

Metody inwersji Bayesowskiej

-L7-

IGF PAN, 21.IV.2005

Podójście optymalizacyjne i probabilistyczne podobieństwa i róźnice (C)

$$\|G(\mathbf{m}) - \mathbf{d}^{obs}\| + \lambda \|\mathbf{m} - \mathbf{m}^{apr}\| = \min$$

$$\mathbf{d}^{obs} = \mathbf{d}^{true} + \epsilon_{obs}$$

$$\mathbf{m}^{apr} = \mathbf{m}^{true} + \epsilon_{apr}$$

$$\mathbf{d}^{th} = G(\mathbf{m}) + \epsilon_{th}$$

$$\|G(\mathbf{m}) - \mathbf{d}^{true} + \epsilon_{obs} + \epsilon_{th}\| + \lambda \|\mathbf{m} - \mathbf{m}^{apr} + \epsilon_{apr}\| = \min$$

Podejście optymalizacyjne i probabilistyczne podobieństwa i różnice (D)

Rozwiązania dla różnych realizacji ϵ_{obs} , ϵ_{th} ϵ_{apr} :

$$\mathbf{m}^{(1)}, \mathbf{m}^{(2)}, \dots \mathbf{m}^{(K)}$$

Pozwala utworzyć histogram rozwiązań:

$$h(\mathbf{m}) = \frac{N^\alpha(\mathbf{m})}{N^K}$$

który jest przybliżeniem $\sigma(\mathbf{m})$

Technika nieefektywna w przypadkach wielowymiarowych!!!

Model najbardziej prawdopodobny - optymalizacja

❖ szukanie modelu najbardziej prawdopodobnego

$$\mathbf{m}^{ml} : \quad \sigma(\mathbf{m}^{ml}) = \max$$

★ metody gradientowe

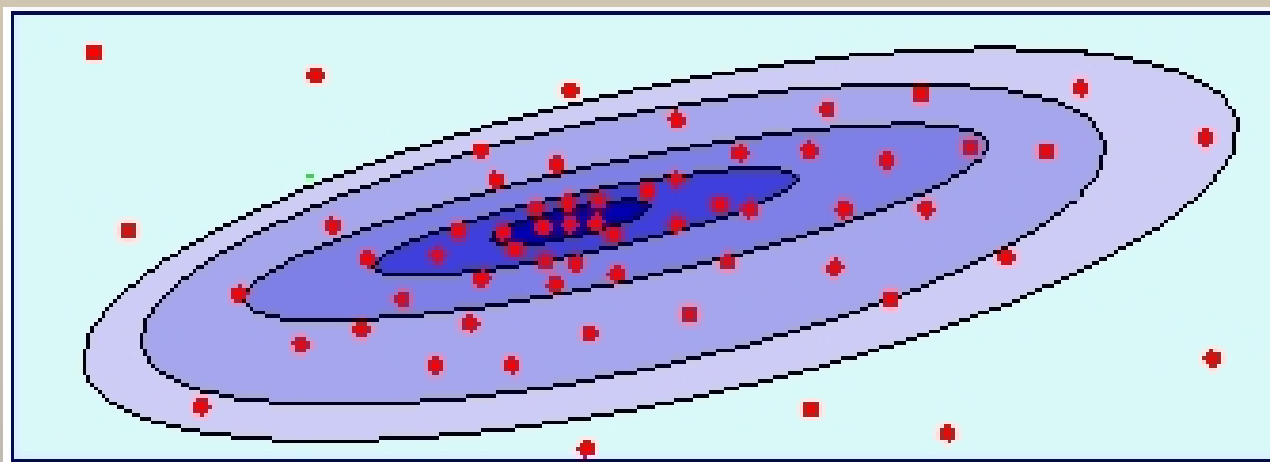
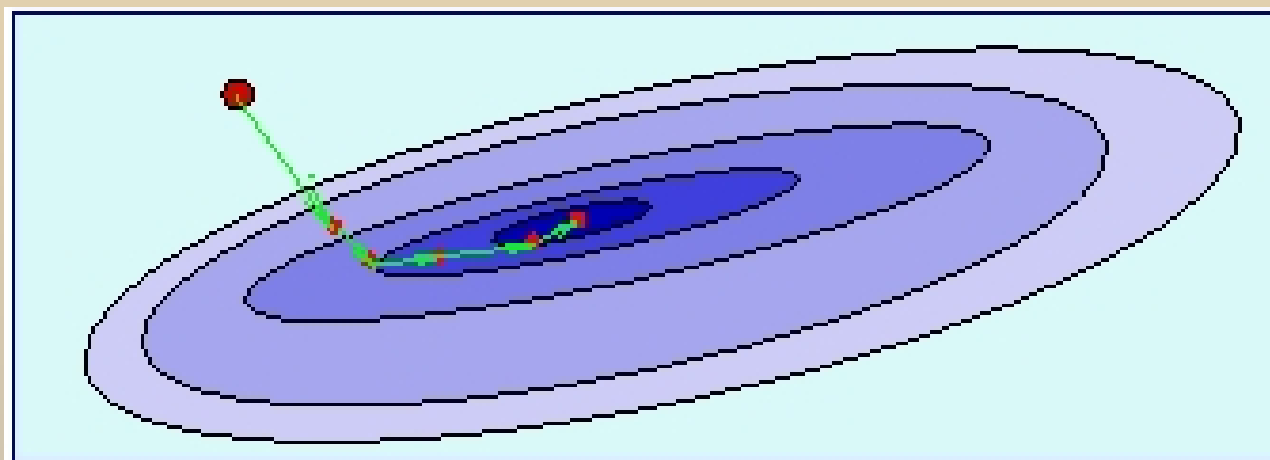
★ metody Monte Carlo

