Markov chain Monte Carlo

Markov chain Monte Carlo

- třída algoritmů umožňující simulovat složité stochastické systémy
- jak s pomocí simulací markovského řetězce aproximovat $\int f$, $\sum f$, resp. extrémy f
- Idea: když chceme generovat z nějakého pravděpodobnostního rozdělení, tak zkonstruujeme markovský řetězec, jehož stacionární rozdělení je požadované rozdělení ($\pi^T P = \pi$)
  simulujeme markovský řetězec a po dostatečně velkém počtu kroků dostaneme přibližně výběr z daného rozdělení
- potřebujeme teorii, která zaručí

$$\lim_{n\to\infty} p(n) = \pi$$

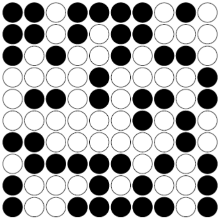
a hodí se na odhady

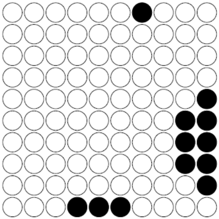
$$\lim_{n\to\infty} ||p(n) - \pi|| = \lim_{n\to\infty} \Delta_n$$

Příklady aplikací

Statistická fyzika: modely fyzikálních systémů, studium fázových přechodů

Isingův model (1925)





$\xi(x) \in \{-1, +1\}$ (orientace rotace atomu) $\qquad$ $x \sim y$ sousedé

hamiltonián $H(\xi) = -\sum_{x \sim y} \xi(x)\xi(y)$

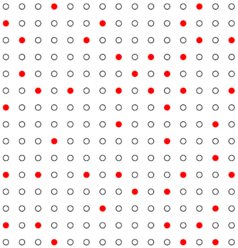
pravděpodobnost konfigurace $\pi_\beta(\xi) = \frac{1}{Z_\beta} \mathrm{e}^{-\beta H(\xi)}$

β .... inverzní teplota $\qquad$ Z_β .... normující konstanta

Příklady aplikací

Informatika: přibližné určení počtů prvků velké množiny (čítací problémy), umělá inteligence, optimalizační problémy (např. problém obchodního cestujícího), studium znáhodněných algoritmů (chování pro rostoucí velikost problému)

Hard-core model



graf $G = (V, E)$, $\xi(x) \in \{0, 1\}$ $\quad \xi(x)\xi(y) \neq 1$ pro $x \sim y$

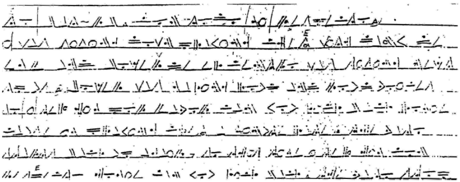
Kolik je přípustných konfigurací?

Jaký je střední počet jedniček v náhodné přípustné konfiguraci?

Příklady aplikací

Prostorová statistika: vzorky z prostorových stochastických modelů – bodové procesy, náhodná pole

Aplikovaná statistika



Reverzibilita

Definice

Řekneme, že h.m.ř. s množinou stavů S a maticí přechodu P je reverzibilní vzhledem k rozdělení $\pi = (\pi_i)_{i \in S}$, jestliže platí tzv. detailní podmínka rovnováhy

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji} \quad \forall i, j \in S$$

Věta (reverzibilita a stacionární rozdělení)

Je-li h.m.ř. X s množinou stavů S reverzibilní vzhledem k nějakému π, pak je π jeho stacionární rozdělení.

Metropolisův-Hastingsův algoritmus

Algoritmus 1 (Metropolisův-Hastingsův)

Mějme π a libovolný jiný m.ř. na S s maticí přechodu $Q = (q_{ij})_{i,j\in S}$. Zvol počet kroků N v generovaném řetězci.

1. Zvol počáteční stav X_0 a polož $n := 0$.
2. Generuj Y_{n+1} z rozdělení $q_{X_n} = (q_{X_n,j})_{j\in S}$.
3. Hoď mincí s pstí úspěchu $\alpha_{X_n, Y_{n+1}}$, kde

$$\alpha_{i,j} = \begin{cases} \min\left(1, \frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}}\right) & \pi_i q_{ij} > 0 \\ 0, & \text{jinak.} \end{cases}$$

4. Pokud je hod úspěch, tak polož $X_{n+1} := Y_{n+1}$, jinak nech $X_{n+1} := X_n$.
5. Pokud $n + 1 \leq N$, tak zvětši n o jedničku a jdi na 2., jinak KONEC.

