T-79.300 Tietojenkäsittelyteorian lisensiaattikurssi

Satunnaismaastot

Satu Virtanen, satu@cs.hut.fi

25. helmikuuta, 2002

Satunnaismaasto

Määritelmä 3.5: Olkoon X äärellinen joukko ja W maastojen $f : X \to \mathbb{R}$ predikaatti. **Satunnainen W-maasto** $\mathcal{F}$ yli X:n on satunnaisavaruus $\Omega = (\{f : X \to \mathbb{R} \mid f\text{:llä on ominaisuus } W\}, \mathcal{A}, \mu)$.

Rajoitutaan tarkasteluissa perheeseen $\forall x \in X\ :\ \mathrm{eval}_x : \Omega \to \mathbb{R}$ jossa $\mathrm{eval}_x(f) = f(x)$ ja joille määritellään

$$\mathbf{C}_{xy} = \mathrm{Cov}[\mathrm{eval}_x, \mathrm{eval}_y] = \mathbb{E}[f(x)f(y)] - \mathbb{E}[f(x)]\mathbb{E}[f(y)].$$

- Ω-**satunnaismuuttuja** $\xi : \Omega \to \mathbb{R}$
- **odotusarvo** $\mathbb{E}[\xi]$; $\mathbb{E}[\mathrm{eval}_x] \triangleq \mathbb{E}[f(x)]$ eli f:n odotusarvo x:ssä
- **varianssi** $\mathbb{V}[\xi]$ ja **kovarianssimatriisi** $\mathbf{C}$ ($\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$, $u^{\mathbf{T}}\mathbf{C}\,u \geq 0$)

Merkintöjä

- maasto $\triangleq$ **konfiguraatiojoukko** X, **naapuruusmitta** χ ja **kelpoisuusfunktio** $f : X \to \mathbb{R}$
- (graafin) **naapurusmatriisi** $\mathbf{A}$, jossa
  $$\mathbf{A}_{xy} = \begin{cases} 1, & \text{jos } x \in N(y) \text{ (eli kuuluu } y\text{:n naapurustoon),} \\ 0, & \text{muulloin;} \end{cases}$$
  suuntaamattomassa tapauksessa symmetrinen
- graafin **astelukumatriisi** $\mathbf{D}$, jossa $\mathbf{D}_{xx} = |N(x)|$ (diagonaalinen)
- graafin diskreetti **Laplace-operaattori** $\Delta = \mathbf{D} - \mathbf{A}$;
  k-säännölliselle graafille $k\mathbf{I} - \mathbf{A}$; ominaisarvona 0, vastaava vektori $(1, 1, \ldots)$

Fourier-kehitelmä

- kelpoisuusfunktion **Fourier-kehitelmä** $f(x) = \sum_k a_k \varphi_k(x)$,
  jossa $\{\varphi_k\}$ on Δ:n ortonormaalien ominaisvektorien kanta (kukin φ_k voidaan tulkita X:n kelpoisuusfunktiona)
- voidaan hajottaa yli Δ:n erillisten ominaisarvojen:
  $$f(x) = \sum_p \beta_p \tilde{\varphi}_p(x)$$
- $\tilde{\varphi}_p(x)$:t ovat ns. **alkeismaastot** ja arvot $|\beta_p|^2 = \sum |a_k|^2$ muodostavat ns. **amplitudispektrin**

Tietyn Δ:n ominaisavaruuden (Λ vastaava ominaisarvo) kontribuutiota maaston varianssiin voidaan arvioida **amplitudispektrillä**

$$B(\Lambda) = \sum_{k:\Delta\varphi_k = \Lambda\varphi_k} |a_k|^2.$$

Maastojen f ja f_Λ varianssien suhde on **Λ:n amplitudi** B
(pikemminkin Λ:n ominaisavaruuden amplitudi)

$$B_n(\Lambda) = \frac{\langle \tilde{f}_\Lambda, \tilde{f}_\Lambda \rangle}{\langle \tilde{f}, \tilde{f} \rangle} = \frac{\sum_{k:\Delta\varphi_k = \Lambda\varphi_k} |a_k|^2}{\sum_{k:\Delta\varphi_k \neq 0} |a_k|^2},$$

