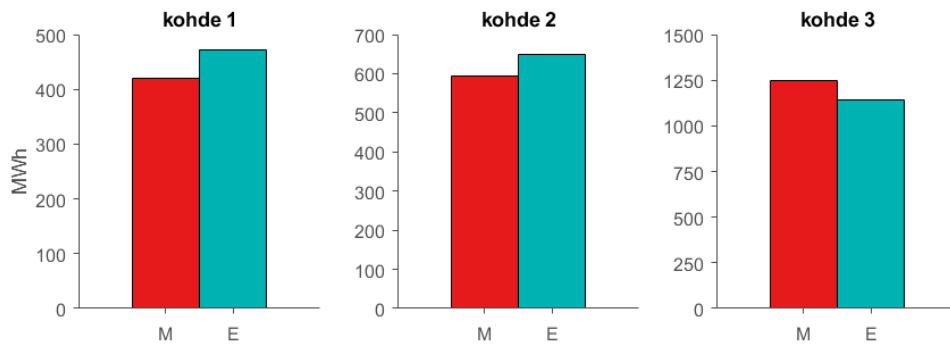


Kuva 5.11. Kohteiden vuosikulutukset 2017.

Kuvissa 5.12 ja 5.13 on esitetty sama asia vuoden 2019 osalta. Kuvasta 5.12 havaitaan, että mitatut kulutukset ovat joka kuukausi pienempiä kuin mallinnetut, lukuunottamatta kohdetta 3. Myös kohteen 3 osalta voidaan kuitenkin havaita, että ero mitattujen ja mallinnettujen kulutusten välillä on kaventunut vuoteen 2017 nähden. Vaikutus näkyy tietenkin myös vuositasolla ja kuvasta 5.13 nähdään, että kohteiden 1 ja 2 osalta vuoden 2019 todellinen kokonaisenergiankulutus on huomattavasti pienempi kuin mallinnettu. Kohteen 3 osalta ero todellisen ja mallinnetun kulutuksen välillä on kaventunut vuodesta 2017.



Kuva 5.12. Kohteiden mitattu ja mallinnettu kuukausittainen energiankulutus vuonna 2019.



Kuva 5.13. Kohteiden vuosikulutukset 2019.

Näiden havaintojen perusteella voidaan sanoa, että tehdyt toimenpiteet ovat säästäneet energiaa verrattuna tilanteeseen, jossa toimenpiteitä ei olisi tehty. Kohteiden 1 ja 2 osalta voidaan arvioida vuositason energiansäästön olleen n. 50 MWh. Kohteen 3 osalta arvion tekeminen on hankalampaa, johtuen mallinnuksessa esiintyneestä epävarmuudesta.

6 JOHTOPÄÄTÖKSET

Työn tavoitteena oli tarkastella sopiiko Gaussin prosessi koneoppimismenetelmänä rakennuksista kerättävän aikasarjadataan perusteella tehtävään mallintamiseen ja voidaanko sitä hyödyntää kolmeen kerrostaloon tehtyjen energiatehokkuustoimenpiteiden vaikutusten todentamiseen.

Tehtyjen mallinnusten perusteella voidaan todeta, että menetelmää käyttäen onnistuttiin kohtuullisen hyvin mallintamaan rakennusten tuntitehontarvetta vähäisilläkin sisäänmenomuuttujilla. Voidaan olettaa, että suurin epävarmuustekijä mallinuksissa liittyy lämpimän käyttöveden kulutukseen ja siitä aiheutuvaan tehon tarpeeseen. Mittaamalla käyttöveden kulutusta voitaisiin mallinnustarkkuutta luultavasti parantaa huomattavasti. Toisaalta rakennuksista on jo tällä hetkellä usein saatavissa tieto käyttöveden lämmityksen säätöventtiilin asennosta. Myös tämän tiedon ottaminen yhdeksi lisämuuttujaksi voisi parantaa mallinnuksen tarkkuutta.