➡ Symulowane wyżarzanie

➡ Algorytm Genetyczny

technika równoważna podejściu optymalizacyjnemu

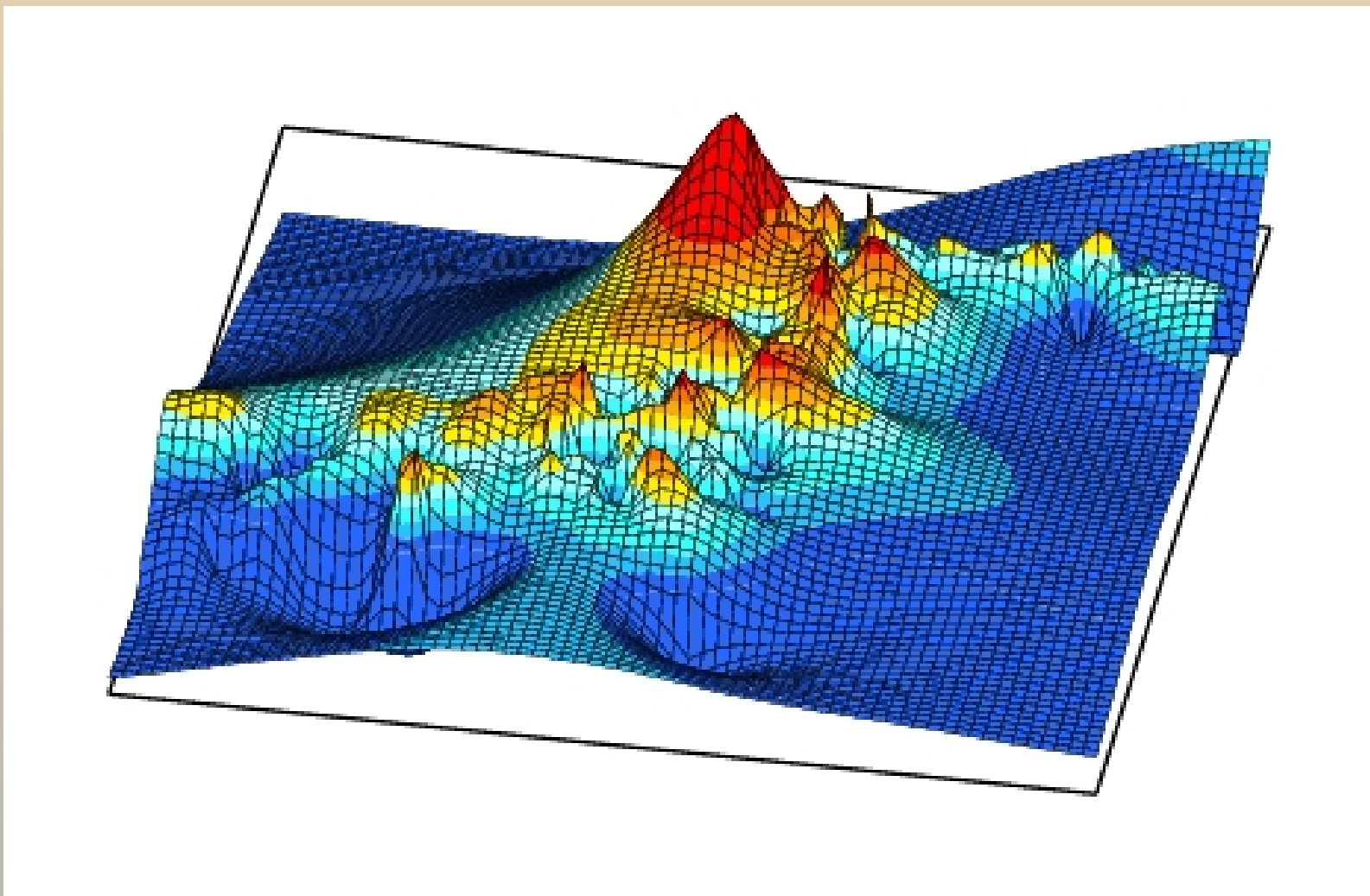
Optymalizacja gradientowa i Monte Carlo



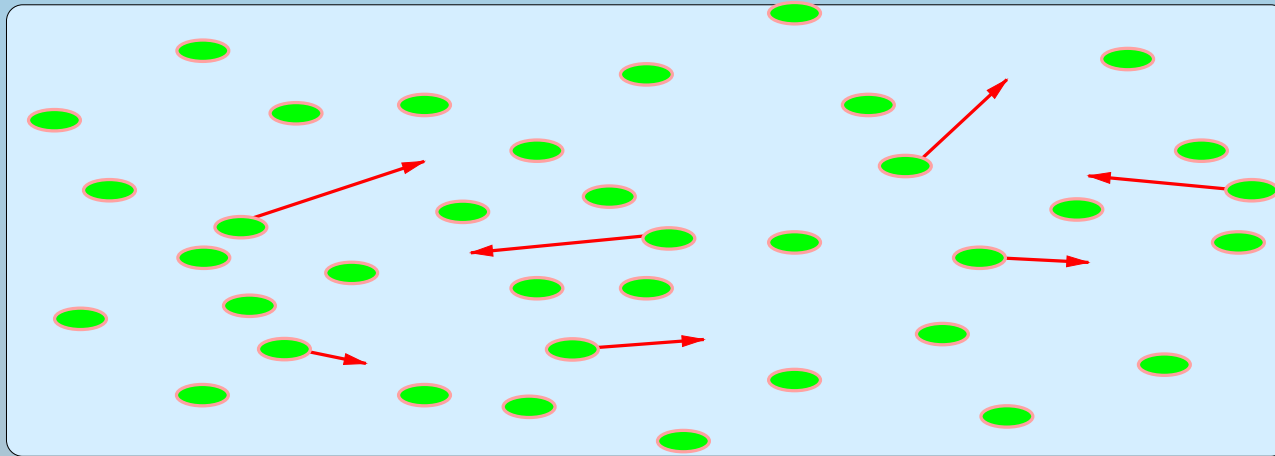
Metoda: preconditioned steepest descent

1. $\mathbf{m}_0$ - dowolny, $\hat{\mathbf{S}}_0 \approx (\mathbf{I} + \mathbf{C}_M \mathbf{G}^t \mathbf{C}_D^{-1} \mathbf{G})^{-1}$
 2. $\gamma_n = \mathbf{C}_M \mathbf{G}^t \mathbf{C}_D^{-1} (G \mathbf{m}_n - \mathbf{d}^{obs}) + (\mathbf{m}_n - \mathbf{m}^{apr})$
 3. $\phi_n = \hat{\mathbf{S}}_0 \gamma_n$
 4. $\mathbf{b}_n = \mathbf{G} \phi_n$
 5. $\mu_n = \frac{\gamma_n^t \mathbf{C}_M^{-1} \phi_n}{\phi_n^t \mathbf{C}_M^{-1} \phi_n + \mathbf{b}_n^t \mathbf{C}_D \mathbf{b}_n}$
 6. $\mathbf{m}_{n+1} = \mathbf{m}_n - \mu_n \phi_n$
-

Optymalizacja gradientowa - ograniczenia



