Markovovská náhodná pole

Jan Kracík
jan.kracik@vsb.cz

Náhodné pole

Definice
Nechť S je libovolná konečná množina. Náhodný vektor $X = (X_s)_{s \in S}$, kde náhodné veličiny X_s mají hodnoty ve stejných konečných množinách $\mathcal{X}_s$, nazveme *náhodným polem*.

- Náhodné pole je zobecněním náhodného vektoru v tom smyslu, že indexová množina složek je libovolná konečná množina.
- Lze uvažovat i obecnější definice náhodného pole (nekonečná množina hodnot; topologický prostor jako indexová množina, ...).

Značení

- náhodné pole: $X = (X_s)_{s \in S}$
- obor hodnot pole X: $\mathcal{X} = \mathcal{X}_S = \times_{s \in S} \mathcal{X}_s$
- hodnoty X_S, X: x_s, x
- pro $\emptyset \neq A \subset S$: $X_A = (X_s)_{s \in A}$, obdobně pro $x_A, \mathcal{X}_A$

Definice

- Množinu $\mathcal{N} = \{N_s \subset S : s \in S\}$, pro kterou platí:
  - $\forall s \in S : s \notin N_s$,
  - $\forall s, t \in S : s \in N_t \Leftrightarrow t \in N_s$,

  nazveme *systémem okolí v S*.
- Body $s, t \in S$, pro něž platí $s \in N_t$ (a tedy $t \in N_s$) nazveme *sousedy*.
- Množinu $C \subset S$ takovou, že $\forall s, t \in C : s \in N_t$, nazveme *klikou systému $\mathcal{N}$*.

Poznámka
Dvojici $S, \mathcal{N}$ lze ekvivalentně reprezentovat neorientovaným grafem (V, E), kde

- $V = S$,
- $(s, t) \in E \Leftrightarrow s \in N_t$.

C je klikou systému $\mathcal{N}$, právě když C je klikou grafu (V, E).

Systém okolí

Příklad

- systém okolí určený grafem $(S, \emptyset)$
  $\forall s \in S : N_s = \emptyset$; bod nemá žádného souseda
- systém okolí určený grafem $(S, 2^S)$
  $\forall s \in S : N_s = S \backslash \{s\}$; bod sousedí se všemi ostatními
- $$\begin{aligned} S &= \{(i,j) : i \in \{1, \dots, m\}, j \in \{1, \dots, n\}\} \\ E &= \{((i,j),(k,l)) \in S \times S : |i-k| + |j-l| = 1\} \end{aligned}$$

  systém okolí určený grafem (S, E),
  okolí N_s tvořena body vlevo, vpravo, pod a nad s v mřížce,
  kliky maximálně dvouprvkové

Markovovské náhodné pole

Definice
Nechť $X = (X_s)_{s \in S}$ je náhodné pole s rozdělením pravděpodobnosti P a $\mathcal{N}$ je systém okolí v S. Řekneme, že X je *markovovské náhodné pole vzhledem k systému okolí* $\mathcal{N}$, jestliže $\forall x \in \mathcal{X}_S, \forall s \in S$:

$$P(x) > 0,$$

$$P(X_s = x_s | X_{S \setminus \{s\}} = x_{S \setminus \{s\}}) = P(X_s = x_s | X_{N_s} = x_{N_s}).$$

Poznámka

- Označíme-li $R_s = S \backslash (\{s\} \cup N_s)$, pak pro markovovské pole X platí
$$X_s \perp\!\!\!\perp X_{R_s} | X_{N_s},$$
tj. X_s a X_{R_s} jsou podmíněně nezávislé za podmínky X_{N_s}.
- Každé náhodné pole X, pro které platí $\forall x \in \mathcal{S} : P(X = x)$ je markovovské pole vzhledem k nějakému systému okolí (např. $N_s = S \backslash \{s\}$).
- Zajímavá jsou pole s malými neprázdnými N_s.

Příklad
Uvažujme markovovský řetězec $X_1, X_2, \ldots, X_T$,
$\forall x \in \mathcal{X}_S, P(X = x) > 0$.

