ε.δε.μ^2

ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Προσομοίωση Monte Carlo Αλυσίδων Markov:

Αλγόριθμοι Metropolis & Metropolis-Hastings
Προσομοιωμένη Ανόπτηση – Simulated Annealing
Markov Random Fields, Ising Model

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Αίθουσα 02, Νέα Κτίρια ΣΗΜΜΥ

Τρίτη 29/3/2022

Στατιστική Μηχανική και Μηχανική Μάθηση (*Επανάληψη*)

- Οριακή προσέγγιση στατιστικής κατανομής χαρακτηριστικών των δειγματικών στοιχείων $\mathbf{x}(n)$ με αντιστοίχηση μακροσκοπικών μοντέλων συστημάτων **φυσικής μηχανικής** σε **δυναμική ισορροπία** κάτω από ορισμένη θερμοκρασία. Αναλογία εννοιών θερμοκρασίας και εντροπίας (αταξίας) με καταστάσεις και παραμέτρους ελέγχου συστημάτων **Μηχανικής Μάθησης**

- Εκτίμηση (**inference**) στατιστικών ιδιοτήτων δειγματικών στοιχείων εισόδου $\mathbf{x}(n)$ σε συστήματα **Μηχανικής Μάθησης** που αυτό-οργανώνονται χωρίς επίβλεψη (**Unsupervised Learning**) για κωδικοποίηση με εξαγωγή κύριων χαρακτηριστικών, συμπίεση, ταξινόμηση, συμπλήρωση ατελειών, παραγωγή δειγματικών στοιχείων συμβατών με υποθέσεις κατανομής δειγματικού χώρου (**statistical sampling**)

- Επιλογή μοντέλων **Στατιστικής Μηχανικής** για κωδικοποίηση στατιστικών ιδιοτήτων m χαρακτηριστικών (**features**) **μεγάλου** πλήθους N δειγματικών στοιχείων μάθησης που προβάλλονται σε τυχαίες μεταβλητές του δείγματος εισόδου. Τα χαρακτηριστικά των N στοιχείων του δείγματος μάθησης αντιστοιχίζονται στις τιμές των συντεταγμένων των διανυσμάτων εισόδου διαστάσεως $(m \text{ x } 1)$ του περιβάλλοντος δειγματικού χώρου:

$$\mathbf{x}(n) = [x_1(n)\ x_2(i)\ \dots\ x_m(i)]^{\mathrm{T}}, n = 1,2,\dots,N$$

- Πρωτοπορειακή εφαρμογή: **Μηχανή Boltzmann** (***Hinton – Sejnowski***, 1983) για επεξεργασία και ταξινόμηση εικόνων μέσω στατιστικής **γενίκευσης** δειγμάτων μάθησης

Εξέλιξη Συστήματος προς Θερμική Ισορροπία: Ο Αλγόριθμος Προσομοίωσης Markov Chain Monte Carlo (MCMC) του Metropolis (1/6)

Μέθοδοι Προσομοίωσης Markov Chain Monte Carlo (MCMC)

Στόχος η παραγωγή δείγματος (***sampling***) διακριτών τυχαίων μεταβλητών $X_n = x, n = 1,2, \ldots$ μέσω προσομοίωσης και καταγραφής της κατάστασης x σαν ***random walk*** αλυσίδας ***Markov*** με τυχαίες αλλά ελεγχόμενες μεταβάσεις

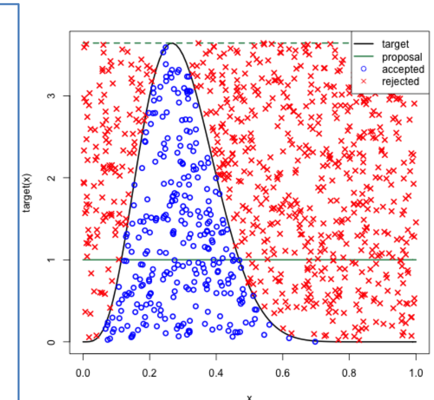
Μία γεννήτρια ***MCMC*** παρακολουθεί την κατάσταση x προσομοιώνοντας την εξέλιξη φυσικού συστήματος προς θερμική ισορροπία με εργοδικές πιθανότητες $\pi(x)$ που προκύπτουν στο όριο σχετικών συχνοτήτων εμφάνισης $f_n(x)$ της x σε n μεταβάσεις:

