

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

[maglaris@netmode.ntua.gr](mailto:maglaris@netmode.ntua.gr)

[www.netmode.ntua.gr](http://www.netmode.ntua.gr)

Video Conference μέσω Cisco Webex

Πέμπτη 18/3/2021

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Στατιστική Μηχανική και Μηχανική Μάθηση

- Εκτίμηση (inference) στατιστικών ιδιοτήτων δειγματικών στοιχείων εισόδου  $\mathbf{x}(i)$  σε συστήματα **Μηχανικής Μάθησης** που αυτό-οργανώνονται χωρίς επίβλεψη (**Unsupervised Learning**) για ταξινόμηση, συμπλήρωση ατελειών... από δείγμα μάθησης μέσω **γενίκευσης**
- 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 αντιστοιχίζονται στις τιμές των συντεταγμένων των διανυσμάτων εισόδου διαστάσεως ( $m \times 1$ ) του περιβάλλοντος δειγματικού χώρου:  
$$\mathbf{x}(i) = [x_1(i) \ (i) \ \dots \ x_m(i)]^T, \ i = 1, 2, \dots, N$$
- Οριακή προσέγγιση στατιστικής κατανομής χαρακτηριστικών των δειγματικών στοιχείων  $\mathbf{x}(i)$  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**
- 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  $E_i$

Οι πιθανότητες ισορροπίας  $p_i$  (σχετική συχνότητα εμφάνισης της  $i$ ) είναι αντιστρόφως ανάλογες των  $E_i$ :

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

Οι  $p_i \geq 0$ ,  $\sum_i p_i = 1$  ακολουθούν **κατανομή Gibbs** (1902) ή **Boltzmann** (1868) με  $Z$  τη **Σταθερά Κανονικοποίησης (Zustadsumme)** που αποκαλείται **Συνάρτηση Κερματισμού (Partition Function)**

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

Καταστάσεις  $i$  χαμηλής ενέργειας  $E_i$  έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να συμβαίνουν από καταστάσεις υψηλής ενέργειας. 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:

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

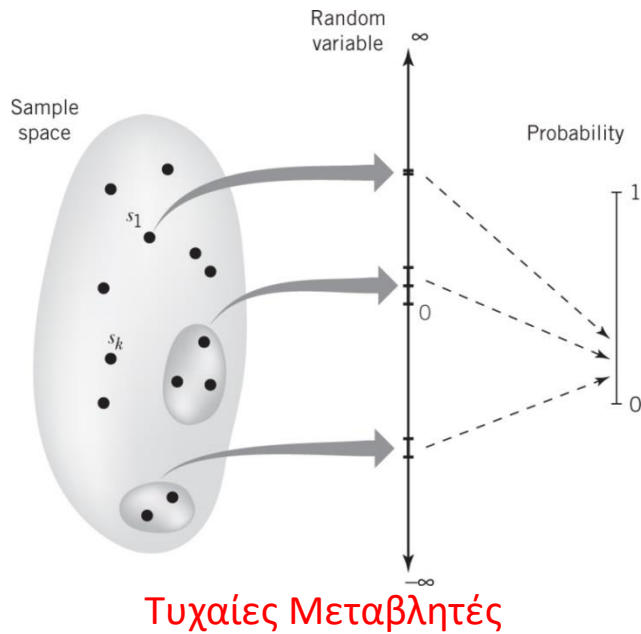
Ορίζεται η **εντροπία** του συστήματος:  $H \triangleq \sum_i p_i \log p_i \Rightarrow \langle E \rangle - F = TH$  ή  $F = \langle E \rangle - TH$

