Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
“Київський політехнічний інститут”
Навчально-науковий комплекс
“Інститут прикладного системного аналізу”

Методи визначення метастабільних станів у ланцюгах Маркова

виконав: Мацагор І.Д.
керівник: Селін О.М.

Актуальність

Ланцюги Маркова є одним із найрозповсюдженіших методів математичного моделювання реальних систем і процесів завдяки простоті представлення даних (у вигляді матриці перехідних ймовірностей) і легкості їх обробки. Сьогодні ланцюги Маркова використовуються у таких прикладних дисциплінах як теорія масового обслуговування, теорія надійності, теорія дифузійних процесів, математична біологія тощо.

У роботі розглянуто застосування методів теорії масового обслуговування до вирішення реальних задач. З'ясовано, що найкращий метод математичного опису процесів, які розглядаються у масовому обслуговуванні, – марківські ланцюги. Було запропоновано використовувати алгоритм визначення метастабільних станів у ланцюгах Маркова, описаний у цій роботі, для визначення ергодичності марківських ланцюгів.

Об’єкт і предмет дослідження

Об’єкт: ланцюг Маркова, що описує певний процес.

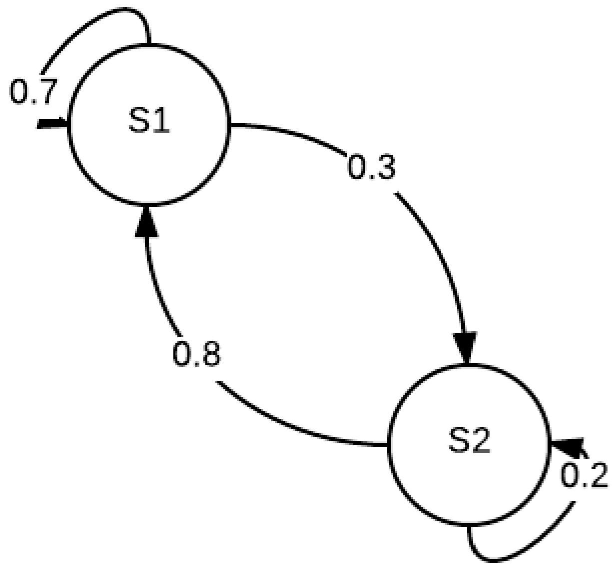
Предмет: методи визначення метастабільних станів у ланцюгах Маркова.

Постановка задачі: розробка алгоритму для зведення матриці перехідних ймовірностей до блоково-діагонального вигляду з метою виділення метастабільних станів у ланцюгу Маркова; дослідження ефективності розробленого алгоритму.

Що таке ланцюг Маркова?

Ймовірність переходу у якийсь наступний стан залежить лише від номеру поточного кроку і поточного стану, і не залежить від усіх попередніх станів, у яких був ланцюг.

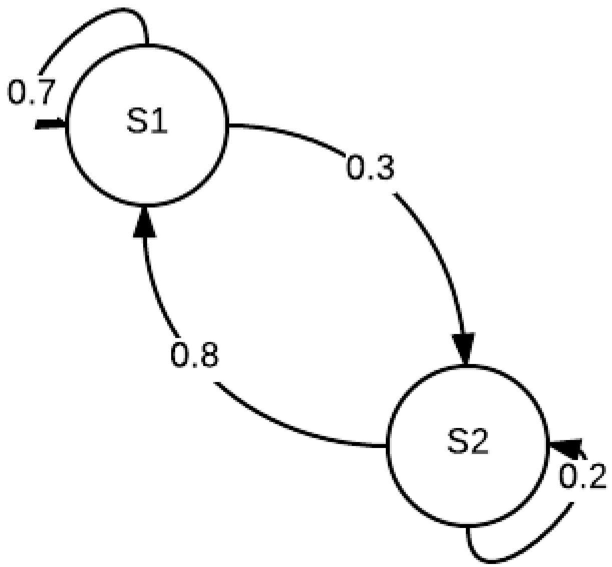
У однорідному ланцюзі Маркова така ймовірність залежить **лише** від поточного стану.



Приклад ланцюга Маркова з двома станами

Матриця перехідних ймовірностей

Матриця за визначенням є стохастичною.

