

Лекция 5. Марковские цепи

Цепь Маркова

Цепь Мáркова — последовательность случайных событий с конечным или счётным числом исходов, характеризующаяся тем свойством, что, говоря нестрого, при фиксированном настоящем будущее независимо от прошлого. Названа в честь А. А. Маркова (старшего).

Цепь Маркова с дискретным временем

Определение

Последовательность дискретных случайных величин $\{X_n\}_{n \geq 0}$ называется простой цепью Маркова (с дискретным временем), если

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = \mathbb{P}(X_{n+1} =$$

Таким образом, в простейшем случае условное распределение последующего состояния цепи Маркова зависит только от текущего состояния и не зависит от всех предыдущих состояний (в отличие от цепей Маркова высших порядков).

Область значений случайных величин $\{X_n\}$ называется **пространством состояний** цепи, а номер n — номером шага.

Переходная матрица и однородные цепи

Матрица $P(n)$, где

$$P_{ij}(n) \equiv \mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i)$$

называется **мáтрицей перехóдных вероятностей** на n -м шаге, а вектор

$\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots)^\top$, где

$$p_i \equiv \mathbb{P}(X_0 = i)$$

— **начáльным распределéнием** цепи Маркова.

Очевидно, матрица переходных вероятностей является стохастической, то есть

$$\sum_{j=1}^{\infty} P_{ij}(n) = 1, \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Цепь Маркова называется **однорóдной**, если матрица переходных вероятностей не зависит от номера шага, то есть

$$P_{ij}(n) = P_{ij}, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

В противном случае цепь Маркова называется неоднородной. В дальнейшем будем предполагать, что имеем дело с однородными цепями Маркова.

Конечномерные распределения и матрица перехода за n шагов

Из свойств условной вероятности и определения однородной цепи Маркова получаем:

$$\mathbb{P}(X_n = i_n, \dots, X_0 = i_0) = P_{i_{n-1}, i_n} \cdots P_{i_0, i_1} P_{i_0},$$

откуда вытекает специальный случай уравнения Колмогорова — Чепмена:

$$\mathbb{P}(X_n = i_n \mid X_0 = i_0) = (P^n)_{i_0, i_n},$$

то есть матрица переходных вероятностей за n шагов однородной цепи Маркова есть n -я степень матрицы переходных вероятностей за 1 шаг. Наконец,

$$\mathbb{P}(X_n = i_n) = ((P^T)^n \mathbf{p})_{i_n}.$$

Цепь Маркова с непрерывным временем

Определение

Семейство дискретных случайных величин $\{X_t\}_{t \geq 0}$ называется цепью Маркова (с непрерывным временем), если

$$\mathbb{P}(X_{t+h} = x_{t+h} \mid X_s = x_s, 0 < s \leq t) = \mathbb{P}(X_{t+h} = x_{t+h} \mid X_t = x_t)$$

Цепь Маркова с непрерывным временем называется однородной, если

$$\mathbb{P}(X_{t+h} = x_{t+h} \mid X_t = x_t) = \mathbb{P}(X_h = x_h \mid X_0 = x_0).$$

Матрица переходных функций и уравнение Колмогорова — Чепмена

Аналогично случаю дискретного времени конечномерные распределения однородной цепи Маркова с непрерывным временем полностью определены начальным распределением

$$\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots)^\top, \quad p_i = \mathbb{P}(X_0 = i), \quad i = 1, 2, \dots$$

и матрицей переходных функций (переходных вероятностей)

$$\mathbf{P}(h) = (P_{ij}(h)) = \mathbb{P}(X_h = j \mid X_0 = i).$$

Матрица переходных вероятностей удовлетворяет уравнению Колмогорова — Чепмена: $\mathbf{P}(t + s) = \mathbf{P}(t)\mathbf{P}(s)$ или

$$P_{ij}(t + s) = \sum_k P_{ik}(t)P_{kj}(s)$$

Матрица интенсивностей и дифференциальные уравнения Колмогорова

По определению, матрица интенсивностей $Q = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{P(h) - I}{h}$ или, что эквивалентно,

$$Q = (q_{ij}) = \left(\frac{dP_{ij}(h)}{dh} \right)_{h=0}.$$

Из уравнения Колмогорова — Чепмена следуют два уравнения:

- Прямое уравнение Колмогорова

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = \mathbf{P}(t)\mathbf{Q},$$

- Обратное уравнение Колмогорова

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = \mathbf{Q}\mathbf{P}(t).$$

Для обоих уравнений начальным условием выбирается $\mathbf{P}(0) = \mathbf{I}$.
Соответствующее решение $\mathbf{P}(t) = \exp(\mathbf{Q}t)$.

Свойства матриц P и Q

Для любого $t > 0$ матрица $P(t)$ обладает следующими свойствами:

1. Матричные элементы $P(t)$ неотрицательны: $P_{ij}(t) \geq 0$
(неотрицательность вероятностей).

2. Сумма элементов в каждой строке $P(t)$ равна 1:

$$\sum_j P_{ij}(t) = 1$$

(полная вероятность), то есть матрица $P(t)$ является стохастической справа (или по строкам).