Označme $S = \{1, \ldots, T\}$ a použijeme zavedené značení pro náhodná pole.
Pro $t \in \{2, \ldots, T-1\}$ platí

$$P\left(X_t = x_t | X_{S \setminus \{t\}} = x_{S \setminus \{t\}}\right)$$

$$= \frac{P(X_t = x_t | X_{t-1} = x_{t-1}) P(X_{t+1} = x_{t+1} | X_t = x_t)}{\sum_{\tilde{x}_t \in \mathcal{X}} P(X_t = \tilde{x}_t | X_{t-1} = x_{t-1}) P(X_{t+1} = x_{t+1} | X_t = \tilde{x}_t)}$$

Markovovské náhodné pole

$$P\left(X_1 = x_1 | X_{S\setminus\{1\}} = x_{S\setminus\{1\}}\right)$$

$$= \frac{P(X_2 = x_2 | X_1 = x_1) P(X_1 = x_1)}{\sum_{\tilde{x}_1 \in \mathcal{X}} P(X_2 = x_2 | X_1 = \tilde{x}_1) P(X_1 = \tilde{x}_1)}$$

$$P\left(X_T = x_T | X_{S\setminus\{T\}} = x_{S\setminus\{T\}}\right) = P\left(X_T = x_T | X_{T-1} = x_{T-1}\right)$$

Markovovský řetězec $X_1, \ldots X_T$ je proto zároveň markovovským náhodným polem se systémem okolí

$$\begin{aligned} N_1 &= \{2\} \\ N_t &= \{t-1, t+1\} \text{ pro } t \in \{2, \ldots, T-1\} \\ N_T &= \{T-1\} \end{aligned}$$

Gibbsovo rozdělení

Definice

Nechť X je náhodné pole s rozdělením pravděpodobnosti P, které lze vyjádřit ve tvaru

$$P(X = x) = \frac{\exp(-H(x))}{\sum_{\tilde{x} \in \mathcal{X}} \exp(-H(\tilde{x}))}$$

pro nějakou funkci $H : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$. Rozdělení P nazveme *Gibbsovým rozdělením s energetickou funkcí H* a pole X nazveme *Gibbsovým polem*.

Poznámky

- Gibbsovo rozdělení pochází ze statistické mechaniky.
- Energie $H(x)$ vyjadřuje míru interakce mezi složkami pole (částice, pixely, body měření, ...).
- Zpravidla je nějak určena energie $H(x)$, ta indukuje rozdělení P.
- Každé náhodné pole s kladným rozdělením lze chápat jako Gibbsovo pole s $H(x) = -\ln(P(X = x)) + Z$. Energie je jednoznačně určena rozdělením až na konstantu.
- Zajímavá jsou Gibbsova pole s energií, kterou lze vyjádřit ve tvaru součtu lokální příspěvků.

Definice

Pro libovolné rozdělení P náhodného pole X definujeme *entropii* $\mathcal{H}(P)$ rozdělení P vztahem

$$\mathcal{H}(P) = -\sum_{x \in \mathcal{X}_S} P(X = x) \ln P(X = x).$$

Poznámka

Entropie vyjadřuje míru neurčitosti náhodného pole (veličiny) s daným rozdělením.

Tvrzení
Nechť X je Gibbsovo pole s rozdělením P indukované energií $H(x)$. Pak pro libovolné rozdělení Q náhodného pole X takové, že $E_Q(H) = E_P(H)$ platí

$$\mathcal{H}(Q) \leq \mathcal{H}(P),$$

přičemž rovnost nastává právě když $Q = P$.

(E_Q značí střední hodnotu vzhledem k Q, $\mathcal{H}$ označuje entropii.)

Mezi všemi rozděleními s danou střední hodnotou energie má Gibbsovo rozdělení největší entropii.