System z wieloma stopniami swobody



Roztopiony metal, skały, itp:

$$1\text{m}^3 : N \approx 10^{21}$$

Jak opisać taki układ ??? ($\vec{r}_i, \vec{v}_i$)

Podójście statystyczne

- ❖ Interesują nas na ogół *makroskopiczne* wielkości: temperatura, gęstość, lepkość, itp.
- ❖ Wiele różnych *mikroskopowych* stanów odpowiada tej samej wielkości makroskopowej
- ❖ Równowaga termodynamiczna: *stan makroskopowy nie zmienia się w czasie* jednakże stany mikroskopowe - *tak*

Termodynamika równowagowa

Rozkład Boltzmana (kanoniczny)

$$p(C) = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{E(C)}{kT} \right)$$

E - energy of a given state

T - temperature

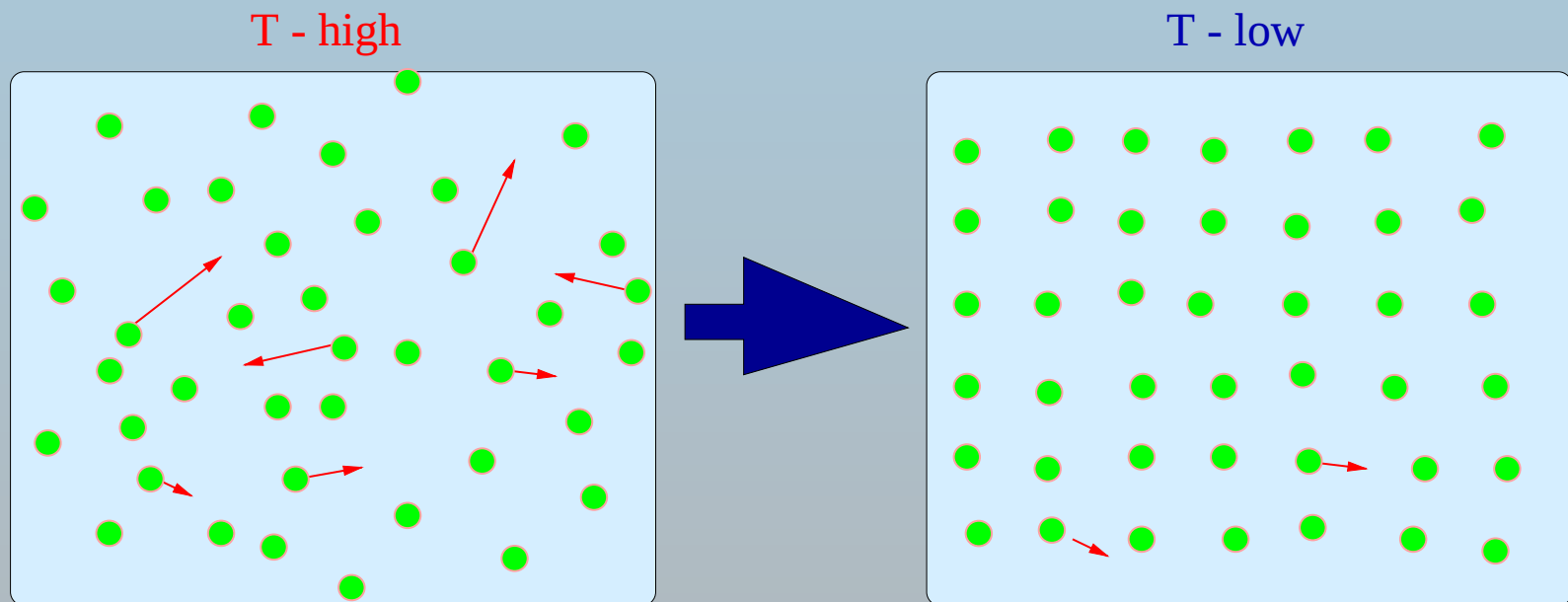
$$Z(T, M, \dots) = \sum_C \exp \left(-\frac{E_i}{kT} \right)$$

prawdopodobieństwo realizacji stanu makroskopowego
przez dany stan mikroskopowy C

