

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

**Μοντέλα Στατιστικής Μηχανικής, Κινητικότητα & Ισορροπία
Αλυσίδες Markov: Καταστάσεις, Εξισώσεις Μεταβάσεων**

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Μέσω Πλατφόρμας Webex

Τρίτη 12/3/2024

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Στατιστική Μηχανική και Μηχανική Μάθηση

- Οριακή προσέγγιση στατιστικής κατανομής χαρακτηριστικών των δειγματικών στοιχείων $\mathbf{x}(n)$ με αντιστοίχιση 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 (**generation**) δειγματικών στοιχείων συμβατών με υποθέσεις κατανομής δειγματικού χώρου (**statistical sampling - Generative AI**)
- 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 ($m \times 1$) του περιβάλλοντος δειγματικού χώρου:
$$\mathbf{x}(n) = [x_1(n) \ x_2(i) \ \dots \ x_m(i)]^T, n = 1, 2, \dots, N$$
- Πρωτοποριακή εφαρμογή: **Μηχανή Boltzmann** (**Hinton – Sejnowski**, 1983) για επεξεργασία και ταξινόμηση εικόνων μέσω στατιστικής **γενίκευσης** δειγμάτων μάθησης

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Στατιστική Μηχανική: Κατανομή Gibbs, Partition Function, Εντροπία

Θερμική Ισορροπία Φυσικού Συστήματος με πολλούς Βαθμούς Ελευθερίας

- Φυσικό σύστημα με πολλούς βαθμούς ελευθερίας ισορροπεί σε T βαθμούς Kelvin σε καταστάσεις i , ενέργειας E_i με πιθανότητες p_i (σχετική συχνότητα εμφάνισης της i)
- Οι πιθανότητες p_i ακολουθούν την **κατανομή Gibbs** (1902) ή **Boltzmann** (1868) σύμφωνα με την αναλογία:

$$p_i \propto \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right), \quad \frac{p_i}{p_j} = \exp\left(-\frac{E_i - E_j}{T}\right), \quad p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1$$

- Καταστάσεις i χαμηλής ενέργειας E_i συμβαίνουν πιο συχνά στην ισορροπία με πιθανότητες:

$$p_i = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right), \quad Z = \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right)$$

Σταθερά Κανονικοποίησης (Zustadsumme) Z : Συνάρτηση Κερματισμού (Partition Function)

- Η ενέργεια της κατάστασης i είναι $E_i = -T \log(Zp_i)$ με μέση τιμή $\langle E \rangle = \sum_i p_i E_i$. Η συνολική Ελεύθερη Ενέργεια F (**Helmholtz Free Energy**) είναι:

