Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 2.3.2022 *Bayesovská štatistika a Markov chains*

Akékoľvek otázky smelo smerujte na `juraj(a)tekel(b)gmail(c)com`

Bayesov vzorec

$$P(M_i|\mathcal{D}) = \frac{\pi(M_i)P(\mathcal{D}|M_i)}{\sum_i \pi(M_i)P(\mathcal{D}|M_i)} ,$$

kde M_i označuje rôzne modely (možnosti), $\mathcal{D}$ označuje pozorované/nové dáta, $\pi(M_i)$ označuje našu apriórnu pravdepodobnosť pre daný model (ako veľmi si myslíme, že realita popisovaná modelom M_i), $P(\mathcal{D}|M_i)$ označuje pravdepodobnosť, že dáta $\mathcal{D}$ sú dôsledkom modelu M_i a $P(M_i|\mathcal{D})$ je nové (posteriórne) rozdelenie pravdepodobnosti na možných modeloch, ktoré berie do úvahy nové dáta. Schematicky teda[1]

$$\pi(M_i) \xrightarrow{\mathcal{D}} P(M_i|\mathcal{D}) .$$

Tu je kľúčový pohľad na pravdepodobnosť ako na modelovanie nevedomosti. My nevieme, aký model M_i je v skotočnosti realizovaný a túto nevedomosť modelujeme rozdelením pravdepodobnosti π. Získame o svete nové informácie $\mathcal{D}$ a rozmýšľame, ako tieto informácie menia našu predstavu o realite.

Príklad 1 (■ Frekvencionistická minca)**.** Máme mincu, o ktorej si nie sme istý, že je férová. Urobíme teda experiment, mincu n krát hodíme a dostaneme n_1 krát znak.

a. Za akých podmienok o minci vyhlásime, že férová nie je?

b. Po koľkých hodoch odhalíme úplne neférovú mincu s $p = 1$?

Príklad 2 (■ Bayesovská minca)**.** Máme mincu, o ktorej si nie sme istý, že je férová a na overenie tohto faktu urobíme rovnaký experiment ako v predchádzajúcej úlohe. Avšak vyhodnocujeme ho Bayesovsky. To znamená, že na začiatok uvažujeme, že o minci nemáme žiadnu informáciu.

a. Čo môžme na základe experimentu o minci usúdiť?

b. Aká bude očakávaná neférovosť mince $\langle p \rangle$? (pre férovú mincu $p = 1/2$)

c. Ako bude vyzerať študovanie úplne neférovej mince?

Príklad 3 (Kruto aktuálny príklad)**.** Nech je špecificita Ag testu 0.99, tj. zdravý človek dostane s pravdepodobnosťou 99% negatívny výsledok a s pravdepodobnosťou 1% pozitívny výsledok. Ďalej nech je senzitivita Ag testu 0.4, tj. chorý človek dostane s pravdepodobnosťou 40% pozitívny výsledok a s pravdepodobnosťou 60% negatívny výsledok.

Najskôr sa zmyslite nad tým, aké sú rozumné rozdelenia apriórnej pravdepodobnosti pre stav človeka, ktorý má príznaky a ktorý nemá príznaky.

Majme teraz človeka, ktorý ide na dva Ag testy za sebou, ktorých výsledky sú

- negatívny, negatívny,
- negatívny, pozitívny,
- pozitívny, negatívny,
- pozitívny, pozitívny.

Čo viete povedať o stave človeka, ktorý bol pôvodne bez príznakov / s príznakmi, po týchto výsledkoch?

Príklad 4 (FC Beňušovce)**.** Futbalový tím [FC Beňušovce] včera hral víťazný zápas. Ak vieme, že futbalisti tohto tímu hrajú 60% zápasov večer a nočných zápasov vyhrajú 55%, ale denných iba 35%, s aku pravdepodobnosťou bol včerajší zápas večer?

[1] Toto je moje obľúbené vyjadrenie Bayesovho vzorca.

Príklad 5 (Extrémne neinovatívna úloha na precvičenie). Majme dve vrecia s bielymi a čiernymi guličkami, označené X a Y. Vrece X obsahuje $p_X = 20\%$ bielych guličiek a vrece Y obsahuje $p_Y = 40\%$ bielych guličiek. Z náhodného vreca vytiahneme 9 guličiek, z toho 3 biele. S akou pravdepodobnosťou to bolo vrece X?

Príklad 6 (■ Spresnenie merania). Meranie istej veličiny ukázalo hodnotu 10 so štandardnou odchýlkou 7 (Gaussovské rozloženie). Chceme túto hodnotu spresniť a preto zoberieme merací prístroj, na ktorom sa dočítame, že preň $\sigma = 4$ a urobíme dve nové merania. Dostaneme výsledky 4 a 6. Čo vieme o hodnote tejto veličiny povedať teraz?

Príklad 7 (Ups). Meranie hmotnosti častice ukázalo, že jej hmotnosť by mala byť $(-0.3 \pm 1)eV$. To ale tak nemôže byť, nakoľko hmotnosť je určite kladná. Aká je očakávaná hmotnosť častice po uvážení tohto faktu?

