

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра математического моделирования и анализа данных

ИВЬЕВ ИЛЬЯ ЮРЬЕВИЧ

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХ МАРКОВСКИХ ПОДХОДОВ К
СТАТИСТИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ДВОИЧНЫХ ПОЛЕЙ**

Отчет по преддипломной практике
студента 4 курса 7 группы

”Допустить к защите”

с предварительной оценкой ____

Руководитель работы _____

“ ____ ” _____ 2017 г

Руководитель

Волошко Валерий Анатольевич

доцент кафедры ММАД

канд. физ.-мат. наук

МИНСК 2017

Содержание

Введение

Модели двоичных случайных последовательностей ???

1 Описание данных

Будем рассматривать двоичные поля спинов:

$$x : \mathbb{K}^2 \rightarrow \{\pm 1\}, \quad (1.1)$$

заданные на стандартной прямоугольной решетке размера $m \times n$:

$$\mathbb{K}^2 ::= \{1, 2, \dots, m\} \times \{1, 2, \dots, n\}, \quad m, n \in \mathbb{N}, \quad (1.2)$$

где \times означает декартово произведение множеств, $\mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$ — множество натуральных (целых положительных) чисел. Кроме того, снабдим решетку (??) структурой графа с множеством ребер:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^2 ::= & \{ \{(i, j), (i, j+1)\} : 1 \leq i \leq m, 1 \leq j < n \} \\ & \cup \{ \{(i, j), (i+1, j)\} : 1 \leq i < m, 1 \leq j \leq n \}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Спиновое значение, принимаемое двоичным полем (??) в точке $k = (i, j) \in \mathbb{K}^2$, будем обозначать с помощью нижнего индекса:

$$x_{i,j} = x_k \in \{\pm 1\}.$$

Замечание 1.1. Парой значений, принимаемых двоичным полем, может служить любое двухэлементное множество, и его выбор в каждом случае обусловлен удобством для конкретной решаемой задачи. В нашем случае более удобным по сравнению с “нулем и единицей” двухэлементным множеством оказывается пара спинов $\{\pm 1\}$, традиционно используемая в статфизике.

Прямоугольная решетка (??), (??) изображена на рисунке ?? . Она имеет следующие числа вершин и ребер:

$$N ::= \#\mathbb{K}^2 = mn, \quad (1.4)$$

$$E_2 ::= \#\mathbb{E}^2 = m(n-1) + n(m-1) = 2N - m - n \approx 2N. \quad (1.5)$$

Последнее приближенное равенство имеет место при больших m и n .

Замечание 1.2. Здесь и далее $\#X$ означает мощность конечного множества X .

Описанная прямоугольная решетка (??), (??) представляет собой стандартную дискретную модель плоскости. При этом ребра (??) отвечают за понятие близости точек.

В предыдущей работе были описаны марковские случайные поля (далее, MRF от английского Markov Random Field), представляющие собой естественные вероятностные модели полей (??). MRF позволяют учесть статистические зависимости между элементами поля, приписанными близким узлам решетки. Однако работа с MRF и их теоретический анализ существенно труднее работы со стандартными цепями Маркова. Поэтому в прикладных исследованиях случайные поля иногда заменяют случайными последовательностями, для которых разработан более широкий спектр инструментов статистического анализа.

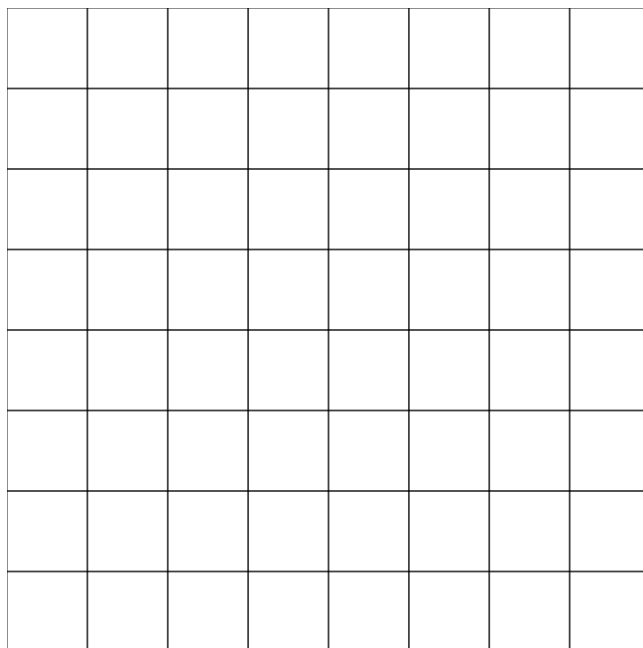


Рисунок 1.1 — Двумерная прямоугольная решетка

Примером такой замены в случае анализа изображений служит рассмотрение двумерного $(m \times n)$ -массива пикселей (атомарных элементов изображения, от английского pixel = picture element) в виде одномерного массива (вектора) размера $N = mn$. Эта процедура векторизации эквивалентна введению полного линейного порядка на множестве пикселей. К примеру, в большинстве компьютерных систем пиксели изображения хранятся в памяти в порядке, проиллюстрированном рисунком ??.

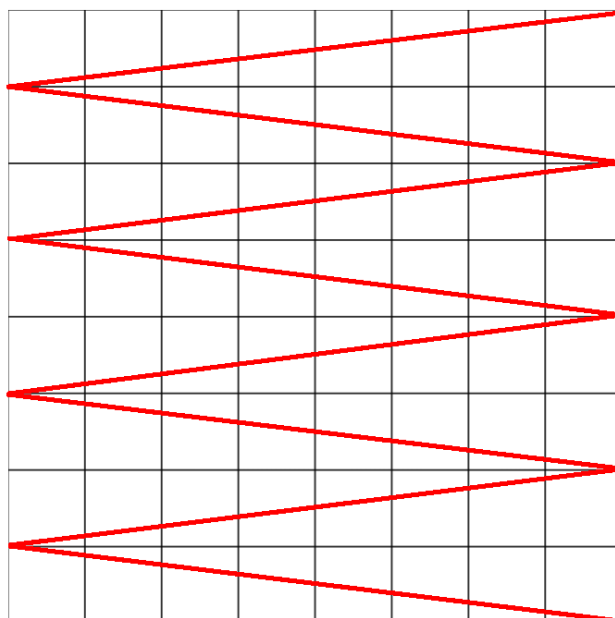


Рисунок 1.2 — Стандартная построчная развертка двумерной прямоугольной решетки

1.1 Понятие развертки

Формализуем описанное выше понятие векторизации изображения.

Определение 1.1. Разверткой будем называть взаимно однозначное отображение

$$\phi : \mathbb{K}^2 \rightarrow \mathbb{K}^1 \quad (1.6)$$

двумерной решетки (??) на одномерную решетку

$$\mathbb{K}^1 ::= \{1, 2, \dots, N\}, \quad \mathbb{E}^1 ::= \{\{i, i+1\} : 1 \leq i < N\}. \quad (1.7)$$

Одномерная решетка (??) имеет следующие характеристики:

$$\#\mathbb{K}^1 = \#\mathbb{K}^2 = N, \quad \#\mathbb{E}^1 = N - 1 \approx N. \quad (1.8)$$

Другими словами, столько же узлов и приблизительно вдвое меньше ребер (при больших m и n) по сравнению с прямоугольной решеткой (??), (??).

Любая развертка (??) превращает двоичное $(m \times n)$ -поле (??) в двоичную последовательность длины N :

$$x_i^\phi ::= x_{\phi^{-1}(i)} \in \{\pm 1\}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.9)$$

Для стандартной построчной развертки, изображенной на рисунке ??, имеем:

$$\phi(i, j) = n(i - 1) + j. \quad (1.10)$$

Переход от исходного двоичного поля (??) к двоичной последовательности-развертке является некоторым огрублением и упрощением модели данных. Естественным и очевидным требованием к такому упрощению должна быть минимизация его “трубости” и, соответственно, частичное сохранение исследуемых свойств.

Одно из таких важных на практике свойств, которое желательно сохранить при векторизации изображения, есть свойство близости точек решетки (и пикселей изображения). Это важно, поскольку марковские модели — как одномерные, так и общего вида — предназначены для исследования локальной статистической зависимости, ослабевающей с ростом расстояния между узлами.

Определение 1.2. Развертку (??) будем называть непрерывной, если прообразы соседних точек в \mathbb{K}^1 — соседи в решетке \mathbb{K}^2 :

$$\phi^{-1}(\mathbb{E}^1) \subset \mathbb{E}^2.$$

В противном случае будем называть развертку разрывной.

Очевидно, стандартная развертка (??) разрывна, поскольку не соседние узлы $k = (1, n)$ и $k' = (2, 1)$ отображаются в соседние $\phi(k) = n$ и $\phi(k') = n + 1$. Кроме этой стандартной развертки мы будем использовать следующие развертки, приведенные на рисунке ??. Нетрудно видеть, что все они непрерывны.

