

# Графические вероятностные модели

---

Сергей Николенко

Академия MADE — Mail.Ru

20 марта 2021 г.

---

## *Random facts:*

- 20 марта в ООН — Международный день счастья; был выбран день весеннего равноденствия как мировое явление, ощущаемое человечеством, обозначающее первый день весны в Северном полушарии, период обновления и новых начал
- 20 марта 1815 г. корсиканское чудовище вошло в Париж и на сто дней превратилось в Его императорское величество
- 20 марта 1854 г. Партия свободной земли и фракция «Совесть» Партии вигов объединились и основали республиканскую партию; партия выступала против рабства, отражая интересы Севера в противовес элитарной демократической партии, которая опиралась на плантаторов-рабовладельцев Юга
- 20 марта 1985 г. Либби Риддлз стала первой женщиной, выигравшей гонку Iditarod Trail Sled Dog Race — 1161 миль по Аляске на собачьих упряжках
- 20 марта 1995 г. «Аум Синрикё» распылила зарин в токийском метро

# Графические модели

---

# В чём же проблема

- В предыдущих лекциях мы рассмотрели задачу байесовского вывода, ввели понятие сопряжённого априорного распределения, поняли, что наша основная задача – найти апостериорное распределение.
- Но если всё так просто – взяли интеграл, посчитали, всё получилось – о чём же здесь целая наука?
- Проблема заключается в том, что распределения, которые нас интересуют, обычно слишком сложные (слишком много переменных, сложные связи).
- Но, с другой стороны, в них есть дополнительная структура, которую можно использовать, структура в виде независимостей и условных независимостей некоторых переменных.

# Графические модели с направленными графами

- Пример: рассмотрим распределение трёх переменных и запишем его по формуле полной вероятности:

$$p(x, y, z) = p(x | y, z)p(y | z)p(z).$$

- Теперь нарисуем граф, в котором стрелки указывают, какие условные вероятности заданы.
- Пока граф полносвязный, это нам ничего не даёт – любое распределение  $p(x_1, \dots, x_n)$  так можно переписать.
- Но если некоторых связей *нет*, это даёт нам важную информацию и упрощает жизнь.

# Графические модели с направленными графами

- Рассмотрим направленный ациклический граф на вершинах  $x_1, \dots, x_k$  и зададим в каждой вершине распределения  $p(x_i \mid \text{pa}(x_i))$ . Тогда будем говорить, что граф с этими локальными распределениями является графической моделью (байесовской сетью доверия) для совместного распределения вероятностей

$$p(x_1, \dots, x_k) = \prod_{i=1}^k p(x_i \mid \text{pa}(x_i)).$$

- Другими словами, если мы можем разложить большое совместное распределение в произведение локальных распределений, каждое из которых связывает мало переменных, это хорошо. :)

# Графические модели с направленными графами

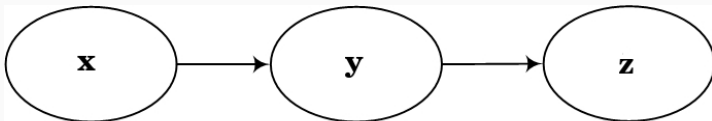
- Пример: обучение параметров распределения по нескольким экспериментам (плашки, можно нарисовать параметры явно):

$$p(x_1, \dots, x_n, \theta) = p(\theta) \prod_{i=1}^n p(x_i \mid \theta).$$

- Что можно сказать о (не)зависимости случайных величин  $x_i$  и  $x_j$ ?
- Задача вывода на графической модели: в некоторой части вершин значения наблюдаются, надо пересчитать распределения в других вершинах (подсчитать условные распределения). Например, из этой модели получатся и задача обучения параметров, и задача последующего предсказания.

# Графические модели с направленными графами

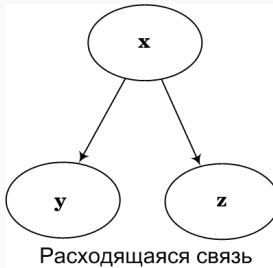
- $d$ -разделимость – условная независимость, выраженная в структуре графа:
  - последовательная связь,  $p(x, y, z) = p(x)p(y | x)p(z | y)$ :
    - если  $y$  не наблюдается, то
$$p(x, z) = p(x) \int p(y | x)p(z | y)dy = p(x)p(z | x);$$
    - если  $y$  наблюдается, то
$$p(x, z | y) = \frac{p(x, y, z)}{p(y)} = \frac{p(x)p(y|x)p(z|y)}{p(y)} = p(x | y)p(z | y),$$
 получили условную независимость.



Последовательная связь

# Графические модели с направленными графами

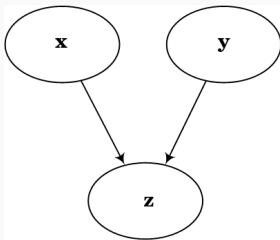
- расходящаяся связь,  $p(x, y, z) = p(x)p(y | x)p(z | x)$ , – так же:
  - если  $y$  не наблюдается, то
$$p(x, z) = p(x)p(z | x) \int p(y | x) dy = p(x)p(z | x);$$
  - если  $y$  наблюдается, то
$$p(x, z | y) = \frac{p(x, y, z)}{p(y)} = \frac{p(x)p(y|x)p(z|x)}{p(y)} = p(x | y)p(z | y),$$
 получили условную независимость.





# Графические модели с направленными графами

- Интересный случай – сходящаяся связь,  $p(x, y, z) = p(x)p(y)p(z | x, y)$ :
  - если  $z$  не наблюдается, то  $p(x, y) = p(x)p(y)$ , независимость есть;
  - если  $z$  наблюдается, то  $p(x, y | z) = \frac{p(x, y, z)}{p(z)} = \frac{p(x)p(y)p(z|x, y)}{p(z)}$ , и условной независимости нету.



Сходящаяся связь

Обобщение: если наблюдается хотя бы один из потомков  $z$ , уже может не быть независимости между  $x$  и  $y$ .

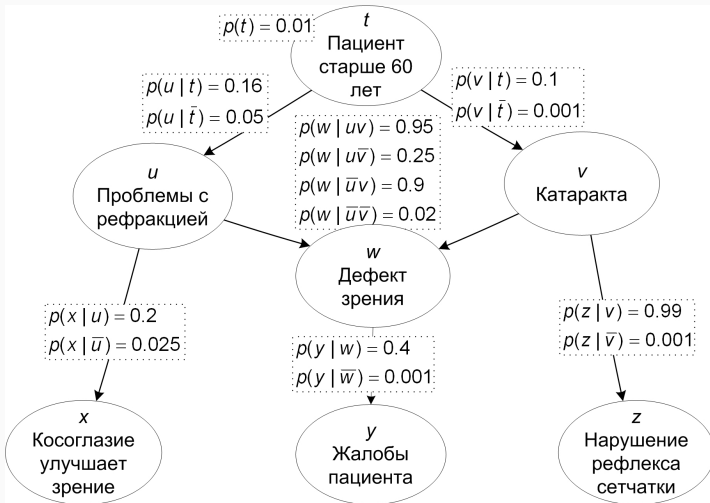
- Можно сформулировать, как структура графа соотносится с условной независимостью: в графе, где вершины из множества  $Z$  получили означивания (evidence), две ещё не означенные вершины  $x$  и  $y$  условно независимы при условии множества означенных вершин  $Z$ , если любой (ненаправленный) путь между  $x$  и  $y$ :
  - либо проходит через означенную вершину  $z \in Z$  с последовательной или расходящейся связью;
  - либо проходит через вершину со сходящейся связью, в которой ни она, ни её потомки не получили означиваний.

# Графические модели с направленными графами

- Можно сказать, что граф задаёт некоторое семейство распределений – не все распределения на вершинах графа будут соответствовать тем ограничениям по условной независимости, которые накладывает структура графа.
- Теорема (без доказательства): это семейство распределений в точности совпадает с семейством тех распределений, которые можно разложить в произведение

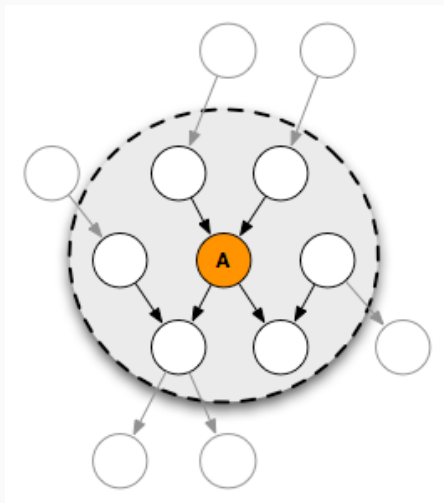
$$p(x_1, \dots, x_k) = \prod_{i=1}^k p(x_i \mid \text{pa}(x_i)).$$

# Пример байесовской сети



- Интересный вопрос: какие вершины нужно означить, чтобы наверняка «отрезать» одну вершину (Markov blanket)?
- Иначе говоря, для какого минимального множества вершин  $X$   $p(x_i \mid x_{j \neq i}) = p(x_i \mid X)$ ?