$$F = -T \log Z \Rightarrow \langle E \rangle - F = -T \sum_i p_i \log p_i$$

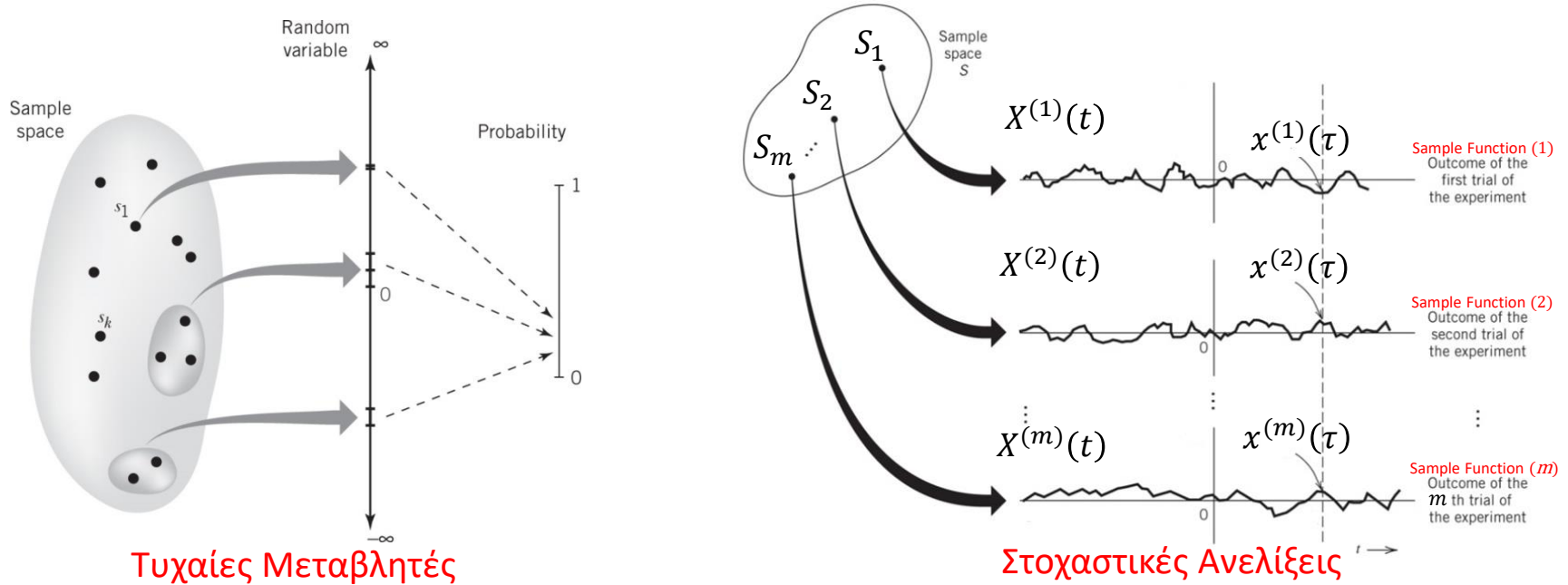
- Η **εντροπία** του συστήματος είναι $H \triangleq -\sum_i p_i \log p_i \Rightarrow \langle E \rangle - F = TH$ ή $F = \langle E \rangle - TH$

Αρχή της Ελάχιστης Ελεύθερης Ενέργειας (Landau & Lifshitz, 1980)

Σε θερμική ισορροπία η εντροπία τείνει στη μέγιστη τιμή, η F παίρνει την ελάχιστη τιμή της και οι καταστάσεις ακολουθούν την κατανομή **Gibbs**

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Στοχαστικές Διαδικασίες - Ανελίξεις, Ιδιότητα Markov



- **Στοχαστική Ανέλιξη Κατάστασης** $X(t)$ με μεταβάσεις από χρόνο τ σε χρόνο t του ίδιου δειγματικού στοιχείου έκβασης (**outcome**) σαν χρονική συνάρτηση (**sample function, trajectory** - τροχιά) με πιθανότητες μετάβασης $P\{[X(t) = a] | [X(\tau) = b]\}$
- **Στοχαστική Ανέλιξη Διακριτού Χρόνου Κατάστασης** $X_n \triangleq X(n \times \Delta t)$ με μεταβάσεις από χρόνο $\tau = (k \times \Delta t)$ σε χρόνο $t = (n \times \Delta t)$ του ίδιου δειγματικού στοιχείου έκβασης σαν χρονοσειρά (**time series, trajectory** - τροχιά) με πιθανότητες μετάβασης $P(X_n = a | X_k = b)$

Ορισμός Ιδιότητας Markov σε Στοχαστική Ανέλιξη Διακριτού Χρόνου

Στοχαστική διαδικασία διακριτού χρόνου έχει την ιδιότητα Markov αν οι πιθανότητες μετάβασης $X_n \rightarrow X_{n+1}$ είναι ανεξάρτητες από το παρελθόν $\{X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}$

$$P(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n, \dots, X_1 = x_1) = P(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n)$$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Αλυσίδες Markov Διακριτής Κατάστασης (Markov Chains)

