



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

Московский институт электроники и  
математики им. А.Н. Тихонова

# **Статистические свойства случайных блужданий с объемным и поверхностным подкреплением**

Лобашев Александр Алексеевич,  
МИЭМ НИУ ВШЭ

Научный руководитель: Тамм Михаил Владимирович

Москва, 2020



# Исследуемая модель в общем виде

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

Вес() = 1

Вес() =  $\exp(a)$

Вес() =  $\exp(b)$

 Непосещенная область

 Граница посещенной области


 Посещенная область


Имеется граф  $G=(V,E)$ , по которому перемещается агент.

- Агент находится в вершине Current.

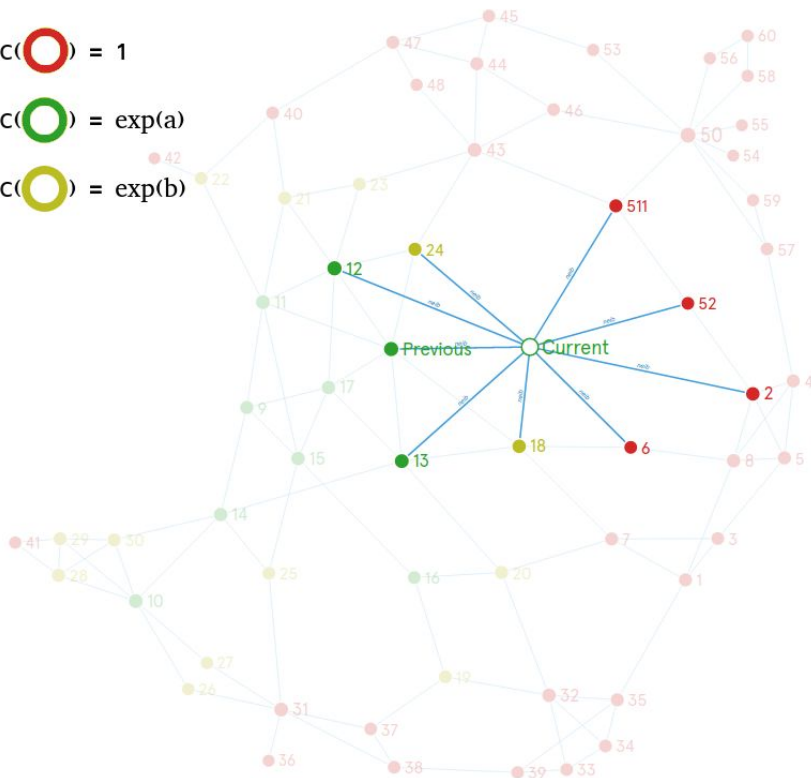
- Агент смотрит на все вершины графа, соседние с вершиной Current

- Соседние вершины могут быть трех типов:

 1. Вершины, в которых агент уже был (volume)

 2. Вершины, граничащие с вершинами, где агент уже был (surface)

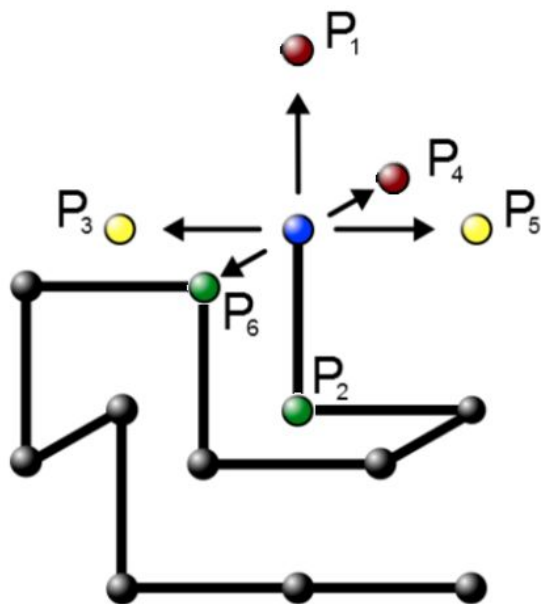
 3. Остальные вершины (bulk)





