

Aula 14

Roteiro

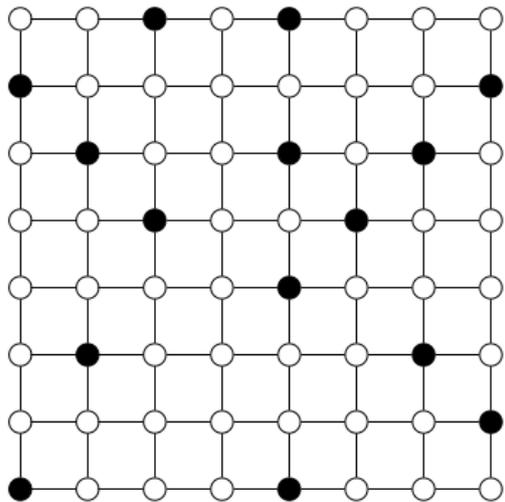
- Modelo Hardcore via Metropolis-Hastings
- Gibbs Sampling
- Exemplo simples
- Modelo Hardcore via Gibbs Sampling
- q -coloração via Gibbs Sampling
- Tempo de mistura (*fast mixing*)

Markov Chain Monte Carlo

- **Problema 1:** gerar amostras de espaço S grande e complicado com distribuição π
- **Solução:** Markov chain Monte Carlo
 - construir uma CM com espaço de estado S tal que π seja sua distribuição estacionária
 - gerar amostras através de caminhos amostrais de comprimento τ_ε
- **Problema 2:** computar $E_\pi[f(X)]$ para alguma função f no espaço amostral S com distribuição π
- **Solução:** Markov chain Monte Carlo!
 - estimador de $E_\pi[f(X)]$ utilizando caminho amostral

Hardcore Model

- Modelo *hardcore*: colorir cada vértice de um grafo com preto ou branco
 - restrição: vértice preto tem todos seus vizinhos brancos
- Conjunto independente (em teoria dos grafos)



15 vértices pretos

- S : conjunto de todas as configurações (sem restrição)
 - $|S| = 2^n$, para grafo com n vértices
- S' : subconjunto de configurações válidas
- **Problema:** número médio de vértices pretos de uma configuração válida?
 - valor esperado sobre a distribuição uniforme sobre o espaço S'

Hardcore Model

- $f(C)$: número de vértices pretos de uma configuração válida C escolhida ao acaso, uniformemente

- Então

$$E[f(C)] = \frac{1}{Z} \sum_{c \in S'} f(c) \quad Z = |S'| = \sum_{c \in S} 1 (c \text{ é válida})$$

- **Problemas:**

(1) como enumerar S' de forma eficiente?

(2) como lidar com o tamanho de S' (exponencial)?