3. Все собственные числа λ матрицы $P(t)$ не превосходят 1 по абсолютной величине: $|\lambda| \leq 1$. Если $|\lambda| = 1$, то $\lambda = 1$.

4. Собственному числу $\lambda = 1$ матрицы $\mathbf{P}(t)$ соответствует, как минимум, один неотрицательный левый собственный вектор-строка (равновесие):
 $(p_1^*, p_2^*, \dots); p_i^* \geq 0; \sum_i p_i^* = 1; \sum_i p_i^* P_{ij}(t) = p_j^*$.

5. Для собственного числа $\lambda = 1$ матрицы $\mathbf{P}(t)$ все корневые векторы являются собственными, то есть соответствующие жордановы клетки тривиальны.

Матрица Q обладает следующими свойствами:

1. Внедиагональные матричные элементы Q неотрицательны:
 $q_{ij} \geq 0 \quad i \neq j$.

2. Диагональные матричные элементы Q неположительны: $q_{ii} \leq 0$.

3. Сумма элементов в каждой строке Q равна 0:

$$\sum_j q_{ij} = 0.$$

j —

4. Действительная часть всех собственных чисел μ матрицы Q неположительна: $Re(\mu) \leq 0$. Если $Re(\mu) = 0$, то $\mu = 0$.

5. Собственному числу $\mu = 0$ матрицы Q соответствует, как минимум, один неотрицательный левый собственный вектор-строка (равновесие):

$$(p_1^*, p_2^*, \dots); p_i^* \geq 0; \sum_i p_i^* = 1; \sum_i p_i^* q_{ij} = 0.$$

6. Для собственного числа $\mu = 0$ матрицы Q все корневые векторы являются собственными, то есть соответствующие жордановы клетки тривиальны.

Граф переходов, связность и эргодические цепи Маркова

Для цепи Маркова с непрерывным временем строится ориентированный граф переходов (кратко — граф переходов) по следующим правилам:

- Множество вершин графа совпадает со множеством состояний цепи.
- Вершины i, j ($i \neq j$) соединяются ориентированным ребром $i \rightarrow j$, если $q_{ij} > 0$ (то есть интенсивность потока из i го состояния в j е положительна).

Топологические свойства графа переходов связаны со спектральными свойствами матрицы Q . В частности, для конечных цепей Маркова верны следующие теоремы:

- Следующие три свойства А, Б, В конечной цепи Маркова эквивалентны (обладающие ими цепи иногда называют **слабо эргодическими**):

А. Для любых двух различных вершин графа переходов i, j ($i \neq j$) найдется такая вершина k графа («общий сток»), что существуют ориентированные пути от вершины i к вершине k и от вершины j к вершине k . *Замечание:* возможен случай $k = i$ или $k = j$; в этом случае тривиальный (пустой) путь от i к i или от j к j также считается ориентированным путем.

Б. Нулевое собственное число матрицы Q невырождено.

В. При $t \rightarrow \infty$ матрица $P(t)$ стремится к матрице, у которой все строки совпадают (и совпадают, очевидно, с равновесным распределением).

- Следующие пять свойств А, Б, В, Г, Д конечной цепи Маркова эквивалентны (обладающие ими цепи называют **эргодическими**):

А. Граф переходов цепи ориентированно связан.

Б. Нулевое собственное число матрицы Q невырождено и ему соответствует строго положительный левый собственный вектор (равновесное распределение).

В. Для некоторого $t > 0$ матрица $P(t)$ строго положительна (то есть $P_{ij}(t) > 0$ для всех i, j).

Г. Для всех $t > 0$ матрица $P(t)$ строго положительна.

Д. При $t \rightarrow \infty$ матрица $P(t)$ стремится к строго положительной матрице, у которой все строки совпадают (и совпадают, очевидно, с равновесным распределением).

Примеры

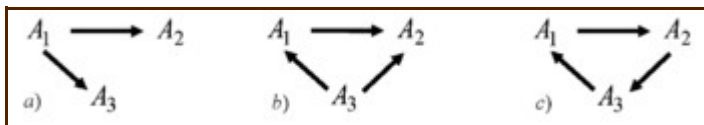


Рис. Примеры графов переходов для цепей Маркова:

а) цепь не является слабо эргодической (не существует общего стока для состояний A_2 , A_3);

б) слабо эргодическая, но не эргодическая цепь (граф переходов не является ориентированно связным)

с) эргодическая цепь (граф переходов ориентированно связан).

