Metropolisův algoritmus

Sociální systémy a jejich simulace
Jana Vacková

13.10.2021

Katedra matematiky FJFI ČVUT v Praze

Náplň dnešní přednášky

- Termodynamický plyn
- Metropolisův algoritmus
    - Obecné odvození
    - Pro náš termodynamický plyn

Úvod - doprava a termodynamika

- Dopravní proud = částice, které mezi sebou interagují
- Rozdělení odstupů mezi částicemi zrcadlí onu interakci (01MMD)
- Fyzikální koncept: interakci popíšeme pomocí interakčních potenciálů

Úvod - doprava a termodynamika

- Dopravní proud = částice, které mezi sebou interagují
- Rozdělení odstupů mezi částicemi zrcadlí onu interakci (01MMD)
- Fyzikální koncept: interakci popíšeme pomocí interakčních potenciálů

Termodynamický plyn:

- N částic na kruhu, teplotní rezervoár
- Konfigurace (polohy částic) $x = (x_1, \ldots, x_N)$
- Interakce částic popsána potenciální energií $U(x)$, proto energie konfigurace $E(x) = U(x)$

Úvod - doprava a termodynamika

- Dopravní proud = částice, které mezi sebou interagují
- Rozdělení odstupů mezi částicemi zrcadlí onu interakci (01MMD)
- Fyzikální koncept: interakci popíšeme pomocí interakčních potenciálů

Termodynamický plyn:

- N částic na kruhu, teplotní rezervoár
- Konfigurace (polohy částic) $x = (x_1, \dots, x_N)$
- Interakce částic popsána potenciální energií $U(x)$, proto energie konfigurace $E(x) = U(x)$
- Boltzmannovo rozdělení

$$\pi(x) \propto \exp\left\{-\frac{E(x)}{kT}\right\},$$

  kde k je Boltzmannova konstanta a T termodynamická teplota
- Inverzní termodynamická teplota $\beta = \frac{1}{kT} \in \mathrm{R}^+$

Úvod - doprava a termodynamika

- Dopravní proud = částice, které mezi sebou interagují
- Rozdělení odstupů mezi částicemi zrcadlí onu interakci (01MMD)
- Fyzikální koncept: interakci popíšeme pomocí interakčních potenciálů

Termodynamický plyn:

- N částic na kruhu, teplotní rezervoár
- Konfigurace (polohy částic) $x = (x_1, \ldots, x_N)$
- Interakce částic popsána potenciální energií $U(x)$, proto energie konfigurace $E(x) = U(x)$
- Boltzmannovo rozdělení

  $$\pi(x) \propto \exp\left\{-\frac{E(x)}{kT}\right\},$$

  kde k je Boltzmannova konstanta a T termodynamická teplota
- Inverzní termodynamická teplota $\beta = \frac{1}{kT} \in \mathrm{R}^+$

Jak budeme takové polohy částic simulovat?

Úvod - doprava a termodynamika

- Dopravní proud = částice, které mezi sebou interagují
- Rozdělení odstupů mezi částicemi zrcadlí onu interakci (01MMD)
- Fyzikální koncept: interakci popíšeme pomocí interakčních potenciálů

Termodynamický plyn:

- N částic na kruhu, teplotní rezervoár
- Konfigurace (polohy částic) $x = (x_1, \ldots, x_N)$
- Interakce částic popsána potenciální energií $U(x)$, proto energie konfigurace $E(x) = U(x)$
- Boltzmannovo rozdělení

$$\pi(x) \propto \exp\left\{-\frac{E(x)}{kT}\right\},$$

  kde k je Boltzmannova konstanta a T termodynamická teplota
- Inverzní termodynamická teplota $\beta = \frac{1}{kT} \in \mathrm{R}^+$

Jak budeme takové polohy částic simulovat? **Markov Chain Monte Carlo**

Markovské řetězce (MŘ) - opakování

- Další stav závisí pouze na předchozím stavu
- Ozn. $\mathcal{X}$ prostor všech možných stavů (stavový prostor)

Markovské řetězce (MŘ) - opakování

- Další stav závisí pouze na předchozím stavu
- Ozn. $\mathcal{X}$ prostor všech možných stavů (stavový prostor)
- *Matice přechodu* P, kde $P(x, y)$ značí pravděpodobnost přechodu ze stavu x do stavu y, $x, y \in \mathcal{X}$ a $\sum_{y \in \mathcal{X}} P(x, y) = 1$

Markovské řetězce (MŘ) - opakování

- Další stav závisí pouze na předchozím stavu
- Ozn. $\mathcal{X}$ prostor všech možných stavů (stavový prostor)
- *Matice přechodu* P, kde $P(x, y)$ značí pravděpodobnost přechodu ze stavu x do stavu y, $x, y \in \mathcal{X}$ a $\sum_{y \in \mathcal{X}} P(x, y) = 1$
- *Stacionární rozdělení (SR)* π Markovského řetězce splňuje $\pi = \pi P$