- **Solução:** Markov Chain Monte Carlo

MCMC para *Hardcore Model*

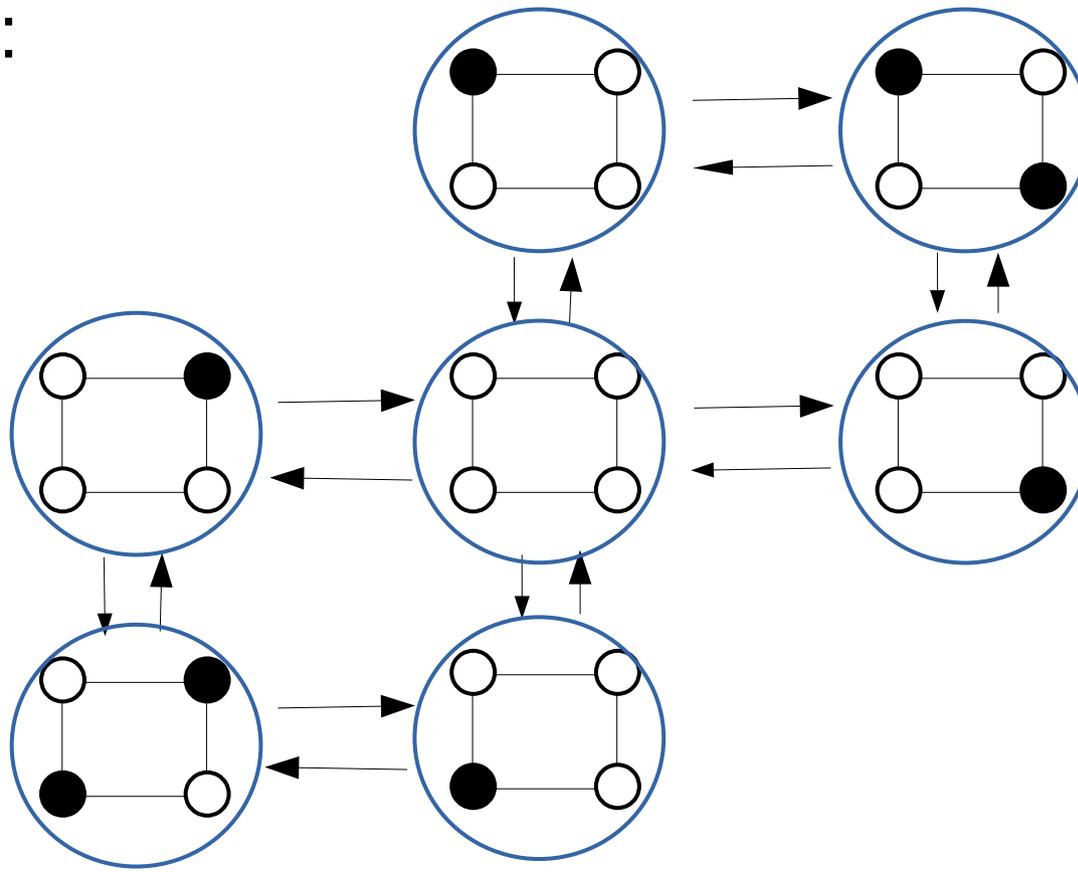
- Construir CM onde estados são elementos de S'
 - configurações válidas
- Fazer com que distribuição estacionária desta CM seja uniforme, $\pi_c = 1/Z$ para toda configuração c
- Gerar caminho amostral pela CM
 - X_k estado da CM no passo k (configuração)
- Estimar valor esperado do número de vértices em preto usando caminho amostral

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^k f(X_l) \xrightarrow[\text{(teorema ergódico)}]{\text{converge quando } k \rightarrow \text{infinito}} E[f(C)]$$

↑
Estimador do número médio de vértices pretos após k amostras

MCMC para *Hardcore Model*

- Construir CM é equivalente a definir as transições para cada estado
- **Ideia:** construir transições entre configurações válidas que diferem na cor de exatamente um vértice
 - usar passeio aleatório para transicionar
- Exemplo:



MCMC para *Hardcore Model*

- Passeio aleatório não possui distribuição estacionária uniforme
- Construir cadeia de Metropolis-Hastings com distribuição uniforme (aula passada)

$$P'_{i,j} = \frac{1}{d_i} \min \left\{ 1, \frac{d_i}{d_j} \right\} \quad \leftarrow \text{para todo } j \text{ vizinho de } i \text{ (estado atual)}$$

- d_i : grau da configuração i (na cadeia de Markov)
 - d_i = número de vértices pretos + número de vértices brancos que não possuem vizinhos pretos
- Gerar caminho amostral para calcular o estimador $\hat{f}(k)$