Рассмотрим цепи Маркова с тремя состояниями и с непрерывным временем, соответствующие графам переходов, представленным на рис. В случае (а) отличны от нуля только следующие недиагональные элементы матрицы интенсивностей — q_{12} , q_{13} , в случае (b) отличны от нуля только q_{12} , q_{31} q_{32} , а в случае (с) — q_{12} , q_{31} q_{23} . Остальные элементы определяются свойствами матрицы Q (сумма элементов в каждой строке равна 0). В результате для графов (а), (b), (с) матрицы

$$Q_a = \begin{pmatrix} -(q_{12} + q_{13}) & q_{12} & q_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

интенсивностей имеют вид:

$$Q_b = \begin{pmatrix} -q_{12} & q_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ q_{31} & q_{32} & -(q_{31} + q_{32}) \end{pmatrix}, Q_c = \begin{pmatrix} -q_{12} & q_{12} & 0 \\ 0 & -q_{23} & q_{23} \\ q_{31} & 0 & -q_{31} \end{pmatrix},$$

Основное кинетическое уравнение

Основное кинетическое уравнение описывает эволюцию распределения вероятностей в цепи Маркова с непрерывным временем. «Основное уравнение» здесь — не эпитет, а перевод термина англ. *Master equation*. Для вектора-строки распределения вероятностей π основное кинетическое уравнение имеет вид:

$$\frac{d\pi}{dt} = \pi Q$$

и совпадает, по существу, с прямым уравнением Колмогорова.

В физической литературе чаще используют векторы-столбцы вероятностей и записывают основное кинетическое уравнение в виде, который явно использует закон сохранения полной вероятности:

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_{j, j \neq i} (T_{ij}p_j - T_{ji}p_i),$$

где $T_{ij} = q_{ji}$.

Если для основного кинетического уравнения существует положительное равновесие $p_i^* > 0$, то его можно записать в форме

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_{j, j \neq i} T_{ij}p_j^* \left(\frac{p_j}{p_j^*} - \frac{p_i}{p_i^*} \right).$$

Функции Ляпунова для основного кинетического уравнения

Для основного кинетического уравнения существует богатое семейство выпуклых функций Ляпунова — монотонно меняющихся со временем функций распределения вероятностей. Пусть $h(x)$ ($x > 0$) — выпуклая функция одного переменного. Для любого положительного распределения вероятностей ($p_i > 0$) определим *функцию Моримото* $H_h(p)$:

$$H_h(p) = \sum_i p_i^* h\left(\frac{p_i}{p_i^*}\right).$$

Производная $H_h(p)$ по времени, если $p(t)$ удовлетворяет основному кинетическому уравнению, есть

$$\frac{dH_h(p(t))}{dt} = \sum_{i,j} T_{ij} p_j^* \left[h\left(\frac{p_i}{p_i^*}\right) - h\left(\frac{p_j}{p_j^*}\right) + h'\left(\frac{p_i}{p_i^*}\right) \left(\frac{p_j}{p_j^*} - \frac{p_i}{p_i^*}\right) \right] \leq 0$$

Последнее неравенство справедливо из-за выпуклости $h(x)$.

Примеры функций Моримото $H_h(p)$

$$H_h(p) = \sum_i |p_i - p_i^*|$$

- $h(x) = |x - 1|$;

эта функция — расстояние от текущего распределения вероятностей до равновесного в l_1 -норме. Сдвиг по времени является сжатием пространства вероятностных распределений в этой норме. (О свойствах сжатий см. статью Теорема Банаха о неподвижной точке.)

$$H_h(p) = \sum_i p_i \ln \left(\frac{p_i}{p_i^*} \right);$$

- $h(x) = x \ln x$,

эта функция — (минус) энтропия Кульбака (см. Расстояние Кульбака — Лейблера). В физике она соответствует свободной энергии, деленной на kT (где k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура):

если $p_i^* = \exp(\mu_0 - U_i/kT)$ (распределение Больцмана), то

$$H_h(p) = \sum_i p_i \ln p_i + \sum_i p_i U_i/kT - \mu_0 = (\langle U \rangle - TS)/kT$$

$$H_h(p) = - \sum_i p_i^* \ln \left(\frac{p_i}{p_i^*} \right);$$

- $h(x) = -\ln x$,

эта функция — аналог свободной энергии для энтропии Бурга, широко используемой в обработке сигналов:

$$S_{\text{Burg}} = \sum_i \ln p_i$$

- $h(x) = \frac{(x-1)^2}{2}$, $H_h(p) = \sum_i \frac{(p_i - p_i^*)^2}{2p_i^*}$;

это квадратичное приближение для (минус) энтропии Кульбака вблизи точки равновесия. С точностью до постоянного во времени слагаемого эта функция совпадает с (минус) энтропией Фишера, которую даёт следующий выбор,

- $$h(x) = \frac{x^2}{2}, \quad H_h(p) = \sum_i \frac{p_i^2}{2p_i^*};$$

это (минус) энтропия Фишера.

- $$h(x) = \frac{x^q - 1}{q - 1}, \quad q > 0, \quad q \neq 1$$

$$H_h(p) = \frac{1}{q - 1} \left[\sum_i p_i^* \left(\frac{p_i}{p_i^*} \right)^q - 1 \right];$$

это один из аналогов свободной энергии для энтропии Тсаллиса.
 Энтропия Тсаллиса (Tsallis entropy)

$$S_{q\text{Tsallis}}(p) = \frac{1}{q - 1} \left(1 - \sum_i p_i^q \right).$$

служит основой для статистической физики неэкстенсивных величин.
 При $q \rightarrow 1$ она стремится к классической энтропии Больцмана — Гиббса — Шеннона, а соответствующая функция Моримото — к (минус) энтропии Кульбака.