Markovské řetězce (MŘ) - opakování

- Další stav závisí pouze na předchozím stavu
- Ozn. $\mathcal{X}$ prostor všech možných stavů (stavový prostor)
- *Matice přechodu* P, kde $P(x, y)$ značí pravděpodobnost přechodu ze stavu x do stavu y, $x, y \in \mathcal{X}$ a $\sum_{y \in \mathcal{X}} P(x, y) = 1$
- *Stacionární rozdělení (SR)* π Markovského řetězce splňuje $\pi = \pi\, P$
- *Detailní rovnováha* (detailed balance equations)

$$\pi(x)\, P(x, y) = \pi(y)\, P(y, x) \qquad \forall x, y \in \mathcal{X}$$

Markovské řetězce (MŘ) - opakování

- Další stav závisí pouze na předchozím stavu
- Ozn. $\mathcal{X}$ prostor všech možných stavů (stavový prostor)
- *Matice přechodu* P, kde $P(x, y)$ značí pravděpodobnost přechodu ze stavu x do stavu y, $x, y \in \mathcal{X}$ a $\sum_{y \in \mathcal{X}} P(x, y) = 1$
- *Stacionární rozdělení (SR)* π Markovského řetězce splňuje $\pi = \pi P$
- *Detailní rovnováha* (detailed balance equations)

$$\pi(x)\, P(x, y) = \pi(y)\, P(y, x) \qquad \forall x, y \in \mathcal{X}$$

- *Konvergenční teorém*: pokud necháme běžet MŘ dostatečně dlouho, distribuce bude blízká π

Markovské řetězce (MŘ) - opakování

- Další stav závisí pouze na předchozím stavu
- Ozn. $\mathcal{X}$ prostor všech možných stavů (stavový prostor)
- *Matice přechodu* P, kde $P(x, y)$ značí pravděpodobnost přechodu ze stavu x do stavu y, $x, y \in \mathcal{X}$ a $\sum_{y \in \mathcal{X}} P(x, y) = 1$
- *Stacionární rozdělení (SR)* π Markovského řetězce splňuje $\pi = \pi\, P$
- *Detailní rovnováha* (detailed balance equations)

$$\pi(x)\, P(x, y) = \pi(y)\, P(y, x) \qquad \forall x, y \in \mathcal{X}$$

- *Konvergenční teorém*: pokud necháme běžet MŘ dostatečně dlouho, distribuce bude blízká π
- **MCMC algoritmy** = třída algoritmů na vzorkování z π pomocí MŘ, jehož matici přechodu P neznáme (opačná úloha k hledání SR MŘ)

MCMC - Metropolisův algoritmus - úvod

- **MCMC algoritmy** $=$ třída algoritmů na vzorkování z π pomocí MŘ, jehož matici přechodu P neznáme (opačná úloha k hledání SR MŘ)

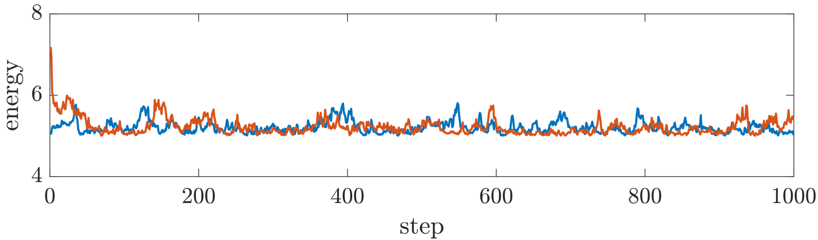
MCMC - Metropolisův algoritmus - úvod

- **MCMC algoritmy** $=$ třída algoritmů na vzorkování z π pomocí MŘ, jehož matici přechodu P neznáme (opačná úloha k hledání SR MŘ)
- *Proč?* Obrovské stavové prostory, kde $|\mathcal{X}| \to +\infty$ (nelze zde vzorkovat klasicky)

MCMC - Metropolisův algoritmus - úvod

- **MCMC algoritmy** $=$ třída algoritmů na vzorkování z π pomocí MŘ, jehož matici přechodu P neznáme (opačná úloha k hledání SR MŘ)
- *Proč?* Obrovské stavové prostory, kde $|\mathcal{X}| \to +\infty$ (nelze zde vzorkovat klasicky)
- **+** Nezávisí na normovací konstantě rozdělení (stačí znát jen váhu konfigurace)

- **MCMC algoritmy** = třída algoritmů na vzorkování z π pomocí MŘ, jehož matici přechodu P neznáme (opačná úloha k hledání SR MŘ)
- *Proč?* Obrovské stavové prostory, kde $|\mathcal{X}| \to +\infty$ (nelze zde vzorkovat klasicky)
- **+** Nezávisí na normovací konstantě rozdělení (stačí znát jen váhu konfigurace)
- - Kdy algoritmus zastavit?



MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Mějme nějaký Markovský řetězec se **symetrickou** maticí přechodu Ψ, mn. stavů $\mathcal{X}$ a lib. SR
- *Jak tento řetězec modifikovat, aby měl stacionární rozdělení* π*?*

MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Mějme nějaký Markovský řetězec se **symetrickou** maticí přechodu Ψ, mn. stavů $\mathcal{X}$ a lib. SR
- *Jak tento řetězec modifikovat, aby měl stacionární rozdělení* π*?*
- Ve stavu x je další krok generován z rozdělení $\Psi(x, \cdot)$
- Ozn. návrh na další stav y
  - Přijmeme y jako další stav s pravděpodobností $a(x, y)$
  - Zamítneme y jako další stav s pravděpodobností $1 - a(x, y)$

  Zamítání stavů snižuje účinnost algoritmu, ale je důležité pro zisk π

MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Mějme nějaký Markovský řetězec se **symetrickou** maticí přechodu Ψ, mn. stavů $\mathcal{X}$ a lib. SR
- *Jak tento řetězec modifikovat, aby měl stacionární rozdělení π?*
- Ve stavu x je další krok generován z rozdělení $\Psi(x, \cdot)$
- Ozn. návrh na další stav y
    - Přijmeme y jako další stav s pravděpodobností $a(x, y)$
    - Zamítneme y jako další stav s pravděpodobností $1 - a(x, y)$

  Zamítání stavů snižuje účinnost algoritmu, ale je důležité pro zisk π
- Matice přechodu hledané modifikace původního MŘ

$$P(x, y) = \begin{cases} \Psi(x, y)\, a(x, y) & \dots \quad y \neq x \\ 1 - \sum_{z \neq x} \Psi(x, z)\, a(x, z) & \dots \quad y = x \end{cases}$$

MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Mějme nějaký Markovský řetězec se **symetrickou** maticí přechodu Ψ, mn. stavů $\mathcal{X}$ a lib. SR
- *Jak tento řetězec modifikovat, aby měl stacionární rozdělení π?*
- Ve stavu x je další krok generován z rozdělení $\Psi(x,\cdot)$
- Ozn. návrh na další stav y
  - Přijmeme y jako další stav s pravděpodobností $a(x,y)$
  - Zamítneme y jako další stav s pravděpodobností $1-a(x,y)$

  Zamítání stavů snižuje účinnost algoritmu, ale je důležité pro zisk π
- Matice přechodu hledané modifikace původního MŘ

$$P(x,y)=\begin{cases}\Psi(x,y)\,a(x,y) & \dots \quad y\neq x\\ 1-\sum_{z\neq x}\Psi(x,z)\,a(x,z) & \dots \quad y=x\end{cases}$$

Jak ale volit pravděpodobnost $a(x,y)$?

MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Z balanční rovnováhy víme, že P má SR π, pokud

$$\pi(x)\,\Psi(x,y)\,a(x,y) = \pi(y)\,\Psi(y,x)\,a(y,x), \qquad \forall y \neq x$$

MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Z balanční rovnováhy víme, že P má SR π, pokud

$$\pi(x)\,\Psi(x,y)\,a(x,y) = \pi(y)\,\Psi(y,x)\,a(y,x), \qquad \forall y \neq x$$

- Ze symetrie Ψ pak máme

$$\pi(x)\,a(x,y) = \pi(y)\,a(y,x)$$

MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Z balanční rovnováhy víme, že P má SR π, pokud

$$\pi(x)\,\Psi(x,y)\,a(x,y) = \pi(y)\,\Psi(y,x)\,a(y,x), \qquad \forall y \neq x$$

- Ze symetrie Ψ pak máme

$$\pi(x)\,a(x,y) = \pi(y)\,a(y,x)$$

- Ozn. $b(x,y) := \pi(x)\,a(x,y)$, potom z $a(y,x) \leq 1$ získáme $b(y,x) \leq \pi(y)$, odkud

$$b(x,y) \leq \pi(y),$$

  takže $a(x,y) \leq \frac{\pi(y)}{\pi(x)}$

MCMC - Metropolisův algoritmus - symetrická verze

- Z balanční rovnováhy víme, že P má SR π, pokud

$$\pi(x)\,\Psi(x,y)\,a(x,y) = \pi(y)\,\Psi(y,x)\,a(y,x), \qquad \forall y \neq x$$