(normalisoitu muoto; jakajana maaston varianssi)

$$\tilde{f} = f(x) - \bar{f},\ B(0) = 0,\ B(\Lambda) \geq 0,\ \sum_\Lambda B(\Lambda) = 1$$

$\{f : X \to \mathbb{R}\}$ perusavaruudeksi Ω:lle $\Longrightarrow$ $\mathbf{C}$:n ortogonaalit ominaisvektorit $\{\psi_k\}$ muodostavat sille kannan; voidaan kirjoittaa seuraava sarjakehitelmä (ns. **pääkomponenttihajotelma** eli Karhunen-Loève -sarja) kun $x \in X$:

$$f(x) \doteq \sum_k b_k \psi_k(x)$$

Lause 3.6: Olkoon σ_k^2 $\mathbf{C}$:n se ominaisarvo, joka vastaa ominaisvektoria $\{\psi_k\}$. Tällöin Karhunen-Loève -sarjan kertoimet b_i ovat keskenään korreloimattomia satunnaismuuttujia, joille pätee $\mathrm{Cov}[b_k, b_j] = \sigma_k^2 \delta_{kj}$, kun $1 \leq k, l \leq |X|$.

Siis: $\sigma_k^2 = \mathbb{V}[b_k]$ ja $\sigma^2 = \mathrm{Tr}\,\mathbf{C} = \sum_k \sigma_k^2$

Entropia

Määritelmä 3.14(a): Satunnaismaastolle määritellään **entropia** seuraavasti:

$$S = -\int \ln \mu(f)\, d\mu(f)$$

Lause 3.14: Olkoon $\mathcal{F}$ satunnaismaasto, jolle $\mathbf{C}$ on positiivisesti definiitti ja $\mathbf{C}$:n ominaisarvoille pätee $\sigma_k^2 > 0$. Tällöin $\mathcal{F}$:n entropialle pätee

$$S \leq S_\mathbf{C} = \frac{1}{2}|X| \ln \frac{2\pi e}{|X|} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_k \ln \frac{\Lambda_k |X|}{\sigma^2}}_{\Delta S_\mathbf{C}}$$

Tässä $S_\mathbf{C}$ on normaalijakauman entropia kovarianssimatriisilla $\mathbf{C}$.

$S_\mathbf{C}$ saavuttaa maksimiarvonsa tietylle varianssille σ^2 jos ja vain jos $\Lambda_k = \sigma^2/|X|$, jolloin lauseen 3.14 summatermin arvoksi saadaan $\ln 1 = 0$. Tämän perusteella satunnaismaaston entropian määrittely on järkevää antaa komponenteittain: $S = S_{\sigma^2} + \Delta S_\mathbf{C} + \Delta S_{ng}$

Komponentit ovat:

(1) $\Delta S_{ng} = S - S_\mathbf{C}$ eli häviö jonka aiheuttaa normaalijakaumasta poikkeaminen,

(2) S_{σ^2} suurin mahdollinen entropia tietylle varianssille σ^2, ja

(3) $\Delta S_\mathbf{C}$ (joka vastaa summakaavaa lauseessa 3.14) määrää $\mathbf{C}$:n spektristä aiheutuvan häviön.

Jos graafin kaaret korreloivat, ei $\mathbf{C}$ ole diagonaalimatriisi ja siksi $\Delta S_\mathbf{C} < 0$. Toisin sanottuna: $\Delta S_\mathbf{C} = 0$ jos ja vain jos vastaava normaalijakautunut satunnaismaasto on i.i.d.