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

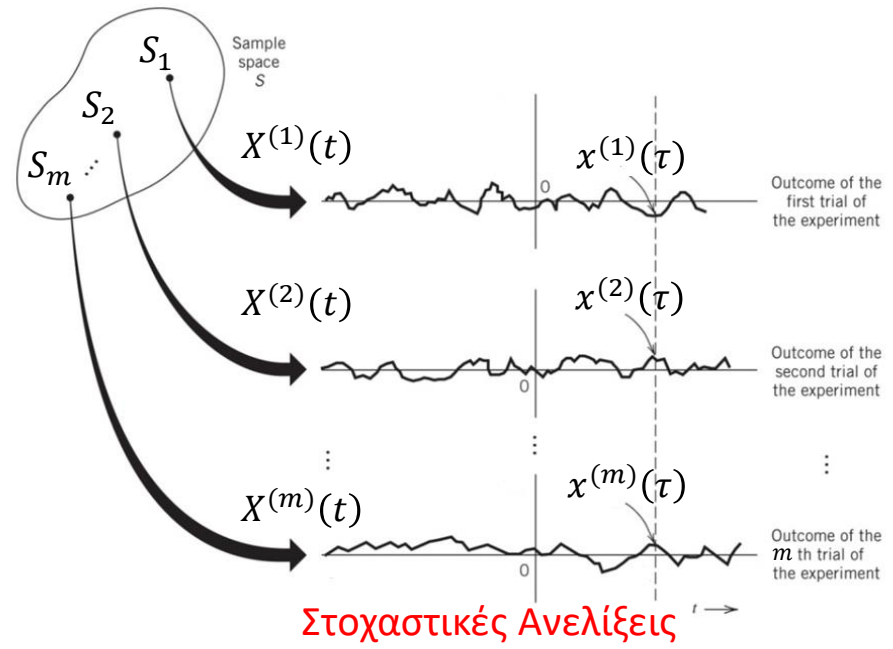
Σε θερμική ισορροπία η εντροπία τείνει στη μέγιστη τιμή, η  $F$  παίρνει την ελάχιστη τιμή της και οι καταστάσεις ακολουθούν την κατανομή **Gibbs**

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Στοχαστικές Διαδικασίες - Ανελιξίες, Ιδιότητα Markov



Τυχαίες Μεταβλητές



Στοχαστικές Ανελιξίες

- **Στοχαστική Ανέλιξη Κατάστασης**  $X(t)$  με μεταβάσεις από χρόνο  $\tau$  σε χρόνο  $t$  του ίδιου δειγματικού στοιχείου έκβασης (outcome, sample value σαν χρονική συνάρτηση) 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 (outcome σαν χρονοσειρά) 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  $(X_n = i) \rightarrow (X_{n+1} = j)$  ανεξάρτητες του παρελθόντος σε διακριτά βήματα

Πιθανότητες μετάβασης σε ένα βήμα είναι σταθερές και ανεξάρτητες της χρονικής στιγμής  $n$  :

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

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 (1/4)

- **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 επόμενό του  $\Rightarrow$

Επισκέψεις σε υποσύνολα  $S_l$  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*)**:

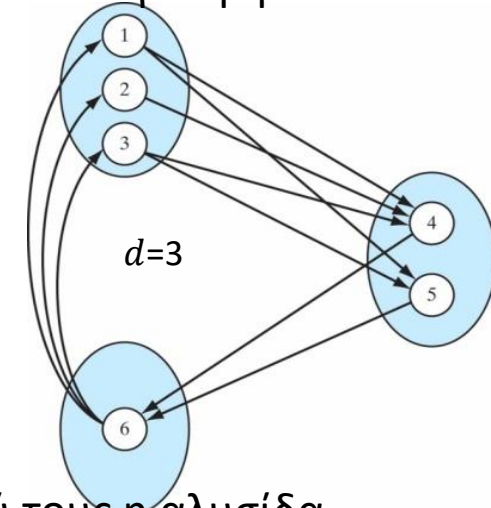
Δύο καταστάσεις επικοινωνούν (*communicate*)  $i \leftrightarrow j$

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 (2/4)