Proces schładzania

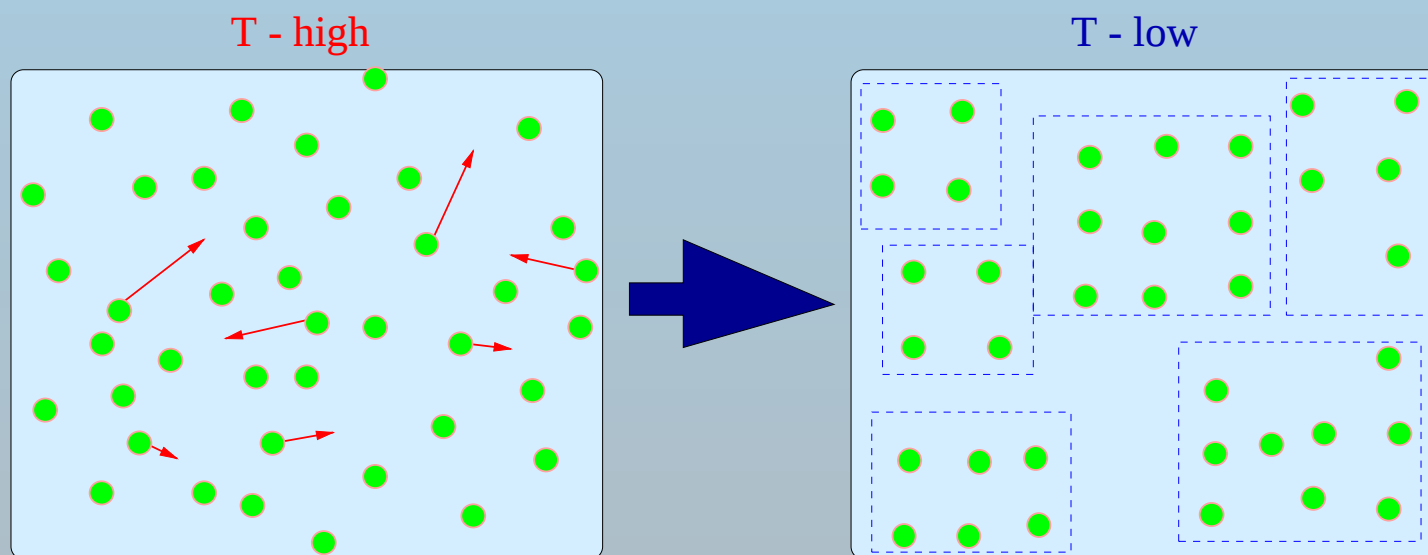
schładzanie powolne

Proces schładzania - system zdąża do stanu o minimum energii wewnętrznej
- ruchy termiczne zostają “zamrożone”



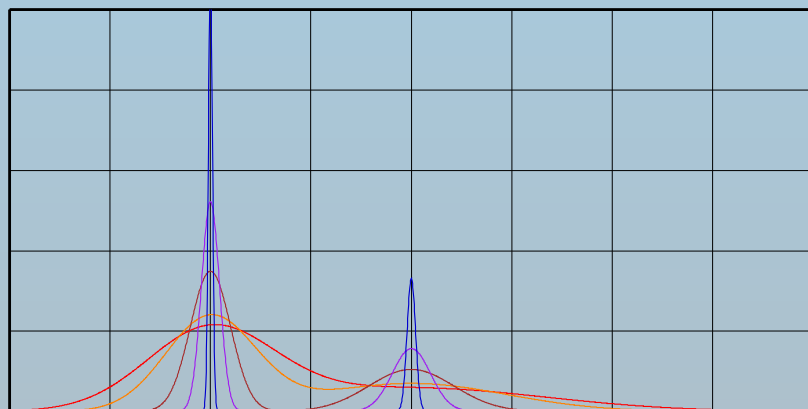
Proces schładzania

szybkie schładzanie



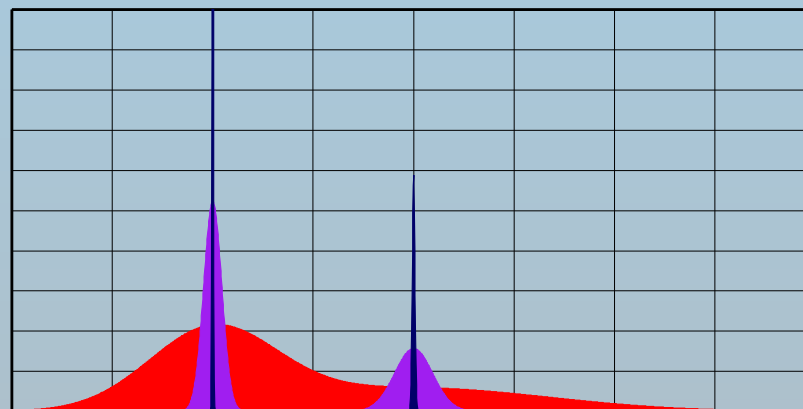
Proces schładzania - zmiany w rozkładzie Boltzmannna