Ορισμοί Αλυσίδων Markov, Μεταβάσεις Καταστάσεων

Θεωρούμε **Στοχαστικές Ανεξίξεις Διακριτού Χρόνου και Διακριτής Κατάστασης** $X_n = i$ με μεταβάσεις $(X_n = i) \rightarrow (X_{n+1} = j)$ σε διακριτά βήματα, ανεξάρτητες του παρελθόντος

Οι πιθανότητες μετάβασης σε ένα βήμα είναι σταθερές, ανεξάρτητες της χρονικής στιγμής n :

$$p_{ij} = P(X_{n+1} = j | X_n = i) \geq 0, \quad \sum_j p_{ij} = 1 \quad \forall i$$

Αν $i \leq K$ οι πιθανότητες μετάβασης δίνονται από την μήτρα \mathbf{P} ($K \times K$) με άθροισμα στοιχείων γραμμών $\sum_j p_{ij} = 1$ (**στοχαστική μήτρα**)

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{1K} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{K1} & \cdots & p_{KK} \end{bmatrix}$$

Οι πιθανότητες μεταβάσεων σε m βήματα είναι $p_{ij}^{(m)} = P(X_{n+m} = j | X_n = i)$, $m = 1, 2, \dots$

$$p_{ij}^{(m+1)} = \sum_k p_{ik}^{(m)} p_{kj} \quad \text{και} \quad p_{ij}^{(m+n)} = \sum_k p_{ik}^{(m)} p_{kj}^{(n)}, \quad m, n = 1, 2, \dots$$

(**Ταυτότητα Chapman-Kolmogorov**)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (1/5)

- **Επαναληπτικές Καταστάσεις (*Recurrent States*)**: Η διαδικασία επιστρέφει στις καταστάσεις αυτές άπειρες φορές στο διηνηκές (απείρως επισκέψιμες καταστάσεις)
- **Μεταβατικές Καταστάσεις (*Transient States*)**: Μετά από πεπερασμένα βήματα μεταβάσεων η διαδικασία δεν επιστρέφει σε αυτές
- **Περιοδικότητα (*Periodicity*)**: Αν όλες οι επαναληπτικές καταστάσεις ομαδοποιούνται σε d ξένα υποσύνολα S_1, S_2, \dots, S_d με επιτρεπτές μεταβάσεις μόνο από συγκεκριμένο υποσύνολο σε επόμενο του \Rightarrow

Επισκέψεις σε υποσύνολο S_k περιοδικά κάθε d μεταβάσεις:

$$\text{Αν } i \in S_k, p_{ij} > 0 \Rightarrow \begin{cases} j \in S_{k+1} & \text{για } k = 1, \dots, d-1 \\ j \in S_1 & \text{για } k = d \end{cases}$$

- **Μη Υποβιβάσιμες Αλυσίδες Markov (*Irreducible Markov Chains*)**:

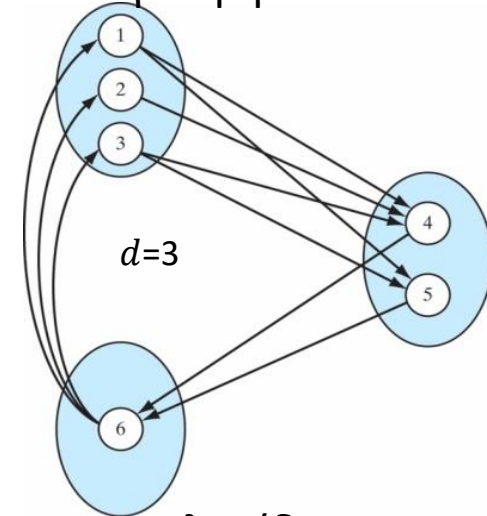
Δύο καταστάσεις επικοινωνούν (*communicate*) $i \leftrightarrow j$

αν η πιθανότητα μετάβασης μεταξύ τους σε πεπερασμένο

αριθμό βημάτων είναι μη μηδενική. Αν $i \leftrightarrow j$ και $i \leftrightarrow k \Rightarrow i \leftrightarrow k$