## Markov blanket



## Другие графические модели

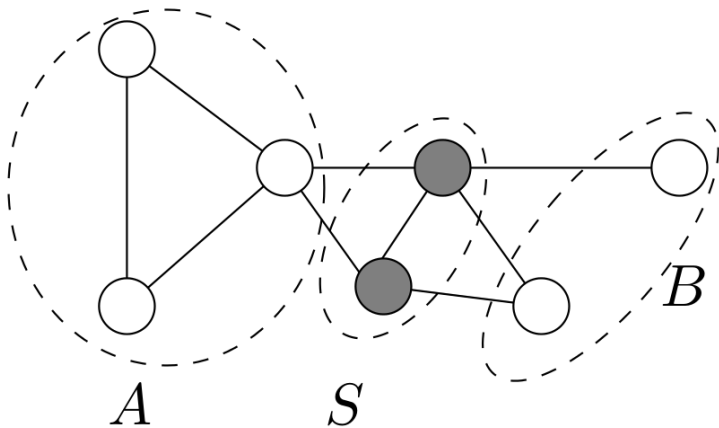
---

# Графические модели с ненаправленными графами

- Можно сделать и так, чтобы условие независимости было (более) локальным.
- Для этого нужно задавать модели ненаправленными графами. В них условие совсем естественное: множество вершин  $X$  условно независимо от множества вершин  $Y$  при условии множества вершин  $Z$ , если любой путь от  $X$  к  $Y$  проходит через  $Z$ .
- В частности, очевидно,  $p(x_i, x_j \mid x_{k \neq i, j}) = p(x_i \mid x_{k \neq i, j})p(x_j \mid x_{k \neq i, j})$  тогда и только тогда, когда  $x_i$  и  $x_j$  не соединены ребром.
- Такие модели называются *марковскими сетями* (Markov random fields).



## Условная независимость в ненаправленных моделях



# Графические модели с ненаправленными графами

- Поэтому в ненаправленных моделях локальные распределения соответствуют кликам в графе, и факторизация получается в виде

$$p(x_1, \dots, x_k) = \frac{1}{Z} \prod \psi_C(x_C),$$

где  $C$  – максимальные клики,  $\psi_C$  – неотрицательные функции (*номенциалы*), а  $Z$  – нормировочная константа (partition function).

- Поскольку  $\psi_C \geq 0$ , их обычно представляют как экспоненты:

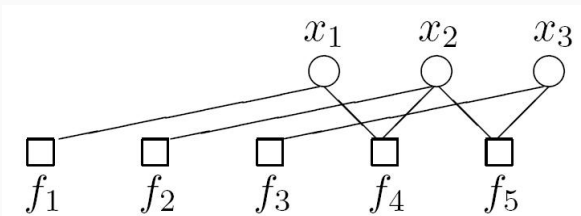
$$\psi_C(x_C) = \exp(-E_C(x_C)),$$

$E_C$  – функции энергии, они суммируются в полную энергию системы (это всё похоже на статистическую физику, отсюда и терминология).

- Интересный факт: назовём *идеальной картой* (perfect map) распределения  $D$  графическую модель  $G$ , если все условные независимости, присутствующие в  $D$ , отображены в  $G$ , и наоборот (ничего лишнего). Тогда идеальные карты в виде направленных моделей существуют не у всех распределений, в виде ненаправленных тоже не у всех, и эти множества существенно различаются (бывают распределения, которые нельзя идеально выразить направленной моделью, но можно ненаправленной, и наоборот).

# Фактор-графы

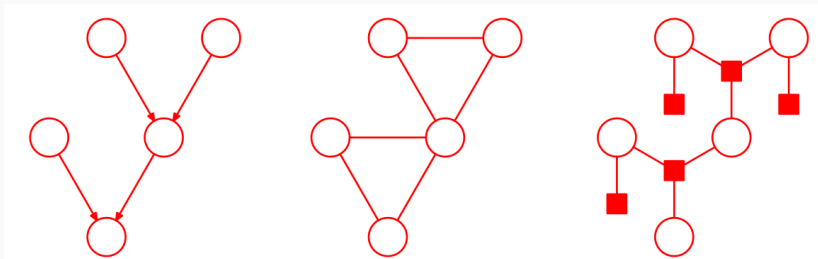
- Важная для вывода модификация – *фактор-граф* (можно построить и по направленной модели, и по ненаправленной).
- Фактор-граф – двудольный граф функций и переменных.
- Функция, соответствующая графу, – произведение всех входящих в него функций (т.е. то самое разложение и есть).
- Пример:  $p(x_1, x_2, x_3) = f_1(x_1)f_2(x_2)f_3(x_3)f_4(x_1, x_2)f_5(x_2, x_3)$ .



# Алгоритм передачи сообщений

---

# Три представления



- Чтобы поставить задачу в общем виде, рассмотрим функцию

$$p^*(X) = \prod_{j=1}^m f_j(X_j),$$

где  $X = \{x_i\}_{i=1}^n$ ,  $X_j \subseteq X$ .

- Т.е. мы рассматриваем функцию, которая раскладывается в произведение нескольких других функций.

- Задача нормализации: найти  $Z = \sum_X \prod_{j=1}^m f_j(X_j)$ .
- Задача маргинализации: найти

$$p_i^*(x_i) = \sum_{k \neq i} p^*(X).$$

Также может понадобиться, например,  $p_{i_1 i_2}$ , но реже.

- Поиск гипотезы максимального правдоподобия:

$$\mathbf{x}^* = \arg \max_X p(X).$$



- Все эти задачи NP-трудные.
- То есть, если мир не рухнет, сложность их решения в худшем случае возрастает экспоненциально.
- Но можно решить некоторые частные случаи.

- Давайте начнём с графа в виде (ненаправленной) цепи:

$$p(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z} \psi_{1,2}(x_1, x_2) \dots \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n).$$

- Мы хотим найти

$$p(x_k) = \sum_{x_1} \dots \sum_{x_{k-1}} \sum_{x_{k+1}} \dots \sum_{x_n} p(x_1, \dots, x_n).$$

## Пример

- Очевидно, тут можно много чего упростить; например, справа налево:

$$\begin{aligned}\sum_{x_n} p(x_1, \dots, x_n) &= \\ &= \frac{1}{Z} \psi_{1,2}(x_1, x_2) \dots \psi_{n-2,n-1}(x_{n-2}, x_{n-1}) \sum_{x_n} \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n).\end{aligned}$$

- Эту сумму можно вычислить отдельно и продолжать в том же духе справа налево, потом аналогично слева направо.

# Пример

- В итоге процесс сойдётся на узле  $x_k$ , куда придут два «сообщения»: слева

$$\mu_{\alpha}(x_k) = \sum_{x_{k-1}} \psi_{k-1,k}(x_{k-1}, x_k) \left[ \dots \sum_{x_2} \psi_{2,3}(x_2, x_3) \left[ \sum_{x_1} \psi_{1,2}(x_1, x_2) \right] \dots \right],$$

справа

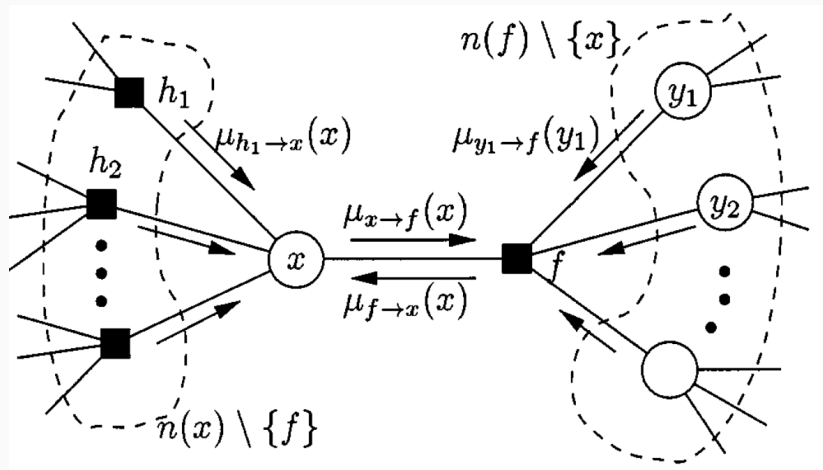
$$\mu_{\beta}(x_k) = \sum_{x_{k+1}} \psi_{k,k+1}(x_k, x_{k+1}) \left[ \dots \left[ \sum_{x_n} \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n) \right] \dots \right].$$

- Каждую частичную сумму можно рассматривать как «сообщение» от узла к своему соседу, причём это сообщение – функция от соседа.