Cooling system



States C

Cooling system

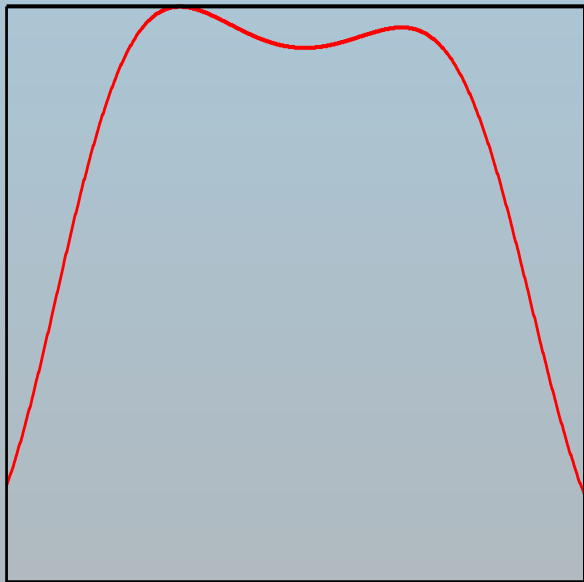


States C

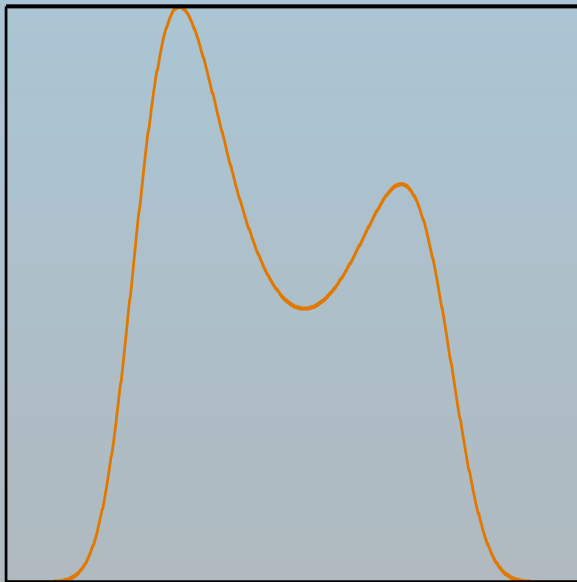
Proces schładzania

ewolucja rozkładu Boltzmana

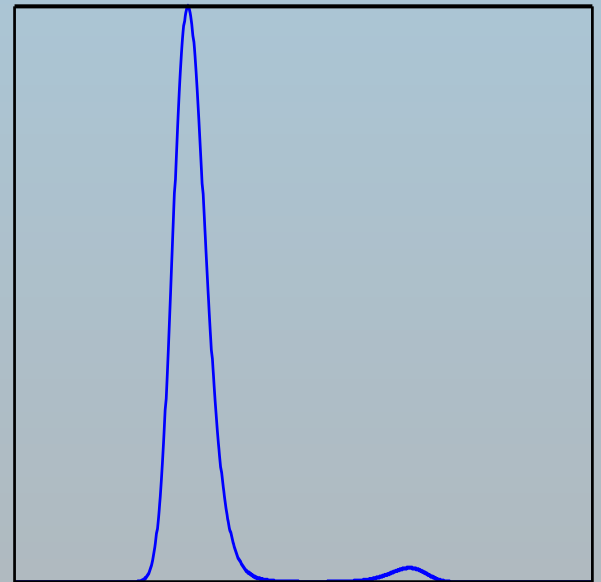
