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

Αίθουσα 002, Νέα Κτίρια ΣΗΜΜΥ
Τρίτη 21/3/2023

Στατιστική Μηχανική και Μηχανική Μάθηση

- 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

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:

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

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***)

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

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 $< E > = \sum_i p_i E_i$. Η συνολική Ελεύθερη Ενέργεια F (***Helmholtz Free Energy***) είναι:

$$F = -T\log Z \Rightarrow < E > - F = -T\sum_i p_i \log p_i$$

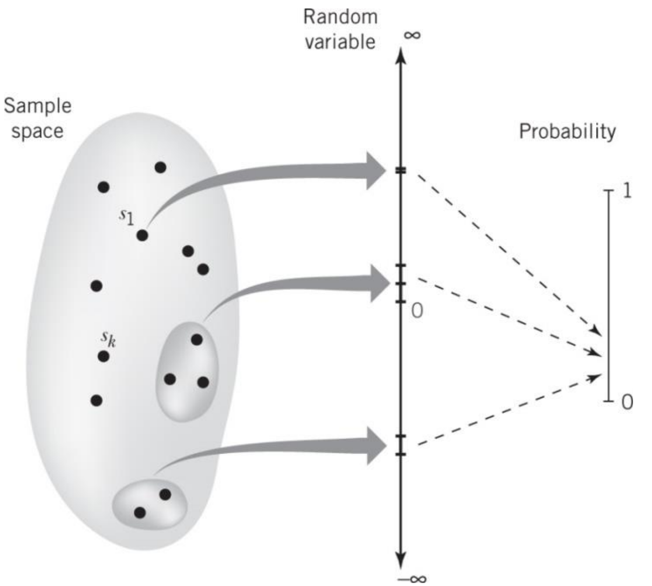
Ορίζεται η ***εντροπία*** του συστήματος: $H \triangleq \sum_i p_i \log p_i \ \Rightarrow < E > - F = TH$ ή $F =< E > - TH$

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

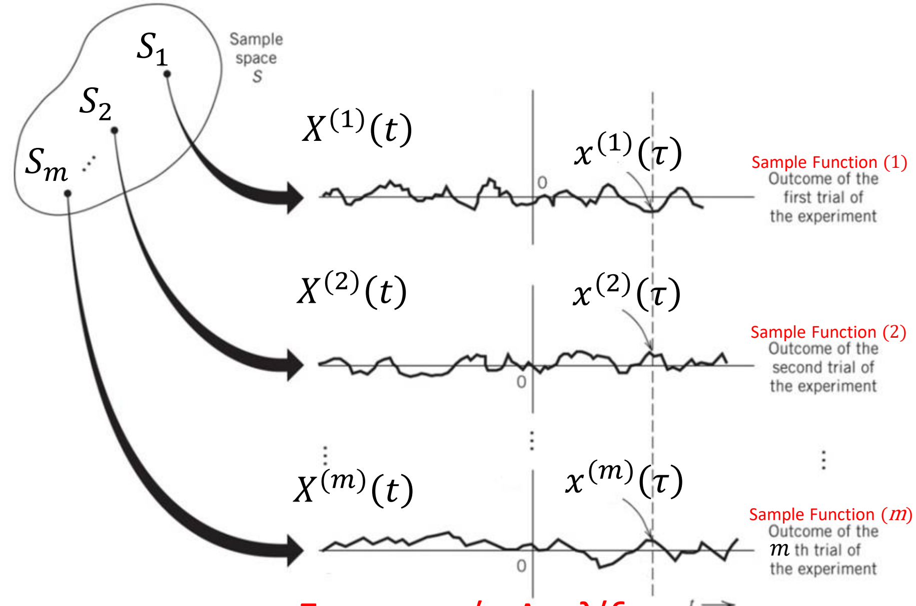
Σε θερμική ισορροπία η εντροπία τείνει στη μέγιστη τιμή, η F παίρνει την ελάχιστη τιμή της και οι καταστάσεις ακολουθούν την κατανομή ***Gibbs***

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Στοχαστικές Διαδικασίες - Ανελίξεις, Ιδιότητα Markov



Τυχαίες Μεταβλητές



Στοχαστικές Ανελίξεις

- ***Στοχαστική Ανέλιξη Κατάστασης*** $X(t)$ με μεταβάσεις από χρόνο τ σε χρόνο t του ιδίου 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 ιδίου 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 $\{X_1, X_2, \ldots, X_{n-1}\}$

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

Ορισμοί Αλυσίδων Markov, Μεταβάσεις Καταστάσεων

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

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

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

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 $p_{ij}^{(m)} = P(X_{n+m} = j | X_n = i), m = 1,2, \ldots$