# Алгоритм передачи сообщений

- Чтобы обобщить, удобно рассмотреть опять фактор-граф.
- Предположим, что фактор-граф – дерево (если не дерево, так просто не сработает).
- Алгоритм передачи сообщений решает задачу маргинализации для функции вида  $p(x_1, \dots, x_n) = \prod_s f_s(X_s)$ , заданной в виде фактор-графа.
- Передаём сообщения по направлению к нужному узлу от переменных к функциям и наоборот.

# Передача сообщений



- Чтобы найти  $p(x_k)$ , запишем  $p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{s \in \text{ne}(x_k)} F_s(x_k, X_s)$ , где  $X_s$  – переменные из поддерева с корнем в  $f_s$ . Тогда

$$\begin{aligned} p(x_k) &= \sum_{x_i \neq k} p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{s \in \text{ne}(x_k)} \left[ \sum_{X_s} F_s(x_k, X_s) \right] = \\ &= \prod_{s \in \text{ne}(x_k)} \mu_{f_s \rightarrow x_k}(x_k), \end{aligned}$$

где  $\mu_{f_s \rightarrow x_k}(x_k)$  – сообщения от соседних функций к переменной  $x_k$ .

# Алгоритм передачи сообщений

- Чтобы найти  $\mu_{f_s \rightarrow x_k}(x_k)$ , заметим, что  $F_s(x_k, X_s)$  тоже можно разложить по соответствующему подграфу:

$$F_s(x_k, X_s) = f_s(x_k, Y_s) \prod_{y \in Y_s} G_y(y, X_{s,y}),$$

где  $Y_s$  – переменные, непосредственно связанные с  $f_s$  (кроме  $x_k$ ),  $X_{s,y}$  – соответствующие поддеревья.

- Итого получаем

$$\begin{aligned} \mu_{f_s \rightarrow x_k}(x_k) &= \sum_{Y_s} f_s(x_k, Y_s) \prod_{y \in Y_s} \left( \sum_{X_{s,y}} G_y(y, X_{s,y}) \right) = \\ &= \sum_{Y_s} f_s(x_k, Y_s) \prod_{y \in Y_s} \mu_{y \rightarrow f_s}(y). \end{aligned}$$



- Можно аналогично подсчитать, что

$$\mu_{y \rightarrow f_s}(y) = \prod_{f \in \text{ne}(y) \setminus f_s} \mu_{f \rightarrow y}(y).$$

# Алгоритм передачи сообщений

- Итак, получился простой и понятный алгоритм:
  - как только узел получил сообщения от всех соседей, кроме одного, он сам начинает передавать сообщение в этого соседа;
  - сообщение по ребру между функцией и переменной является функцией от этой переменной;
  - узел-переменная  $x$  передаёт сообщение

$$\mu_{x \rightarrow f}(x) = \prod_{g \in \text{ne}(x) \setminus f} \mu_{g \rightarrow x}(x);$$

- узел-функция  $f(x, Y)$  передаёт сообщение

$$\mu_{f \rightarrow x}(x) = \sum_{y \in Y} f(x, y) \prod_{y \in Y} \mu_{y \rightarrow f}(y);$$

- начальные сообщения в листьях  $\mu_{x \rightarrow f}(x) = 1$ ,  $\mu_{f \rightarrow x}(x) = f(x)$ .

# Алгоритм передачи сообщений

- Когда сообщения придут из всех соседей в какую-то переменную  $x_k$ , можно будет подсчитать

$$p(x_k) = \prod_{f \in \text{ne}(x_k)} \mu_{f \rightarrow x_k}(x_k).$$

- Когда сообщения придут из всех соседей в какой-то фактор  $f_s(x_s)$ , можно будет подсчитать совместное распределение

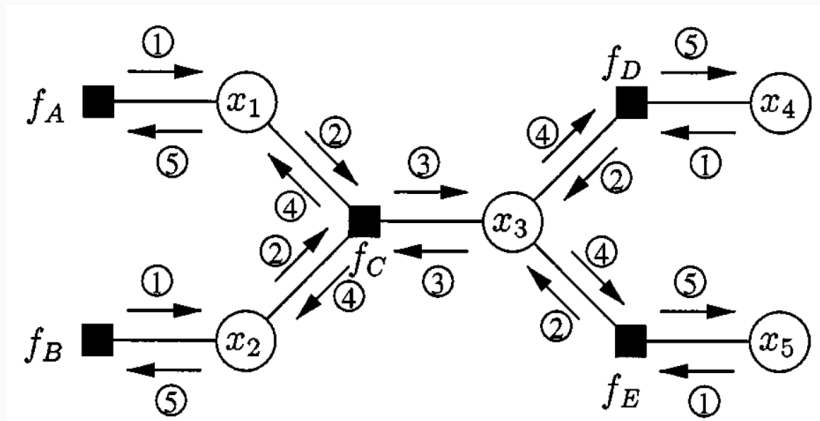
$$p(x_s) = f_s(x_s) \prod_{y \in \text{ne}(f_s)} \mu_{y \rightarrow f_s}(y).$$

- За два прохода (по каждому ребру туда и обратно) можно будет подсчитать маргиналы во всех узлах.

- Это называется алгоритм sum-product, потому что сообщение вычисляется как

$$\mu_{f \rightarrow x}(x) = \sum_{y \in Y} f(x, y) \prod_{y \in Y} \mu_{y \rightarrow f}(y).$$

- Задача максимизации  $\arg \max_x p(x_1, \dots, x_n)$  решается так же, но алгоритмом max-sum: сумма заменяется на максимум, а произведение на сумму.



## Так что же делать с байесовской сетью?

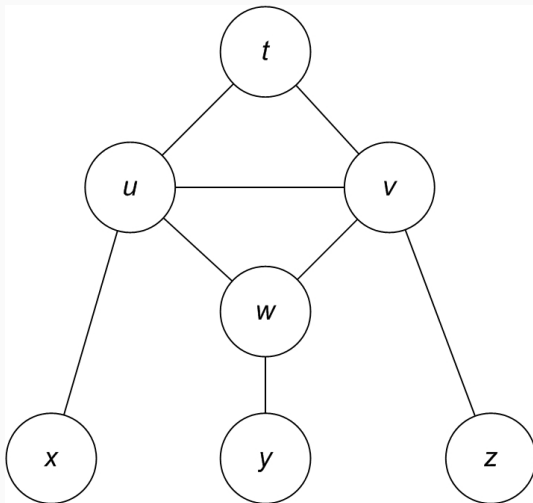
Для модели не в виде фактор-графа надо просто представить её в виде фактор-графа тем или иным способом.

Для байесовской сети это может означать, что надо сначала сделать морализацию, а потом добавить факторы в явном виде.

# Так что же делать с байесовской сетью?

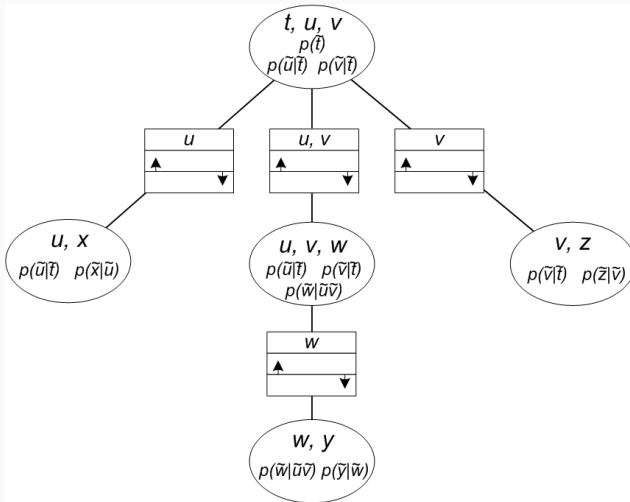


## Так что же делать с байесовской сетью?





# Так что же делать с байесовской сетью?



## Приближённый вывод

---

- Когда граф – дерево, и в каждом узле всё считается явно и аналитически, можно посчитать быстро и точно.
- Но что делать, когда зубная щётка недоступна?
- Могут быть две проблемы:
  1. сложная структура графа, с циклами;
  2. сложные факторы – результат маргинализации в отдельном узле неудобный.