- 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  $\pi_i$  (**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 βάσει του οποίου προσεγγίζονται οι πιθανότητες σταθερής κατάστασης (**Steady State Probabilities**)  $\pi_i$  σαν όριο χρονικών αναλογιών παραμονής στην κατάσταση  $i$  ενός χρονικού δείγματος της  $X_n$  σε άπειρο χρόνο εξέλιξης (**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 (3/4)

- Οι καταστάσεις  $i$  των οποίων οι πιθανότητες σταθερής κατάστασης  $\pi_i$  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  $\pi_i$  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 υπολογίζονται μέσω του γραμμικού συστήματος **αναλλοίωτης κατανομής εργοδικών πιθανοτήτων**:

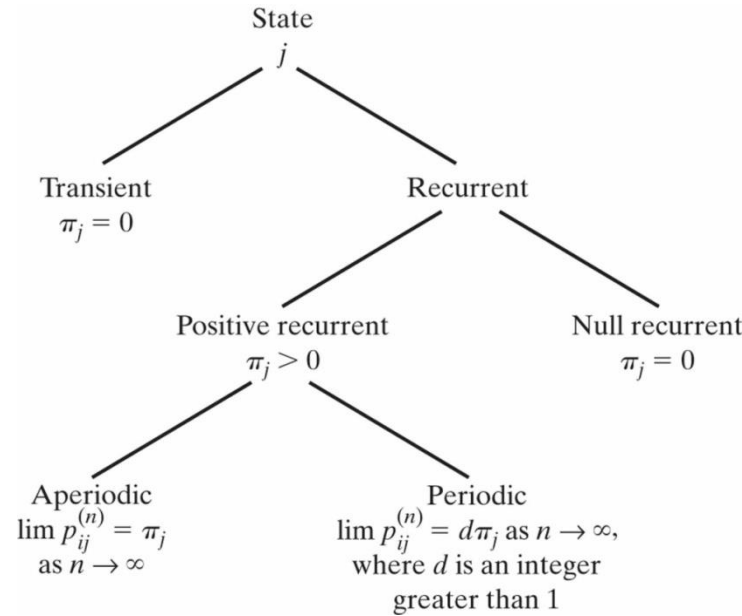
$$\pi_j = \sum_{i=1}^K \pi_i p_{ij} \quad j = 1, 2, \dots, K \quad \text{ή} \quad \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} \mathbf{P} \quad \text{και} \quad \sum_{j=1}^K \pi_j = 1$$

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



## Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (4/4)

### 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  $\pi_i$  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  $\hat{p}_{ji} = \frac{\pi_i}{\pi_j} p_{ij}$ .

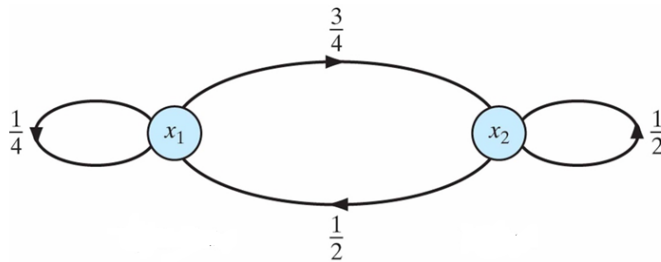
# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## 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



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

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

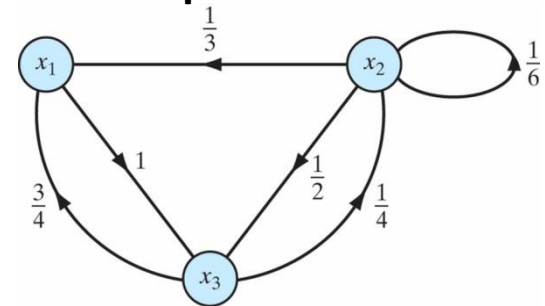
$$\mathbf{P}^2 = \begin{bmatrix} 0.4375 & 0.5625 \\ 0.3750 & 0.6250 \end{bmatrix}$$

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

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

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

(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)

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

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

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

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

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