Μάθημα ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΕΣ ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΕΣ ΚΑΙ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ
Καθ. Γ. Κοντογιάννης
Τρίτη 10 Δεκεμβρίου 2013

Περίληψη αλγόριθμου Metropolis για προσομοίωση

Μοντέλο Ising

Έστω $x = (x_{ij} : 1 \le i, j \le N)$ μια μαυρόασπρη εικόνα με NxN pixels, όπου x_{ij} είναι η τιμή του pixel στη θέση (i, j), δηλαδή $x_{ij} = 1$ αν είναι άσπρο και $x_{ij} = -1$ αν είναι μαύρο. Οπότε κάθε εικόνα x ανήκει στο σύνολο $\{-1,+1\}^{N^2}$ και υπάρχουν 2^{N^2} τέτοιες εικόνες. Ορίζουμε την κατανομή

$$\pi_\beta(x) = \frac{1}{Z} e^{\beta \sum_{u \sim v} x_u x_v},$$

όπου $u \sim v$ συμβολίζει όλα τα ζευγάρια γειτονικών pixel, και όπου

$$Z = \sum_{y \in \{-1,+1\}^{N^2}} e^{\beta \sum_{u \sim v} y_u y_v}.$$

Λόγω του μεγάλου πλήθους των όρων που περιέχει, η σταθερά Z (και κατά συνέπεια οι τιμές της πυκνότητας $\pi_\beta(x)$) είναι αδύνατον να υπολογιστούν. Αλλά η $\pi_\beta(x)$ έχει τις εξής πολύ χρήσιμες ιδιότητες.

1. Ο λόγος των πιθανοτήτων $\pi_\beta(x)$ και $\pi_\beta(y)$ δύο εικόνων x, y μπορεί εύκολα να υπολογιστεί:

$$\frac{\pi_\beta(x)}{\pi_\beta(y)} = e^{\beta \sum_{u \sim v} [x_u x_v - y_u y_v]}.$$

2. Το ίδιο και οι δεσμευμένες πιθανότητες:

$$\pi_\beta(x_{(i,j)} = +1 \mid x_u : u \ne (i, j)) = \left[1 + e^{-2\beta \sum_{u \sim (i,j)} x_u} \right]^{-1}.$$

Αλγόριθμος Metropolis

Αν θέλουμε να προσομοιώσουμε μια κατανομή $\pi(x)$ για x σε κάποιο σύνολο τιμών *S*, μπορούμε να κατασκευάσουμε μια Α.Μ. $\{X_n\}$ η οποία έχει στάσιμη κατανομή την $\pi(x)$, και για να την προσομοιώσουμε απαιτεί ΜΟΝΟ τον υπολογισμό λόγων των πιθανοτήτων $\pi(y)/\pi(x)$, και όχι των ίδιων των πιθανοτήτων $\pi(x)$. Αυτό επιτυγχάνει ο αλγόριθμος Metropolis, ο οποίος λειτουργεί ως εξής:

Έστω ένας πίνακας μεταβάσεων $Q = (Q_{ij})$ για i, j στο σύνολο τιμών *S*, ο οποίος είναι αδιαχώριστος και συμμετρικός.

i. Θέτουμε $X_0 = x$ αυθαίρετο.

ii. Επιλέγουμε μια «προτεινόμενη» τιμή y με βάση τον πίνακα μεταβάσεων *Q*.

iii. Δεχόμαστε την προτεινόμενη τιμή και θέτουμε $X_1 = y$ με πιθανότητα

$$\alpha(x, y) = \min\left\{1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)}\right\},$$

ή απορρίπτουμε την προτεινόμενη τιμή και θέτουμε $X_1 = x$ με πιθανότητα $1 - \alpha(x, y)$.

iv. Επαναλαμβάνουμε.

Η Α.Μ. που προκύπτει είναι αδιαχώριστη, απεριοδική και αναστρέψιμη με στάσιμη κατανομή την $\pi(x)$. Άρα:

1. Η κατανομή του X_n συγκλίνει στην π καθώς το $n \to \infty$
2. Για οποιαδήποτε συνάρτηση $f(x)$, έχουμε

$$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f(X_k) \to E_\pi[f(X)] = \sum_x \pi(x) f(x),$$

καθώς το $n \to \infty$.