Pseudo-isotropia

Määritelmä 3.7: Satunnaismaasto $\mathcal{F}$ on **pseudo-isotrooppinen** jos $\exists$ vakiot a_0 (Fourier-sarjan ensimmäinen kerroin), v ja w s.e. $\forall x \in X$

(i) $\mathbb{E}[f(x)] = a_0$

(ii) $\mathbb{V}[f(x)] = v^2$

(iii) $\frac{1}{|X|} \sum_{y \in X} \mathbf{C}_{xy} = w$ (ns. $\mathcal{F}$:n keskimääräinen korrelaatio)

Uniformi satunnaismaasto

Määritelmä 3.9(a): Additiivinen satunnaismaasto on **uniformi** jos ja vain jos

(i) satunnaismuuttujat c_i ovat riippumattomia ja noudattavat samaa jakaumaa (i.i.d. = independent and identically distributed)

(ii) $\exists$ vakiot $a, b \in \mathbb{R}$ s.e. $\forall i$ $\sum_{x \in X} \vartheta_i(x) = |X|a$ ja $\sum_{x \in X} \vartheta_i^2(x) = |X|b$

Määritelmä 3.9(b): Uniformi additiivinen satunnaismaasto on **tiukasti uniformi** jos $\exists$ vakiot $d, e \in \mathbb{R}$ s.e. $\forall x \in X$

$$\sum_i \vartheta_i(x) = d \text{ ja } \sum_i \vartheta_i^2(x) = e.$$

Additiivinen satunnaismaasto

Määritelmä (arl): Olkoon M äärellinen indeksijoukko, c_j riippumaton reaaliarvoinen satunnaismuuttuja ($j \in M$) sopivan todennäköisyysavaruuden $\Omega_j = (\mathbb{R}, \mathcal{A}_j, \mu_j)$ yli. Olkoon $\Theta = \{\vartheta_j : X \to \mathbb{R} \mid j \in M\}$ funktioperhe. **Additiivinen satunnaismaasto** on todennäköisyysavaruus $(\Omega_X, \oplus_j \mathcal{A}_j, \oplus_j \mu_j)$, jossa

$$\Omega_X = \left\{ f : X \to \mathbb{R} \mid f(x) = \sum_{j=1}^{M} c_j \vartheta_j(x) \right\}.$$

Esimerkki: Ising spin-maastot

n spiniä $x_i = \pm 1$, vuorovaikutusjoukot $I \in \mathcal{I}$ ($\neq 0$); vuorovaikutusenergiat muotoa $c_I \prod_{i \in I} x_i$ (c_i:t i.i.d. ja $\mathbb{E}[c_i] = 0$)

$$\vartheta_I(x) = \prod_{i \in I} x_i \wedge \vartheta_I(x) = \pm 1 \Longrightarrow \forall x : \vartheta_I^2(x) = 1 \Longrightarrow b = 1 \ \forall I,$$

$$\sum_{x \in X} \underbrace{\prod_{j \in I} x_j}_{\vartheta_I(x)} = \underbrace{\prod_{i \in I} \Bigg(\sum_{x_i = \pm 1} x_i \Bigg)}_{=0} \prod_{i \notin I} \Bigg(\sum_{x_i = \pm 1} 1 \Bigg) = 0 \Longrightarrow a = 0 \ \forall I \neq \emptyset.$$

$\Longrightarrow$ tällaiset spinlasimallit ovat uniformeja; yleisesti eivät ole tiukasti uniformeja: vakiota d ei löydy (esim. kahden spinin ja yhden piirteen tapaus), joskin e löytyy.

Esimerkki: NK-maastot

- n binääristä lokusta ℓ_i
- konfiguraationa n-bittinen vektori, $|X| = 2^n$
- lokuksen ℓ_i $(K+1)$-alkioinen riippuvuusjoukko D_i, $\ell_i \in D_i$
- riippuvuusjoukon mahdollisten tilojen esitysvektorit $s \in S_i$ ($|S_i| = 2^{(K+1)}$)

$$\vartheta_{(\ell_i,s)}(x) = \begin{cases} 1/n, & \text{jos } s \text{ ja } x \text{ yhteensopivat } D_{\ell_i}\text{:n lokuksille,} \\ 0, & \text{jos } s \text{ ja } x \text{ ristiriitaiset jollekin } D_{\ell_i}\text{:n lokukselle.} \end{cases}$$