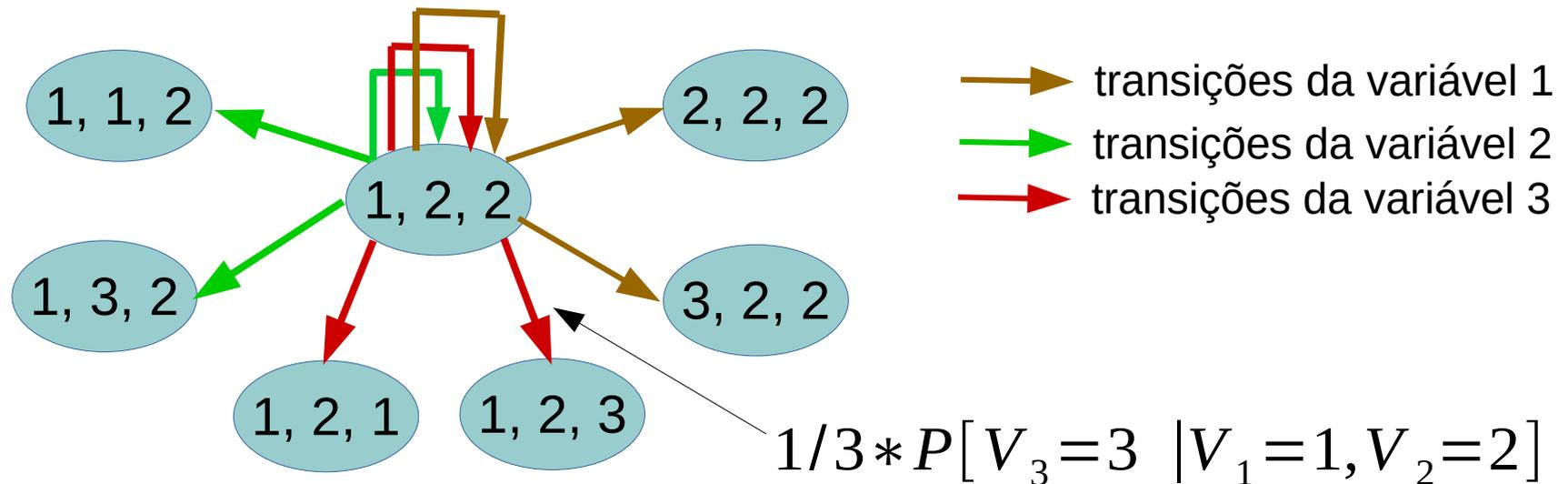
Gibbs Sampling

- Outro algoritmo de Markov Chain Monte Carlo
 - também chamado de *Glauber Dynamics*
- Algoritmo para construir CM com distribuição estacionária π sobre o espaço S (ambos são entrada para o problema)
- Elemento do espaço amostral é um vetor $V = (V_1, \dots, V_n)$
- Cada variável V_i assume valores do conjunto K
 - $|S| \leq |K|^M$: nem todas as combinações precisam estar no espaço amostral
- Baseado na distribuição condicional de uma variável dado o valor de todas as outras
 - precisa ser conhecida a priori ou construída para induzir π

$$P[V_k = a_k \mid V_1 = a_1, \dots, V_n = a_n]$$

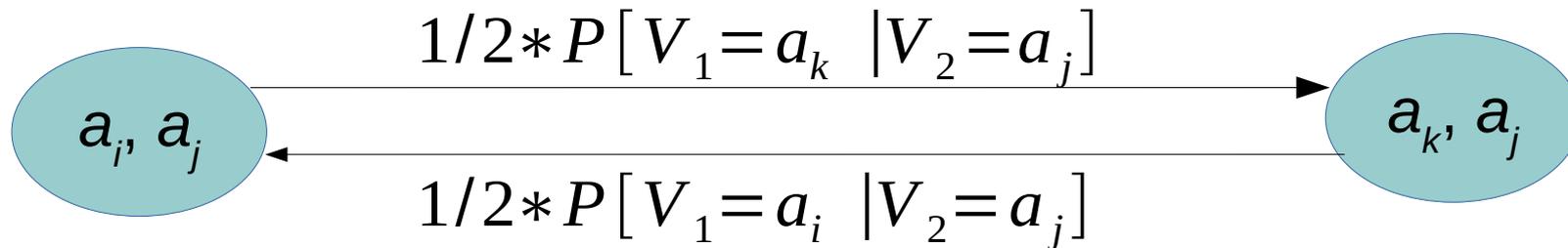
Gibbs Sampling

- CM é construída considerando todos possíveis valores para uma variável, dado o valor atual de todas as outras
- Probabilidade de transição é proporcional a probabilidade condicional
 - dividida pelo número de variáveis, n
- Exemplo: $n = 3$, $|K| = 3$