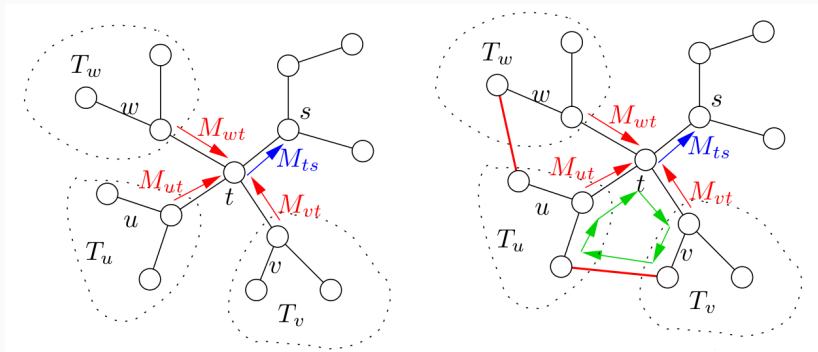
- Sum-product работает корректно, только если граф — дерево (ну, разве что скрестить пальцы и помолиться...).
- Что делать, когда граф содержит циклы?
- Нужно использовать деревья сочленений.

# Деревья сочленений — неформально

- Если цикл не сдаётся, его уничтожают, то есть заменяют весь цикл на одну вершину.
- Получается дерево, в котором уже можно работать обычным `sum-product`’ом; но при этом, конечно, замена нескольких вершин одной приводит к экспоненциальному раздуванию соответствующего фактора (множество значений соответствующей переменной должно содержать все комбинации значений исходных переменных).

- Если цикл всё-таки большой, то есть хороший общий метод, который применяют, когда нельзя применять `sum-product`.
- Метод заключается в том, чтобы применять `sum-product`. :)
- Он работает довольно часто даже тогда, когда в принципе работать не обязан (когда есть циклы).

# Передача сообщений с циклами



- Если факторы простые, а структура сложная, можно приближать сложное распределение более простой формой, разрывая связи в графе: *вариационные приближения* (из матфизики).
- Т.е. надо будет выбрать распределение из некоторого более простого семейства, которое лучше всего приближает сложное распределение.
- «Похожесть» можно определить по расстоянию Кульбака–Лейблера

$$d(p, q) = \int p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} dx.$$



- Например: давайте искусственно разорвём связи, оставив только рёбра внутри подмножеств вершин  $X_i$ .
- Иначе говоря, будем предполагать, что любой фактор  $q(Z)$  представляется в виде

$$q(Z) = \prod q_i(Z_i), \text{ где } Z_i = Z \cup X_i.$$

- Затем оптимизируем параметры, минимизируя расстояние между исходным распределением и таким факторизованным; это соответствует методу самосогласованного поля (mean field theory) в физике.
- Более подробно мы рассмотрим вариационные методы позже.

# Expectation propagation

- Если структура простая, но сложные факторы (результат не представляется в виде распределения нужной формы), можно его приближать простыми распределениями. Если в нашем факторизованном распределении

$$p(\boldsymbol{\theta} \mid D) = \frac{1}{p(D)} \prod_i f_i(\boldsymbol{\theta})$$

слишком сложные факторы  $f_i$ , мы хотим их заменить на какие-нибудь простые (из экспоненциального семейства, например, гауссианы):

$$q(\boldsymbol{\theta} \mid D) = \frac{1}{Z} \prod_i \hat{f}_i(\boldsymbol{\theta}).$$

- И тоже минимизировать расстояние Кульбака–Лейблера между  $p$  и  $q$ .

# Expectation propagation

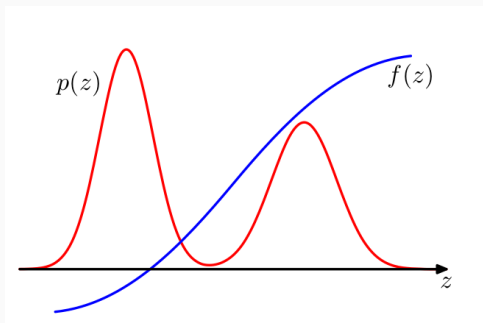
- Для одного фактора всё это очень просто было бы – посчитать среднее и дисперсию (moment matching).
- Для многих факторов надо приближать все  $\hat{f}_i$  одновременно. Можно доказать (мы не будем), что это можно делать последовательно, приближая фактор за фактором и итерируя, пока не сойдётся.
- Таким образом, алгоритм Expectation Propagation на самом деле очень простой:
  1. запустить алгоритм передачи сообщений, но на каждом шаге вместо сообщения  $\mu_{f_s \rightarrow x_k}(x_k)$  считать его приближение  $\hat{\mu}_{f_s \rightarrow x_k}(x_k)$  из какого-нибудь простого семейства;
  2. повторять передачу сообщений, пока не сойдётся.

# Постановка задачи сэмплирования

---

- Пусть у нас есть некоторое вероятностное распределение.
- Как с ним работать? Как, например, его симулировать?
- Мы не всегда можем приблизить (как по методу Лапласа) распределение каким-нибудь известным так, чтобы всё посчитать в явном виде.
- Например, в кластеризации: мультимодальное распределение с кучей параметров, что с ним делать?

- Однако часто задача не в том, чтобы что-то сделать с самой плотностью, а в том, чтобы считать ожидания функций:



- Пусть имеется некое распределение  $p(x)$ .
- Задача 1: научиться генерировать сэмплы  $\{x^{(r)}\}_{r=1}^R$  по  $p(x)$ .
- Задача 2: научиться оценивать ожидания функций по распределению  $p(x)$ , т.е. научиться оценивать интегралы вида

$$E_p[f] = \int p(x)f(x)dx.$$

# Постановка задачи

- Мы будем обычно предполагать, что  $x$  — это вектор из  $\mathbb{R}^n$  с компонентами  $x_n$ , но иногда будем рассматривать дискретные множества значений.
- Функции  $f$  — это, например, моменты случайных величин, зависящих от  $x$ .
- Например, если  $t(x)$  — случайная величина, то её среднее — это  $E_p[t(x)]$  ( $\int p(x)t(x)dx$ ), а её дисперсия равна  $E_p[t^2] - (E_p[t])^2$ .
- И мы предполагаем, что явно вычислить не получается — слишком сложная функция  $p$ .



- Мы будем заниматься только сэмплингом, потому что задача оценки ожиданий функций легко решится, если мы научимся делать сэмплинг.
- Как она решится?

# Ожидания и сэмплинг

- Мы будем заниматься только сэмплингом, потому что задача оценки ожиданий функций легко решится, если мы научимся делать сэмплинг.
- Как она решится?
- Нужно взять сэмплы  $\{x^{(r)}\}_{r=1}^R$  и подсчитать

$$\hat{f} = \frac{1}{R} \sum_r f(x^{(r)}).$$

- Ожидание  $\hat{f}$  равно  $E_p[f]$ , а дисперсия убывает обратно пропорционально  $R$ .

# Monte Carlo EM

- Пример применения: вспомним, где мы часто вычисляем ожидания – в алгоритме EM, на E-шаге:

$$Q(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) = \int p(\mathbf{Z} | \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) \ln p(\mathbf{Z}, \mathbf{X} | \boldsymbol{\theta}) d\mathbf{Z}.$$

- Давайте приблизим:

$$Q(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) \approx \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \ln p(\mathbf{Z}^{(r)}, \mathbf{X} | \boldsymbol{\theta}) d\mathbf{Z}.$$

- А потом будем это приближение оптимизировать; получится *Monte Carlo EM*.
- Пример ещё проще: байесовские предсказания – это ожидания известных функций по сложному апостериорному распределению, и посчитать их руками обычно сложно.