Развертка Пеано возможна только на квадратной решетке при

$$m = n = 2^s, \quad s \in \mathbb{N}.$$

Преимущество развертки Пеано и спиральной развертки перед стандартной (??) и змейкой состоит в равнозначном учете вертикальных и горизонтальных связей между узлами. При этом развертка Пеано обладает этим свойством локально на любом фрагменте решетки (см. рисунок ??, а), в то время как для змейки решетка может быть разбита на две части, в одной из которых учитываются только вертикальные связи, а в другой — только горизонтальные (см. рисунок ??, б).

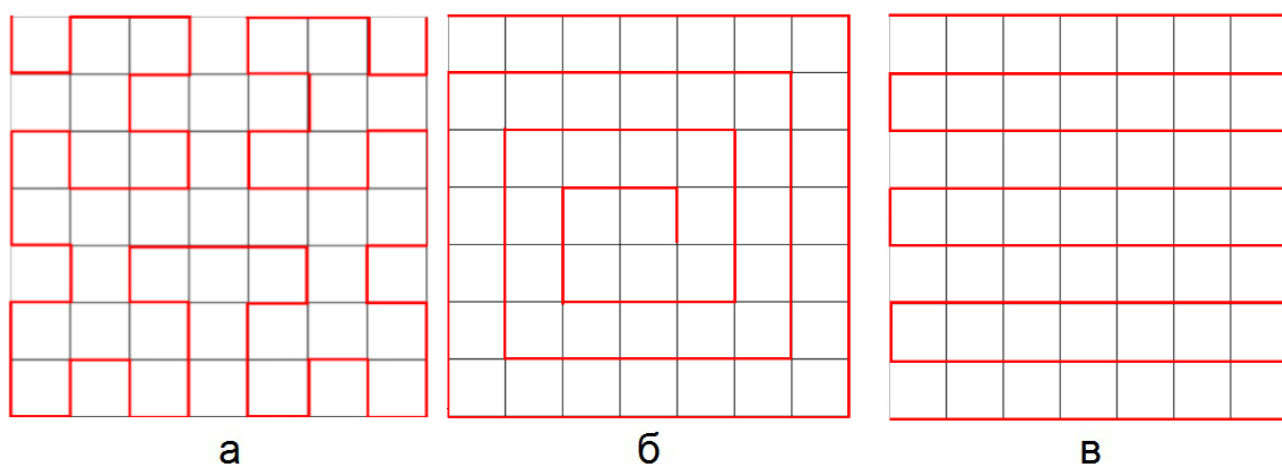


Рисунок 1.3 — Развертки двумерной прямоугольной решетки: а — Пеано, б — спиральная, в — змейка

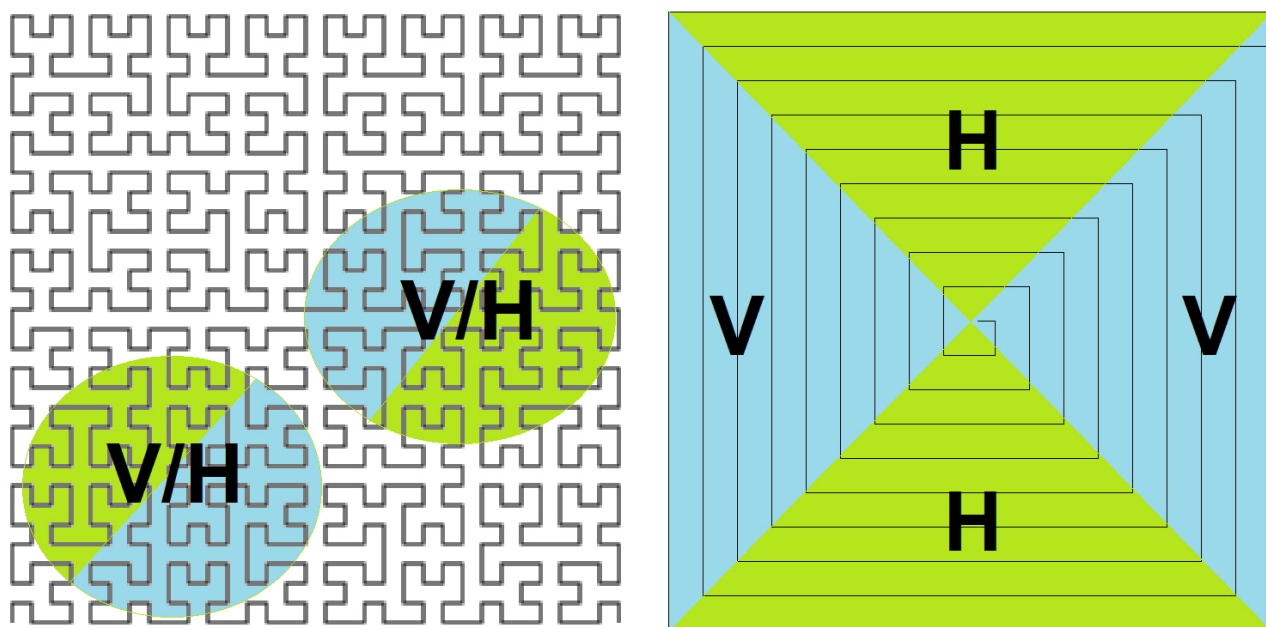


Рисунок 1.4 — Учет вертикальных и горизонтальных связей в развертках Пеано и змейке

2 Два подхода к моделированию случайного двоичного поля

Мы будем сравнивать два подхода к вероятностному моделированию двоичного случайного поля (??) на квадратной решетке (??), (??). Оба подхода основаны на простейшем типе Марковского случайного поля — модели Изинга с нулевым внешним полем. Эта модель была описана в предыдущей работе. Для произвольного графа $G = (V, E)$ модель Изинга с нулевым внешним полем приписывает каждой конфигурации спинов $x \in \{\pm 1\}^V$ вероятность:

$$p(x, \beta) = \frac{1}{Z} e^{\beta H}, \quad (2.1)$$

где $\beta \in \mathbb{R}$ — единственный параметр модели, величина

$$H = H(x) = \sum_{e=\{u,v\} \in E} x_u x_v \quad (2.2)$$

называется Гамильтонианом, а величина

$$Z = Z(\beta) = \sum_{x \in \{\pm 1\}^V} e^{\beta H(x)} \quad (2.3)$$

называется статсуммой модели.

Для линейного графа (??) описанная модель эквивалентна стационарной цепи Маркова первого порядка с симметричной матрицей переходных вероятностей

$$(\mathbf{P} \{x_{i+1} = a | x_i = b\})_{a,b \in \{\pm 1\}} = \frac{1}{2 \cosh \beta} \begin{pmatrix} e^{+\beta} & e^{-\beta} \\ e^{-\beta} & e^{+\beta} \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Здесь и далее

$$\cosh z = \frac{e^z + e^{-z}}{2}, \quad \sinh z = \frac{e^z - e^{-z}}{2}, \quad \tanh z = \frac{\sinh z}{\cosh z}, \quad \coth z = \frac{\cosh z}{\sinh z} -$$

гиперболические косинус, синус, тангенс и котангенс.

Первый исследуемый подход к вероятностному моделированию двоичного поля (??) состоит в применении одномерной модели Изинга (??) к развертке (??). Второй подход предполагает непосредственное использование двумерной модели Изинга для графа (??), (??).

Замечание 2.1. В случае непрерывной развертки ϕ первый подход представляет собой огрубление второго подхода следующего типа: мы берем то же множество узлов \mathbb{K}^2 и убираем примерно половину связей $e \in \mathbb{E}^2$ между узлами, оставляя лишь те ребра $e' \in \phi^{-1}(\mathbb{E}^1) \subset \mathbb{E}^2$, которые образуют цепочку развертки ϕ . При этом, если ϕ -прообразы близких точек в \mathbb{K}^1 обязательно близки в \mathbb{K}^2 , обратное неверно и ϕ -образы близких в \mathbb{K}^2 точек могут быть далеки в \mathbb{K}^1 . Это приводит к тому, что близко расположенные спины в огрубленной вероятностной модели поля (??) могут быть слабозависимы.

Замечание 2.2. Таким образом, настоящая работа имеет следующие цели:

1. исследовать ущерб от описанного выше упрощения модели Изинга (??)-(??) двоичного поля (??) на двумерной квадратной решетке (??), (??);
2. сравнить различные развертки (??) по величине этого ущерба;
3. найти оптимальную развертку, либо развертку, оптимальную в некотором классе.

2.1 Расстояния Кульбака-Лейблера между моделями

Для теоретического анализа и сравнения различных описанных вероятностных моделей будем использовать несимметричное расстояние Кульбака-Лейблера $KL(p|q)$ между распределениями вероятностей p и q на конечном множестве I :

$$KL(p|q) = \sum_{i \in I} p_i \ln \frac{p_i}{q_i} \geq 0. \quad (2.5)$$

Многие важные численные характеристики модели Изинга могут быть выражены через ее статсумму (??), точнее, через ее логарифм. В случае рассматриваемых квадратной решетки (??), (??) и линейной решетки (??) больших размеров $N = \#V$ логарифм статсуммы может быть приближен с помощью так называемой свободной энергии:

$$F(\beta) ::= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(\beta). \quad (2.6)$$

Для линейной решетки (??) свободная энергия (??) находится элементарно:

$$F_1(\beta) = \ln 2 + \ln \cosh \beta. \quad (2.7)$$

Для квадратной решетки (??), (??) задача нахождения свободной энергии оказывается существенно сложнее. Впервые она была решена Ларсом Онзагером, который в 1944 году представил свою формулу:

$$F_2(\beta) = \ln \cosh(2\beta) + \frac{1}{2} \left(\ln 2 + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left(1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \cos^2 \lambda} \right) d\lambda \right), \quad \gamma = \frac{2 \sinh(2\beta)}{\cosh^2(2\beta)}. \quad (2.8)$$

Впоследствии решение Онзагера было значительно упрощено.