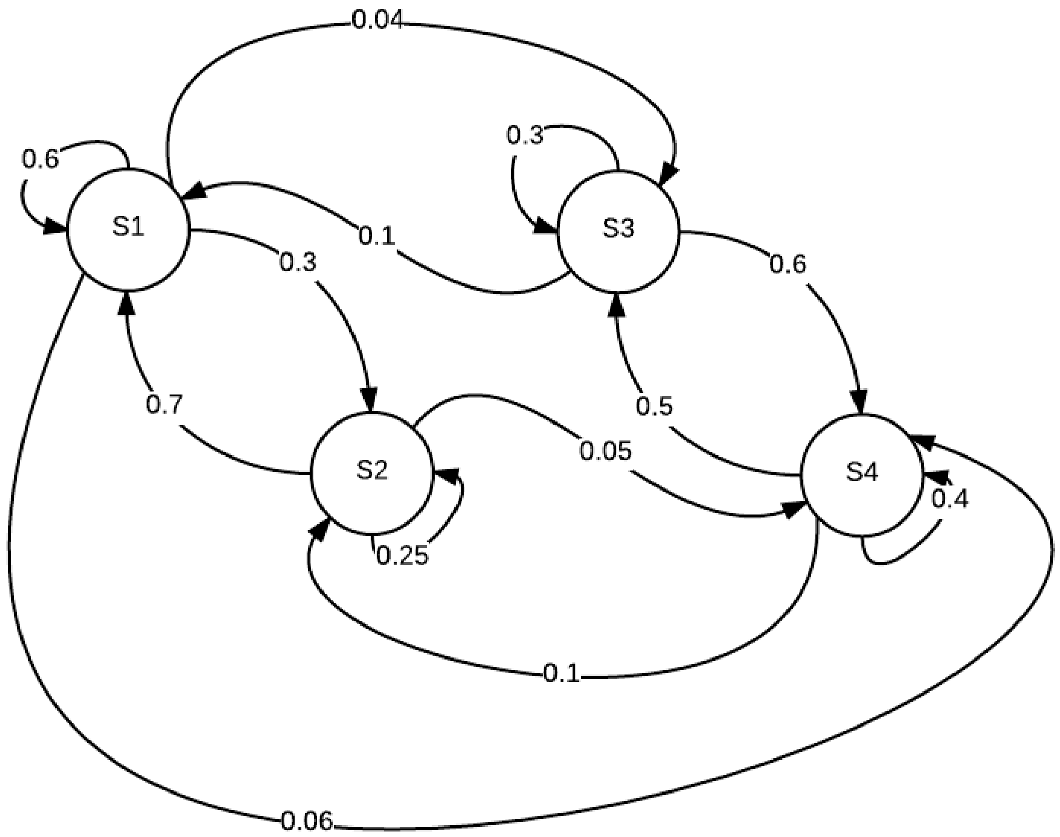


$$\begin{pmatrix} 0,7 & 0,3 \\ 0,8 & 0,2 \end{pmatrix}$$

Метастабільні стани

Підмножина станів E називається метастабільним станом, якщо переходи між станами в E – дуже ймовірні, а перехід у якийсь стан не із E – малоймовірний.

0,6	0,3	0,04	0,06
0,7	0,25	0	0,05
0,1	0	0,3	0,6
0	0,1	0,5	0,4



Ергодичні ланцюги Маркова

Однорідний ланцюг Маркова називається ергодичним, якщо виконується умова:

$$\exists t_0 \in \aleph\colon\ p_{ij}^{(t_0)} > 0, \forall i, j,$$

де $p_{ij}^{(t_0)}$ – це ймовірність того, що ланцюг перейде із стану s_i у s_j за t_0 кроків.

Тобто, по суті, це означає, що існує універсальна величина t_0, яка гарантує, що з будь-якого стану s_i можна потрапити у будь-який інший стан s_j. Таким чином гарантується, що усі стани ланцюга не є тупиковими або зацикленими.

