

Porównanie schematów symulacji: adaptacyjny vs monolityczny

Cel. Porównujemy dwie procedury pozyskiwania informacji o nieznanym obiekcie Θ (np. parametry FES/MSM): (A) *adaptacyjną* (kilka partii danych z treningiem po każdej partii i aktualizacją polityki próbkowania) oraz (B) *monolityczną* (jedna długa symulacja, trening tylko na końcu). Budżet całkowity próbek jest stały.

Ustawienie. Niech $\pi(x)$ będzie docelowym rozkładem (np. Boltzmanna), a $q_t(x)$ rozkładem/propozycją, z której w partii t generujemy n_t próbek $X_{t,1:n_t} \sim q_t$. Zbiór danych po t partiach: $D_t = \bigcup_{i=1}^t \{X_{i,1:n_i}\}$, $N = \sum_{t=1}^B n_t$.

Model (z parametrami θ) jest trenowany operatorami

$$\theta_t \mathcal{T}(\theta_{t-1}; D_t), \quad \theta_0 \text{ zadane.}$$

Polityka kolejnej partii może zależeć od bieżącego modelu: $q_{t+1} \equiv q(\cdot | \theta_t)$.

Dwa schematy. (A) **Adaptacyjny:** po każdej partii $t = 1, \dots, B$ trenujemy θ_t i wybieramy q_{t+1} na podstawie θ_t .

$$D_B^A = \bigcup_{t=1}^B \{X_{t,1:n_t}\}, \quad \theta_B^A = \mathcal{T}(\theta_{B-1}^A; D_B^A).$$

(B) **Monolityczny:** $q_t \equiv q_0$ dla wszystkich t (brak adaptacji); trenujemy tylko raz na końcu:

$$D_B^M = \bigcup_{t=1}^B \{X_{t,1:n_t}\}, \quad \theta_B^M = \mathcal{T}(\theta_0; D_B^M).$$

Funkcja jakości (użyteczności). Rozważmy dwie równoważne (w praktyce) definicje postępu:

- Spadek ryzyka generalizacji względem π :

$$\mathcal{R}(\theta) \mathbb{E}_{x \sim \pi} [\ell(\theta; x)], \quad U(D) \mathcal{R}(\theta_0) - \mathcal{R}(\theta(D)).$$

- Zysk informacyjny o Θ (projektowanie bayesowskie):

$$\text{IG}(D) H(\Theta | D_0) - H(\Theta | D).$$

W obu przypadkach większa wartość oznacza „więcej informacji / mniejszy błąd”.

Założenia. (1) Warunkowa niezależność nowych obserwacji przy zadanych decyzjach q_t (standard w projektowaniu eksperymentów). (2) $U(\cdot)$ jest *adaptacyjnie monotoniczne* i *adaptacyjnie podmodularne* (marginalny zysk maleje wraz z rosnącym D), co dobrze przybliża typowe funkcje: spadek ryzyka, zysk informacyjny, log det informacji Fishera, itp. (3) Budżet N jest identyczny w obu schematach.

Twierdzenie (korzyść adaptacji; szkic). Dla powyższych założeń zachodzi

$$\mathbb{E}[U(D_B^A)] \geq \mathbb{E}[U(D_B^M)].$$

Silniej: polityka zachłanna, która po każdej partii wybiera q_{t+1} maksymalizujące oczekiwany marginalny przyrost U , osiąga co najmniej ułamek $(1 - 1/e)$ optimum adaptacyjnego, zaś schemat monolityczny jest szczególnym przypadkiem polityki nieadaptacyjnej. Intuicyjnie: wcześniejsze partie uczą model wskazywać regiony o najwyższej wariancji lub największym gradiencie informacji, więc kolejne partie są lepiej „ukierunkowane” niż stałe q_0 .

Perspektywa informacji Fishera (wariant). Dla estymacji parametru φ niech $s_\varphi(x)$ będzie *score* (pochodna log-gęstości). Dla ważkowania do π wariancja nieobciążonego estymatora maleje wraz ze wzrostem macierzy informacji

$$\mathcal{I}_t \mathbb{E}_{x \sim q_t} [w_t(x)^2 s_\varphi(x) s_\varphi(x)^\top], \quad w_t(x) = \frac{\pi(x)}{q_t(x)}.$$

Adaptacja q_t w kolejnych partiach może zwiększać $\sum_{t=1}^B \mathcal{I}_t$ (wybierając regiony o dużym wkładzie do informacji), co obniża wariancję względem $B \mathcal{I}(q_0)$ osiąganego przez schemat monolityczny ze stałym q_0 .

Ewaluacja ciągła (regresja jakości). Po każdej partii definiujemy walidacyjny wskaźnik jakości na niezależnym zbiorze D_{val} :

$$\mathcal{R}_t^{\text{val}} \frac{1}{|D_{\text{val}}|} \sum_{x \in D_{\text{val}}} \ell(\theta_t; x), \quad \Delta_t \mathcal{R}_{t-1}^{\text{val}} - \mathcal{R}_t^{\text{val}}.$$

Strażnik regresji: jeśli $\Delta_t < -\tau$ dla pewnego progu $\tau > 0$, sygnalizujemy regresję jakości i wstrzymujemy/wycofujemy ostatnią aktualizację (fail-fast).

Plan eksperymentu (porównanie A vs B przy równym budżecie). Wybierz liczbę parti B oraz n_t tak, by $\sum_t n_t = N$ było stałe. Dla A: po każdej partii trenuj θ_t i wybieraj q_{t+1} na podstawie θ_t (np. maksymalizacja przewidywanego spadku ryzyka lub przyrostu informacji). Dla B: generuj wszystkie N próbek z q_0 , trenuj raz. Porównaj $\mathcal{R}(\theta_B^A)$ vs $\mathcal{R}(\theta_B^M)$, ewentualnie $\text{IG}(D_B^A)$ vs $\text{IG}(D_B^M)$, oraz śledź trajektorie $\mathcal{R}_t^{\text{val}}$ dla A.