$T=10$



$T=1$

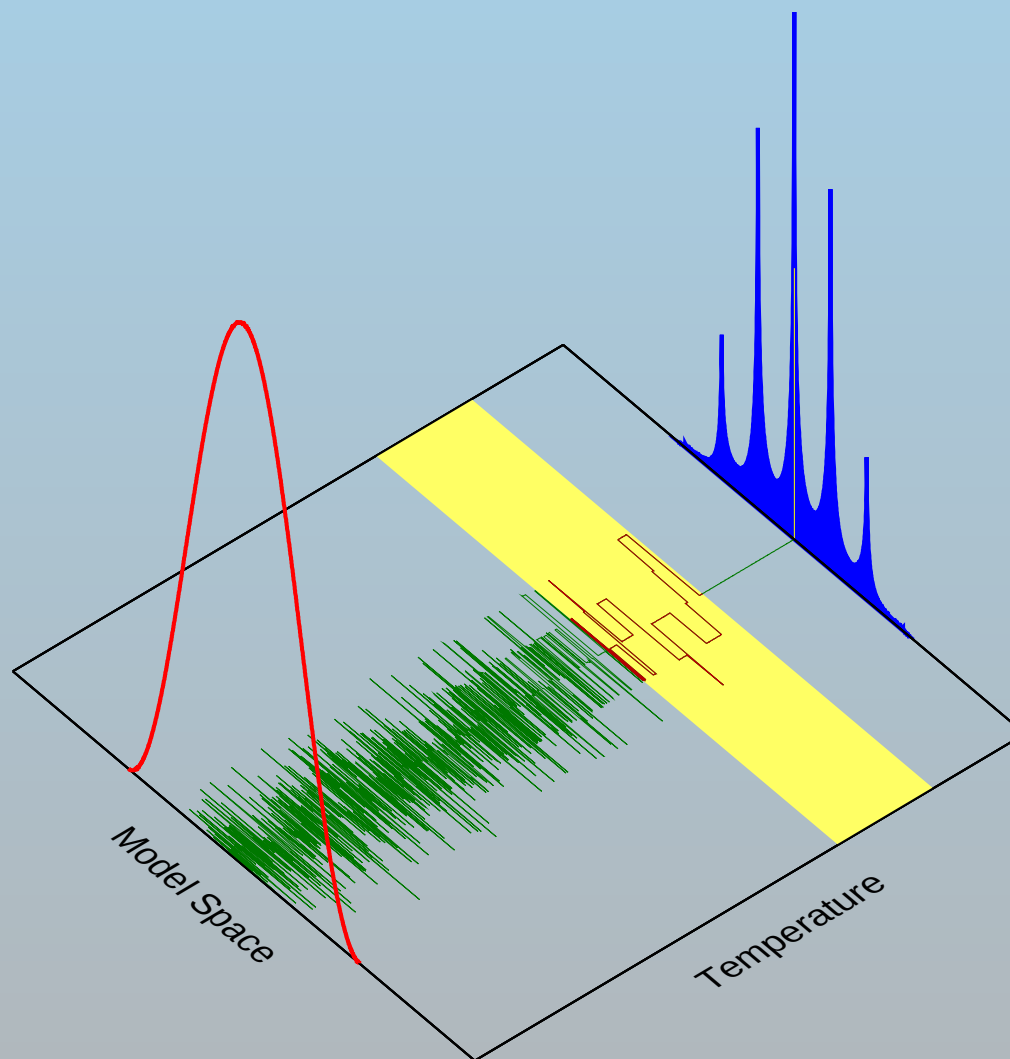


$T=0.1$



Proces schładzania:

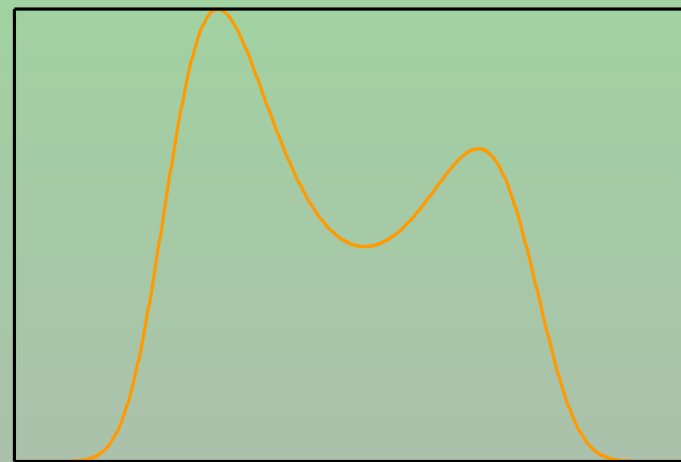
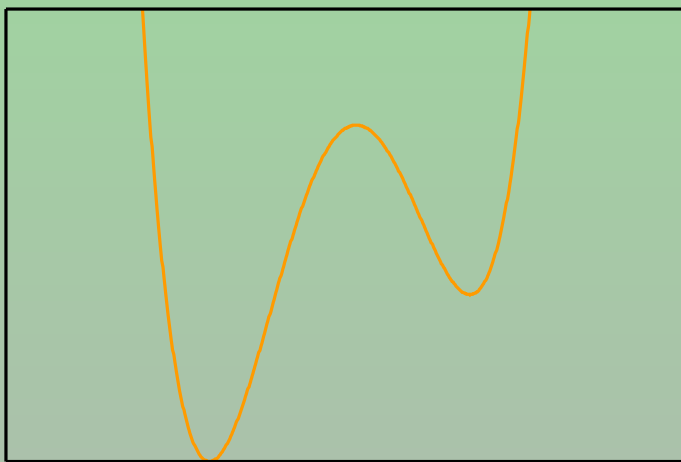
krystalizacja