Gibbs Sampling

- CM construída é aperiódica, reversível e possui distribuição estacionária π
- Considerando duas variáveis (ideia idêntica outros casos)



- Para reversibilidade temos que para toda transição

$$\pi_{a_i, a_j} P_{(a_i, a_j), (a_k, a_j)} = \pi_{a_k, a_j} P_{(a_k, a_j), (a_i, a_j)}$$

$$\pi_{a_i, a_j} \frac{1}{2} P[V_1 = a_k | V_2 = a_j] = \frac{1}{2} \pi_{a_k, a_j} P[V_1 = a_i | V_2 = a_j]$$

$$\pi_{a_i, a_j} P[V_1 = a_k | V_2 = a_j] P[V_2 = a_j] = \pi_{a_k, a_j} P[V_1 = a_i | V_2 = a_j] P[V_2 = a_j]$$

$$\pi_{a_i, a_j} P[V_1 = a_k, V_2 = a_j] = \pi_{a_k, a_j} P[V_1 = a_i, V_2 = a_j]$$

$$\pi_{a_i, a_j} \pi_{a_k, a_j} = \pi_{a_k, a_j} \pi_{a_i, a_j}$$

Algoritmo

- Dado estado atual $X_t = (V_1(t), V_2(t), \dots, V_n(t))$
- Escolher uma das variáveis uniformemente
 - $K \sim \text{Uniforme}(1, n)$
- Escolher valor para V_K dado o vetor $V_1(t), \dots, V_n(t)$
 - usar probabilidade condicional para V_K
 - seja a_k o valor escolhido
- Transicionar para o estado X_{t+1} copiando valores de $V_i(t)$ e atualizando apenas V_K com a_k
- Repetir por τ_ϵ passos para que distribuição de X_t esteja próxima de π

Exemplo

- Duas variáveis (X, Y) com seguinte distribuição conjunta

X

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
|-------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|-------|-------|-------|
| Y 1 | 1/100 | 1/100 | 1/100 | 1/100 | 1/100 | 1/100 | 1/100 | 1/100 | 1/100 |
| 2 | 0 | 3/100 | 3/100 | 3/100 | 3/100 | 3/100 | 3/100 | 3/100 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 5/100 | 5/100 | 5/100 | 5/100 | 5/100 | 0 | 0 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 7/100 | 7/100 | 7/100 | 0 | 0 | 0 |
| 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 24/100 | 0 | 0 | 0 | 0 |

- Distribuição condicional é obtida a partir da conjunta
 - dado Y , X tem distribuição uniforme sobre valores que dependem de Y
- Como gerar amostras de (X, Y) ?

Gibbs Sampling!

Exemplo

- Escolher $Z_0 = (X_0, Y_0)$ de forma arbitrária, ex. $Z_0 = (1,1)$
- Escolher uniformemente entre as variáveis X e Y
- Escolher novo valor para X ou Y utilizando a distribuição condicional (dado o valor atual da outra variável)
 - seja a_t o valor escolhido
- Atualizar $Z_{t+1} = (X_t, a_t)$ ou $Z_{t+1} = (a_t, Y_t)$
- Repetir τ_ϵ vezes e retornar Z_t como sendo a amostra

Hardcore com Gibbs

- Estado como vetor de vértices e suas cores
 - $|V| = n$, $V_i = \{0, 1\}$, para cada vértice i do grafo
- Distribuição π é uniforme
- Probabilidade condicional do vértice i
 - dado a cor de todos os outros vértices, temos apenas um ou dois estados restantes (de probabilidade uniforme)
 - se i não possui vizinhos em preto