Определение 2.1.

- Распределение вероятностей (??) для прямоугольной решетки (??), (??) будем обозначать $\pi_2(\beta)$.
- Распределение вероятностей двоичного поля (??), при котором его ϕ -развертка (??) описывается одномерной моделью Изинга (??), будем обозначать $\pi_1(\beta, \phi)$ и называть ϕ -разверточной моделью.
- ϕ -разверточную модель $\pi_1(\beta, \phi)$ будем называть непрерывной, если непрерывна соответствующая развертка ϕ .

Теорема 2.1. При больших размерах $m, n \gg 1$ прямоугольной решетки (??), (??) расстояние Кульбака-Лейблера (??) между двумерной моделью Изинга $\pi_2(\beta_2)$ и непрерывной ϕ -разверточной моделью $\pi_1(\beta_1, \phi)$ допускает не зависящую от развертки ϕ аппроксимацию:

$$\frac{1}{N} KL(\pi_2(\beta_2) | \pi_1(\beta_1, \phi)) \approx KL_{21}(\beta_2, \beta_1), \quad (2.9)$$

где

$$\text{KL}_{21}(\beta_2, \beta_1) = \left(\beta_2 - \frac{1}{2}\beta_1 \right) F'_2(\beta_2) - F_2(\beta_2) + F_1(\beta_1). \quad (2.10)$$

Одномерная и двумерная функции свободной энергии $F_1(\cdot)$ и $F_2(\cdot)$ определены в (??) и (??) соответственно.

Доказательство. Обозначим через $H_\phi(x)$ Гамильтониан конфигурации $x \in \{\pm 1\}^{\mathbb{K}^2}$, соответствующий непрерывной развертке ϕ :

$$H_\phi(x) ::= \sum_{e=\{u,v\} \in \phi^{-1}(\mathbb{E}^1) \subset \mathbb{E}^2} x_u x_v.$$

Разверточная модель $\pi_1(\beta_1, \phi)$ описывается формулой (??) с Гамильтонианом H_ϕ . Соответствующая этому Гамильтониану статсумма (??) не зависит от развертки ϕ , потому обозначим ее $Z_1(\beta)$. Полный Гамильтониан конфигурации x для решетки (??), (??) обозначим:

$$H_2(x) ::= \sum_{e=\{u,v\} \in \mathbb{E}^2} x_u x_v.$$

Соответствующую этому Гамильтониану статсумму (??) обозначим $Z_2(\beta)$. Будем также писать \mathbf{E}_2 для математического ожидания при условии, что имеет место модель $\pi_2(\beta_2)$ двоичного поля (??). Из (??) и (??) с учетом (??)-(??) имеем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \text{KL}(\pi_2(\beta_2) | \pi_1(\beta_1, \phi)) &= \frac{1}{N} \mathbf{E}_2 \{ \ln \pi_2(x | \beta_2) - \ln \pi_1(x | \beta_1, \phi) \} \\ &= \frac{1}{N} \mathbf{E}_2 \{ \beta_2 H_2(x) - \ln Z_2(\beta_2) - \beta_1 H_\phi(x) + \ln Z_1(\beta_1) \} \\ &\approx F_1(\beta_1) - F_2(\beta_2) + \frac{1}{N} \mathbf{E}_2 \{ \beta_2 H_2(x) - \beta_1 H_\phi(x) \}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

В условиях модели $\pi_2(\beta_2)$ и при больших размерах $m, n \gg 1$ прямоугольной решетки (??), (??) большинство пар соседних спинов (x_u, x_v) имеют совместное распределение, близкое к таковому в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$). А поскольку Гамильтониан H_ϕ содержит примерно половину спиновых произведений $x_u x_v$, входящих в Гамильтониан $H_2(x)$, получаем:

$$\frac{1}{N} \mathbf{E}_2 \{ \beta_2 H_2(x) - \beta_1 H_\phi(x) \} \approx \left(\beta_2 - \frac{1}{2}\beta_1 \right) \frac{1}{N} \mathbf{E}_2 \{ H_2(x) \}. \quad (2.12)$$

В свою очередь

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \mathbf{E}_2 \{ H_2(x) \} &::= \frac{N^{-1}}{Z_2(\beta_2)} \sum_{x \in \{\pm 1\}^{\mathbb{K}^2}} H_2(x) e^{\beta_2 H_2(x)} \\ &= \frac{1}{N} \frac{Z'_2(\beta_2)}{Z_2(\beta_2)} = \frac{d}{d\beta_2} \left(\frac{1}{N} \ln Z_2(\beta_2) \right) \approx F'_2(\beta_2). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Совмещая (??)-(??), приходим к (??). □

Следствие 2.1. При больших размерах $m, n \gg 1$ прямоугольной решетки (??), (??) оптимальная с точки зрения расстояния Кульбака-Лейблера (??) непрерывная ф-разверточная аппроксимация $\pi_1(\beta_1, \phi)$ двумерной модели Изинга $\pi_2(\beta_2)$ имеет не зависящий от развертки ϕ параметр β_1 , определяемый равенством:

$$\tanh \beta_1 = \frac{1}{2} F'_2(\beta_2). \quad (2.14)$$

Доказательство. Достаточно приравнять к нулю производную по β_1 выражения (??), где $F'_1(\beta_1) = \tanh \beta_1$ согласно (??). □

3 Численные эксперименты

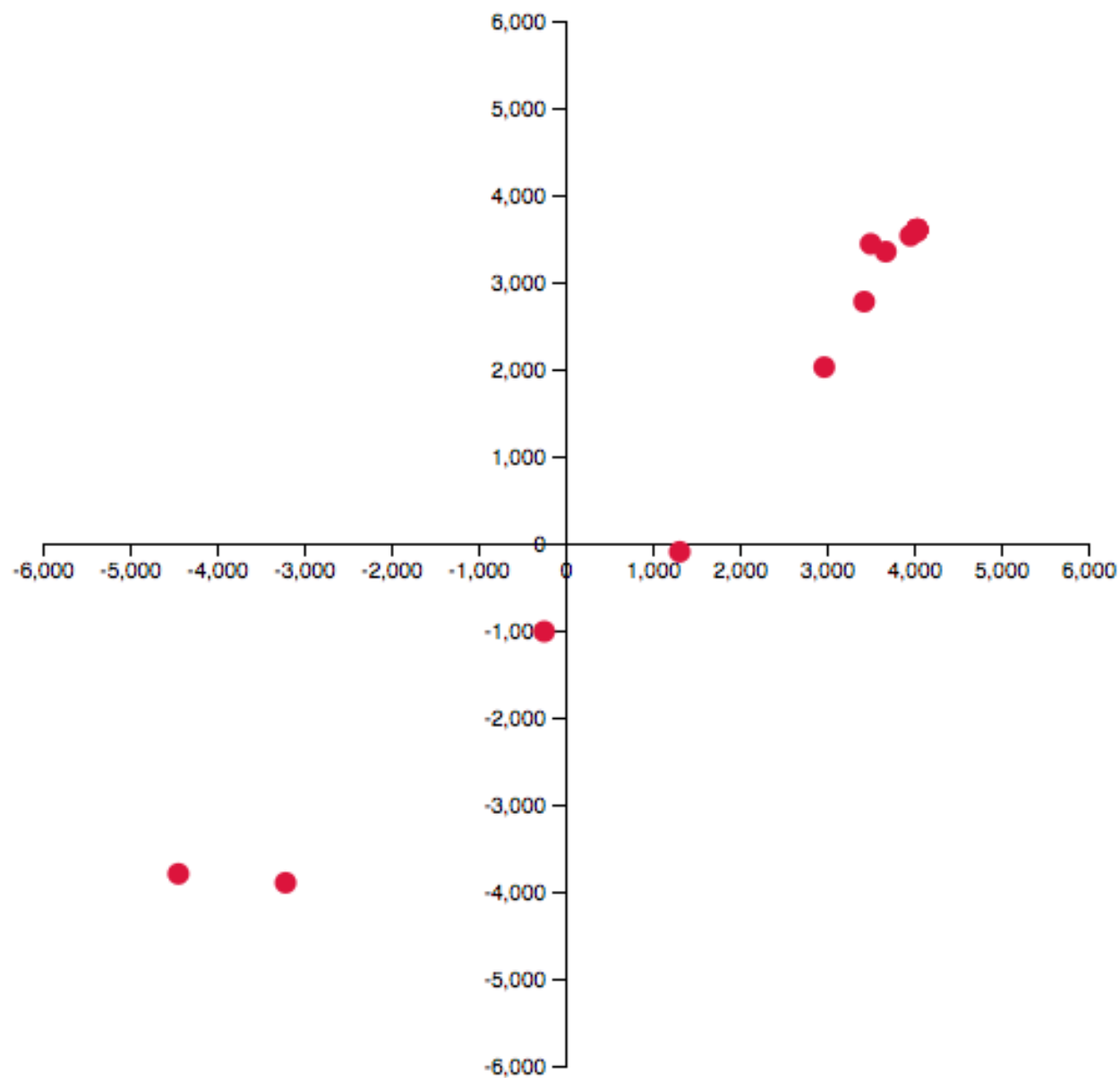


Рисунок 3.1 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для построчной развертки и развертки Пеано для 1-го класса изображений