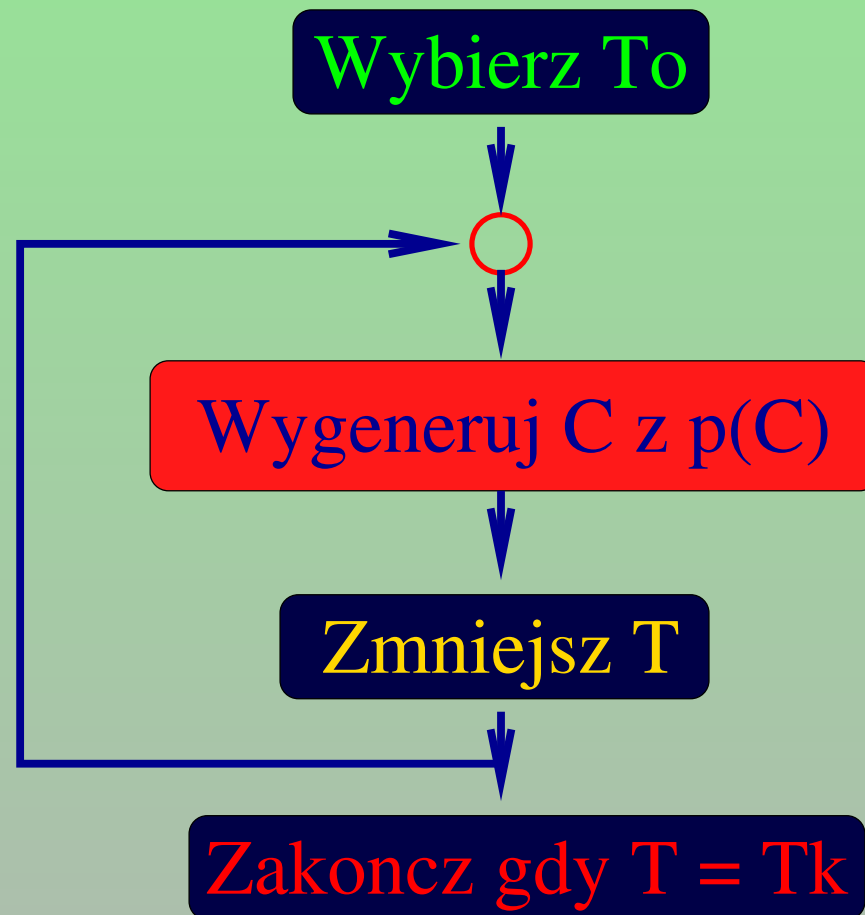
Symulowane schładzanie - optymalizacja

Szukamy absolutnego minimum dodatniej funkcji $S(\mathbf{m}) > 0$

$$S(\mathbf{m}) \implies e^{-\frac{S(\mathbf{m})}{T}}$$

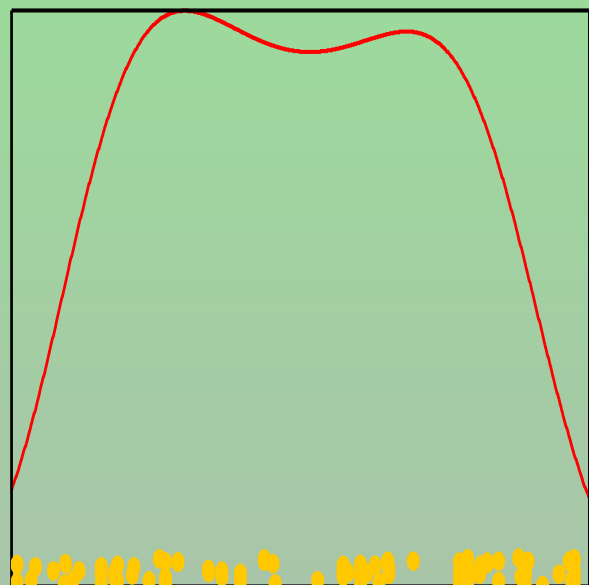


Algorytmy typu **Simulated Annealing**

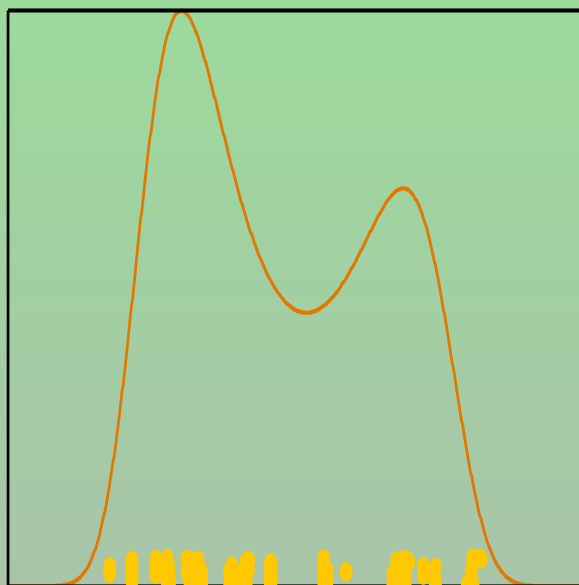


Generowane próbki

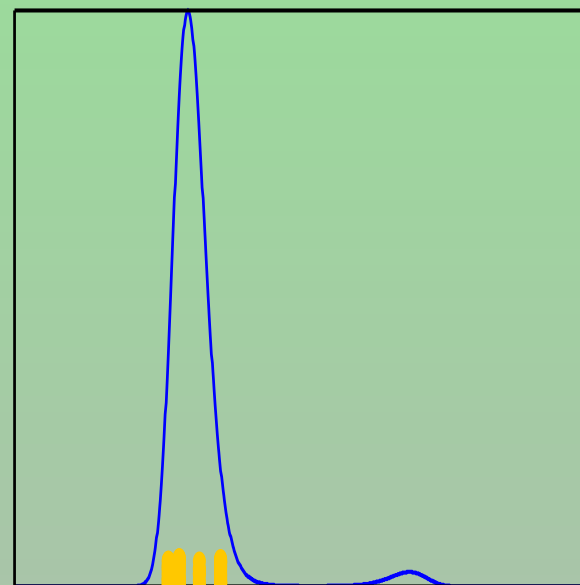
$T=10$



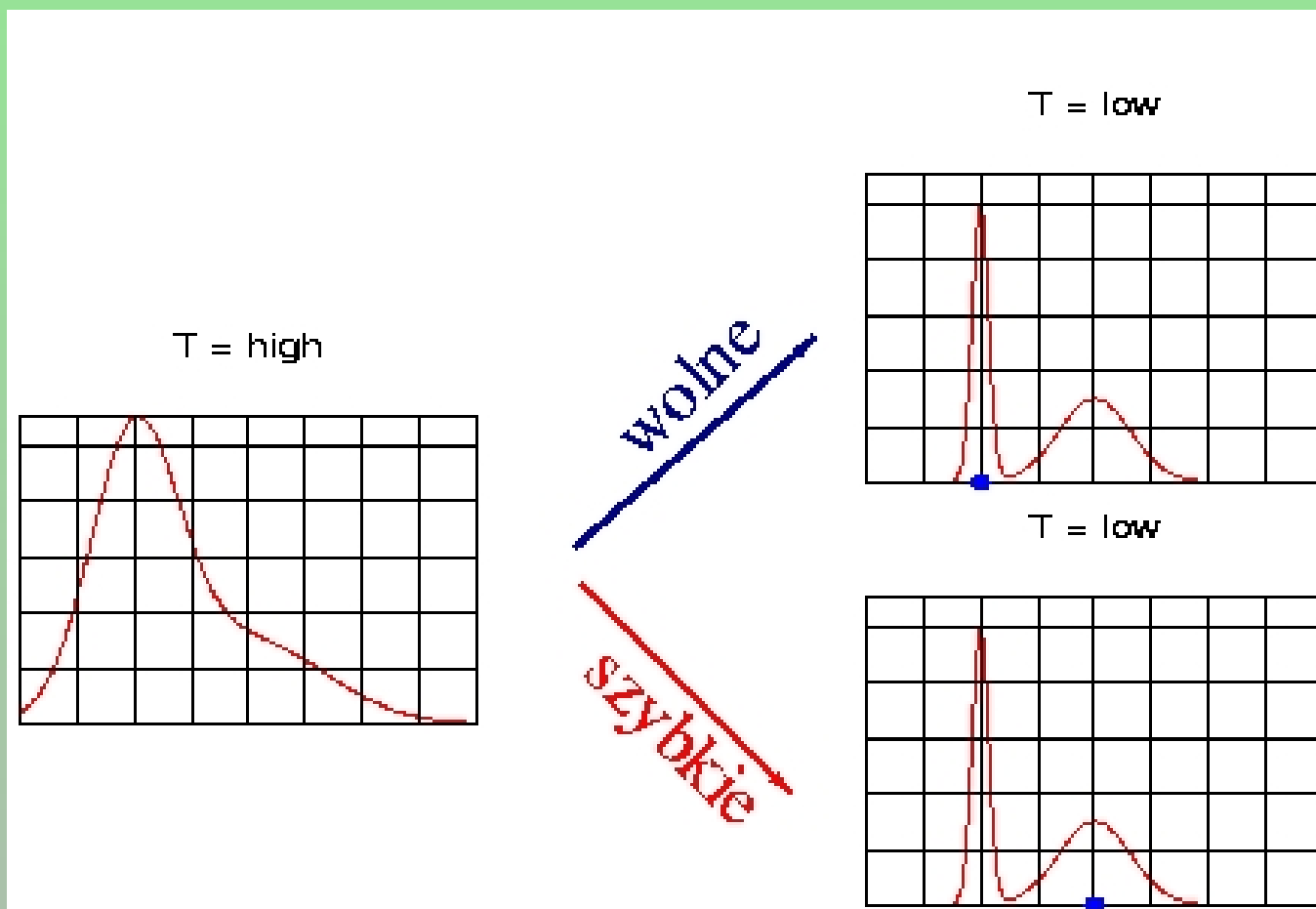
$T=1$



$T=0.1$



Stan podstawowy i stany metatrwałe



- ❖ Utwórz rozkład “Boltzmanowski” $p(\mathbf{m}, T) = \exp(-S(\mathbf{m})/T)$
- ❖ Wybierz T_0 , i model początkowy $\mathbf{m}^\alpha$ i oceń go

$$p_\alpha = p(\mathbf{m}^\alpha, T_0)$$

- ❖ Dla danej temperatury T_k wylosuj $\mathbf{m}^{\alpha+1}$ z $p(\mathbf{m}, T_k)$

★ wylosuj próbkę testową $\mathbf{m}^\beta$: $\mathbf{m}^\beta = \mathbf{m}^\alpha + \delta \mathbf{m}$

★ oceń $\mathbf{m}^\beta$: $p_\beta = p(\mathbf{m}^\beta, T_k)$

★ Utwóź $\mathbf{m}^{\alpha+1}$

zaakceptuj $\mathbf{m}^\beta$ z prawdopodobieństwem $p = \min(1, p_\beta/p_\alpha)$

$$\mathbf{m}^{\alpha+1} = \mathbf{m}^\beta$$

jeśli $\mathbf{m}^\beta$ odrzucona duplikuj stan obecny

$$\mathbf{m}^{\alpha+1} = \mathbf{m}^\alpha$$

- ❖ Zmniejsz temperaturę

$$T_{k+1} = f(T_k)$$

- ❖ Powtarzaj aż do osiągnięcia końcowej temperatury

Algorytm SA przykład

```
while( T > Tf)      /* decrease T loop */