$$\pi(x) = \lim_{n\to\infty} P(X_n = x) = \lim_{n\to\infty} \frac{f_n(x)}{n}$$

Μια κύρια εφαρμογή: Η εκτίμηση ροπών διακριτών τυχαίων μεταβλητών μέσω παραγωγής δείγματος (***sampling***) συμβατού με κατανομή γνωστής μορφής όταν δεν είναι δυνατή η πλήρης καταγραφή του δειγματικού χώρου και ο υπολογισμός της σταθεράς κανονικοποίησης (***partition function***)

- Οι παραγόμενες τυχαίες μεταβλητές κατανέμονται σύμφωνα με επιθυμητό ιστόγραμμα (κατανομή ισορροπίας) αλλά λόγω παραγωγής τους μέσω ***Markov random walk*** είναι συσχετισμένες (***correlated***)
- Εναλλακτικά για δημιουργία ***sample*** με γνωστή κατανομή και χωρίς συσχέτιση μπορούν να χρησιμοποιηθούν απλές μέθοδοι, π.χ. παραγωγή τυχαίων σημείων και καταγραφή όσων είναι κάτω από την επιφάνεια του ιστογράμματος (***Rejection Sampling***)

https://en.wikipedia.org/wiki/Rejection_sampling#Adaptive_rejection_sampling



ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

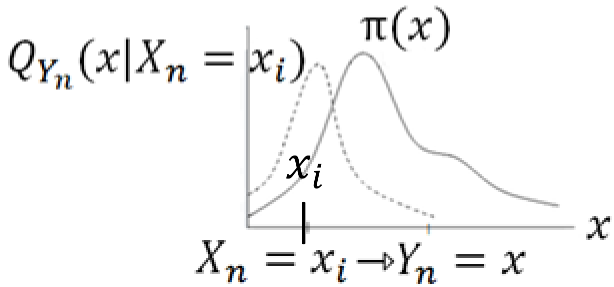
Εξέλιξη Συστήματος προς Θερμική Ισορροπία: Ο Αλγόριθμος Προσομοίωσης Markov Chain Monte Carlo (MCMC) του Metropolis (2/6)

Παραδοχές και Προσέγγιση

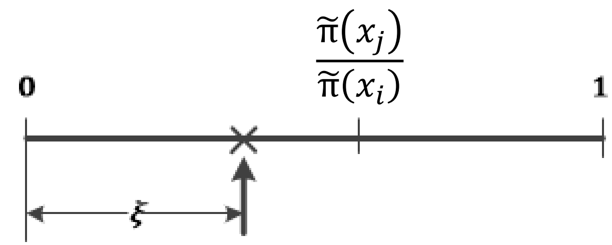
- Η $\pi(x)$ είναι μια κατανομή στόχος (***Target***) που αντανακλά σχετικές συχνότητες εμφάνισης της τιμής x στο δειγματικό χώρο της τυχαίας μεταβλητής X: $\sum_x P(X_n = x) = 1$
- Η $\pi(x)$ έχει γνωστή μορφή $\pi(x) \propto \tilde{\pi}(x)$, π.χ. κατανομή ***Gibbs*** $\pi(x) \propto \exp\left(-\frac{E(x)}{T}\right)$ αλλά δεν μπορεί να δημιουργήσει τυχαία δειγματικά στοιχεία λόγω αδυναμίας πλήρους καταγραφής του δειγματικού χώρου και υπολογισμού της ***partition function***
- Ζητείται γεννήτρια (**αλγόριθμος δημιουργίας, *sampling***) ακολουθίας $X_n = x, n = 1,2, \ldots$ με κατανομή $\pi(x) \propto \tilde{\pi}(x)$ όπου $\tilde{\pi}(x)$ ανάλογη της συχνότητας εμφάνισης μιας τιμής x
- Η εκτίμηση των σχετικών συχνοτήτων (ιστόγραμμα) $P(X_n = x) \to \pi(x)$ γίνεται με την καταμέτρηση επισκέψεων ***random walk*** εργοδικής αλυσίδας ***Markov*** σε καταστάσεις $\{X_n\}$ που αντιστοιχούν στις τιμές x. Η αλυσίδα προσδιορίζεται ώστε οι εργοδικές της πιθανότητες να είναι ίσες (κατά προσέγγιση) με τις ζητούμενες $\pi(x)$ εξού η μέθοδος εντάσσεται στη κατηγορία προσομοιώσεων ***Markov Chain Monte Carlo*** (**MCMC**)
- Η προσομοίωση **MCMC** προσεγγίζει ζητούμενο ιστόγραμμα αλλά με **συσχετισμένα** δείγματα