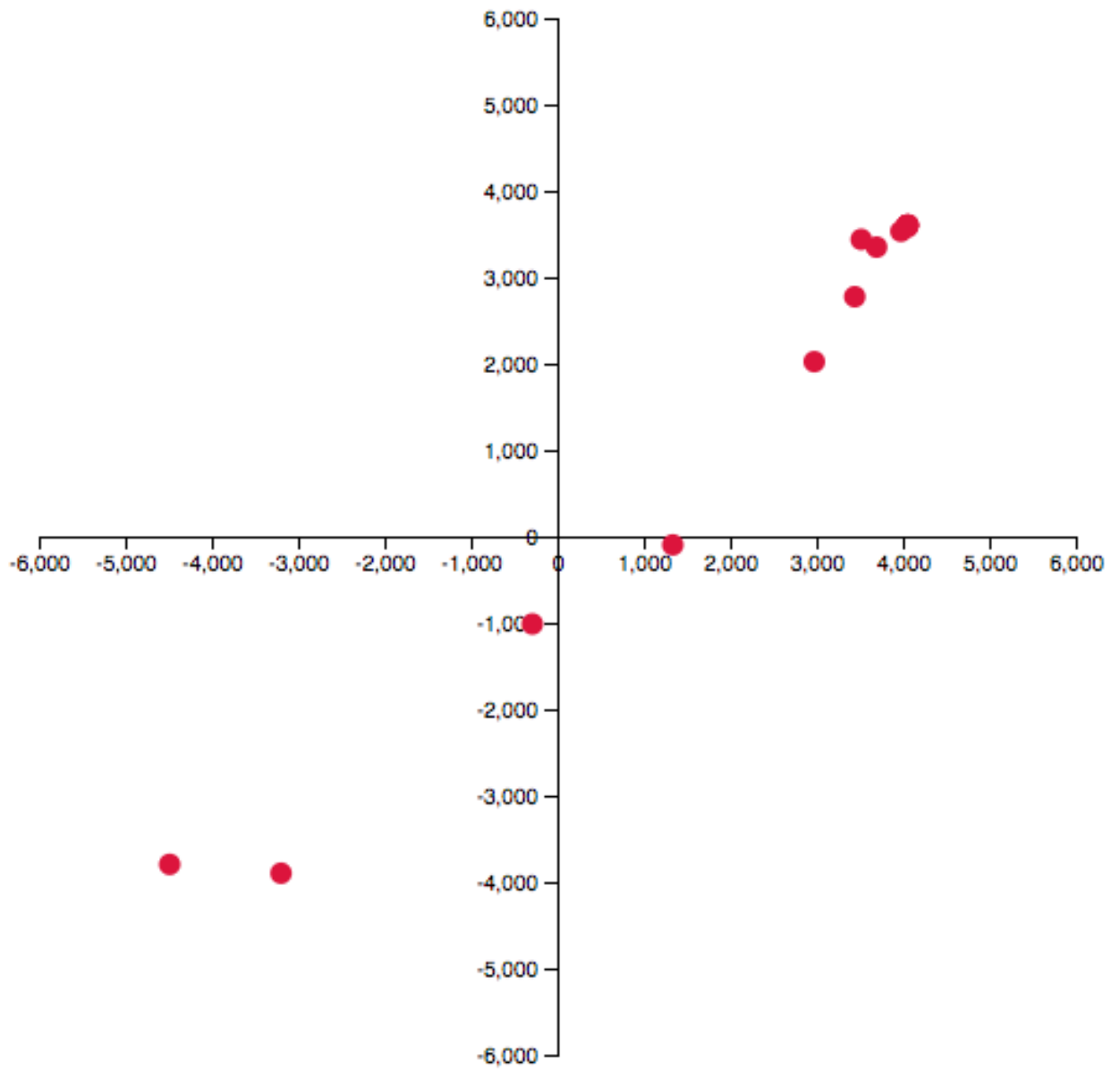


Рисунок 3.2 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для развертки "змейка" и развертки Пеано для 1-го класса изображений

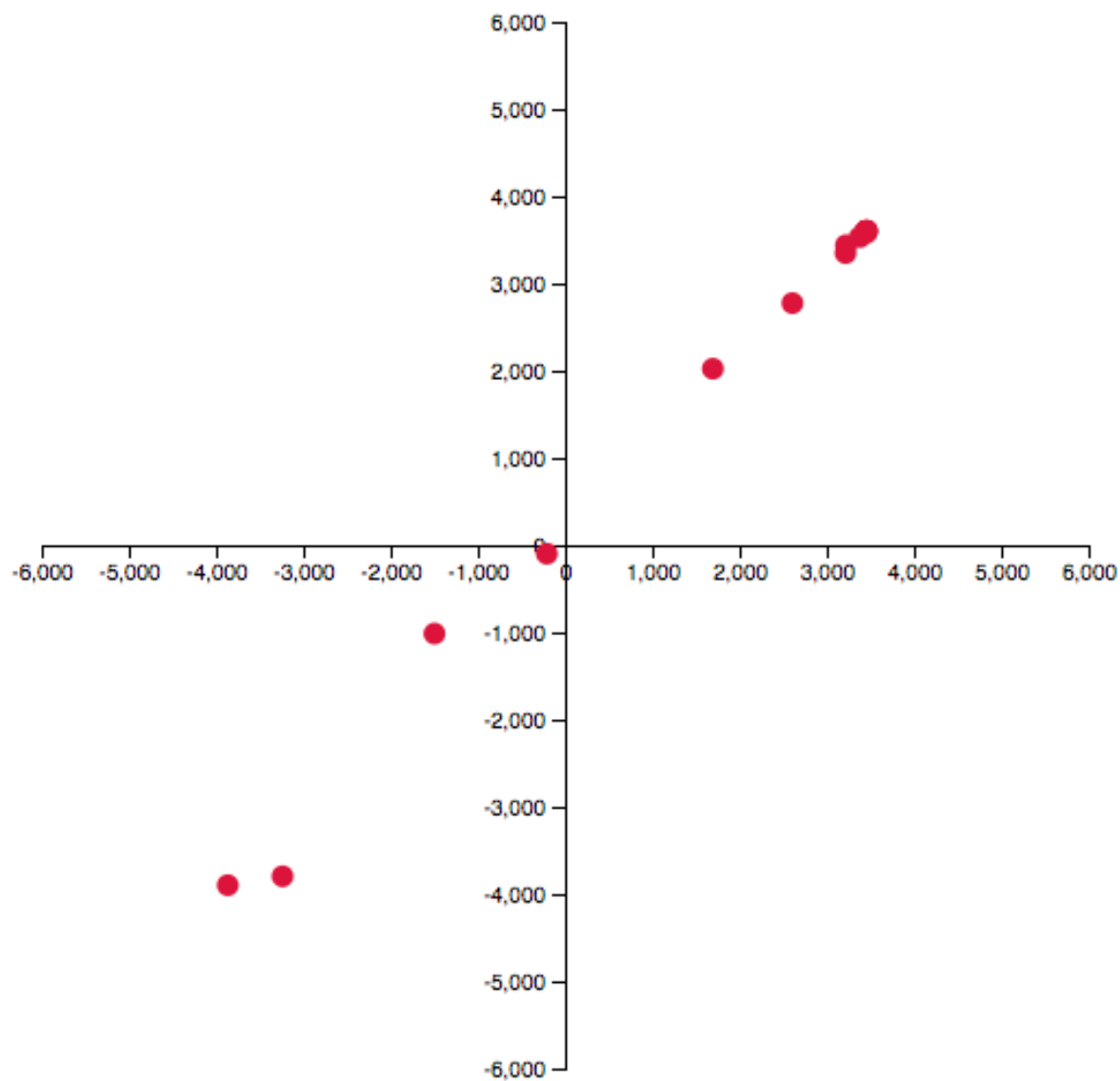


Рисунок 3.3 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для спиральной развертки и развертки Пеано для 1-го класса изображений