{
    nc =ceil( p2+p3*exp(-(double)k/(double)sa->n));
    if(nc<=1) nc=1;
    ++k;

    for(l=0;l<nc;l++) /* T=const loop */
    {
        for(j=0;j<N;j++)      /* generate new sample */
        {
            u=SArandval(0,1);      /* modified VFSA */
            x= fabs(2*u -1);
            z= T*( pow(1+1/T,x) - 1);

            if(u >=0.5)
                p=mi[j] + z * (mu[j]-mi[j]);
            else
```

```

    p= mi[j] - z * (mi[j]-ml[j]);

    mf[j]=p;
}

tt= (*fun)(mf);    /* evaluate */
    e = tt-ta;
z=exp(-e/T);
u=SArandval(0,1);

if( e<0 || z > u) /* accept */
{
    ta=tt;
    mc = mi;
    mi = mf;
    mf=mc;

if(ta < ts) /* keep the best */
{ ts=ta;
    for(i=0;i < N; i++)
        ms[i]=mi[i];
}
}

```

```

}

} /* End of T=const loop */

To=T;      /* decrease T (VFSA scheme) */
z=Tc*pow((double)(k),di);
T = Ti*exp(-z);

if(sa->pf>0) /* messages to STD_ERR */
{ if(k%sa->pf==0)
    fprintf(stderr," VFSA:  T = %.2e    dT = %.2e    iter: %-6d    nc: %

}

} /* End  of cooling (T) loop */

```

Termodynamika - Optymalizacja/Inwersja

analogie

Termodynamika	Optymalizacja
wiele stopni swobody	optymalizacja wielu parametrowa
rozkład Boltzmana	rozkład <i>a posteriori</i>
energia	niedopasowanie
stan podstawowy	globalne maksimum
możliwe stany metatrwałe	lokalne maksima
Schładzanie wymaga by układ był w stanie równowagi termodynamicznej	