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

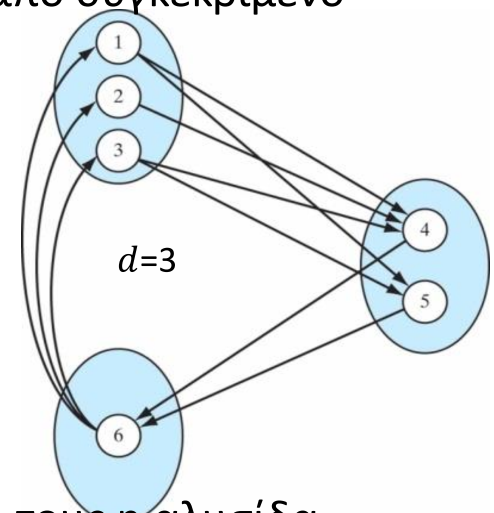
(***Ταυτότητα Chapman-Kolmogorov***)

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (1/5)

- **Επαναληπτικές Καταστάσεις** (***Recurrent States***): Η διαδικασία επιστρέφει στις καταστάσεις αυτές άπειρες φορές στο διηνεκές (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 $S_1, S_2, \ldots, S_d$ με επιτρεπτές μεταβάσεις μόνο από συγκεκριμένο υποσύνολο σε επόμενό του ⇒

  Επισκέψεις σε υποσύνολα S_ι περιοδικά κάθε d μεταβάσεις:

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



- **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***

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (2/5)

- **Μέσος Χρόνος Επιστροφής** (***Mean Recurrence Time***)
  $\mathrm{E}[T_i(k)]$ 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***) $\pi_i = \frac{1}{\mathrm{E}[T_i(k)]}$
  Αν $\mathrm{E}[T_i(k)] < \infty$ 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

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

  Οι χρόνοι επιστροφής $T_i(k)$ είναι ακολουθία ανεξαρτήτων τυχαίων μεταβλητών της ίδιας κατανομής (***independent identically distributed – iid***) και για $l \to \infty$ 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***)

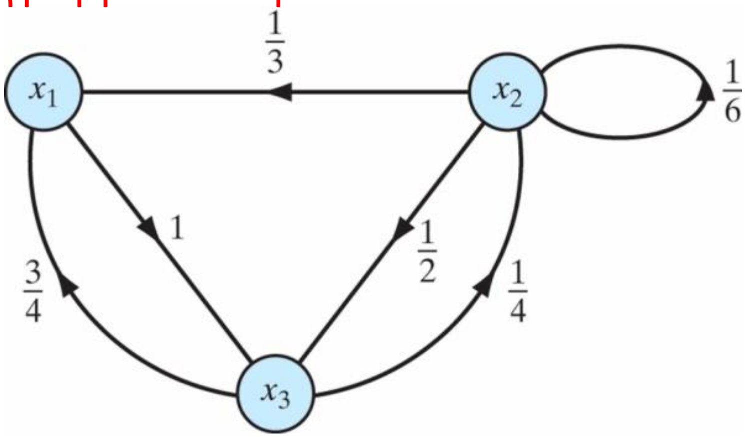
$$\lim_{l\to\infty} \nu_i(l) = \pi_i \,, i = 1,2,\dots,K$$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ιδιότητες Καταστάσεων Αλυσίδων Markov (3/5)

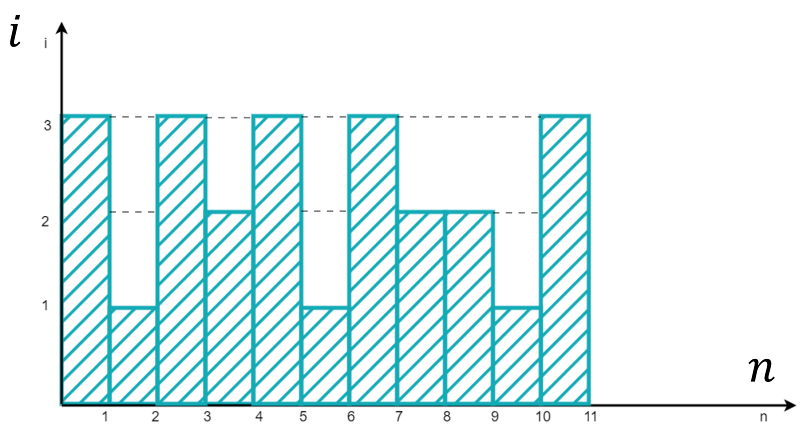
Παράδειγμα Υπολογισμού $T_i(k), \nu_i(l)$ σε Αλυσίδα Markov τριών Recurrent States