# Сэмплирование известных функций

---

# Сэмплирование известной плотности

- Как сэмплировать из известного распределения? Ну скажем, нормального?
- Предположим, что умеем сэмплировать  $z \in [0, 1]$  равномерно, `rand`.
- Какое будет распределение  $p(y)$  у  $y = f(z)$ ?

# Сэмплирование известной плотности

- Как сэмплировать из известного распределения? Ну скажем, нормального?
- Предположим, что умеем сэмплировать  $z \in [0, 1]$  равномерно, `rand`.
- Какое будет распределение  $p(y)$  у  $y = f(z)$ ?

$$p(y) = p(z) \left| \frac{dz}{dy} \right|, \text{ и тут } p(z) = 1.$$

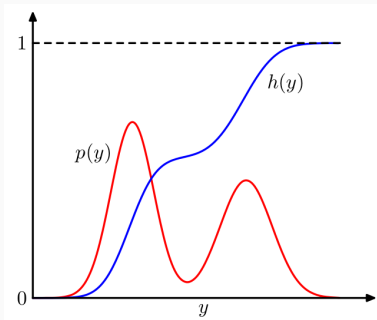
- Нам надо выбрать  $f(z)$  так, чтобы получилось заданное  $p(y)$ . Это что за  $f(z)$  будет?

# Сэмплирование известной плотности

- Надо выбрать

$$z = h(y) = \int_{-\infty}^y p(\hat{y}) d\hat{y},$$

неопределённый интеграл от  $p(y)$ .



- Т.е. надо как-то найти  $h^{-1}(z)$ .

- Например, что будет для экспоненциального распределения

$$p(y) = \lambda e^{-\lambda y}, \text{ где } y \in [0, \infty)?$$



# Сэмплирование известной плотности

- Например, что будет для экспоненциального распределения

$$p(y) = \lambda e^{-\lambda y}, \text{ где } y \in [0, \infty)?$$

- Будет интеграл от нуля,  $h(y) = 1 - e^{-\lambda y}$ , и  $y = \frac{1}{\lambda} \ln(1 - z)$ .
- То же и с многомерными распределениями, только теперь якобиан

$$p(y_1, \dots, y_M) = p(z_1, \dots, z_M) \left| \frac{d(z_1, \dots, z_M)}{d(y_1, \dots, y_M)} \right|.$$

- А как гауссиан сэмплировать?

# Сэмплирование гауссиана

- А как гауссиан сэмплировать?
- Преобразование Бокса-Мюллера: сначала сгенерируем  $(z_1, z_2)$  равномерно из единичного круга, потом посчитаем

$$y_1 = z_1 \sqrt{\frac{-2 \ln r^2}{r^2}}, \quad y_2 = z_2 \sqrt{\frac{-2 \ln r^2}{r^2}}, \quad \text{где } r^2 = z_1^2 + z_2^2.$$

- Тогда совместное распределение

$$p(y_1, y_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}y_1^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}y_2^2}.$$

- Всё понятно?..

## Выборка с отклонением

---

# Что же сложного в сэмплинге?

- Мы предполагаем, что дана функция  $p^*(x)$ , которая отличается от  $p(x)$  только нормировочной константой  $Z = \int p^*(x)dx$ :  $p(x) = p^*(x)/Z$ .
- Почему трудно делать сэмплинг?
- Во-первых, мы обычно не знаем  $Z$ ; но это не главное.
- Главное — обычно правильные сэмплы  $p^*$  часто попадают туда, где  $p^*$  велика. А как определить, где она велика, не вычисляя её везде?

# Дискретизация пространства

- Простейшая идея: давайте дискретизируем пространство, вычислим  $p^*$  на каждом участке (пусть она гладкая), потом будем брать дискретные сэмплы, зная все вероятности (это нетрудно).
- Сколько же будет дискретных участков?
- Главная проблема — обычно велика размерность  $x$ .  
Например, если разделить каждую ось на 20 участков, то участков будет  $20^n$ ; а  $n$  в реальных задачах может достигать нескольких тысяч...
- Иными словами, такой подход никак не работает.

## Пример: сколько в озере нефти?

- Перед вами — участок, под которым залежи нефти (да хоть подземное озеро нефти).
- Вам нужно определить, сколько её тут.
- Вы можете проводить замер в каждой конкретной точке, чтобы определить глубину слоя в этой точке.
- Проблема в том, что значительная часть общего объёма нефти может быть сосредоточена в глубоких, но узких каньонах.
- И это только размерность два. :)

- Может быть, всё-таки получится решить хотя бы вторую задачу?
- Давайте брать сэмплы  $\{x^{(r)}\}_{r=1}^R$  *равномерно* из всего пространства, затем вычислять там  $p^*$  и нормализовать посредством  $Z_R = \sum_{r=1}^R p^*(x^{(r)})$ .
- Тогда  $\hat{f}$  можно будет оценить как

$$\hat{f} = \frac{1}{Z_R} \sum_{r=1}^R f(x^{(r)}) p^*(x^{(r)}).$$

- В чём проблема?



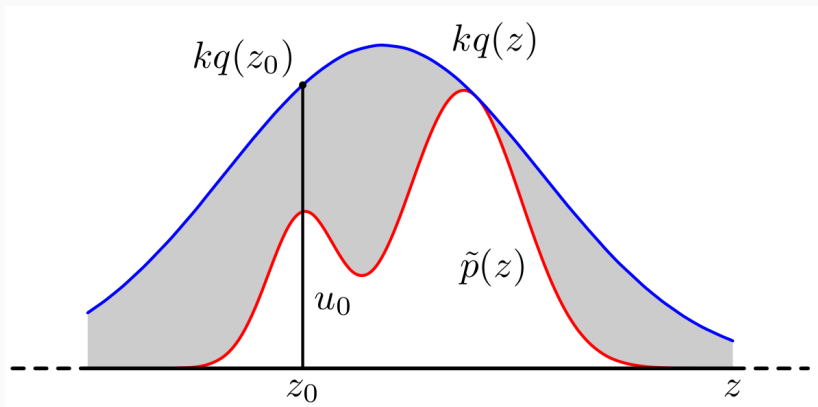
- Да в том же самом.
- Обычно значительная часть  $p^*$  сосредоточена в очень небольшой части пространства.
- Вероятность попасть в неё за  $R$  равномерно выбранных сэмплов тоже экспоненциально мала (например, если по каждой оси вероятность попасть  $1/2$ , и всё независимо, то получится вероятность  $2^{-n}$ ).
- Так что даже вторую задачу решить не получится.

- Но что-то всё-таки делать надо.
- Выборка с отклонением — rejection sampling.
- Наше предположение теперь в том, что у нас есть  $q^*$ , которое мы можем сэмплировать и про которое мы знаем константу  $c$ , такую, что

$$\forall x \quad cq^*(x) > p^*(x).$$

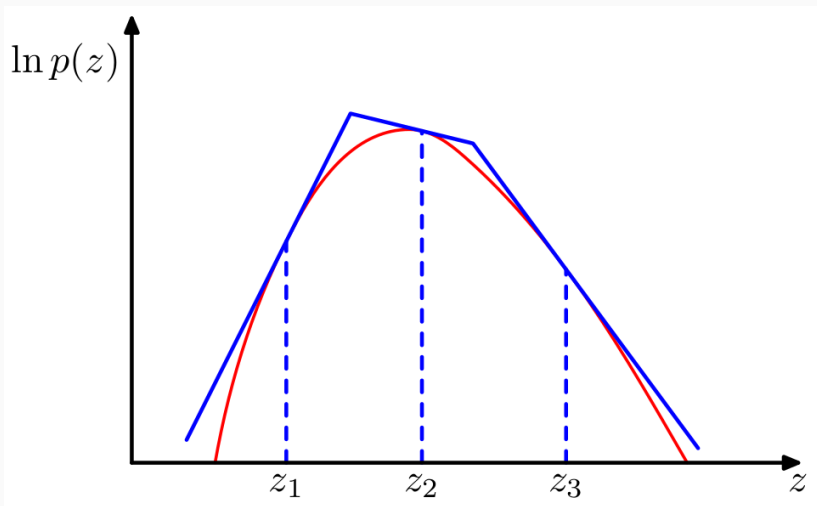
- Тогда мы сумеем сэмплировать  $p$ .

- Взять сэмпл  $x$  по распределению  $q^*(x)$ .
- Выбрать случайное число  $u$  равномерно из интервала  $[0, cq^*(x)]$ .
- Вычислить  $p^*(x)$ . Если  $u > p^*(x)$ ,  $x$  отклоняется (отсюда и название), иначе добавляется в сэмплы.



