Abstract

MPF 及び CD-method の objection function を整理したノートです。

1 CD-method

$$\begin{aligned} CD(p^{(0)}\|p^{(1)}) &:= KL(p^{(0)}\|p^{(\infty)}) - KL(p^{(1)}\|p^{(\infty)}) && (1)\\ &= \sum_x p^{(0)}(x)\log(\frac{p^{(0)}(x)}{p^{(\infty)}(x|\theta)}) - \sum_x p^{(1)}(x|\theta)\log(\frac{p^{(1)}(x|\theta)}{p^{(\infty)}(x|\theta)}) && (2)\\ &= -\sum_x p^{(0)}(x)\log(p^{(\infty)}(x|\theta)) + \sum_x p^{(1)}(x|\theta)\log(p^{(\infty)}(x|\theta)) && (3)\end{aligned}$$

ただし、$p^{(0)}$ は経験分布。$p^{(1)}$ は経験分布から 1MC-step で到達できる確率分とします。一次元 (サイト数 d) イジングモデル、かつ、パラメータが一様 (一変数) の場合は分配関数を簡単に書くことができ、以下のような式になります。

$$Z(\theta) = (2\cosh(\theta))^d + (2\sinh(\theta))^d \tag{4}$$

$$p^{(0)}(x) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M}\prod_{j=1}^{d}\delta(x_j, x_j^{(m)}) \tag{5}$$

従って、第 1 項目は

$$\sum_x p^{(0)}(x)\log(\frac{p^{(0)}(x)}{p^{(\infty)}(x|\theta)}) = \frac{1}{|\mathcal{D}|}\{-\sum_{x\in\mathcal{D}} E(x|\theta) - \log((2\cosh(\theta))^d + (2\sinh(\theta)))\} \tag{6}$$

1MC-step の遷移で得られる確率分布は以下のように考えました。
まずは、初期状態と次の遷移先の同時確率を、初期状態の変数を周辺化するとみなします ($p^{(1)}(x)$ は一度の遷移で到達でき変数の確率分布であるため)。

$$p^{(1)}(x) = \sum_{x':all} p(x|x')p(x') = \sum_{x'\in\mathcal{D}} p(x|x')p^{(0)}(x) \tag{7}$$

経験分布はデータに含まれている状態のみ有限の値を持つとします

$$p^{(0)}(x) = \{ \begin{array}{ll} \frac{1}{|\mathcal{D}|} & \text{for } x \in \mathcal{D} \\ 0 & \text{for } x \notin \mathcal{D} \end{array} \tag{8}$$

また、$p(x|x')$ は humming 距離 1,0 またはそれ以上かの 3 通り場合分けをして考えます。

$$p(x|x') = \{ \begin{array}{ll} d^{-1}(1+\exp\{-E(x'|\theta)+E(x|\theta)\})^{-1} & \text{for } \|x-x'\| = 1 \\ 1 - \sum_{x:\text{all},\|x-x'\|=1} d^{-1}\{1+\exp(-E(x'|\theta)+E(x|\theta))\}^{-1} & \text{for } \|x-x'\| = 0 \\ 0 & \text{for } \|x-x'\| > 1 \end{array} \tag{9}$$

$x = x'$ の場合は任意の確率変数 x, y に対して、$\sum_{x:all} p(x|y) = 1$ であることから導かれます。
従って、1MC-step で遷移可能な確率分布は

$$\begin{aligned} p^{(1)}(x) &= |\mathcal{D}|^{-1}\sum_{x'\in\mathcal{D}} p(x|x') && (10)\\ &= |\mathcal{D}|^{-1}\sum_{x'\in\mathcal{D},\|x-x'\|=1} p(x|x') + |\mathcal{D}|^{-1}p(x|x'=x) && (11)\end{aligned}$$

この $p^{(1)}$ を CD の第 2 項目に代入すれば良いのだと思います。

2 MPF

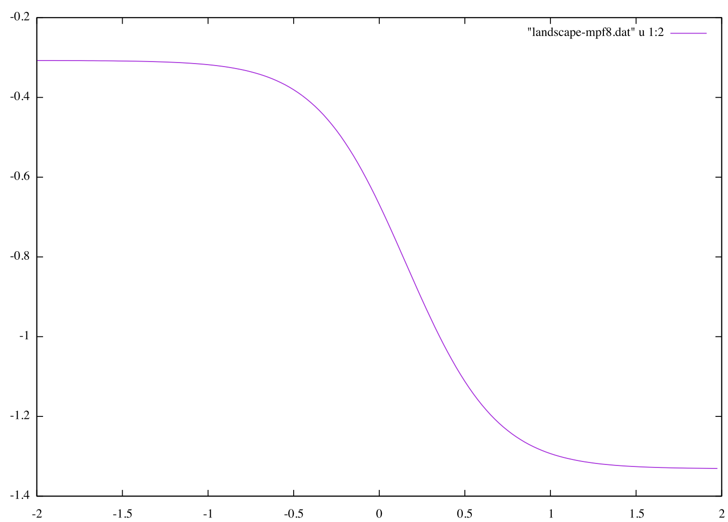
1MC-step の遷移で得られる MPF の objective-function は

$$MPF(\theta) = KL(p^{(0)} \| p^{(1)}) = -\sum_{x:all} p^{(0)}(x) \log(p^{(1)}(x|\theta)) + const \tag{12}$$

CD の章で得られた $p^{(1)}$ を用いると以下の式を得られます

$$\begin{aligned}
MPF(\theta) &= -\sum_{x:all} p^{(0)}(x) \log(p^{(1)}(x|\theta)) && (13)\\
&= -\frac{1}{|\mathcal{D}|}\sum_{x\in\mathcal{D}} \log(p^{(1)}(x|\theta)) && (14)\\
&= -\frac{1}{|\mathcal{D}|}\sum_{x\in\mathcal{D}} \log\{\sum_{x'\in\mathcal{D},\|x-x'\|=1} \{d^{-1}(1+\exp\{-E(x'|\theta)+E(x|\theta)\})^{-1}\} && (15)\\
&\quad +1 - \sum_{x:\mathrm{all},\|x-x'\|=1} d^{-1}\{1+\exp(-E(x'|\theta)+E(x|\theta))\}^{-1}\}\} && (16)\\
&= -\frac{1}{|\mathcal{D}|}\sum_{x\in\mathcal{D}} \log\{1 - \sum_{x'\notin\mathcal{D},\|x-x'\|=1} \{d^{-1}(1+\exp\{-E(x'|\theta)+E(x|\theta)\})^{-1}\}\} && (17)
\end{aligned}$$

式の意味としては、最初の状態点に 1MC-step 先でも止まる確率分布となっています。(たぶん、最後の行が間違っているのではないかと思います。)
一応 $MPF(\theta)$ の一次元 d=16, パラメータ数が 1 つ (真値 = 0.5) の場合で、プロットすると以下の様な図を得ました (本来局値に成るべき 0.5 に局値が現れません。何かが変です。)。
縦軸は MPF の値で、横軸はパラメータです。



landscape of MPF