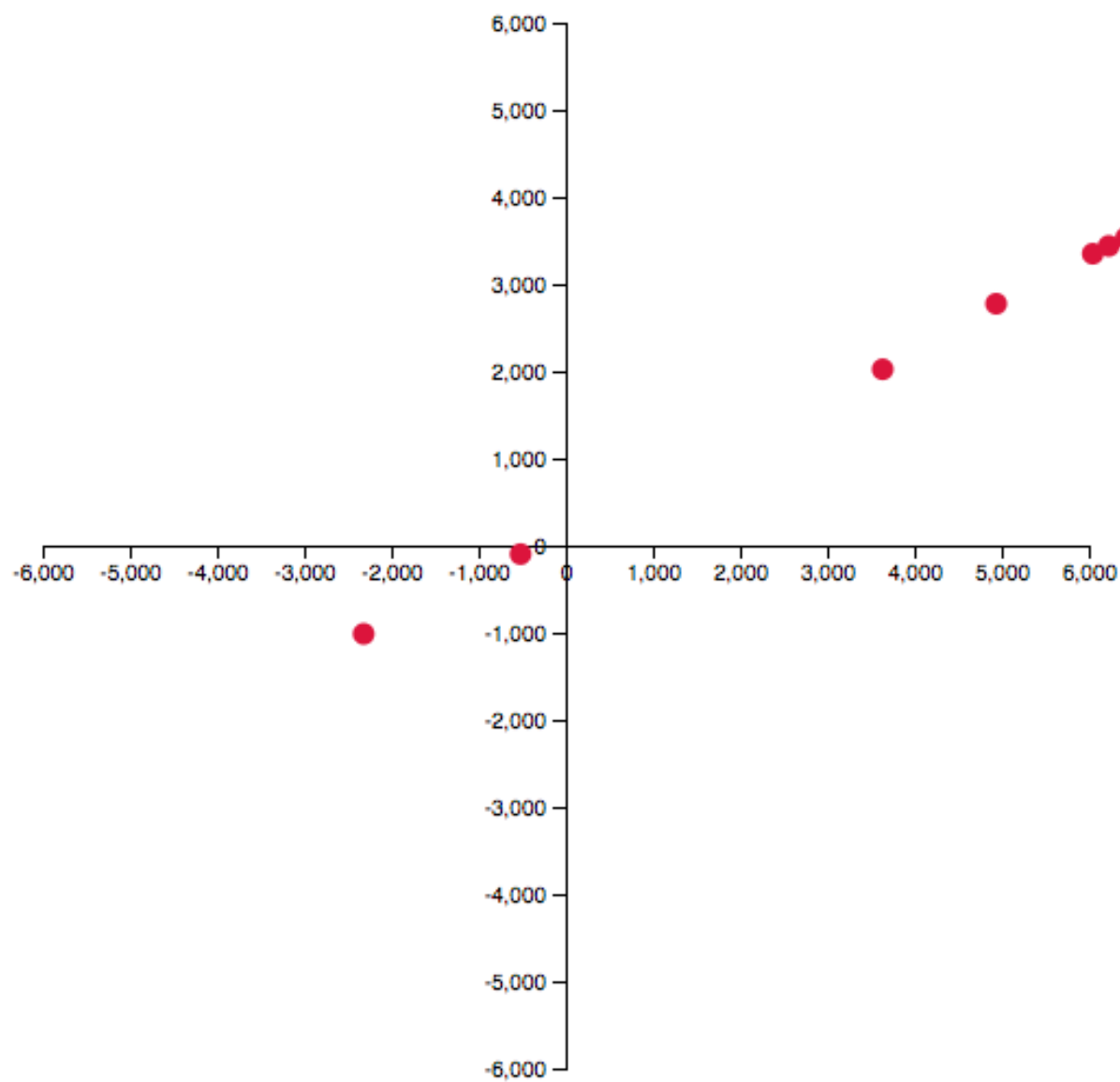


Рисунок 3.4 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для 2-мерной модели Изинга и развертки Пеано для 1-го класса изображений

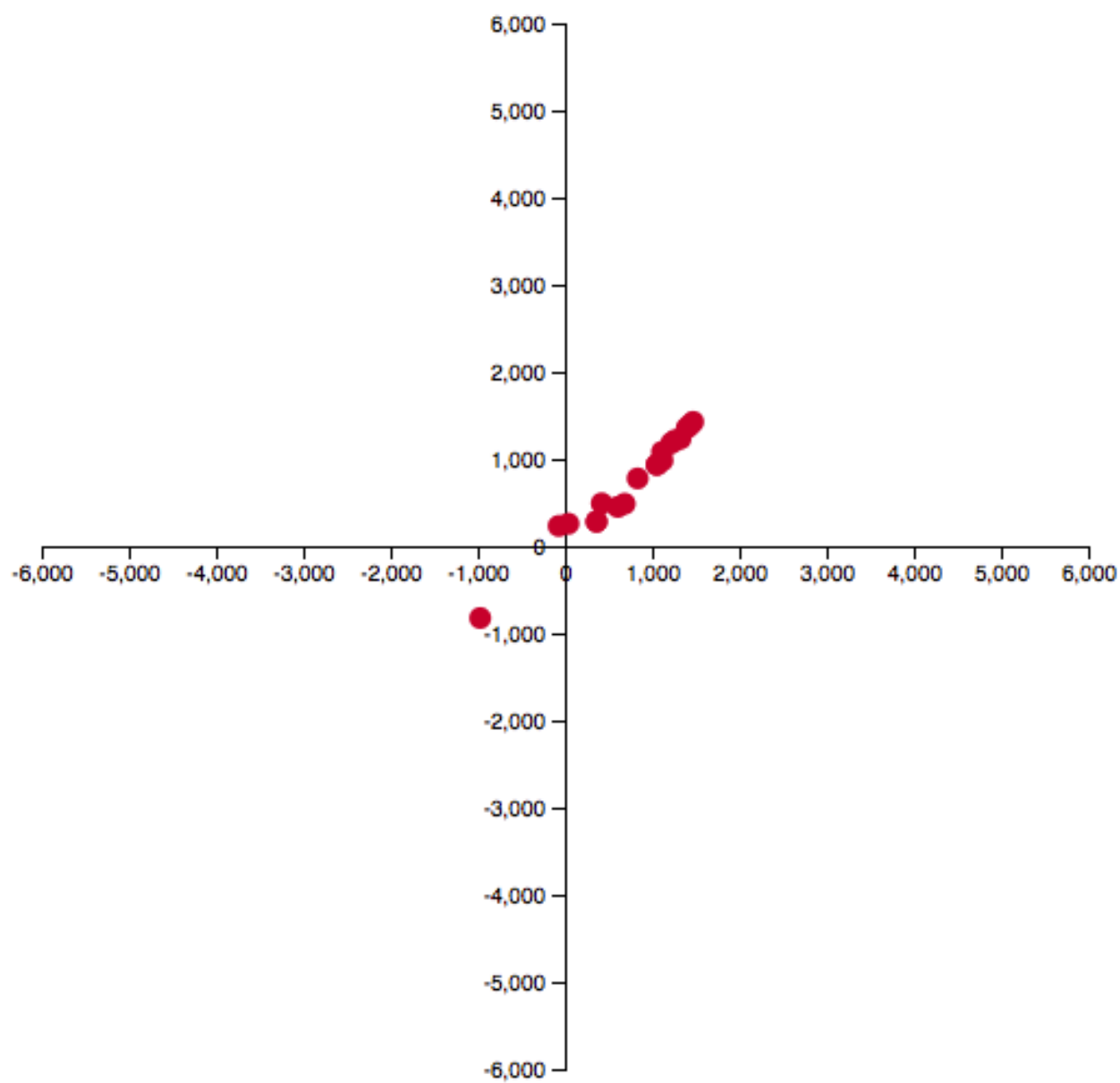


Рисунок 3.5 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для построчной развертки и развертки Пеано для 2-го класса изображений