Αν όλες οι καταστάσεις μιας Αλυσίδας Markov επικοινωνούν μεταξύ τους η αλυσίδα είναι μη υποβιβάσιμη (*Irreducible*)

- **Κλάσεις**: Οι καταστάσεις μπορεί να χωρίζονται σε **υποσύνολα - κλάσεις**. **Ανοικτές** κλάσεις είναι αυτές που επιτρέπουν έξοδο προς άλλη κλάση. **Κλειστές** αυτές που δεν επιτρέπουν έξοδο και οι στατιστικές ιδιότητες της αλυσίδας μετά την παρέλευση μεταβατικού χρόνου περιορίζονται στο υποσύνολο αυτό. Αν υπάρχει μόνο μία κλειστή κλάση η διαδικασία είναι *Irreducible*



ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (2/5)

- **Μέσος Χρόνος Επιστροφής (*Mean Recurrence Time*)**

$E[T_i(k)]$ ορίζεται ο μέσος αριθμός βημάτων (χρόνος) για την επιστροφή (κύκλο) από μια **Recurrent State** i στον εαυτό της, αν έχουν προηγηθεί $k - 1$ κύκλοι από την i στην i . Η σχετική συχνότητα εμφάνισης της κατάστασης i είναι ανάλογη της πιθανότητας σταθερής κατάστασης π_i (**Steady State Probabilities**) $\pi_i = \frac{1}{E[T_i(k)]}$

Αν $E[T_i(k)] < \infty$ τότε $\pi_i > 0$ και η i είναι γνησίως επαναληπτική (**Positive Recurrent**). Αλλιώς $\pi_i = 0$ και η i είναι **Null Recurrent**

- **Πιθανότητες Σταθερής Κατάστασης (*Steady State Probabilities, Ergodicity*)**

Μετά από l επιστροφές σε μια **Positive Recurrent State** i , η αναλογία του χρόνου (βημάτων) παραμονής (**Sojourn Time**) στην i είναι

$$v_i(l) = \frac{l}{\sum_{k=1}^l T_i(k)}$$

Οι χρόνοι επιστροφής $T_i(k)$ είναι ακολουθία ανεξαρτήτων τυχαίων μεταβλητών της ίδιας κατανομής (**independent identically distributed – iid**) και για $l \rightarrow \infty$ ισχύει ο Νόμος των Μεγάλων Αριθμών. Οι πιθανότητες σταθερής κατάστασης (**Steady State Probabilities**) π_i προσεγγίζονται σαν όριο χρονικών αναλογιών παραμονής σε μία κατάσταση i , της δειγματικής τιμής (**sample value**) της X_n σε μια εξέλιξη σε άπειρο χρονικό ορίζοντα (**ergodicity**)

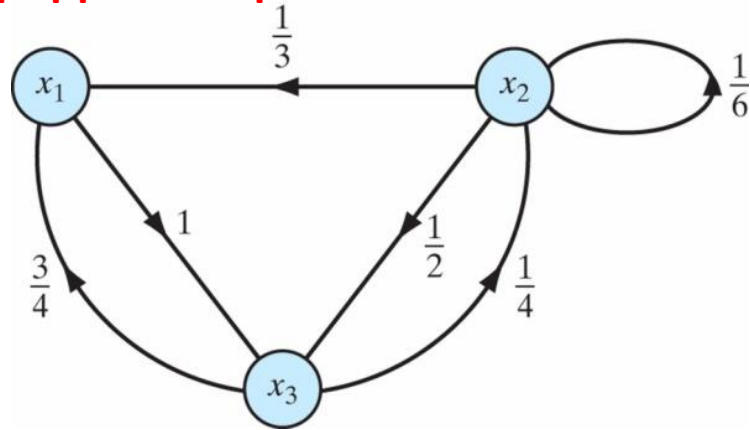
$$\lim_{l \rightarrow \infty} v_i(l) = \pi_i, i = 1, 2, \dots, K$$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (3/5)