Kullekin parille (ℓ_i, s) satunnainen reaaliluku c (i.i.d.):

$$f(x) = \sum_{\substack{1\le i\le n,\\ 1\le j\le |S_i|}} c_{(i,j)} \cdot \vartheta_{\ell_i,s_j}(x)$$

Esimerkki: GBP-maastot

- X kaikkien järjestettyjen $[n]$:n puolitusten joukko
- $x \in X$ jos $|A| = |B|$, $|X| = \binom{n}{n/2}$
- reaaliarvoiset satunnaismuuttujat d (i.i.d.), joilla $d_{ji} = d_{ij}$ kun $i \neq j$

$$\forall i \neq j;\ \ \vartheta_{ij}(x) = \begin{cases} 1, & \text{jos solmut } i \text{ ja } j \text{ eri puolilla jakoa,} \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases}$$

Arl: $f(x) = \sum_{i\neq j} d_{ij}\vartheta_{ij}(x)$

Esimerkki: NK-maastot (jatkuu)

$$\begin{aligned} \sum_{x\in X} \vartheta_{\ell_i,s}(x) &= \sum_{x\in X} \vartheta_{\ell_i,s}(x) \\ &= \frac{1}{n}\sum_{x\in X} \vartheta'_{\ell_i,s}(x) \\ &= \frac{1}{n}\cdot 2^{n-(K+1)} = \text{ vakio.} \end{aligned}$$

$$\vartheta^2_{\ell_i,s}(x) = (1/n)\cdot \vartheta_{\ell_i,s}(x) \Longrightarrow \exists b$$

$$\sum_{\mathbf{i}} \underbrace{\sum_{s\in S_i} \vartheta_{\ell_i,s}(x)}_{\mathbf{1/n}} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{n}}\sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{n}} \mathbf{1} = \mathbf{1} \Longrightarrow \mathbf{d} = \mathbf{e} = \mathbf{1}$$

Esimerkki: GBP-maastot (jatkuu)

Onko tämä uniformi eli päteekö $\sum_x \vartheta_{ij}(x) = |X|a$ ja $\sum_x \vartheta^2_{ij}(x) = |X|b$?

- $\vartheta_{ij}(x)$ saa arvon 1 vain kun i ja j ovat eri puolilla jakoa
- jos i ja j on kiinnitetty eri puolille, loput solmut voidaan jakaa $\binom{n-2}{(n-2)/2}$ tavalla kelvolliseksi puolitukseksi
- lasketaan auki ja ryhmitellään muotoon $|X|a$:

$$\begin{aligned} \binom{n-2}{(n-2)/2} &= \frac{(n-2)!}{((n-2)/2)!^2} = \frac{1}{n\cdot(n-1)}\cdot\frac{n!}{((n-2)/2)!^2} \\ &= \frac{1}{n\cdot(n-1)}\cdot\frac{n!}{(n/2-1)!^2} = \frac{(n/2)^2}{n\cdot(n-1)}\cdot\frac{n!}{(n/2)!^2} \\ &= \frac{n^2}{4}\cdot\frac{1}{n\cdot(n-1)} = \frac{1}{4}\cdot\frac{n}{n-1}\binom{n}{n/2}. \end{aligned}$$

Esimerkki: GBP-maastot (jatkuu yhä)

Saadaan siis $\sum_x \vartheta_{ij}(x) = \overbrace{\frac{1}{4}\cdot\frac{n}{(n-1)}}^{\text{vakio } a}\overbrace{\binom{n}{n/2}}^{|X|}.$

Kun lisäksi $\vartheta_{ij}(x) = \vartheta_{ij}^2(x)$ eli $\exists b$ s.e. $\sum_x \vartheta_{ij}^2(x) = |X|b$, on GBP-maasto selvästi uniformi.