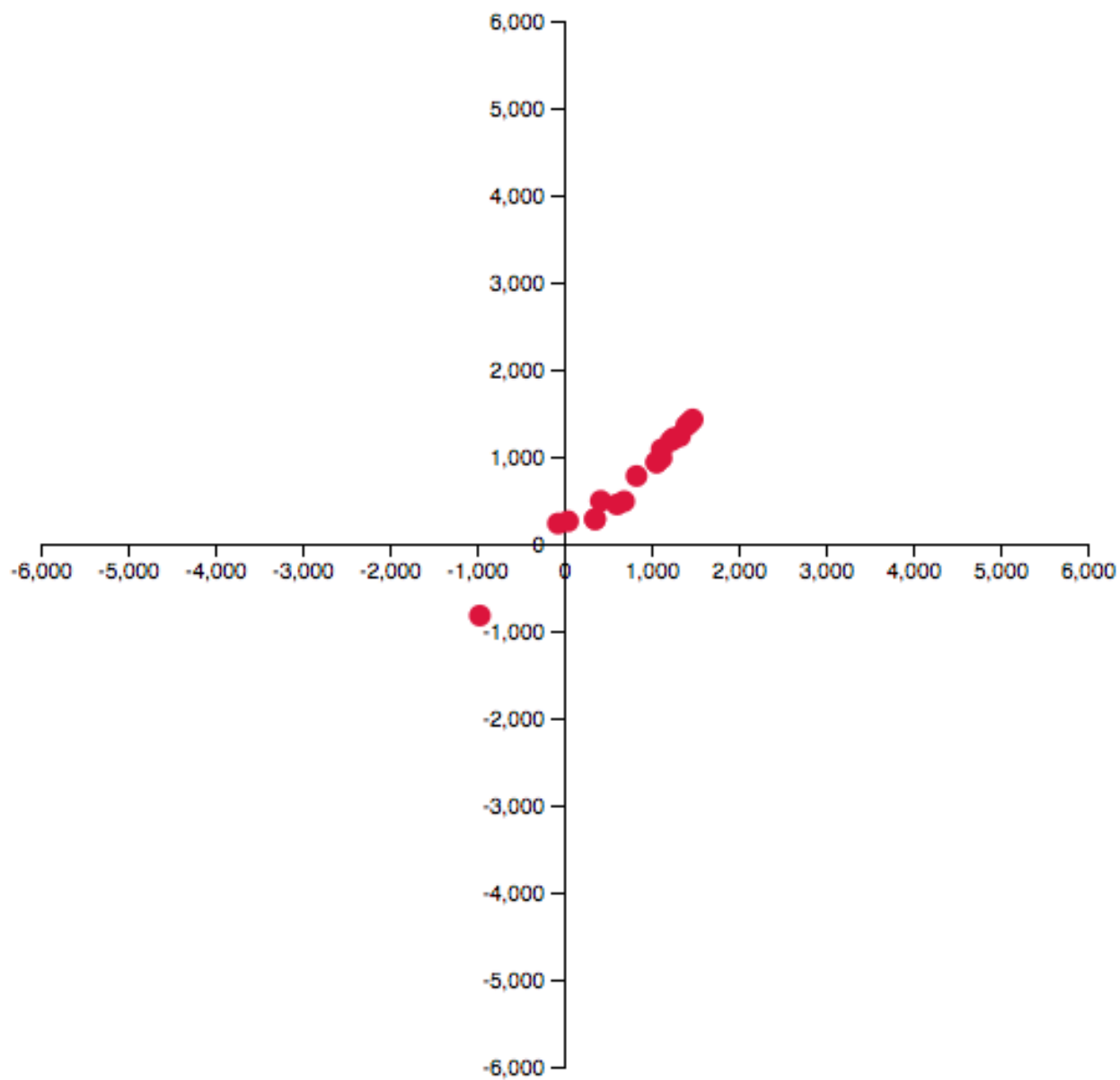


Рисунок 3.6 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для развертки "змейка" и развертки Пеано для 2-го класса изображений

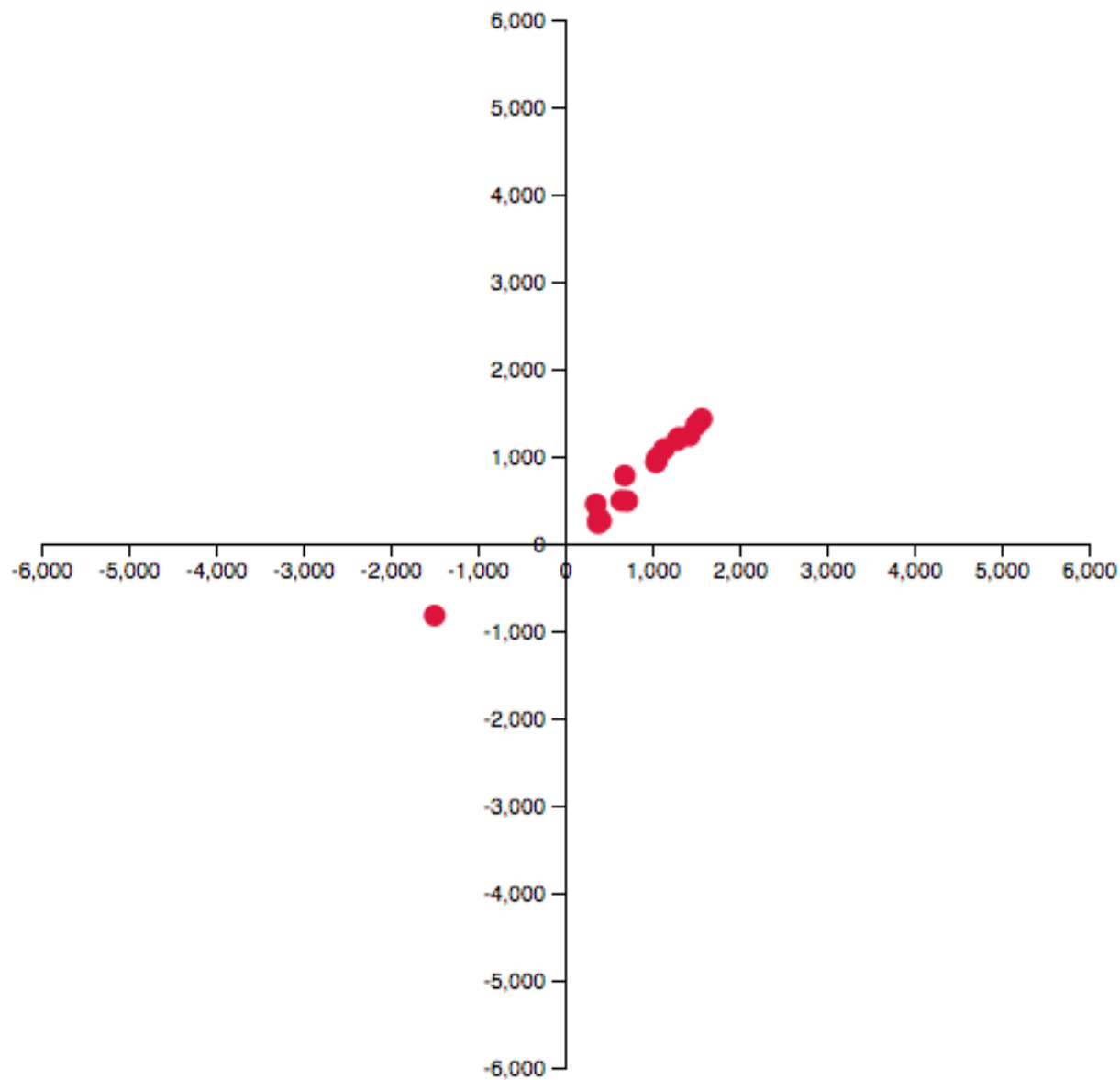


Рисунок 3.7 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для спиральной развертки и развертки Пеано для 2-го класса изображений

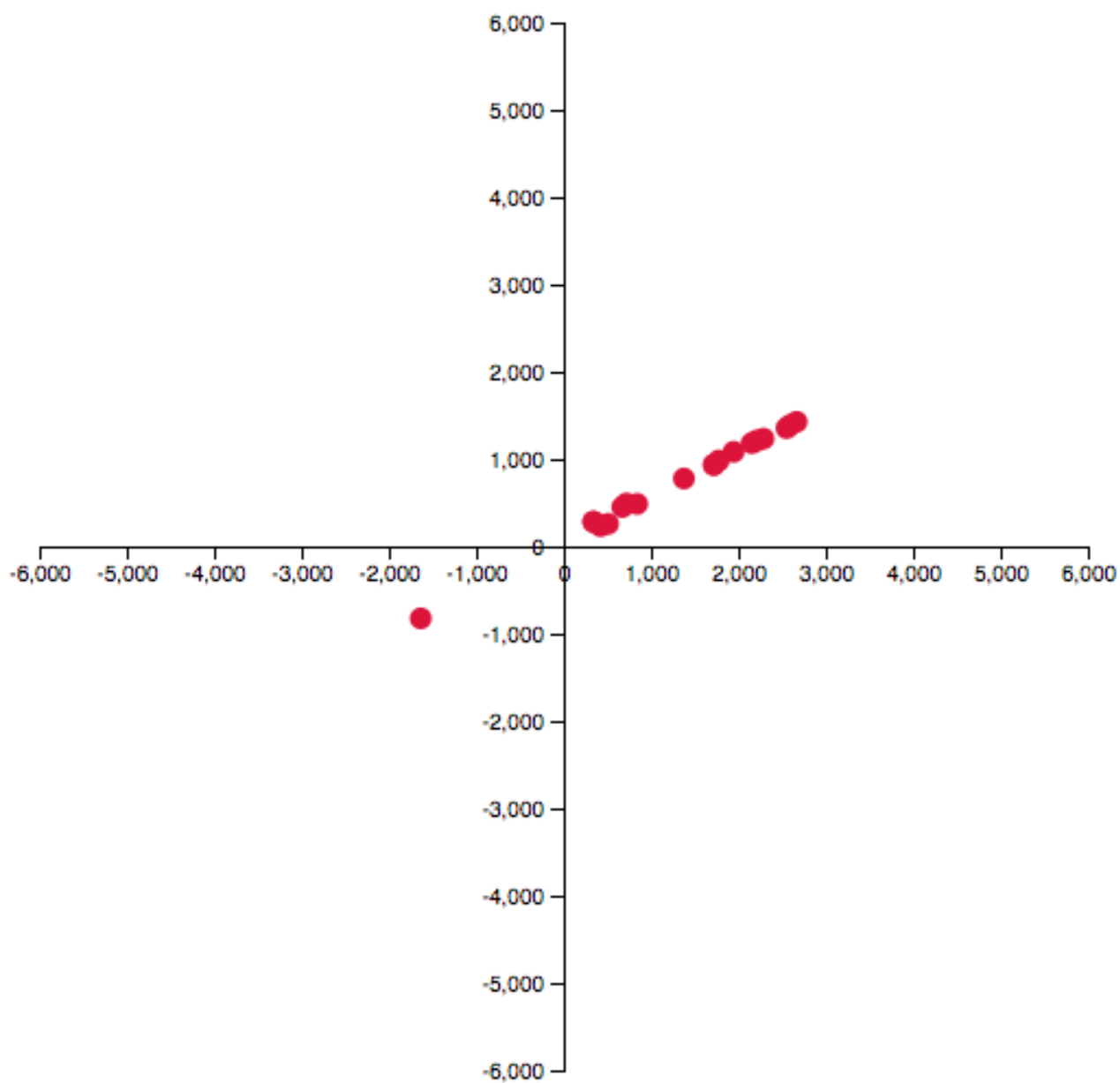


Рисунок 3.8 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для 2-мерной модели Изинга и развертки Пеано для 2-го класса изображений