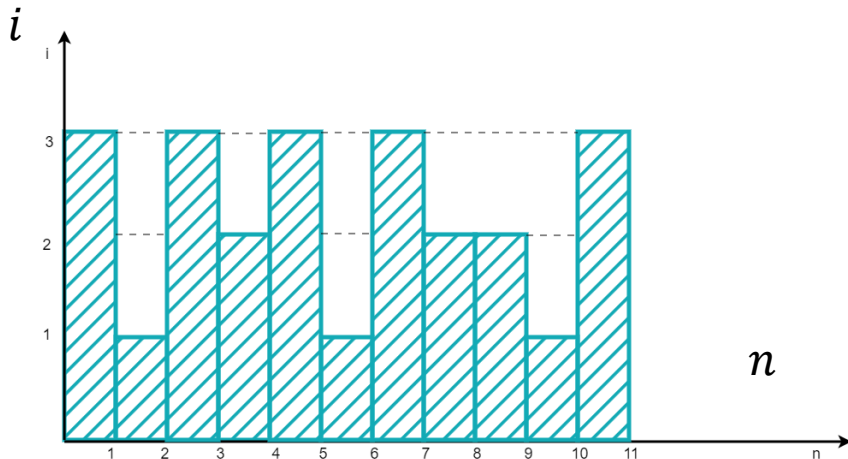
Παράδειγμα Εκτίμησης $T_i(k)$, $v_i(l)$ σε Αλυσίδα Markov τριών **Recurrent States**

Διάγραμμα Μεταβάσεων Καταστάσεων



$$\pi_1 = 0.3953 \quad \pi_2 = 0.1395 \quad \pi_3 = 0.4652$$

Ενδεικτική Τροχιά Καταστάσεων $x_i(n) = i$ **Υπολογισμός** $T_3(k)$, $v_3(l)$, $k \in \{1, 2, \dots, 5\}$, $l = 5$



- $T_3(1) = 0$

- $T_3(2) = 2$

- $T_3(3) = 2$

- $T_3(4) = 2$

- $T_3(5) = 4$

- $v_3(5) = \frac{5}{0+2+2+2+4} = \frac{5}{10} \rightarrow \pi_3 = 0.4652$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (4/5)

- Οι καταστάσεις i των οποίων οι πιθανότητες σταθερής κατάστασης π_i μπορούν να υπολογισθούν σαν αναλογία χρόνου στην i σε άπειρο χρονικό ορίζοντα εξέλιξης ενός δείγματος της αλυσίδας Markov X_i ορίζονται σαν **εργοδικές καταστάσεις**
- Οι πιθανότητες π_i των εργοδικών καταστάσεων είναι **εργοδικές πιθανότητες** και η X_i ορίζεται σαν **εργοδική αλυσίδα Markov**. Μια **irreducible** μη περιοδική Markov Chain είναι πάντα εργοδική
- **Σύγκλιση πιθανοτήτων καταστάσεων σε αναλλοίωτη κατανομή εργοδικών πιθανοτήτων**
Οι πιθανότητες καταστάσεων εργοδικής αλυσίδας Markov $X_i, i = 1, 2, \dots, K$ στο βήμα μετάβασης $n = 0, 1, 2, \dots$ ορίζουν διάνυσμα $(1 \times K)$ $\boldsymbol{\pi}^{(n)}$ με εξισώσεις μετάβασης από τη στοχαστική μήτρα \mathbf{P} ($K \times K$) και αρχικές συνθήκες $\boldsymbol{\pi}^{(0)}$

$$\boldsymbol{\pi}^{(n)} = \left[\pi_1^{(n)} \quad \pi_2^{(n)} \quad \dots \quad \pi_K^{(n)} \right], \quad \boldsymbol{\pi}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}^{(n-1)} \mathbf{P} = \boldsymbol{\pi}^{(n-2)} \mathbf{P}^2 = \dots = \boldsymbol{\pi}^{(0)} \mathbf{P}^n$$