Tehtyjen tarkastelujen avulla voidaan todeta, että rakennuksiin tehdyillä energiatehokkuustoimenpiteillä on ollut positiivinen vaikutus sekä suurimpien tuntitehontarpeiden rajoittamiseksi, että kokonaisenergian kulutuksen vähentämiseksi. Vaikka vaikutukset ovat selvät, niiden absoluuttista suuruutta etenkin tuntitasolla on vaikea arvioida. Tuntitason absoluuttisten vaikutusarvioiden tekemiseksi mallin tulisi olla tarkempi, johon voitaisiin päästä esimerkiksi edellä kuvatulla tiedolla lämpimän käyttöveden kulutuksesta. Mallin Vuosikulutusten osalta voidaan tehdä kohtuullisen hyvä arvio kohteiden 1 ja 2 toteutuneesta energiansäästöstä. Sen sijaan kohteen 3 osalta mallinnuksessa esiintyi enemmän epävarmuutta. Tämä voi johtua esimerkiksi kyseisessä rakennuksessa tapahtuneista muutoksista, joista ei ollut tietoa ja joilla on ollut tehontarvetta lisäävä vaikutus vuonna 2017. Toisaalta myös tämän rakennuksen osalta voidaan mallinnusten perusteella tehdä päätelmä, että kohteeseen on vuoden 2018 aikana tehty toimenpiteitä, jotka ovat pienentäneet lämmityksen maksimitahon tarvetta sekä vähentäneet kokonaisenergian kulutusta verrattuna tilanteeseen, että toimenpiteitä ei olisi tehty.

Voidaan myös todeta Gaussin prosessin soveltuvan rakennuksista kerätyn datan perusteella tehtävään mallintamiseen. Sopivien sisäänmenomuuttujien valinta edellyttää kuitenkin mallintajalta ymmärrystä rakennusten järjestelmien toiminnasta ja vuorovaikutuksista. Myös mallien testaamiseen kannattaa kiinnittää huomiota, jotta voidaan arvioida minkälaisia johtopäätöksiä ja minkälaisiin sovelluksiin mallintamista voidaan hyödyntää.

Koneoppimisella voi olla merkittäviä sovelluskohteita rakennusten toiminnan analysoin-

nissa ja entistä älykkäämpien ohjausmenetelmien kehityksessä. Tässä työssä tarkastellun energiatehokkuustoimien vaikutusarvioinnin lisäksi mahdollisia sovelluskohteita voisivat olla myös mallipohjainen ennustava säätö, ylläpitokustannusten ennakointi käyttöasteen perusteella, vikadiagnostiikka erilaisia poikkeamia tunnistamalla ja ryhmittelyyn perustuva älykäs ohjaus. Nämä ovat kuitenkin vain pintaraapaisu mahdollisista sovelluskohteista ja onkin nähtävissä, että myös rakennusala tarjoaa huomattavasti innovaatiomahdollisuuksia tekoälyn ja koneoppimisen hyödyntämiseksi. Erilaisten menetelmien ja sovellusten saattaminen käytäntöön vaatii kuitenkin vielä huomattavasti lisätutkimusta ja kehitystyötä. On monia kysymyksiä, joihin tulee vielä etsiä vastauksia. Minkälainen tieto on merkityksellistä? Kuinka tietoa kerätään ja kuka sen omistaa? Minkälaisia mahdollisuuksia eri menetelmillä on? Mitä rajoitteita niillä on? Kuinka menetelmät saadaan tuotantoon?

Haasteena ei enää tänä päivänä ole niinkään tiedon kerääminen rakennuksista, vaan tämän tiedon jalostaminen rakennusten käyttäjiä, ylläpitäjiä, rakentajia ja omistajia palvelemaan hyötykäyttöön.