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Εξέλιξη Συστήματος προς Θερμική Ισορροπία: Ο Αλγόριθμος Προσομοίωσης Markov Chain Monte Carlo (MCMC) του Metropolis (3/6)



$$\boxed{\pi(x) \propto \tilde{\pi}(x)}$$



- Γνωρίζοντας τη μορφή $\tilde{\pi}(x)$ των ***εργοδικών πιθανοτήτων στόχου*** $\pi(x) \propto \tilde{\pi}(x)$ για παράμετρο $x \in \{0,1,2,\dots\}$ ζητείται η δημιουργία (***generation***) χρονικά αναστρέψιμης ακολουθίας **Markov** καταστάσεων $X_n = x$ με κατανομή που να προσεγγίζει τις $\pi(x)$
- Βήμα n : Έστω $X_n = x_i$. Επιλέγω τυχαία μεταβλητή $Y_n = x_j$ με βάση αυθαίρετη ***προτεινόμενη*** κατανομή (***Proposal Conditional Density***) $Q_{Y_n}(x|X_n = x_i)$. Οι πιθανότητες μετάβασης $(X_n = x_i) \rightarrow (Y_n = x_j)$ επιλέγονται ώστε να ισχύει ***συμμετρία***

$$P(Y_n = x_j | X_n = x_i) = P(Y_n = x_i | X_n = x_j)$$

- Αν $\tilde{\pi}(x_j) \geq \tilde{\pi}(x_i)$ η επιλογή $X_n \rightarrow Y_n$ γίνεται αποδεκτή και $X_{n+1} = x_j$
- Αν $\tilde{\pi}(x_j) < \tilde{\pi}(x_i)$ δημιουργώ τυχαίο αριθμό ξ ομοιόμορφα κατανεμημένο μεταξύ $(0,1)$

Αν $\xi < \frac{\tilde{\pi}(x_j)}{\tilde{\pi}(x_i)} = \frac{\pi(x_j)}{\pi(x_i)}$ η επιλογή $X_n \rightarrow Y_n$ γίνεται αποδεκτή $\Rightarrow X_{n+1} = x_j$. Αλλιώς $X_{n+1} = x_i$

- Προσοχή στην επιλογή αρχικής τιμής $X_0 = x$ και προτεινόμενης κατανομής $Q_{Y_n}(x|X_n = x_i)$: Πρέπει να είναι συμμετρική και να καλύπτει ικανό εύρος τιμών x ώστε η αλυσίδα Markov να μην εγκλωβίζεται σε υποσύνολα καταστάσεων. Συνήθεις επιλογές: (1) **Gauss** με μέση τιμή $\mu = x_i$ και $\sigma^2 = 1$ και (2) **Ομοιόμορφη Κατανομή** $x \in (x_i - a, x_i + a)$

Εξέλιξη Συστήματος προς Θερμική Ισορροπία: Ο Αλγόριθμος Προσομοίωσης Markov Chain Monte Carlo (MCMC) του Metropolis (4/6)