Στο όριο της εξέλιξης έχουμε σύγκλιση στις εργοδικές πιθανότητες $\boldsymbol{\pi} = [\pi_1 \quad \pi_2 \quad \dots \quad \pi_K]$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \boldsymbol{\pi}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}^{(0)} \times \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n = \boldsymbol{\pi}^{(0)} \begin{bmatrix} \pi_1 & \dots & \pi_K \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \pi_1 & \dots & \pi_K \end{bmatrix} = \boldsymbol{\pi}^{(0)} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi} \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^K \pi_j^{(0)} \times \boldsymbol{\pi} = 1 \times \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}$$

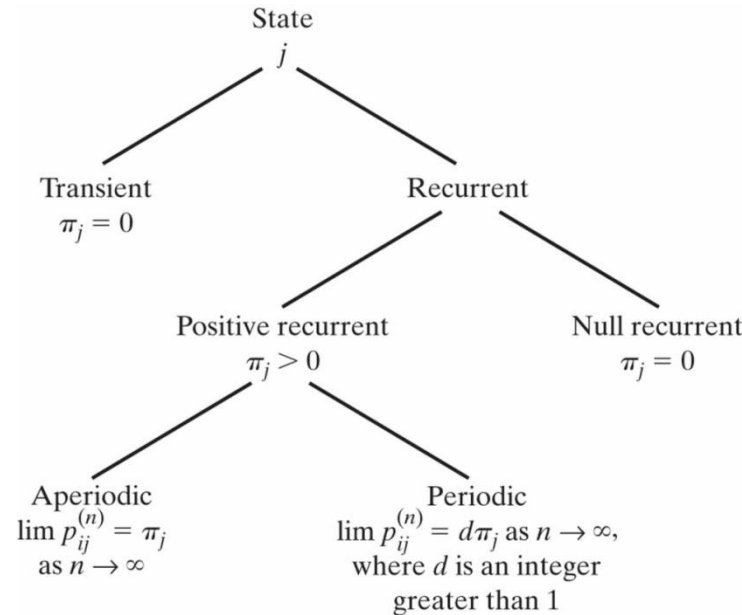
Άρα οι $\boldsymbol{\pi} = \lim_{n \rightarrow \infty} \boldsymbol{\pi}^{(n)}$ είναι **ανεξάρτητες** της αρχικής συνθήκης $\boldsymbol{\pi}^{(0)}$ και μπορεί να υπολογιστούν μέσω του γραμμικού συστήματος **αναλλοίωτης κατανομής εργοδικών πιθανοτήτων**:

$$\pi_j = \sum_{i=1}^K \pi_i p_{ij} \quad j = 1, 2, \dots, K \quad \text{ή} \quad \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} \mathbf{P} \quad \text{και} \quad \sum_{j=1}^K \pi_j = 1$$

(για γραμμική ανεξαρτησία απαιτείται και η εξίσωση **κανονικοποίησης** των πιθανοτήτων)

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (5/5)

Σύνοψη Ταξινόμησης Καταστάσεων Αλυσίδων Markov



Χρονικά Αναστρέψιμες Διαδικασίες - Εξισώσεις Ακριβούς Ισορροπίας

- Στη θερμική ισορροπία σύστημα με πιθανότητες καταστάσεων **Gibbs** $\pi_i = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right)$ όπου Z η **Partition Function**, κάθε δυνατή μετάβαση $i \rightarrow j$ πραγματοποιείται με σχετική συχνότητα ίση με την αντίστροφή της $j \rightarrow i$. Τότε ισχύουν οι εξισώσεις **Ακριβούς Ισορροπίας (Detailed Balance Equations)** $\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}$ και οι π_i είναι συμβατές με τις εξισώσεις **Αναλλοίωτων**