LÄHTEET

- [1] K. Bailey. *Gaussian Processes for Dummies*. 9. elokuuta 2016. URL: <https://katbailey.github.io/post/gaussian-processes-for-dummies/> (viitattu 11.07.2019).
- [2] M. Banko ja E. Brill. *Scaling to Very Very Large Corpora for Natural Language Disambiguation*. ACL '01 Proceedings of the 39th Annual Meeting on Association for Computational Linguistics, 2001, 26–33.
- [3] T. Bayes. *Essay Towards Solving a Problem in the Doctrine of Chances*. Philosophical Transactions of the Royal Society, 1763.
- [4] D. S. Bernstein. *Matrix mathematics: theory, facts, and formulas*. Englanti. 41 William Street, Princeton, New Jersey 08540: Princeton University Press, 2009, 117–118.
- [5] P.-L. Bescond. *Cyclical features encoding, it's about time!* URL: <https://towardsdatascience.com/cyclical-features-encoding-its-about-time-ce23581845ca> (viitattu 15.12.2020).
- [6] D. Duvenaud. *Automatic Model Construction with Gaussian Processes*. Doctoral thesis. University of Cambridge, 2014.
- [7] M. Ebden. *Gaussian Processes for Regression: A Quick Introduction*. arXiv:1505.02965v2, 2015.
- [8] *Elements of AI (verkkokurssi)*. URL: <https://www.elementsofai.com/> (viitattu 30.01.2021).
- [9] *Encyclopædia Britannica*. 20. heinäkuuta 1998. URL: <https://www.britannica.com/biography/Thomas-Bayes> (viitattu 12.07.2019).
- [10] A. Geron. *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow*. Englanti. 1005 Gravenstein Highway North, Sebastopol, CA 05472: O'Reilly Media Inc., 2017.
- [11] J. Görtler, R. Kehlbeck ja O. Deussen. *A Visual Exploration of Gaussian Processes*. URL: <https://www.jgoertler.com/visual-exploration-gaussian-processes/> (viitattu 11.07.2019).
- [12] A. Halevy, P. Norvig ja F. Pereira. *The Unreasonable Effectiveness of Data*. Intelligent Systems, IEEE, 2009, 8–12.
- [13] A. Hilden, P. Järventausta, K. Systä, O. Hylli ja V. Heikkilä. *A Data Collection Platform of a Modern Building for Smart Energy Applications*. Power System Computation Conference, Portugali, 2020.
- [14] Ilmatieteenlaitos. *Lämmitystarveluku eli astepäiväluku*. URL: <https://www.ilmatieteenlaitos.fi/lammitystarveluvut> (viitattu 04.02.2021).
- [15] A. J. Izenman. *Modern Multivariate Statistical Techniques*. Englanti. New York Heidelberg: Springer, 2008.

- [16] E. T. Jaynes. *Probability theory: the logic of science*. Englanti. The Edinburgh Building, Cambridge, United Kingdom: Cambridge university press, 2003.
- [17] P. Kannan. *Artificial Intelligence - Applications in Healthcare*. 30. toukokuuta 2017. URL: <https://www.asianhnm.com/technology-equipment/artificial-intelligence> (viitattu 29.01.2021).
- [18] *Machine learning with MATLAB*. The MathWorks, inc. 2016. URL: <https://se.mathworks.com/campaigns/offers/machine-learning-with-matlab.html>.
- [19] T. Mitchell. *Machine Learning*. Englanti. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1997.
- [20] K. P. Murphy. *Machine learning: a probabilistic perspective*. Englanti. Cambridge, Massachusetts, London, England: The MIT Press, 2012.
- [21] S. Puntanen, T. Ando, J. Liu, C. Brezinski, C. R. Johnson, F. Zhang, R. L. Smith ja G. P. H. Styan. *The Schur Complement and Its Applications: luku 2 Basic Properties of the Schur Complement*. Englanti. Springer US, 2005, 17–46.
- [22] C. E. Rasmussen. *Gaussian Processes in Machine Learning*. Lecture Notes in Computer Science. Springer Berlin Heidelberg, 2004, 63–71.
- [23] C. E. Rasmussen ja K. I. Williams. *Gaussian Processes for Machine Learning*. Englanti. 55 Hayward Street, Cambridge: MIT Press, 2006.
- [24] J. Rice. *Mathematical Statistics and Data Analysis*. Englanti. Duxbury Press, 1995.
- [25] *Teho ja vesivirta kaukolämmön maksuperusteina*. Energiateollisuus ry. 2014. URL: https://energia.fi/files/586/Teho_ja_vesivirta_SuositusK15_2014.pdf.
- [26] K. Vafa. *Gaussian Process Tutorial*. 14. tammikuuta 2017. URL: <http://keyonvafa.com/gp-tutorial/> (viitattu 11.07.2019).
- [27] J. Vanhatalo, J. Riihimäki, J. Hartikainen, P. Jylänki, V. Tolvanen ja A. Vehtari. *GPs-tuff: Bayesian Modeling with Gaussian Processes*. Journal of Machine Learning Research, 2013, 1175–1179.