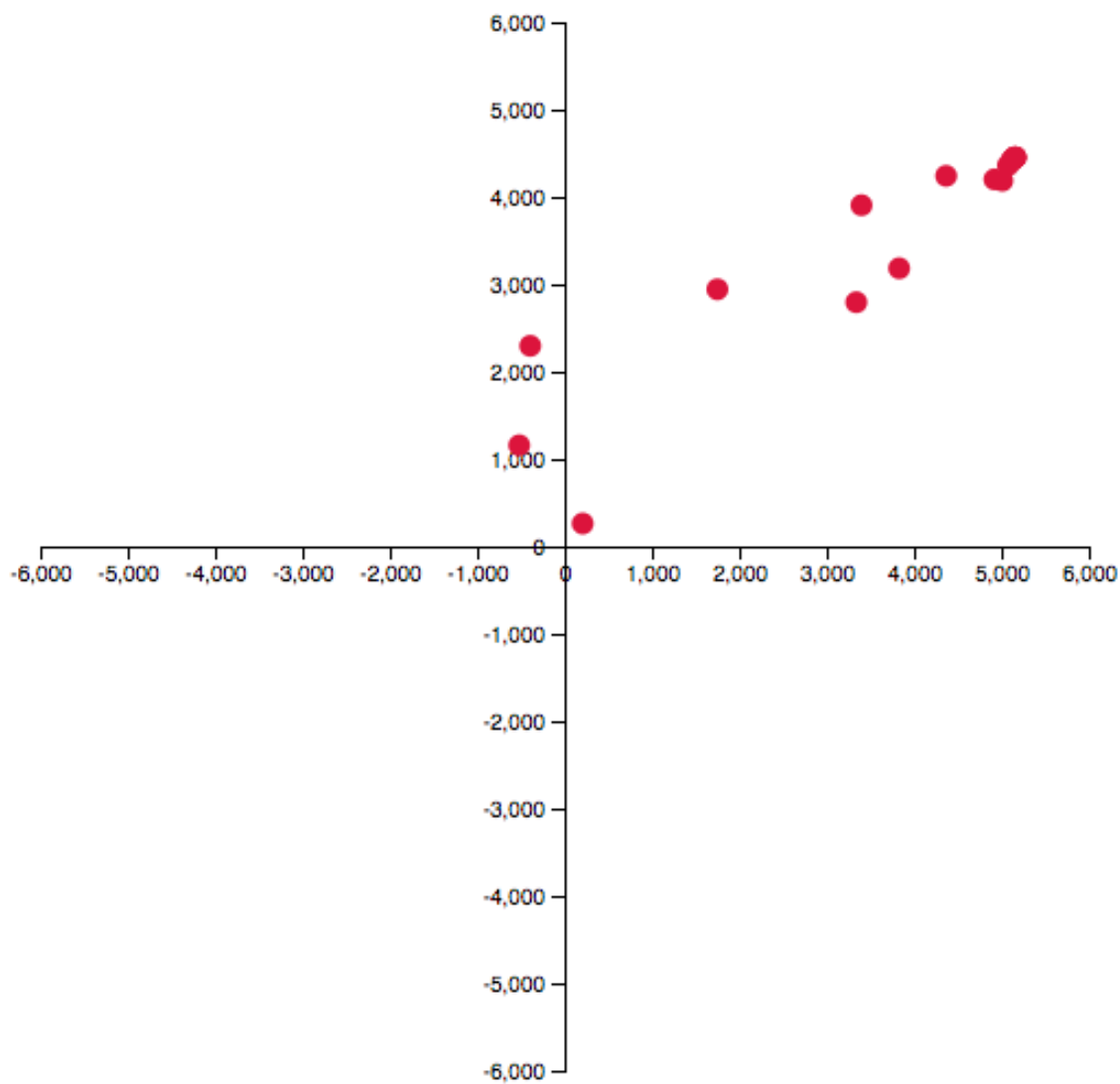


Рисунок 3.9 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для построчной развертки и развертки Пеано для 3-го класса изображений

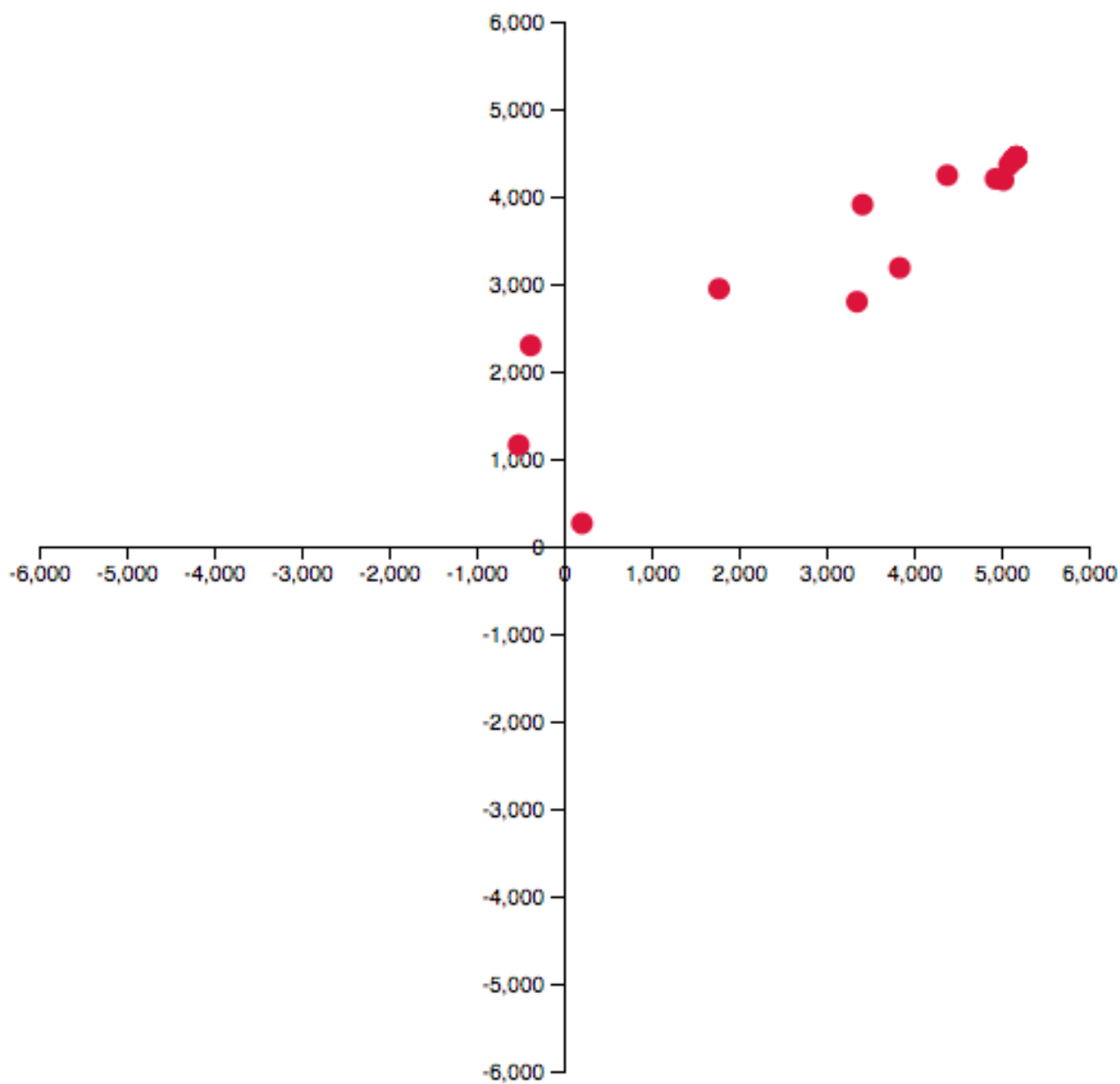


Рисунок 3.10 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для развертки "змейка" и развертки Пеано для 3-го класса изображений