- Ze symetrie Ψ pak máme

$$\pi(x)\,a(x,y) = \pi(y)\,a(y,x)$$

- Ozn. $b(x,y) := \pi(x)\,a(x,y)$, potom z $a(y,x) \leq 1$ získáme $b(y,x) \leq \pi(y)$, odkud

$$b(x,y) \leq \pi(y),$$

  takže $a(x,y) \leq \frac{\pi(y)}{\pi(x)}$
- Vybereme co největší, abychom co nejméně zamítali

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

MCMC - Metropolisův algoritmus - nesymetrická verze

- Úplně obdobně jako v symetrické verzi

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

MCMC - Metropolisův algoritmus - náš případ

- Budeme zde používat symetrickou verzi
- Chceme olomit na náš případ Boltzmannova rozdělení, tj.

$$\pi(x) \propto \exp\left\{-\beta U(x)\right\}, \qquad \beta \in \mathrm{R}^+$$

- Odvodili jsme, že $a(x, y) = \min\left\{\frac{\pi(y)}{\pi(x)}, 1\right\}$
- Pro Boltzmanna: $\tilde{a}(x, y) := \frac{\pi(y)}{\pi(x)} = \mathrm{e}^{-\beta(U(y)-U(x))}$

MCMC - Metropolisův algoritmus - náš případ

- Budeme zde používat symetrickou verzi
- Chceme olomit na náš případ Boltzmannova rozdělení, tj.

$$\pi(x) \propto \exp\{-\beta U(x)\}, \qquad \beta \in \mathrm{R}^+$$

- Odvodili jsme, že $a(x,y) = \min\left\{\frac{\pi(y)}{\pi(x)}, 1\right\}$
- Pro Boltzmanna: $\tilde{a}(x,y) := \frac{\pi(y)}{\pi(x)} = \mathrm{e}^{-\beta(U(y)-U(x))}$
    - Pokud $\tilde{a}(x,y) < 1$, pak $a(x,y) = \tilde{a}(x,y)$, což odpovídá podmínce:

      Pokud $U(y) > U(x)$, pak kandidáta y přijmu jako nový stav s pravděpodobností $\tilde{a}(x,y)$

MCMC - Metropolisův algoritmus - náš případ

- Budeme zde používat symetrickou verzi
- Chceme olomit na náš případ Boltzmannova rozdělení, tj.

$$\pi(x) \propto \exp\{-\beta U(x)\}, \qquad \beta \in \mathrm{R}^+$$

- Odvodili jsme, že $a(x,y) = \min\left\{\frac{\pi(y)}{\pi(x)}, 1\right\}$
- Pro Boltzmanna: $\tilde{a}(x,y) := \frac{\pi(y)}{\pi(x)} = \mathrm{e}^{-\beta(U(y)-U(x))}$
  - Pokud $\tilde{a}(x,y) < 1$, pak $a(x,y) = \tilde{a}(x,y)$, což odpovídá podmínce:

    Pokud $U(y) > U(x)$, pak kandidáta y přijmu jako nový stav s pravděpodobností $\tilde{a}(x,y)$
  - Pokud $\tilde{a}(x,y) \geq 1$, pak $a(x,y) = 1$, což odpovídá podmínce:

    Pokud $U(y) \leq U(x)$, pak kandidáta y přijmu jako nový stav vždy.

Algorithm 0.1: METROPOLIS( )

$x \in \mathcal{X}$
$U = U(x)$
while nejsme spokojeni

$$\textbf{do} \begin{cases} y \sim \Psi(x, \cdot) \\ \textbf{if } U(y) \leq U(x) \\ \quad \textbf{then } \begin{cases} x \leftarrow y \\ U \leftarrow U(y) \end{cases} \\ \quad \textbf{else } \begin{cases} \textbf{if } \mathit{rand} < \mathrm{e}^{-\beta(U(y)-U(x))} \\ \quad \textbf{then } \begin{cases} x \leftarrow y \\ U \leftarrow U(y) \end{cases} \end{cases} \end{cases}$$

MCMC - Metropolisův algoritmus - náš případ - volba U, Ψ

- Volba $U(x)$:

$$U(x) = U(x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^{N} U_j(x_1, \dots, x_N),$$

kde $U_j(x_1, \dots, x_N) = g(x_j - x_{j-1})$, kde g je např. $g(d) = \frac{1}{d}$

- Volba symetrické $\Psi(x, y)$
  - Hýbáme všemi částicemi najednou:

$$y_j = x_j + \delta_j, \qquad \forall j \in \hat{N}$$

  kde $\delta_j \sim \mathcal{U}(-R, R)$, $R = \frac{L}{N} \cdot 0.1$ je šum a L je délka kruhu
  - Předpokládáme pro jednoduchost, že $L = N$
  - Předjíždění je zakázáno, tj. musí platit

$$y_j < y_{j-1}, \qquad \forall j \in \hat{N}$$

Konec dnešní přednášky. :-)