- Алгоритм работает, потому что выбирает точки  $[x, u]$  равномерно из области под графиком  $p^*(x)$ , а это и значит, что получатся сэмплы  $p^*$ .
- Вариант – *адаптивная выборка*: если мы можем точнее определить  $q(x)$ , например построить её как многогранник, касающийся выпуклой (как правило, лог-выпуклой – и многогранник в логарифмическом пространстве) плотности распределения.

# Адаптивная выборка с отклонением



- Вариант выборки с отклонением можно применить к направленным графическим моделям.
- Сэмплировать без evidence – тривиально.
- Сэмплировать с evidence можно так: сделаем сэмпл, если наблюдаемые переменные не сошлись, выкинем.
- Для ненаправленных не так просто, да и для направленных не сработает, если наблюдаемых много.

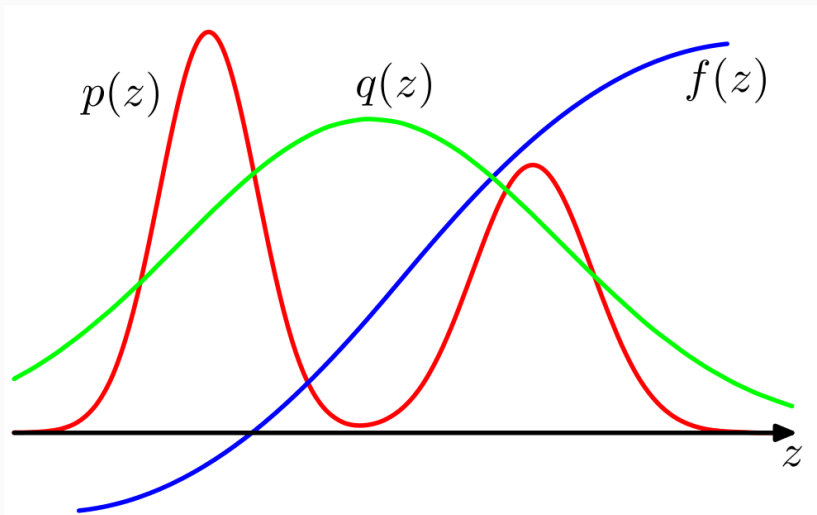
- Как и у предыдущего алгоритма, у выборки с отклонением начинаются проблемы в больших размерностях.
- Суть проблемы та же, что в предыдущем случае, а выражается она в том, что  $s$  будет очень большим (экспоненциальным от  $n$ ), и почти все сэмплы будут отвергаться.



- Выборка по значимости — importance sampling.
- Мы решаем только вторую задачу, а не первую.
- То есть нам нужно брать сэмплы, при этом желательно попадая в зоны, где функция  $p^*$  имеет большие значения.

- Предположим, что у нас есть какое-то другое распределение вероятностей  $q$  (точнее,  $q^*$ ), попроще, и мы умеем брать его сэмплы.
- Тогда алгоритм такой: сначала взять выборку по  $q^*$ , а затем перевзвесить её так, чтобы получилась всё-таки выборка по  $p^*$ .

## Выборка по значимости



- Мы хотим

$$\begin{aligned} E[f] &= \int f(\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int f(\mathbf{x})\frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})}q(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \\ &\approx \frac{1}{L} \sum_r \frac{p(\mathbf{x}^{(r)})}{q(\mathbf{x}^{(r)})}f(\mathbf{x}^{(r)}). \end{aligned}$$

- $w_r = p(\mathbf{x}^{(r)})/q(\mathbf{x}^{(r)})$  – веса, с которыми входят сэмплы, но все сэмплы остаются в множестве.

- Если у нас не  $p$  и  $q$ , а  $p^*$  и  $q^*$ , и  $p = \frac{1}{Z_p} p^*$ ,  $q = \frac{1}{Z_q} q^*$ , то

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f] &= \int f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{Z_q}{Z_p} \int f(\mathbf{x}) \frac{p^*(\mathbf{x})}{q^*(\mathbf{x})} q(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \\ &\approx \frac{Z_q}{Z_p} \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \frac{p^*(\mathbf{x}^{(r)})}{q^*(\mathbf{x}^{(r)})} f(\mathbf{x}^{(r)}), \end{aligned}$$

и  $Z_q/Z_p$  можно оценить из тех же сэмплов:

$$\frac{Z_p}{Z_q} = \frac{1}{Z_q} \int p^*(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \frac{p^*(\mathbf{x})}{q^*(\mathbf{x})} q(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \frac{p^*(\mathbf{x}^{(r)})}{q^*(\mathbf{x}^{(r)})}.$$

- Получаем такой алгоритм:

1. Взять сэмплы  $\{\mathbf{x}^{(r)}\}_{r=1}^R$  по распределению  $q^*$ .
2. Рассчитать веса

$$w_r = \frac{p^*(\mathbf{x}^{(r)})/q^*(\mathbf{x}^{(r)})}{\sum_m p^*(\mathbf{x}^{(m)})/q^*(\mathbf{x}^{(m)})}.$$

3. Оценить функцию по формуле

$$\mathbb{E}[f] \approx \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R w_r f(\mathbf{x}^{(r)}).$$

- Зачем нужно  $q$ ? Чем это лучше равномерного распределения?

- Зачем нужно  $q$ ? Чем это лучше равномерного распределения?
- Проще говоря, распределение  $q$  должно помочь выбрать те участки, на которых имеет смысл сэмплить  $r$ .
- Если  $q$  хорошее, то может помочь, а если плохое, может только навредить.
- Но есть и более фундаментальные проблемы.



- Во-первых, сэмплер  $q$  не должен быть слишком узким.
- Например, если сэмплер гауссиановский с небольшой вариацией, то пики  $r$  далеко от центра  $q$  вообще никто не заметит.

- Во-вторых, может случиться, что все сэмплы будут напрочь убиты небольшим количеством сэмплов с огромными весами. Это плохо.
- Чтобы показать, как это бывает, давайте перейдём в многомерный случай.

- Пусть есть равномерное распределение  $r$  на единичном шаре и сэмплер  $q$  — произведение гауссианов с центром в нуле:

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_i x_i^2}.$$

**Упражнение.** Найдите среднее и дисперсию расстояния  $r^2 = \sum_i x_i^2$  точки, взятой по этому распределению.

- Ответ на упражнение: расстояние будет  $N\sigma^2 \pm \sqrt{2N}\sigma^2$  (распределение будет похоже на гауссовское).
- Значит, почти все сэмплы лежат в «типичном множестве», кольце расстоянием около  $\sigma\sqrt{N}$  от нуля.

- Тогда большинство сэмплов  $q$  будут лежать в интервале

$$\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} 2^{-\frac{N}{2} \pm \frac{\sqrt{2N}}{2}},$$

и ненулевые веса будут иметь значения порядка

$$(2\pi\sigma^2)^{n/2} 2^{\frac{N}{2} \pm \frac{\sqrt{2N}}{2}}.$$

- Это значит, что максимальный вес будет относиться к среднему примерно как  $2^{\sqrt{2N}}$ , а это очень много.

- Варианты выборки по значимости для направленных графических моделей:
  - uniform sampling – фиксируем evidence, выбираем остальные равномерно, вес у сэмпла получается просто  $p(\mathbf{x})$ , потому что он автоматически сходится с evidence;
  - likelihood weighted sampling – фиксируем evidence, выбираем остальные от родителей к детям из условного распределения  $p(x_i \mid \text{pa}(x_i))$ , где  $\text{pa}(x_i)$  уже зафиксированы; вес тогда будет

$$r(\mathbf{x}) = \prod_{x_i \notin E} \frac{p(x_i \mid \text{pa}(x_i))}{p(x_i \mid \text{pa}(x_i))} \prod_{x_i \in E} \frac{p(x_i \mid \text{pa}(x_i))}{1} = \prod_{x_i \in E} p(x_i \mid \text{pa}(x_i)).$$

- Если размерность большая, то у выборки по значимости есть две большие проблемы.
- Во-первых, чтобы получить разумные сэмплы, нужно уже заранее выбрать  $q$  так, чтобы оно хорошо аппроксимировало  $p$ .
- Во-вторых, даже если их получить, часто может так случиться, что веса у некоторых сэмплов будут слишком велики.
- В общем, для случая многих размерностей это не очень хороший метод.