Gibbsovo rozdělení

Důkaz

Označme $Z = \sum_{x \in \mathcal{X}} \exp(-H(x))$.

$$
\begin{aligned}
&E_Q(H) - \mathcal{H}(Q) + \ln Z \\
&\quad = \sum_{x \in \mathcal{X}} Q(x) \left(H(x) + \ln(Q(x)) + \ln \sum_{\tilde{x} \in \mathcal{X}} \exp(-H(\tilde{x})) \right) \\
&\quad = \sum_{x \in \mathcal{X}} Q(x) \ln \left(Q(x) \frac{\sum_{\tilde{x} \in \mathcal{X}} \exp(-H(\tilde{x}))}{\exp(-H(x))} \right) \\
&\quad = \sum_{x \in \mathcal{X}} Q(x) \ln \frac{Q(x)}{P(x)} \\
&\quad = D(Q||P) \geq 0,
\end{aligned}
$$

rovnost nastává, právě když $Q = P$.

Označíme-li $h = E_P(H(x))$, lze poslední nerovnost vyjádřit jako

$$h + lnZ \geq \mathcal{H}(Q),$$

kde rovnost nastává, právě když $Q = P$.

$\square$

Potenciál

Definice
Nechť $X = (X_s)_{s\in S}$ je náhodné pole s hodnotami v $\mathcal{X}$. Množina zobrazení $U = \{U_A : \mathcal{X} \to \mathbb{R} | A \subset S\}$ taková, že

$\forall x \in \mathcal{X} : U_\emptyset(x) = 0,$
$\forall A \in 2^S, \forall x, y \in \mathcal{X} : U_A(x) = U_A(y) \Leftrightarrow x_A = y_A$

se nazývá *potenciál náhodného pole* $\mathcal{X}$.

Potenciálem U je definována energie

$$H_U(x) = \sum_{A\subset S} U_A(x).$$

Potenciál

Definice
Nechť $\mathcal{N}$ je systém okolí na S a $U = \{U_A : A \subset S\}$ je potenciál takový, že $U_A = 0 \Leftrightarrow A$ není klika $\mathcal{N}$.
Pak potenciál U nazýváme *lokalizovaný potenciál okolí* $\mathcal{N}$

Poznámka
Zajímavá jsou Gibbsova rozdělení indukovaná energií, kterou lze vyjádřit pomocí lokalizovaného potenciálu systému malých okolí. Takovéto rozdělení zachycuje skutečnost, že "blízké" veličiny spolu interagují.

Příklady: Částice, pixely, křižovatky, místa výskytu nemoci, kuličky (aproximace) $\ldots$.

Gibbsovo rozdělení indukované potenciálem

Definice
Nechť U je potenciál náhodného pole X. Gibbsovo rozdělení, které lze vyjádřit ve tvaru

$$P(X = x) = \frac{\exp\left(-\sum_{A \subset S} U_A(x)\right)}{\sum_{\tilde{x} \in \mathcal{X}} \exp\left(-\sum_{A \subset S} U_A(\tilde{x})\right)},$$

se nazývá *Gibbsovo rozdělení indukované potenciálem U*.

Gibbsovo rozdělení indukované potenciálem

Poznámka
Je-li U lokalizovaný potenciál systému okolí $\mathcal{N}$, pak v definici stačí sčítat přes kliky $\mathcal{N}$.

Označíme-li $\mathcal{C}$ množinu klik $\mathcal{N}$, pak rozdělení P lze vyjádřit ve tvaru

$$P(X = x) = \prod_{C \in \mathcal{C}} \Psi_C(x_C),$$

kde $\Psi_C(x_C)$ jsou nezáporné funkce na $\mathcal{X}_C$.

Příklad
Konečná mřížka:

$$\begin{aligned} S &= \{(i,j) : i \in \{1,\dots,m\}, j \in \{1,\dots,n\}\} \\ E &= \{((i,j),(k,l)) \in S \times S : |i-k| + |j-l| = 1\} \end{aligned}$$

Gibbsovo rozdělení náhodného pole $X = (X_s)_{s\in S}$ s $\mathcal{X}_s = \{-1, 1\}$ indukované energií ve tvaru

$$H(x) = \sum_{s\in S} \sum_{t\in N_s} \vartheta_{st} x_s x_t + \sum_{s\in S} \vartheta_s x_s,$$

kde $\vartheta_{st}, \vartheta_s \in \mathbb{R}$, se nazývá *binární autologistický model*.