Δημιουργία Τυχαίων Δειγμάτων με Εργοδικές Πιθανότητες Θερμικής Ισορροπίας

Ο αλγόριθμος ***Metropolis*** δημιουργεί μέσω προσομοίωσης ***χρονικά αναστρέψιμης διαδικασίας Markov*** ακολουθία καταστάσεων $X_n = x_i$ με σχετική συχνότητα εμφάνισης θερμικής ισορροπίας ***Gibbs***: $\pi_i = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_i}{T}\right)$. Η αναλογία των π_i είναι γνωστή αλλά η ακριβής τιμή τους απαιτεί γνώση της ***Partition Function*** Z μέσω κανονικοποίησης $\sum_i \pi_i = 1$ σε περίπλοκο δειγματικό χώρο

Έστω χρονικά αναστρέψιμη αλυσίδα ***Markov*** X_n (ακολουθία αριθμών) με ***συμμετρικές πιθανότητες μετάβασης ακριβούς ισορροπίας*** που μετά από n μεταβάσεις (βήματα) παράγει την κατάσταση x_i. Με τυχαίο τρόπο δημιουργούμε νέα κατάσταση x_j άλλης διαδικασίας Y_n θεωρώντας τη ***συνθήκη συμμετρίας*** στις μεταβάσεις $X_n \to Y_n$:

$$P\left(Y_n = x_j \middle| X_n = x_i\right) = P\left(Y_n = x_i \middle| X_n = x_j\right)$$

Η μετάβαση δημιουργεί διαφορικό ενέργειας $\Delta E = E_j - E_i$

- Αν $\Delta E < 0$ η μετάβαση οδηγεί σε κατάσταση $(Y_n = x_j)$ μικρότερης ενέργειας και γίνεται αποδεκτή: $X_{n+1} \coloneqq Y_n$
- Αν $\Delta E > 0$ η μετάβαση σε $(Y_n = x_j)$ γίνεται αποδεκτή και $X_{n+1} \coloneqq Y_n$ με πιθανότητα $\exp(-\frac{\Delta E}{T})$ όπου T η θερμοκρασία του συστήματος. Αλλιώς $X_{n+1} \coloneqq X_n$
- Η εξέλιξη της κατάστασης για $\Delta E > 0$ οδηγείται από ***προσομοίωση Monte Carlo*** μέσω δοκιμών ***Bernoulli*** δημιουργίας (ψευδο)τυχαίου αριθμού ξ ομοιόμορφα κατανεμημένου μεταξύ $(0,1)$

  Αν $\xi < \exp(-\frac{\Delta E}{T})$, $X_{n+1} \coloneqq Y_n$. Αλλιώς $X_{n+1} \coloneqq X_n$

Εξέλιξη Συστήματος προς Θερμική Ισορροπία: Ο Αλγόριθμος Προσομοίωσης Markov Chain Monte Carlo (MCMC) του Metropolis (5/6)

Δημιουργία μέσω Προτεινόμενων Πιθανοτήτων Μετάβασης

Ζητείται η δημιουργία χρονικά αναστρέψιμης αλυσίδας Markov $X_n = x_i, \quad i = 1,2,\ldots,K$ που να συγκλίνει σε εργοδικές πιθανότητες π_i κατανομής ***Gibbs*** με παραμέτρους E_i και T :

$$\pi_i = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_i}{T}\right)$$

Θεωρούμε νέα αλυσίδα Markov με ***αυθαίρετα*** ορισμένες ***συμμετρικές προτεινόμενες*** πιθανότητες μετάβασης τ_{ij} από την $X_n = x_i$ σε νέα κατάσταση $Y_n = x_j$:

$$\tau_{ij} = P\left(Y_n = x_j \middle| X_n = x_i\right) = P\left(Y_n = x_\iota \middle| X_n = x_j\right) = \tau_{ji}$$

$$\tau_{ij} \geq 0, \forall i,j \;\text{ και } \sum_j \tau_{ij} = 1, \forall i$$

$$\tau_{ij} = \tau_{ji}, \forall i,j$$

Η ζητούμενη αλυσίδα X_n έχει πιθανότητες μετάβασης p_{ij} οριζόμενες από τις τ_{ij} ως εξής:

$$p_{ij} = P\left(X_{n+1} = x_j \middle| X_n = x_i\right) = \begin{cases} \tau_{ij}\frac{\pi_j}{\pi_i} = \tau_{ij}\exp\left(-\frac{E_j - E_i}{T}\right) & \text{για } \frac{\pi_j}{\pi_i} < 1 \\ \tau_{ij} & \text{για } \frac{\pi_j}{\pi_i} \geq 1 \end{cases} \quad , \quad i \neq j$$