Věta

Metropolisův-Hastingsův algoritmus vytvoří N kroků m.ř. s maticí přechodu $P = (p_{ij})_{i,j\in S}$, kde

$$p_{ij} = q_{ij}\alpha_{ij}, \quad \text{pro } i \neq j \in S$$

jehož stacionární rozdělení je π.

Random scan Gibbs sampler

Speciální případ pro stavovou množinu součinového tvaru $S = X_{i=1}^{d} S_i$.

Algoritmus 2 (Random scan Gibbs sampler)

0. Zvol počet kroků N.
1. Zvol počáteční stav $X^{(0)} = (X_1^{(0)}, \dots, X_d^{(0)})$ a polož $n := 0$.
2. Vygeneruj k z rovnoměrného rozdělení na $\{1, 2, \dots, d\}$
   a simuluj $X_k^{(n+1)}$ z plně podmíněného rozdělení $X_k | X_1^{(n)}, \dots X_{k-1}^{(n)}, X_{k+1}^{(n)}, \dots X_d^{(n)}$
   a polož $X_j^{(n+1)} := X_j^{(n)}\ \forall j \neq k$
3. Pokud $n + 1 \leq N$, tak zvětši n o jedničku a jdi na 2., jinak KONEC.

Simulované žíhání

stochastický optimalizační algoritmus - jeho cílem je najít globální minimum (resp. maximum) funkce $h : S \to \mathbb{R}$

Definice

Boltzmannovo rozdělení $\pi_{h,T}$ na S s funkcí energie $h : S \to \mathbb{R}$ a parametrem teploty $T > 0$ je dáno pravděpodobnostmi

$$\pi_{h,T}(s) = \frac{1}{C_{h,T}} \exp\{-h(s)/T\}, \qquad s \in S$$

kde $C_{h,T}$ je normující konstanta.

Věta (správnost simulovaného žíhání)

Buď $|S| < \infty$ a $h : S \to \mathbb{R}$ libovolná funkce. Pro $T > 0$ buď $\alpha(T)$ pravděpodobnost, že náhodný element Y na S s Boltzmannovým rozdělením $\pi_{h,T}$ splňuje

$$h(Y) = \min_{s \in S} h(s).$$

Potom $\lim_{T \to 0+} \alpha(T) = 1$.

Simulované žíhání

Algoritmus 3 (simulované žíhání)

Zvolme klesající posloupnost teplot $\{T_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ takovou, že $T_n \searrow 0$ a klesající posloupnost přirozených čísel $\{N_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ (schéma žíhání)

1. Polož $i := 1$, zvol počáteční stav.
2. Simuluj N_i kroků řetězce, jehož stacionární rozdělení je π_{h,T_i}.
3. Jestliže není splněna podmínka ukončení, zvětši i o 1 a jdi na 2, jinak KONEC.

Za řešení optimalizační úlohy považujeme stav, kde skončíme.

Simulované žíhání

Věta (vhodná volba teplot)

Buď $S = \{s_1, \ldots, s_k\}$ a $h : S \to \mathbb{R}$. Je-li $T^{(n)}$ teplota v čase n a

$$T^{(n)} \geq \frac{k\left(\max_{s \in S} h(s) - \min_{s \in S} h(s)\right)}{\log n}$$

pro dostatečně velká n, potom $\lim_{n \to \infty} \alpha(T^{(n)}) = 1$, kde

$$\alpha(T^{(n)}) = \mathbb{P}(h(Y_n) = \min_{s \in S} h(s))$$

a Y_n je stav řetězce v čase n.

pozn.: Pro hledání globálního maxima používáme rozdělení $\frac{1}{C_{h,T}} \exp\{+h(s)/T\}$ a ve větě je pak maximum místo minima.

Aplikace: např. různé NP-těžké kombinatorické problémy (např. problém obchodního cestujícího nebo bisekce grafu)