Příklad - pokračování

- Kliky velikosti 0, 1, 2.
- $\vartheta_{st} < 0$ zvyšuje pravděpodobnost výskytu stejných hodnot na sousedních pozicích *s* a *t*.
- Homogenní pole: $\vartheta_{st} = \vartheta_v$ pro vertikálně sousedící *s* a *t*, $\vartheta_{st} = \vartheta_h$ pro horizontálně sousedící body, $\vartheta_s = \vartheta_0$. $(\vartheta_v, \vartheta_h, \vartheta_0 \in \mathbb{R})$
- Izotropní pole: $\vartheta_s = \vartheta_h$.

Značení

Nechť $x = (x_s)_{s \in S}, \tilde{x} = (\tilde{x}_s)_{s \in S}$ jsou hodnoty náhodného pole X. Nechť dále $A, B \subset S, A \cap B = \emptyset$.

$$x_A \circ \tilde{x}_B$$

značí hodnotu marginálního náhodného pole $X_{A \cup B}$, pro niž platí

$$x_A \circ \tilde{x}_B = \bar{x}_{A \cup B},$$

kde

$$\begin{aligned} \bar{x}_s &= x_s \text{ pro } s \in A \\ \bar{x}_s &= \tilde{x}_s \text{ pro } s \in B. \end{aligned}$$

Tvrzení

Nechť X je náhodné pole s potenciálem U, tj.

$$P(X = x) = \frac{\exp\left(-\sum_{B\subset S} U_B(x)\right)}{\sum_{\tilde{x}\in\mathcal{X}} \exp\left(-\sum_{B\subset S} U_B(\tilde{x})\right)}.$$

Pro lokální charakteristiky pak platí

$$\begin{aligned} &P(X_A = x_A | X_{S\setminus A} = x_{S\setminus A}) \\ &\qquad = \frac{\exp\left(-\sum_{B\subset S: B\cap A\neq\emptyset} U_B(x)\right)}{\sum_{\tilde{x}_A\in\mathcal{X}_A} \exp\left(-\sum_{B\subset S: B\cap A\neq\emptyset} U_B(\tilde{x}_A \circ x_{S\setminus A})\right)}. \end{aligned}$$

Tvrzení

Nechť U je lokalizovaný potenciál Gibbsova náhodného pole X vzhledem k systému okolí $\mathcal{N}$. Pak $\forall A \subset S$:

$$P(X_A = x_A | X_{S\setminus A} = x_{S\setminus A}) \\ = \frac{\exp\left(-\sum_{C\subset\mathcal{C}:C\cap A\neq\emptyset} U_C(x)\right)}{\sum_{\tilde{x}_A\in\mathcal{X}_A}\exp\left(-\sum_{C\subset\mathcal{C}:C\cap A\neq\emptyset} U_B(\tilde{x}_A\circ x_{S\setminus A})\right)},$$

$$P(X_A = x_A | X_{S\setminus A} = x_{S\setminus A}) = P(X_A = x_A | X_{N_A} = x_{N_A}).$$

Poznámka
Označme $R_A = S \backslash (A \cup N_A)$. Druhé tvrzení věty říká, že

$$X_A \perp\!\!\!\perp X_{R_A} | X_{N_A}$$

Důsledek
Pro $A = \{s\}$ dostaneme

$$X_s \perp\!\!\!\perp X_{R_s} | X_{N_s},$$

tudíž Gibbsovo pole indukované lokalizovaným potenciálem vzhledem k systému okolí $\mathcal{N}$ je Markovovské pole vzhledem systému okolí $\mathcal{N}$.

Tvrzení

Hammersley Clifford Theorem

Nechť $\mathcal{N}$ je systém okolí na S. Pak platí:

- Náhodné pole X je Markovovské vzhledem k okolí $\mathcal{N}$, právě tehdy, je-li Gibbsovým polem indukovaným potenciálem lokalizovaným vzhledem k $\mathcal{N}$.
- Pro Markovovské pole X vzhledem k systému okolí $\mathcal{N}$ platí

$$P(X_A = x_a | X_{S \setminus A} = x_{S \setminus A}) = P(X_A = x_A | X_{N_A} = x_{N_A})$$

  pro každou $A \subset S$.