και με p_{ii} όπως προκύπτει από τη συνθήκη κανονικοποίησης $\sum_j p_{ij} = 1, \forall i$:

$$p_{ii} = \tau_{ii} + \sum_{j \neq i} \tau_{ij}\left(1 - \frac{\pi_j}{\pi_i}\right)$$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Εξέλιξη Συστήματος προς Θερμική Ισορροπία: Ο Αλγόριθμος Προσομοίωσης Markov Chain Monte Carlo (MCMC) του Metropolis (6/6)

Επιλογή Πιθανοτήτων Μετάβασης

Οι p_{ij} ορίζονται από τον λόγο $\frac{\pi_j}{\pi_i} = \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{T}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right)$, χωρίς υπολογισμό της ***partition function*** Z, και είναι συμβατές με τις ***detailed balance equations***:

- $\Delta E < 0$: $\left({}^{\pi_j}/_{\pi_i}\right) > 1$
  $\pi_i p_{ij} = \pi_i \tau_{ij} = \pi_i \tau_{ji}$ και $\pi_j p_{ji} = \pi_j \tau_{ji} \frac{\pi_i}{\pi_j} = \pi_i \tau_{ji} \Rightarrow \pi_j p_{ji} = \pi_i p_{ij}$
- $\Delta E > 0$: $\left({}^{\pi_j}/_{\pi_i}\right) < 1$
  $\pi_i p_{ij} = \pi_i \tau_{ij} \frac{\pi_j}{\pi_i} = \pi_j \tau_{ij} = \pi_j \tau_{ji} \Rightarrow \pi_j p_{ji} = \pi_i p_{ij}$

Άρα έχουμε προσομοιώσει διαδικασία X_n που οδηγεί μονοσήμαντα σε ***θερμική ισορροπία Gibbs*** με βάση τις ενέργειες E_i των καταστάσεων x_i παρακάμπτοντας τον υπολογισμό της Z

Οι μεταβάσεις τ_{ij} που οδηγούν τις p_{ij} προς εργοδικές πιθανότητες $\pi_j = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_j}{T}\right)$ προκύπτουν από την προσομοίωση ***Monte Carlo*** όπου η διαδικασία εξελίσσεται $i \to j$ για $E_j - E_i = \Delta E < 0$ ή αν $\Delta E > 0$ εξελίσσεται με πιθανότητα $\exp(-\frac{\Delta E}{T})$, αλλιώς με πιθανότητα $1 - \exp(-\frac{\Delta E}{T})$ παραμένει στην κατάσταση i (βάση ανεξάρτητων τυχαίων δοκιμών ***Bernoulli***)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ

Γενίκευση του Αλγορίθμου Metropolis: Ο Αλγόριθμος Metropolis-Hastings (1/2)

- Ο αλγόριθμος προσομοίωσης του *Nicholas Metropolis et.al.*, *1953* υποθέτει συμμετρικές μεταβάσεις και ***time reversible*** αλυσίδες Markov που συνεπάγονται ***detailed balance equations.*** Συγκλίνει προς τη κατανομή ***Gibbs*** (***Boltzmann***) $\pi_i = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_i}{T}\right)$ με κατάλληλο ορισμό ενεργειών καταστάσεων E_i
- Γενικεύτηκε από τον *W.K. Hastings* το 1970 στον αλγόριθμο ***Metropolis-Hastings***

Γενίκευση Προτεινόμενης Κατανομής Μετάβασης: Δεν απαιτείται συμμετρία της

$$Q_{Y_n}(x|X_n = x_i): P\left(Y_n = x_j \middle| X_n = x_i\right) \neq P\left(Y_n = x_i \middle| X_n = x_j\right)$$