Se on myös tiukasti uniformi:

$$\sum_{i\neq j}\vartheta_{ij}(x) = \underbrace{\sum_{i\in A}\sum_{j\in B}1}_{(n/2)^2} + \underbrace{\sum_{i\in B}\sum_{j\in A}1}_{(n/2)^2} = \frac{n^2}{2}$$

Lause 3.10: Uniformi satunnaismaasto $\mathcal{F}$ on pseudo-isotrooppinen jos ja vain jos

(i) joko $\mathcal{F}$ on tiukasti uniformi tai

(ii) kaikki seuraavista pätevät:

- $\sum_{x\in X}\vartheta_i(x) = 0$,
- $\mathbb{E}[c_i] = 0$ ja
- $\exists$ vakio $e \in \mathbb{R}$ s.e. $\forall x \in X : \sum_i \vartheta_i^2(x) = e$

Esimerkki: TSP-maastot

n kaupunkia, satunnaiset etäisyydet $\Rightarrow X \triangleq$ mahdolliset reitit, reitin x pituus $\sum_i d_{x(i),x(i-1)}$; kirjoitetaan tämä kustannusfunktiona

$$f(x) = \sum_{\substack{k,l\\k\neq l}} d_{kl}\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\delta_{k,x(i)}\delta_{l,x(i-1)}}_{\vartheta_{kl}(x)}.$$

$$\sum_{x\in S_n}\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\delta_{x(i),k}\delta_{x(i-1),l}}_{\vartheta_{kl}(x)} = \sum_{x\in S_n}\delta_{x(x^{-1}(k)-1),l} = |S_n|/n = (n-1)!$$

Tämäkin on tiukasti uniformi.

Isotropia

Määritelmä 3.11: Satunnaismaasto on **isotrooppinen** $X \times X$:n ositukselle $\mathcal{R}$, jos $\exists$ vakiot a_0 ja v sekä funktio $c : \mathcal{R} \to \mathbb{R}$ s.e.

(i) $\forall x \in X : \mathbb{E}[f(x)] = a_0$ ja $\mathbb{V}[f(x)] = v^2$ (vrt. pseudo-isotropia)

(ii) $\forall (x,y) \in \mu : \mathbf{C}_{xy} = c(\mu)$ eli kovarianssimatriisin alkioilla on vakioarvo luokassa $\mu \in \mathcal{R}$.

Määritelmä 3.13(a): Olkoon $\mathbf{A}$ suuntaamattoman graafin naapurusmatriisi. Satunnaismaasto on **$*$-isotrooppinen** $\mathbf{A}$:n suhteen jos $\mathbb{E}[f(x)] = a_0$ ja $\mathbf{C} \in \langle\mathbf{A}\rangle$

Osituksista

Määritelmä 3.12(a): $X \times X$:n ositus $\mathcal{R}$ on **homogeeninen** jos diagonaali $\{(x,x) \mid x \in X\}$ on sen luokka.

Määritelmä 3.12(b): $X \times X$:n ositus $\mathcal{R}$ on **säännöllinen luokkien asteen suhteen** jos annetulle luokalle $\chi \in \mathcal{R}$ joukon $|\{y \in X \mid (x,y) \in \chi\}|$ ei riipu alkion $x \in X$ valinnasta.

Lause 3.12(i): Jos $\mathcal{F}$ on isotrooppinen homogeenisen ja luokkien asteen suhteen säännöllisen $X \times X$:n osituksen suhteen, on se myös pseudo-isotrooppinen.

Lause 3.13: Additiivinen satunnaismaasto on $*$-isotrooppinen jos ja vain jos sen Fourier-kertoimille a_i (**A**:n ominaisarvojen ortonormaalikannan suhteen) pätee:

(i) $\mathbb{E}[a_k] = 0$ kun $k \neq 0$

(ii) $\mathrm{Cov}[a_k, a_j] = \delta_{kj} \mathbb{V}[a_k]$ (eli kertoimet eivät korreloi keskenään)

(iii) $\mathbb{V}[a_k] = \mathbb{V}[a_j]$ jos φ_j ja φ_k ovat samassa ominaisavaruudessa

(eli samaan **A**:n ominaisavaruuteen kuuluvilla kertoimilla on sama keskiarvo ja varianssi)

$*$-isotrooppisten satunnaismaastojen Fourier- ja Karhunen-Loève-esitykset yhtyvät.