# Марковские методы Монте-Карло

---



- Алгоритм Метрополиса-Гастингса; суть алгоритма похожа на выборку с отклонением, но есть важное отличие.
- Распределение  $q$  теперь будет меняться со временем, зависеть от текущего состояния алгоритма.
- Как и прежде, нужно распределение  $q$ , точнее, семейство  $q(x'; x^{(t)})$ , где  $x^{(t)}$  — текущее состояние.
- Но теперь  $q$  не должно быть приближением  $p$ , а должно просто быть каким-нибудь сэмплируемым распределением (например, сферический гауссиан).
- Кандидат в новое состояние  $x'$  сэмплируется из  $q(x'; x^{(t)})$ .

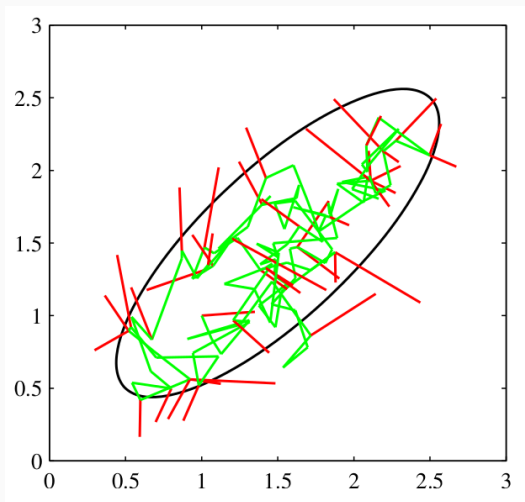
- Очередная итерация начинается с состояния  $x^{(i)}$ .
- Выбрать  $x'$  по распределению  $q(x'; x^{(i)})$ .
- Вычислить

$$a = \frac{p^*(x')}{p^*(x^{(i)})} \frac{q(x^{(i)}; x')}{q(x'; x^{(i)})}.$$

- С вероятностью  $a$  (1, если  $a \geq 1$ )  $x^{(i+1)} := x'$ , иначе  $x^{(i+1)} := x^{(i)}$ .

- Суть в том, что мы переходим в новый центр распределения, если примем очередной шаг.
- Получается этакий random walk, зависящий от распределения  $p^*$ .
- $\frac{q(x^{(i)}; x')}{q(x'; x^{(i)})}$  для симметричных распределений (гауссиана) равно 1, это просто поправка на асимметрию.
- Отличие от rejection sampling: если не примем, то не просто отбрасываем шаг, а записываем  $x^{(i)}$  ещё раз.

## Пример блуждания [Bishop]



- Очевидно, что  $x^{(i)}$  — отнюдь не независимы.
- Независимые сэмплы получаются только с большими интервалами.
- Поскольку это random walk, то если большая часть  $q$  сосредоточена в радиусе  $\epsilon$ , а общий радиус  $p^*$  равен  $D$ , то для получения независимого сэмпла нужно будет минимум... сколько?
- Рассмотрим одномерное случайное блуждание, где на каждом шаге с вероятностью  $1/2$  точка движется влево или вправо на единицу длины. Какое ожидаемое расстояние точки от нуля после  $T$  шагов?

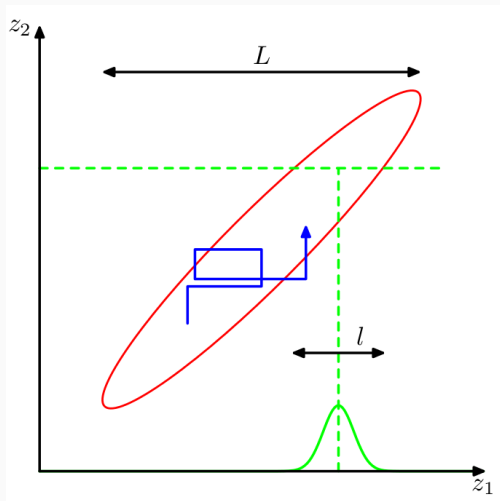
- Ответ на упражнение: ожидаемое расстояние будет  $\sqrt{T}$ .
- Значит, нам потребуется где-то  $\left(\frac{D}{\epsilon}\right)^2$  шагов (и это оценка снизу).
- Хорошие новости: это верно для любой размерности. То есть времени надо много, но нет катастрофы при переходе к размерности 1000.

- Когда размерность большая, можно не сразу все переменные изменять по  $q(x'; x)$ , а выбрать несколько распределений  $q_j$ , каждое из которых касается части переменных, и принимать или отвергать изменения по очереди.
- Тогда процесс пойдёт быстрее, чаще принимать изменения будем.

- Пусть размерность большая. Что делать?
- Давайте попробуем выбирать сэмпл не весь сразу, а покомпонентно.
- Тогда наверняка эти одномерные распределения окажутся проще, и сэмпл мы выберем.



- Пусть есть две координаты:  $x$  и  $y$ . Начинаем с  $(x^0, y^0)$ .
- Выбираем  $x^1$  по распределению  $p(x|y = y^0)$ .
- Выбираем  $y^1$  по распределению  $p(y|x = x^1)$ .
- Повторяем.



- В общем виде всё то же самое:  $x_i^{t+1}$  выбираем по распределению

$$p(x_i | x_1^{t+1}, \dots, x_{i-1}^{t+1}, x_{i+1}^t, \dots, x_n^t)$$

и повторяем.

- Это частный случай алгоритма Метрополиса (для распределений  $q(\mathbf{x}'; \mathbf{x}) = p(x'_i | \mathbf{x}_{-i})$ , и вероятность принятия получится 1 – упражнение).
- Поэтому сэмплирование по Гиббсу сходится, и, так как это тот же random walk по сути, верна та же квадратичная оценка.

- Нужно знать  $p(x_i | x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n)$ . Это, например, особенно легко знать в байесовских сетях.
- Как будет работать сэмплирование по Гиббсу в байесовской сети?
- Для сэмплирования по Гиббсу не нужно никаких особенных предположений или знаний. Можно быстро сделать работающую модель, поэтому это очень популярный алгоритм.
- В больших размерностях может оказаться эффективнее сэмплить по нескольким переменным сразу, а не по одной.

- Марковская цепь задаётся начальным распределением вероятностей  $p^0(x)$  и вероятностями перехода  $T(x'; x)$ .
- $T(x'; x)$  — это распределение следующего элемента цепи в зависимости от следующего; распределение на  $(t + 1)$ -м шаге равно

$$p^{t+1}(x') = \int T(x'; x) p^t(x) dx.$$

- В дискретном случае  $T(x'; x)$  — это матрица вероятностей  $p(x' = i | x = j)$ .

# Свойства марковских цепей: инвариантное распределение

- Не всякая марковская цепь нам подойдёт.
- Во-первых, цепь должна сходиться к распределению, которое нас интересует.
- Это называется *инвариантным распределением*; инвариантное распределение  $\pi$  удовлетворяет

$$\pi(x') = \int T(x'; x)\pi(x)dx.$$

- Нам нужно, чтобы инвариантным распределением нашей цепи было  $p(x)$ , которое мы хотим сэмплировать.

- Ну, и нужно, чтобы собственно сходилось:

$$\forall p^0(x) \quad p^t(x) \longrightarrow \pi(x) \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

- Какие могут быть примеры неэргодичных цепей?

# Свойства марковских цепей: эргодичность

- Ну, и нужно, чтобы собственно сходилось:

$$\forall p^0(x) \quad p^t(x) \longrightarrow \pi(x) \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

- Какие могут быть примеры неэргодичных цепей?
- В цепи могут быть недостижимые состояния (тогда предел зависит от  $p^0$ ).
- У цепи может быть период, т.е. предельное распределение может меняться с некоторым периодом (например, по соображениям чётности).



- Есть несколько удобных конструкций, с помощью которых можно построить достаточно сложную функцию  $T$ , сохраняя её свойства.
- Давайте их рассмотрим.

- Можно конкатенировать распределения, запуская их друг за другом:

$$T(x', x) = \int T_2(x', x'') T_1(x'', x) dx''.$$

- При этом сохраняется инвариантное распределение (докажите).