Τροποποίηση Πιθανότητας Αποδοχής $X_{n+1} = x_j$

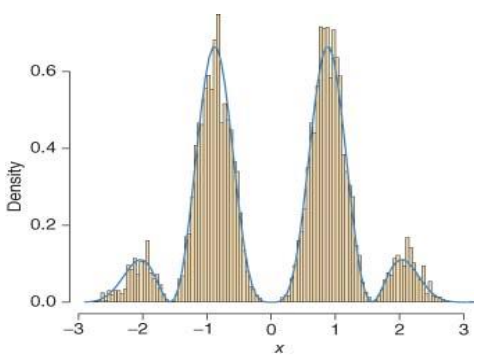
- Αν $\tilde{\pi}(x_j) \times P\left(Y_n = x_i \middle| X_n = x_j\right) \geq \tilde{\pi}(x_i) \times P\left(Y_n = x_j \middle| X_n = x_i\right)$ η επιλογή $X_n \to Y_n$ γίνεται αποδεκτή και $X_{n+1} = x_j$
- Αλλιώς δημιουργώ τυχαίο αριθμό ξ ομοιόμορφα κατανεμημένο μεταξύ $(0,1)$
  Αν $\xi < \frac{\tilde{\pi}(x_j)}{\tilde{\pi}(x_i)} \times \frac{P\left(Y_n = x_i \middle| X_n = x_j\right)}{P\left(Y_n = x_j \middle| X_n = x_i\right)}$ η επιλογή $X_n \to Y_n$ γίνεται αποδεκτή και $X_{n+1} = x_j$. Αν όχι η X_n παραμένει στη τιμή της και $X_{n+1} = x_i$
- Ο αλγόριθμος ***Metropolis*** είναι ειδική περίπτωση με συμμετρική $Q_{Y_n}(x|X_n = x_i)$

Γενίκευση του Αλγορίθμου Metropolis: Ο Αλγόριθμος Metropolis-Hastings (2/2)

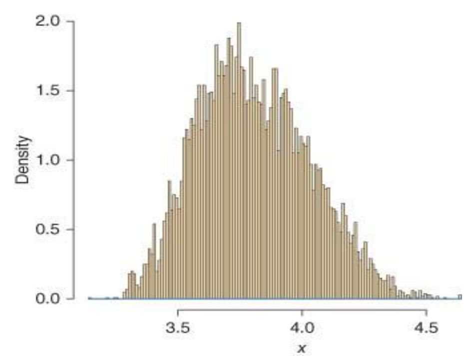
Προβλήματα Αλγορίθμου

- Ο αλγόριθμος ***Metropolis-Hastings*** δημιουργεί αλυσίδα Markov με εργοδικές πιθανότητες συμβατές με ζητούμενη κατανομή αλλά παράγει **συσχετισμένες** τυχαίες μεταβλητές
- Αν απαιτείται η παραγωγή (***sampling***) τυχαίων διανυσμάτων $\mathbf{X}_n$ με πολλές διαστάσεις, ο αλγόριθμος υποφέρει από το ***curse of dimensionality***
- Η επιλογή κατάλληλης προτεινόμενης κατανομής μεταβάσεων $Q_{Y_n}(x|X_n = x_i)$ και αρχικής κατάστασης $X_0 = x_i$ έχουν ιδιαίτερη σημασίας για την ορθή και ταχεία σύγκλιση του αλγορίθμου https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/9781118445112.stat07834
- Η επιρροή της μεταβατικής κατάστασης σβήνει χωρίς αρχικές μεταβάσεις π.χ. $n \leq 1000$

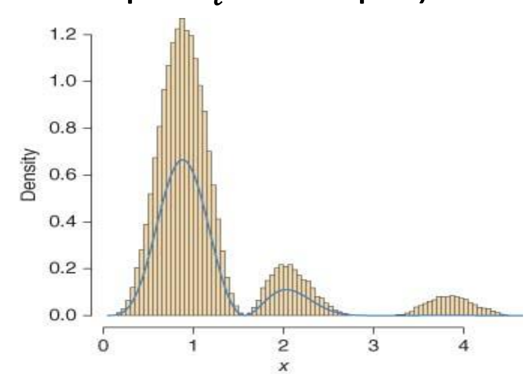
Παράδειγμα: Προσομοίωση κατανομής στόχου (***target***) $\pi(x)$ ανάλογης των
$\widetilde{\pi}(x) = \sin^2(x) \times \sin^2(2x) \times \varphi(x)$ όπου $\varphi(x)$ κανονική κατανομή Gauss $\mathbb{N}(0,1)$
Επιλογή $Q_{Y_n}(x|X_n = x_i) = \frac{1}{2a} \mathbb{I}_{x_i - a, x_i + a}(x)$ ομοιόμορφη με μέσο όρο x_i και εύρος $2a$