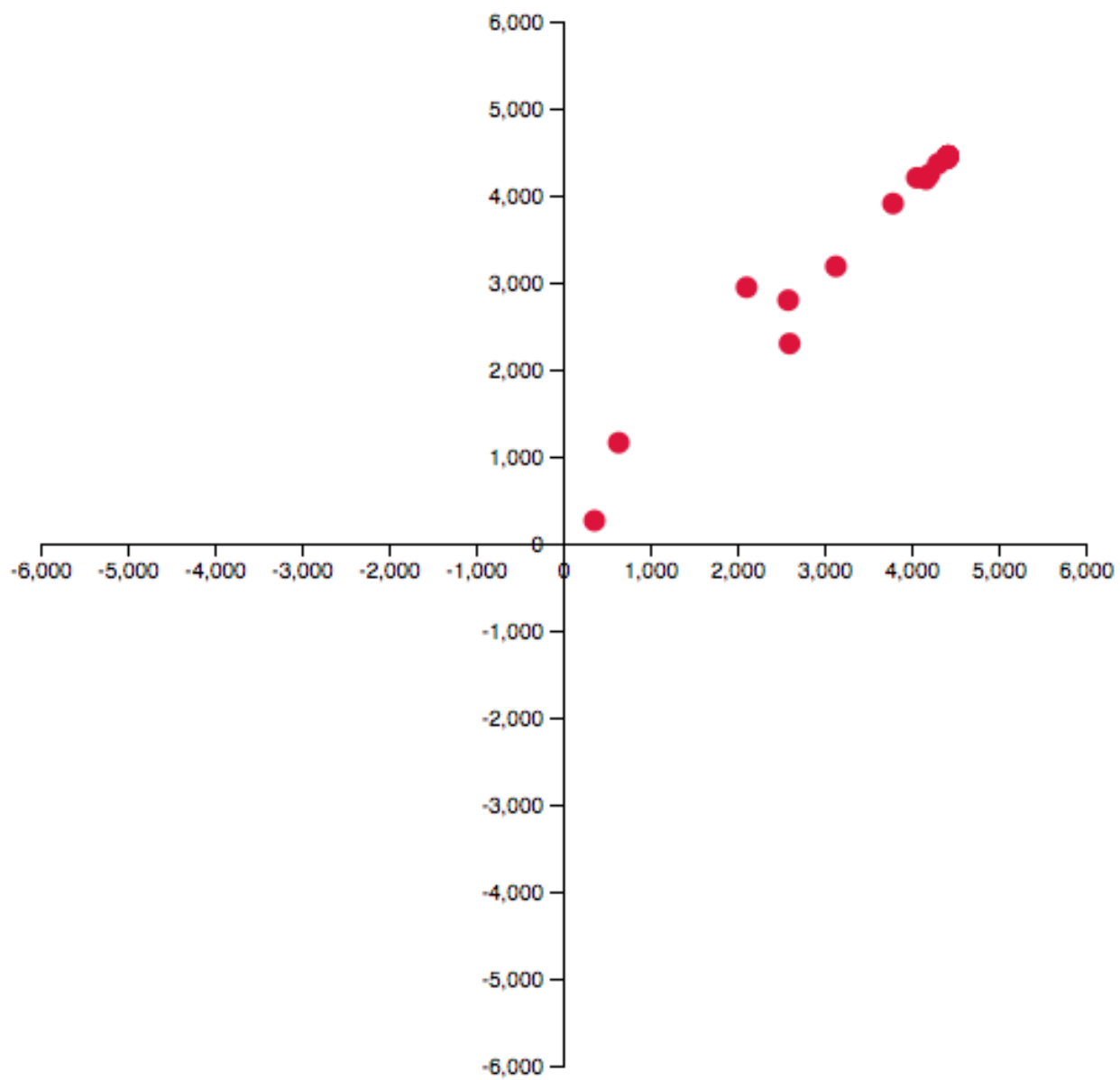


Рисунок 3.11 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для спиральной развертки и развертки Пеано для 3-го класса изображений

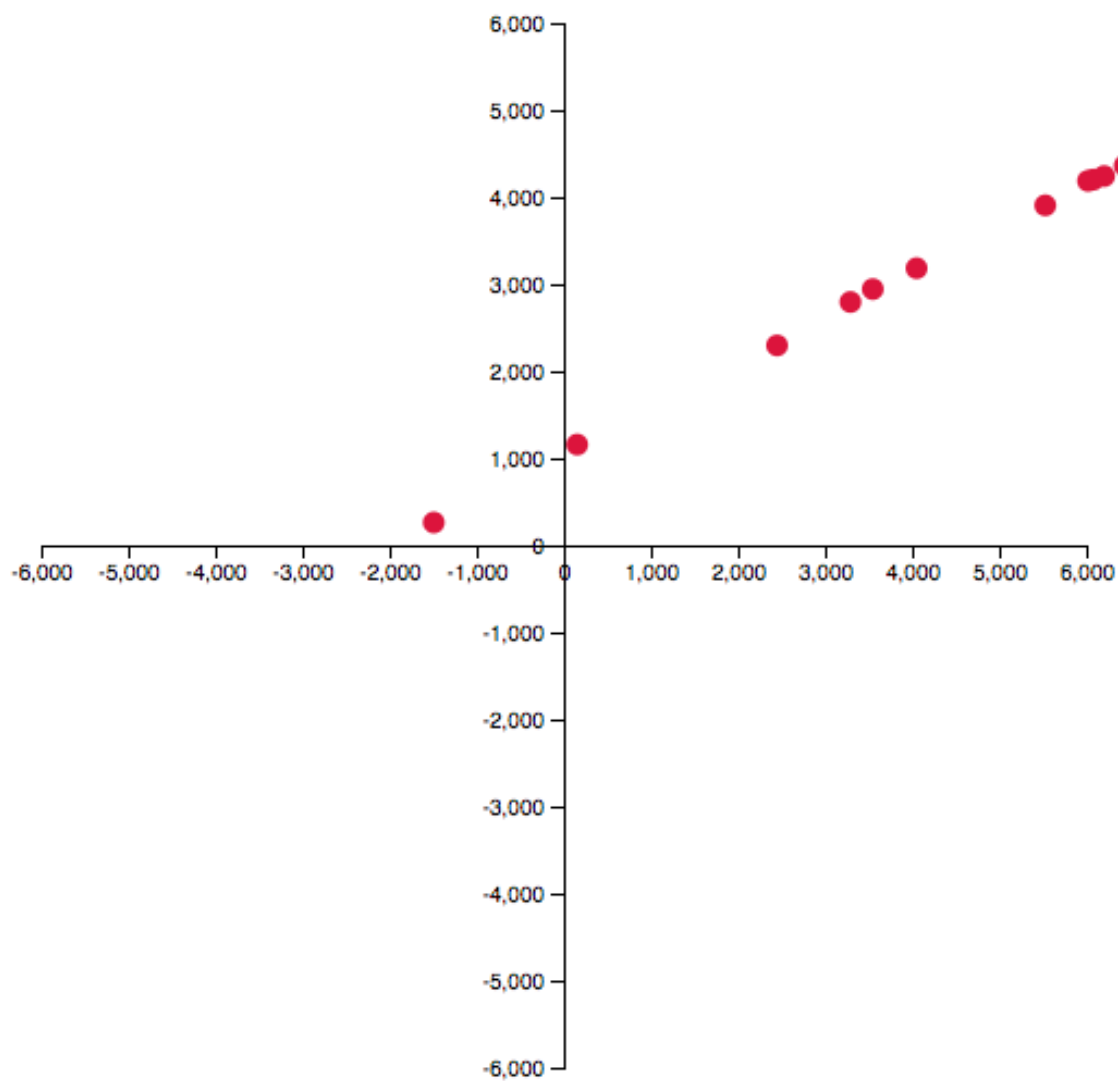


Рисунок 3.12 — Сравнение центрированных оценок максимального правдоподобия для 2-мерной модели Изинга и развертки Пеано для 3-го класса изображений

Заключение

В ходе выполнения дипломной работы ???

Список литературы

1. *Kindermann, R., Snell, J.L.* Markov Random Fields and Their Applications / R. Kindermann, J.L. Snell. — American Mathematical Society, 1980. — 142 p.
2. *Hammersley, J.M., Clifford, P.* Markov Fields on Finite Graphs and Lattices. — 1971 (unpublished).
3. *Moussouris, J.* Gibbs and Markov Systems with Constraints / J. Moussouris // J. Statistical Physics. — 1974. — Vol. 10. — P. 11–33.
4. *Kramers, H.A., Wannier, G.H.* Statistics of Two-dimensional Ferromagnet / H.A. Kramers, G.H. Wannier // Physical Review — 1941 — Vol. 60. — P. 252-262.
5. *Geman, S., Geman, D.* Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images / S. Geman, D. Geman. // IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell., 6:721–741, 1984.
6. *Onsager, L.* Crystal statistics. I. A Two-dimensional Model with an Order-disorder Transition / L. Onsager // Physical Review — 1944 — Vol. 65. — P. 117–149.