Metropolisov algortimus

Príklad 8 (Markov chain pre dvojhladinový systém). Majme náhodnú premennú x, ktorá má dve hodnoty 0 a 1, pričom $p(0) = p$ $p(1) = 1 - p$. Zostrojme nasledujúcu postupnosť hodnôt náhodnej premennej $\{x_i\}, i = 1, \ldots, N$. Začnime s nejakou hodnotou x_0, na základe algoritmu ktorý bude špecifikovaný neskôr zvoľme testovaciu hodnotu x_t a urobme pomer

$$\alpha = \frac{p(x_t)}{p(x_0)} \ . \tag{1}$$

Potom vyberieme náhdoné číslo q z intervalu $(0, 1)$ a ak $\alpha \geq q$, za x_1 zvolíme x_t, ak $\alpha < q$ za x_1 zvolíme x_0. Rovnaký postup opakujeme postupne pre ďalšie x_i.

Vygenerujte takto niekoľko postupností pre rôzne N a presvedčte sa, že $\sum x_i = Np$.

Potom vygenerujte zoberte z postupnosti iba poslednú hodnotu x_N a celý postup zopakujte M krát. Takto dostanete sadu M čísel x_j a overte, že opäť platí $\sum x_j = Np$.

Ako testovaciu hodnotu x_t pre vytvorenie x_{i+1} je v tomto prípade prirodzené zobrať opačnú hodnotu ako je x_i.

Príklad 9 (Metropolisov algoritmus ako generátor náhodných čísel). Majme náhodnú premennú x, ktorá je rozdelená podľa rozdelenia pravdepodobnosti $p(x)$. Zostrojme nasledujúcu postupnosť hodnôt náhodnej premennej $\{x_i\}, i = 1, \ldots, N$. Začnime s nejakou hodnotou x_0, na základe algoritmu ktorý bude špecifikovaný neskôr zvoľme testovaciu hodnotu x_t a urobme pomer

$$\alpha = \frac{p(x_t)}{p(x_0)} \ . \tag{2}$$

Potom vyberieme náhdoné číslo q z intervalu $(0, 1)$ a ak $\alpha \geq q$, za x_1 zvolíme x_t, ak $\alpha < q$ za x_1 zvolíme x_0. Rovnakú postup opakujeme postupne pre ďalšie x_i. Dá sa ukázať, že rozdelenie takomto súbore hodnôt $\{x_i\}$ konverguje k $p(x)$, t.j. že vybrať náhodne z tohto súboru je to isté ako vybrať náhodne zo všetkých možných x podľa rozdelenia pravdepodobnosti $p(x)$.

a. Rozmyslite si, že pre generovanie postupnosti nepotrebujeme poznať normalizáciu $p(x)$. Prečo je to dôležité?

b. Rozmyslite si, že pre x stav v kanonickom súbore a $p(x)$ príslušné rozdelenie pravdepodobnosti takto dostaneme algoritmus z prednášky.

c. Za náhodnú premennú zvoľme celé čísla $\mathbb{Z}$ a $x_0 = 0$. Za algoritmus generovania x_t zoberme náhodný krok veľkosti 1 vpravo alebo vľavo. Takýto algoritmus vygeneruje pre $p(x) = e^{-x^2/2}$ postupnosť celých čísel rozdelených podľa Gaussovho rozdelenia. Overte to počítačovým programom. Skúste, ako váš výsledok závisí od voľby N a ako to vyzerá, keď budete čísla x voliť na číselnej osi hustejšie.

d. Naprogramujte aj dvojrozmerný prípad, pre $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^2$. Algoritmus generovania testovacieho bodu skúste ako

   - krok náhodným smerom veľkosti 1,
   - krok veľkosti 1 náhodne doprava alebo doľava a potom krok veľkosti 1 náhodne hore alebo dole.

   Porovnajte výsledky, fungujú oba spôsoby generovania rovnako dobre?

e. Vyskúšajte rôzne iné rozdelenia $p(x)$, napríklad aj také, kedy neviete nájsť generátor metódou inverzná k primitívnej. Kedy funguje Metropolis lepšie, ako táto metóda?

Treba upozorniť, že táto implementácia je trochu naivná a program môže mať niekoľko problémov, ktoré potom treba riešiť sofistikovanejším postupom.

Príklad 10 (Metropolisov algoritmus ako generátor náhodných čísel 2)**.** Iný postup, spomínaný v nasledujúcom príklade, je o čosi iný ako vyššie prezentovaný. Tam sa zoberie ako hodnota náhodnej premennej posledná vygenerovaná premenná x_N a ďalšia hodnota sa potom generuje novou postupnosťou. Zvoľte N_1, N_2 a upravte váš program tak, aby N_2-krát vygeneroval postupnosť N_1 náhodných čísel a za výsledný súbor zoberal iba posledné vygenerované premenné. Porovnajte z výsledkom z predchádzajúcej úlohy pre $N = N_2$.