$a = 1, X_0 = 3.14$
Ορθή σύγκλιση σε 10^4 βηματα



$a = 0.1, X_0 = 3.14$
Αστοχία σε 10^4 βήματα
(η διαδικασία παγιδεύτηκε σε 1 λοβό)



$a = 0.2, X_0 = 3.14$
Μερική αστοχία σε 10^4 βήματα
(η διαδικασία παγιδεύτηκε σε θετικές τιμές)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ενδεικτικές Εφαρμογές & Επεκτάσεις Αλγόριθμου Metropolis-Hastings (1/2)

Ακολουθία Τυχαίου Δείγματος προς Θερμική Ισορροπία

Ο αλγόριθμος ***Metropolis*** παράγει **συσχετισμένες** καταστάσεις ***time reversible*** αλυσίδας Markov X_n με εργοδικές πιθανότητες συμβατές με κατανομή ***Gibbs*** (***Boltzmann***) χωρίς γνώση της ***partition function*** Z. Οι καταστάσεις είναι σχεδόν αδύνατο να προσδιορισθούν με πληρότητα, ιδίως αν είναι ***πολυδιάστατες***, και άρα η κανονικοποίησή τους είναι δυσεπίλυτη

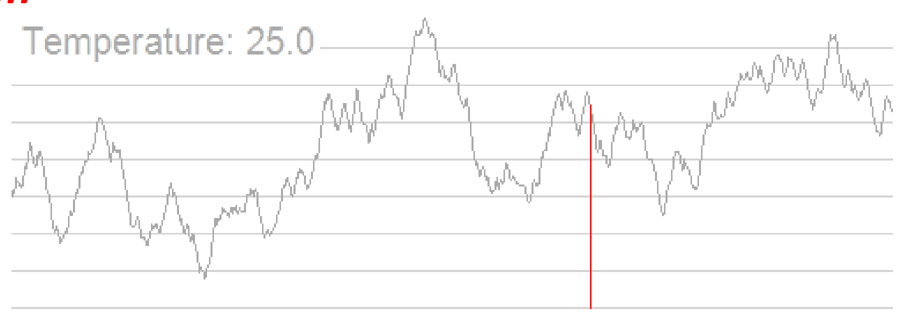
Υπολογισμοί Ολοκληρωμάτων και Στατιστικών Παραμέτρων

Η δημιουργία ακολουθίας τιμών που προσομοιώνουν ***Markov Chain Random Walks*** μπορεί να αποτελέσει εργαλείο για τον αριθμητικό υπολογισμό ολοκληρωμάτων και ροπών κατανομών ***πολυδιάστατων*** τυχαίων μεταβλητών χωρίς πλήρη στοιχεία και με λογικό αριθμό διαστάσεων

Εντοπισμός Ακραίων Τιμών, Simulated Annealing

Οι μέθοδοι MCMC παρέχουν τη δυνατότητα να μην εγκλωβισθεί μια επαναληπτική διαδικασία σε περιοχές με τοπικά άκρα αλλά επιτρέπει να διερευνηθούν με κάποια πιθανότητα και εναλλακτικές προς μη ελκυστικές κατευθύνσεις που ένας αλγόριθμος τύπου deepest descent δεν θα εντόπιζε. Αυτή είναι η αρχή αλγορίθμων τύπου ***Προσομοιωμένης Ανόπτησης*** (***Simulated Annealing***) με εφαρμογή σε περίπλοκα προβλήματα συνδυαστικής βελτιστοποίησης, π.χ. ***Travelling Salesman Problem***