Основна теорема

Нехай A – блокова стохастична матриця, яка складається із m блоків $A_1, \dots, A_m$ з відповідними розмірностями $n_1, \dots, n_m$. Нехай S_i – множина індексів для блоку A_i. Нехай $A = \mathrm{U}\Sigma V^T$ – це сингулярний розклад A, причому $u_1, \dots, u_m$ – ліві сингулярні вектори, що відповідають найбільшим сингулярним значенням у кожному блоці. Пов'яжемо із кожним станом s_i його знакову структуру:

$sign(s_i) \stackrel{\text{def}}{=} [sgn(u_1)_i, \dots, sgn(u_m)_i]$, де $sgn(x)$ – це звичайна сигнум-функція.

Тоді:

1. Стани, які належать одному блоку в A мають однакову знакову структуру, тобто для будь-якого A_j і $k, l \in S_j$ маємо $sign(s_k) = sign(s_l)$;

2. Стани, які належать різним блокам в A мають різну знакову структуру, тобто для будь-яких A_i, A_j $(i \neq j)$ і усіх $k \in S_i, l \in S_j$ маємо $sign(s_k) \neq sign(s_l)$.

Ідея алгоритму

Враховуючи, що станам із одного блоку відповідають однакові знакові структури, то відсортувавши значення другого сингулярного вектора (вибрано емпірично) можна розділити матрицю на два великі блоки, кожен з яких може містити в собі ще більше блоків. Тому природньо можна застосувати алгоритм рекурсивно до кожного із блоків.

Опис алгоритму

Маємо стохастичну матрицю B і порогове значення ε.

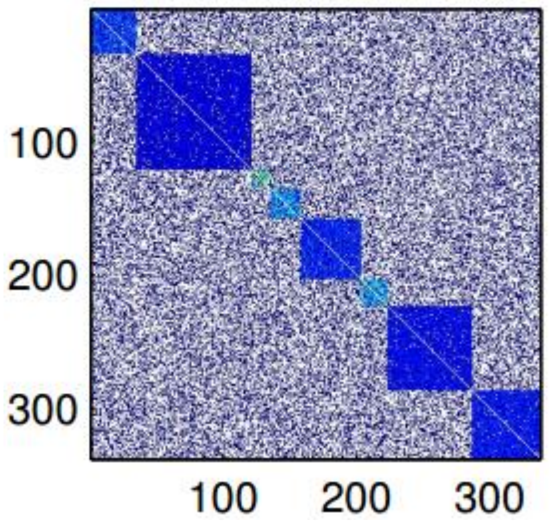
1. Обчислюємо другий лівий сингулярний вектор u_2 для B.

2. Сортуємо у порядку зростання значення u_2 і застосовуємо отриману перестановку для матриці B.

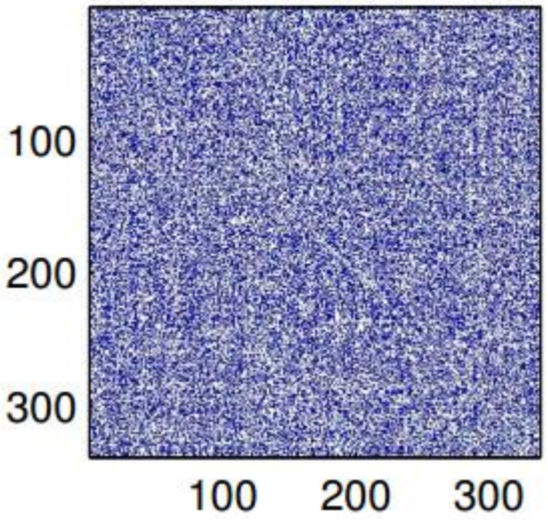
3. Враховуючи, що різним блокам у B відповідають значення різних знаків у u_2, знаходимо два потенційні блоки.

4. Якщо норми кожного з блоків більші за ε, це означає, що ми можемо розділити матрицю на два блоки, після чого ми рекурсивно продовжуємо алгоритм для кожного з блоків; якщо ж ні, то ми не можемо далі ділити цей блок і закінчуємо алгоритм.