- Можно смешивать распределения. Если были функции  $T_i(x', x)$ , то можно ввести новую

$$T(x', x) = \sum_i p_i T_i(x', x), \text{ где } \sum_i p_i = 1.$$

- Как убедиться, что марковская цепь сходится именно к тому распределению, которое нам нужно?
- Свойство баланса в марковских цепях: для  $p$  и  $T$

$$\forall x, x' \quad T(x, x')p(x') = T(x', x)p(x).$$

- Т.е. вероятность того, что мы выберем  $x$  и дойдём до  $x'$ , равна вероятности выбрать  $x'$  и дойти до  $x$ .
- Такие цепи называются *обратимыми* (reversible).
- Если выполняется условие баланса, то  $p(x)$  — инвариантное распределение (докажите!).

- Очередная итерация начинается с состояния  $x^{(i)}$ .
- Выбрать  $x'$  по распределению  $q(x'; x^{(i)})$ .
- Вычислить

$$a(x', x) = \frac{p^*(x')}{p^*(x^{(i)})} \frac{q(x^{(i)}; x')}{q(x'; x^{(i)})}.$$

- С вероятностью  $a(x', x)$  (1, если  $a \geq 1$ )  $x^{(i+1)} := x'$ , иначе  $x^{(i+1)} := x^{(i)}$ .

- Условие баланса:

$$\begin{aligned} p(x)q(x; x')a(x', x) &= \min(p(x)q(x; x'), p(x')q(x'; x)) = \\ &= \min(p(x')q(x'; x), p(x)q(x; x')) = p(x')q(x'; x)a(x, x'). \end{aligned}$$

- Важный параметр – дисперсия распределения  $q$ ; она задаёт баланс между частым принятием и быстрым перемещением по пространству состояний.

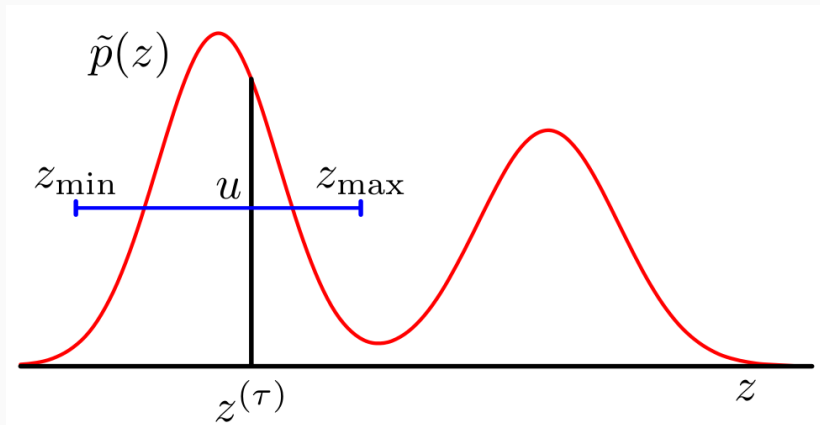
- Slice sampling — ещё один алгоритм, похожий на алгоритм Метрополиса.
- Это аналог алгоритма Метрополиса, но в нём мы хотим настраивать длину шага («дисперсию») автоматически.

# Алгоритм в одномерном случае

- Мы хотим сделать random walk из одной точки под графиком  $p^*$  в другую точку под графиком  $p^*$ , да так, чтобы в пределе получилось равномерное распределение.
- Вот как будем делать переход  $(x, u) \rightarrow (x', u')$ :
  - Вычислим  $p^*(x)$  и выберем  $u'$  равномерно из  $[0, p^*(x)]$ .
  - Сделаем горизонтальный интервал  $(x_l, x_r)$  вокруг  $x$ .
  - Затем будем выбирать  $x'$  равномерно из  $(x_l, x_r)$ , пока не попадём под график.
  - Если не попадаем, модифицируем  $(x_l, x_r)$ .
- Осталось понять, как сделать  $(x_l, x_r)$  и как его потом модифицировать.



# Slice sampling



- Исходный выбор  $(x_l, x_r)$ :
  - Выбрать  $r$  равномерно из  $[0, \epsilon]$ .
  - $x_l := x - r$ ,  $x_r := x + (\epsilon - r)$ .
  - Раздвигать границы на  $\epsilon$ , пока  $p^*(x_l) > u'$  и  $p^*(x_r) > u'$ .
- Модификация  $(x_l, x_r)$ : Если  $x'$  лежит выше  $p^*$ , сокращаем интервал до  $x'$ .

- В алгоритме Метрополиса нужно было выбирать размер шага. И от него всё зависело квадратично.
- А тут размер шага подправляется сам собой, и эта поправка происходит за линейное время (а то и логарифм).
- В задачах с большой размерностью нужно сначала выбрать (случайно или совпадающими с осями) направление изменения  $u$ , а потом проводить алгоритм относительно параметра  $\alpha$  в распределении  $p^*(x + \alpha u)$ .

- Рассмотрим ситуацию, когда вероятность можно записать как  $p(x) = \frac{1}{Z} e^{-E(x)}$ .
- Во многих таких случаях можно вычислить не только  $E(x)$ , но и градиент  $\nabla E(x)$ .
- Такую информацию хотелось бы использовать.

- Займёмся матфизикой: рассмотрим механическую систему.
- Состояние системы описывается обобщёнными координатами  $q$  и обобщёнными моментами  $p$  (векторные переменные).
- Её общая энергия  $H(q, p, t) = V(q, t) + K(p, t)$ , где  $V$  — потенциальная,  $K$  — кинетическая.

- Тогда система будет описываться гамильтоновыми уравнениями

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}.$$

- Гамильтонова механика — это, конечно, то же самое, что лагранжева, но вместо уравнений второго порядка на  $n$  переменных получаются уравнения первого порядка на  $2n$  переменных.
- Важные для нас свойства: в течение эволюции системы
  1. значение гамильтониана  $H$  остаётся постоянным;
  2. объём любой области в пространстве переменных  $(p, q)$  сохраняется.

- Гамильтонов метод Монте-Карло — это вариация метода Метрополиса.
- Пространство поиска  $\mathbf{x}$  расширяется *моментами*  $\mathbf{p}$ .
- Благодаря законам сохранения гамильтонова динамика оставляет постоянным совместное распределение  $p(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ ; применяя эволюцию вдоль гамильтониана, можно ходить далеко по пространству состояний, не меняя распределение; а потом делать несколько «обычных» (гиббсовских, например) шагов, которые уже будут менять  $H$ .

- Введём *гамильтониан*  $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = E(\mathbf{x}) + K(\mathbf{p})$ , где  $K$  — кинетическая энергия, например  $K(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^T \mathbf{p}}{2}$ .
- Теперь блуждание осуществляется двумя способами: первый случайно блуждает по пространству моментов (по Гиббсу, например).
- А второй шаг пытается сэмплировать совместную вероятность

$$p_H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{Z_H} e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{p})} = \frac{1}{Z_H} e^{-E(\mathbf{x})} \frac{1}{Z_H} e^{-K(\mathbf{p})}.$$

- Потом можно будет просто отбросить  $K$  и получить сэмплы для  $e^{-E(\mathbf{x})}$ , потому что тут всё так хорошо разделяется.



- Мы хотим построить траекторию в пространстве  $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ , на которой  $H$  остаётся постоянным, а затем по методу Метрополиса либо принять, либо отклонить этот сэмпл.
- Понятно, что  $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{p}$ , а гамильтоновы уравнения нам говорят, что

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial E(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}.$$

- Осталось это проинтегрировать. Для этого можно использовать leapfrog technique приближённого интегрирования:

$$\begin{aligned}p_i(t + \frac{\tau}{2}) &= p_i(t) - \frac{\tau}{2} \frac{\partial E}{\partial x_i} \Big|_{x(t)}, \\x_i(t + \tau) &= x_i(t) + \frac{\tau}{m_i} p_i(t + \frac{\tau}{2}), \\p_i(t + \tau) &= p_i(t + \frac{\tau}{2}) - \frac{\tau}{2} \frac{\partial E}{\partial x_i} \Big|_{x(t+\tau)}.\end{aligned}$$

- Дополнительные «половинные» шаги позволяют добиться погрешности второго порядка по  $\tau$ .

- Алгоритм делает  $m$  learpfrog шагов, потом по методу Метрополиса принимает или отвергает получившуюся точку (проекцию на  $x$ ).
- То есть если мы можем подсчитывать  $\nabla E$ , а не только  $E$ , мы можем включить эту информацию в наш random walk.
- В результате он будет двигаться более-менее в правильном направлении, и пройденное расстояние  $\sqrt{n}$  превратится в  $n$  (доказывать уж не будем).

Спасибо!

Спасибо за внимание!