ΕΥΡΕΣΗ ΣΦΑΙΡΙΚΟΥ ΑΚΡΟΥ: Ο αλγόριθμος ακολουθεί κατευθύνσεις προς το ζητούμενο σφαιρικό (*global*) άκρο (ψηλότερη κορυφή), αλλά επιτρέπει φαινομενικά *λάθος* βήματα με σταδιακά μειούμενη πιθανότητα όσο μειώνεται η «θερμοκρασία»



https://en.wikipedia.org/wiki/File:Hill_Climbing_with_Simulated_Annealing.gif

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

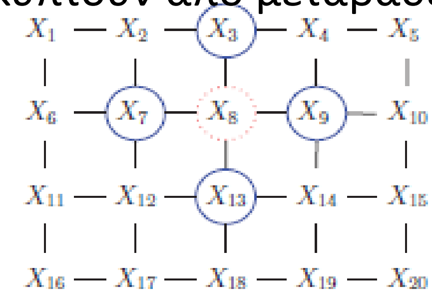
Ενδεικτικές Εφαρμογές & Επεκτάσεις Αλγόριθμου Metropolis-Hastings (2/2)

Μοντέλο *Ising* – Markov Random Fields, Προσομοίωση Μεταβάσεων Φάσεων

Αφορά σε υλικά με μαγνητικά δίπολα s κατανεμημένα στις κορυφές ενός γράφου G με ακμές μεταξύ τους αν υπάρχει αμφίδρομη αλληλοεπίδραση. Κάθε δίπολο μπορεί να βρίσκεται σε δύο καταστάσεις (***spins***) $y_s \in \{-1, +1\}$. Αν $s \leftrightarrow t$ τα δίπολα s, t είναι γειτονικά και αλληλοεπιδρούν με δύναμη $J_{s,t}$ θετική (π.χ. $J_{s,t} = 1$) αν τείνει να ευθυγραμμίσει τις καταστάσεις y_s και y_t ή αρνητική (π.χ. $J_{s,t} = -1$) αν τις ωθεί προς αντίθετη κατεύθυνση.

Σε ένα ***Markov Random Field*** οι καταστάσεις ενός διπόλου s μπορεί να επηρεάζονται μόνο από τα αμέσως γειτονικά του $t \in N(s) \subset G$. Αν τα δίπολα είναι κατανεμημένα σε επίπεδο δύο διαστάσεων με τοπολογία πλέγματος (***lattice***) η συνολική κατάσταση σε ισορροπία του συστήματος $\boldsymbol{y}(G) = [y_1\ y_2 \ldots y_s\ y_t \ldots]^T$ αφορά σε νόμιμους σχηματισμούς (***configurations***) των επιμέρους καταστάσεων y_s των διπόλων που προκύπτουν από μεταβάσεις με πιθανότητες $P(y_s|\boldsymbol{y}(G)) = P(y_s|\boldsymbol{y}(N(s)))$

Η κατάσταση του διπόλου X_8 εξαρτάται μόνο από τα X_3, X_7, X_9 και X_{13}



Το ***Markov Random Field*** του μοντέλου ***Ising*** ισορροπεί σε καταστάσεις $\boldsymbol{y}(G)$ με πιθανότητες κατανομής ***Gibbs*** (***Boltzmann***) με ή χωρίς εξωτερική μαγνητική επιρροή h_t στα δίπολα t :

$$P\big(\boldsymbol{y}(G)\big) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E(\boldsymbol{y}(G))}{T}\right) \text{ με } E\big(\boldsymbol{y}(G)\big) \approx -\sum_{s\leftrightarrow t} J_{s,t} y_s y_t - \mu \sum_t h_t y_t$$

Αν $J_{s,t} = J$ για όλα τα γειτονικά ζεύγη $s \leftrightarrow t$ τότε $E\big(\boldsymbol{y}(G)\big) \approx -J\sum_{s\leftrightarrow t} y_s y_t - \mu \sum_t h_t y_t$

Η σύγκλιση σε καταστάσεις ισορροπίας και η σταθερά Z μπορούν να προσεγγισθούν με αλγόριθμο random walk ***Metropolis-Hastings***