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 $T_3(k), \nu_3(l), k \in \{1,2,\dots,5\}, l = 5$

- $T_3(1) = 0$
- $T_3(2) = 2$
- $T_3(3) = 2$
- $T_3(4) = 2$
- $T_3(5) = 4$

- $\nu_3(5) = \frac{5}{0+2+2+2+4} = \frac{5}{10} \rightarrow \pi_3 = 0.4652$

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 $\boldsymbol{\pi}^{(0)}$

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

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

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

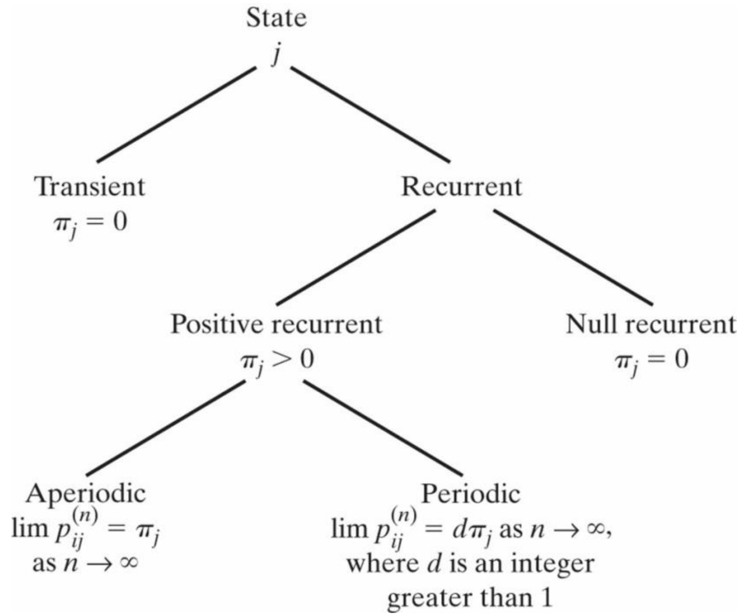
Άρα οι $\boldsymbol{\pi} = \lim_{n\to\infty} \boldsymbol{\pi}^{(n)}$ είναι ***ανεξάρτητες*** της αρχικής συνθήκης $\boldsymbol{\pi}^{(0)}$ και υπολογίζονται μέσω του γραμμικού συστήματος ***αναλλοίωτης κατανομής εργοδικών πιθανοτήτων***:

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

(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 $i \to j$ πραγματοποιείται με σχετική συχνότητα ίση με την αντίστροφή της $j \to i$. 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**: $\sum_{i=1}^{K} \pi_i p_{ij} = \sum_{i=1}^{K} \left(\frac{\pi_i}{\pi_j} p_{ij}\right) \pi_j = \sum_{i=1}^{K} p_{ji} \pi_i = \pi_i$
- 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 ($i \to j$) ή προς στο παρελθόν ($j \to i$) με $\hat{p}_{ji} = \frac{\pi_i}{\pi_j} p_{ij}$.

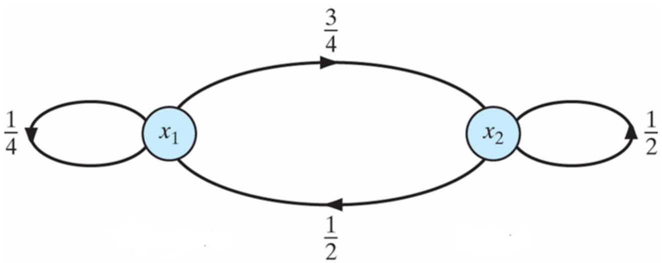
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Διαγράμματα Καταστάσεων & Παραδείγματα Εργοδικών Αλυσίδων Markov

Διαγράμματα Μεταβάσεων Καταστάσεων (State Transition Diagrams)

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

Παραδείγματα Υπολογισμού Εργοδικών Πιθανοτήτων



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

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

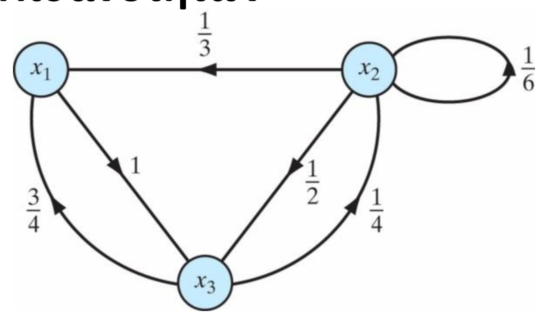
$$\mathbf{P}^2 = \begin{bmatrix} 0.4375 & 0.5625 \\ 0.3750 & 0.6250 \end{bmatrix}$$

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

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

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

(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)

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

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

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

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

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