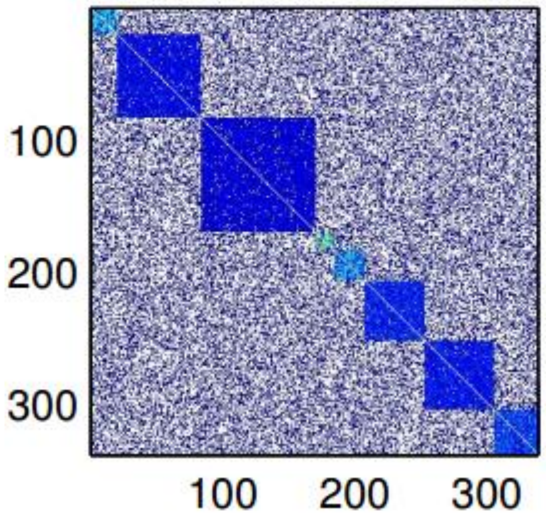
Приклад вдалої роботи алгоритму



Початкова матриця

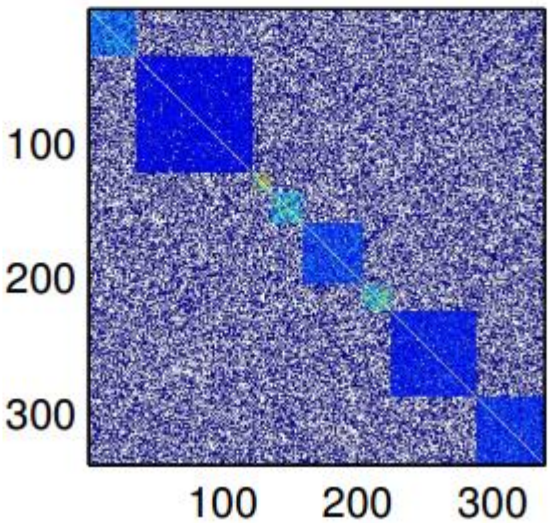


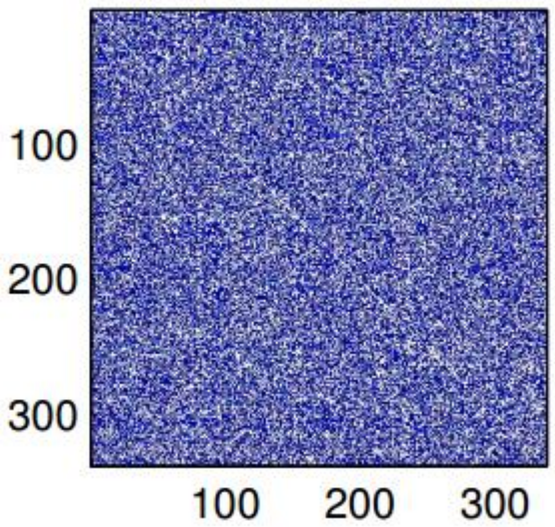
Після випадкової перестановки

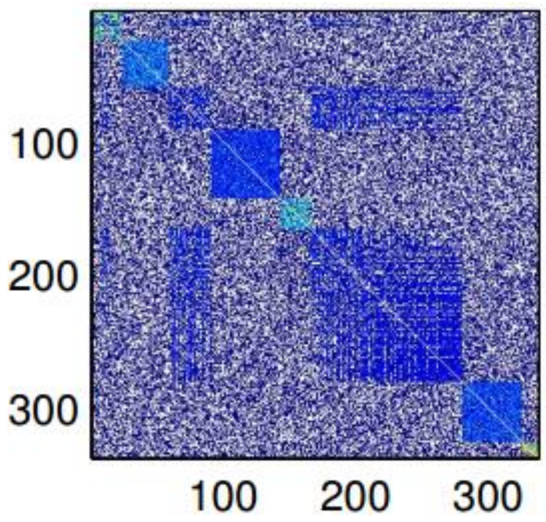


Відновлена

Приклад невдалої роботи алгоритму







Початкова матриця

Після випадкової перестановки

Відновлена

Висновки

Нещодавно проблема визначення метастабільних станів у ланцюгах Маркова стала дуже обговорюваною. Незважаючи на те, що дана проблема виникла у математичній біології, де ланцюги Маркова використовуються для опису зміни конформацій біомолекул, результати її дослідження можна використовувати і в інших дисциплінах, наприклад у теорії масового обслуговування. Усе це доводить актуальність цієї роботи і розробленого в ньому алгоритму.

У роботі проведено розробку алгоритму, який дозволяє визначати метастабільні стани у ланцюгах Маркова; також проведено дослідження працездатності і ефективності алгоритму у залежності від вхідних параметрів.

Дякую за увагу!