Πιθανοτήτων Αλυσίδων Markov: $\sum_{i=1}^K \pi_i p_{ij} = \sum_{i=1}^K \left(\frac{\pi_i}{\pi_j} p_{ij}\right) \pi_j = \sum_{i=1}^K p_{ji} \pi_i = \pi_j$

- Αλυσίδα Markov με ισχύουσες τις εξισώσεις ακριβούς ισορροπίας έχει την ιδιότητα της **χρονικής αντιστρεψιμότητας (Time Reversibility)** με ίδιες εργοδικές πιθανότητες είτε σε μεταβάσεις p_{ij} προς το μέλλον ($i \rightarrow j$) ή προς στο παρελθόν ($j \rightarrow i$) με $\hat{p}_{ji} = \frac{\pi_i}{\pi_j} p_{ij}$.

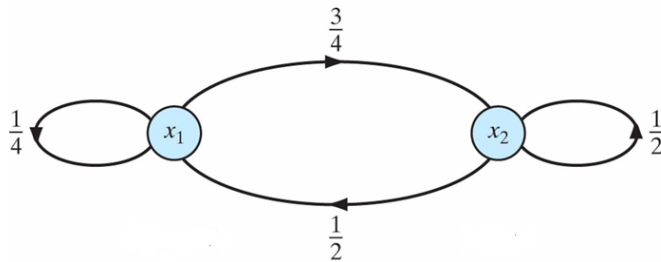
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Διαγράμματα Καταστάσεων & Παραδείγματα Εργοδικών Αλυσίδων Markov

Διαγράμματα Μεταβάσεων Καταστάσεων (State Transition Diagrams)

Οι καταστάσεις συμβολίζονται με κύκλους x_1, x_2, \dots και οι μεταβάσεις με βέλη.
Οι πιθανότητες μετάβασης p_{ij} από $x_i \rightarrow x_j$ αναφέρονται δίπλα στα βέλη

Παραδείγματα Υπολογισμού Εργοδικών Πιθανοτήτων



$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1/4 & 3/4 \\ 1/2 & 1/2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\pi}^{(0)} = [1/6 \quad 5/6]$$

$$\boldsymbol{\pi}^{(1)} = \boldsymbol{\pi}^{(0)}\mathbf{P} = [11/24 \quad 13/24]$$

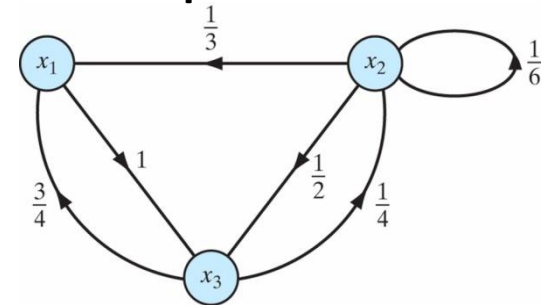
$$\mathbf{P}^2 = \begin{bmatrix} 0.4375 & 0.5625 \\ 0.3750 & 0.6250 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P}^3 = \begin{bmatrix} 0.4001 & 0.5999 \\ 0.3999 & 0.6001 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P}^4 = \begin{bmatrix} 0.4000 & 0.6000 \\ 0.4000 & 0.6000 \end{bmatrix}$$

$$\pi_1 = 0.4, \quad \pi_2 = 0.6$$

(Σύγκλιση σε 4 βήματα)



$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1/3 & 1/6 & 1/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 \end{bmatrix}$$

(Εξισώσεις αναλλοίωτης εξέλιξης πιθανοτήτων)

$$\pi_1 = \frac{1}{3}\pi_2 + \frac{3}{4}\pi_3$$

$$\pi_2 = \frac{1}{6}\pi_2 + \frac{1}{4}\pi_3$$

$$\pi_3 = \pi_1 + \frac{1}{2}\pi_2$$

$$\pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 1$$

$$\pi_1 = 0.3953, \quad \pi_2 = 0.1395, \quad \pi_3 = 0.4652$$