$$P[V_i=1 \mid V_1=a_1, \dots, V_n=a_n]=1/2$$

$$P[V_i=0 \mid V_1=a_1, \dots, V_n=a_n]=1/2$$

- se i possui vizinhos em preto

$$P[V_i=0 \mid V_1=a_1, \dots, V_n=a_n]=1$$

Hardcore com Gibbs

- **Algoritmo**

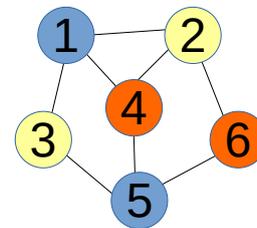
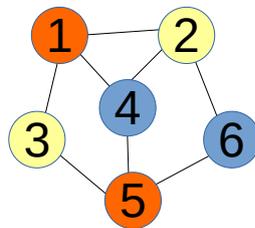
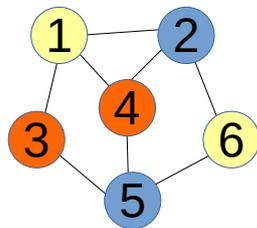
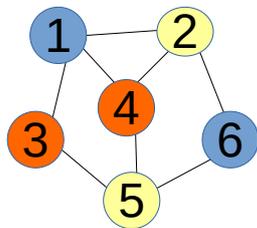
- Inicia em uma configuração válida qualquer
- Escolhe vértice i ao acaso, uniformemente
- Se i não tem nenhum vizinho em preto
 - i é branco com probabilidade $\frac{1}{2}$ ou preto com probabilidade $\frac{1}{2}$
- Atualiza estado (considerando *self-loops*)
- Repete por k passos para gerar caminho amostral

**Mais simples e eficiente que
Metropolis-Hastings**

- não precisa do número de vértices em preto para transicionar

q -Coloração

- Coloração de vértices em grafos
 - colorir vértices tal que vértices adjacentes tenham cores distintas
 - q -coloração: coloração que usa exatamente q cores
 - grafo geralmente tem muitas q -colorações distintas
- Exemplos de 3-colorações (amarelo = 1, azul = 2, laranja = 3)



- **Problema:** gerar uma q -coloração uniformemente para um grafo qualquer
 - conexão com problema de coloração mínima, que é NP-Completo

Gibbs Sampler para q -coloração

- V = vetor de vértices do grafo, K = cores $1, \dots, q$
 - $V = (V_1, V_2, \dots, V_n)$ com as cores de cada vértice
- *Lema*: dado uma coloração válida, a distribuição condicional das cores que um determinado vértice pode assumir é uniforme nas possíveis cores

$$P[V_i = c \mid V_1 = c_1, \dots, V_n = c_n] = \frac{1}{|G(c_1, \dots, c_n)|}$$

Conjunto de cores que i pode assumir dado as outras cores

- *Lema*: dado a distribuição condicional acima, cadeia de Gibbs é simétrica e aperiódica
 - Para dois vetores de coloração V^1 e V^2 que diferem em apenas uma cor, temos que $P_{V^1, V^2} = P_{V^2, V^1}$ (pelo lema)
 - Todos estados possuem self-loop, logo é aperiódica

Gibbs Sampler para q -coloração

- **Algoritmo**

- 1) Dado X_t , uma coloração válida no tempo t

- 2) Escolher vértice v uniformemente

- 3) Escolher $X_{t+1}(v)$ (nova cor para v) uniformemente entre as cores válidas para v em X_t

- 4) Não modificar nenhuma outra cor: $X_{t+1}(w) = X_t(w)$ para todo outro vértice w

- Gerar caminho amostral com comprimento τ_ε , e retornar amostra X_{τ_ε}

Tempo de Mistura

- Considere variação onde vértices são escolhidos sequencialmente (ao invés de aleatoriamente)
 - $V_1, V_2, V_3, \dots, V_n, V_1, \dots$
- Considere que $q > 2d$, onde d é o grau máximo do grafo (q é número de cores), e um $\epsilon > 0$
- Teorema: para CM definida acima, existe uma constante C (que não depende de n ou ϵ), tal que

$$\tau_\epsilon = C n \log(n + \log 1/\epsilon)$$

- CM é *fast mixing*: tempo de mistura é polylog em n (número de vértices) enquanto número de estados é exponencial em n
- Na prática, funciona bem!