# Случайное блуждание с объемным и поверхностным подкреплением

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова



● - current position

● -  $P_2 = P_6 = \text{Exp}(b)$  Поверхностное подкрепление

● -  $P_3 = P_5 = \text{Exp}(a)$  Объемное подкрепление

● -  $P_1 = P_4 = 1$

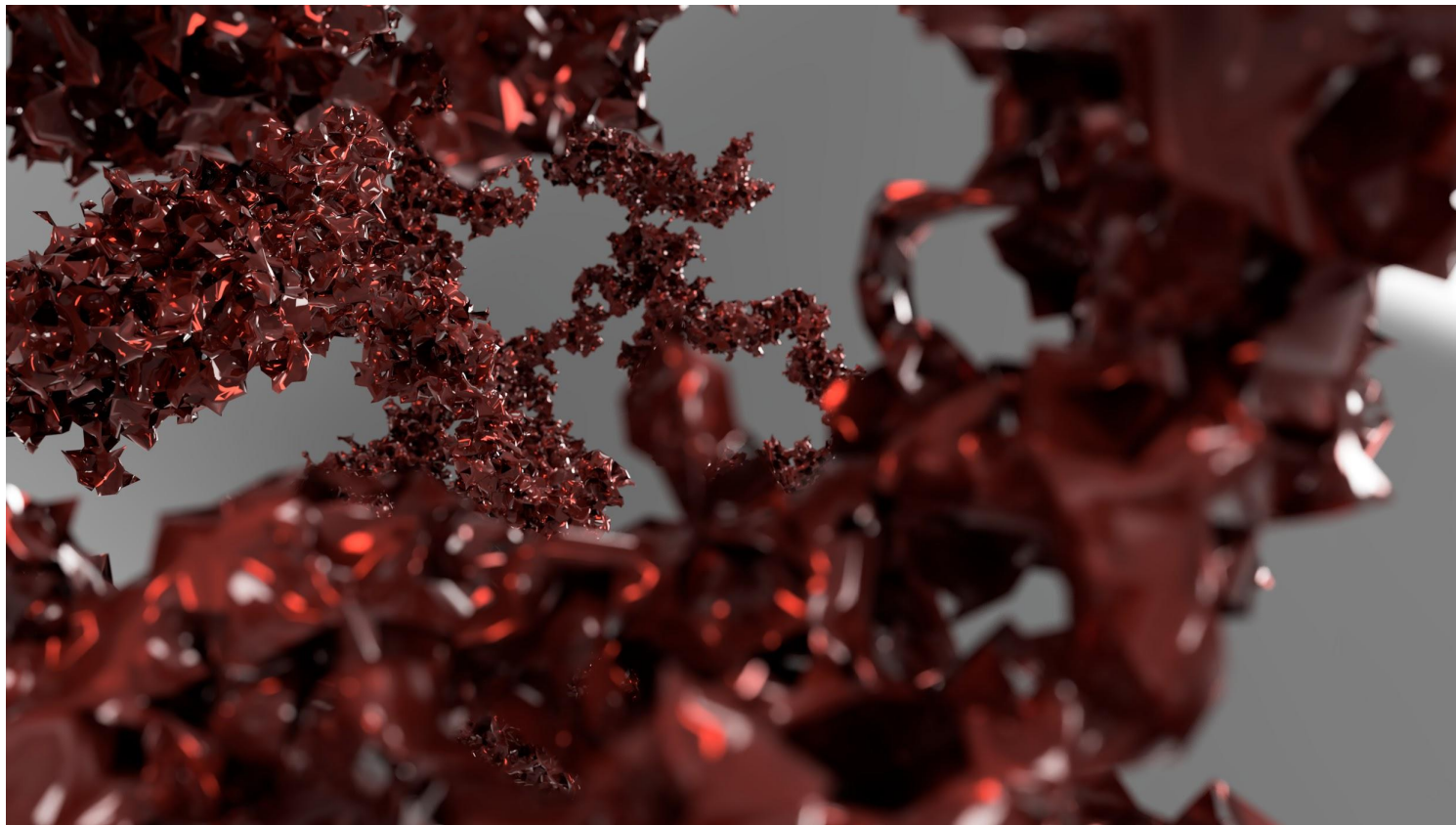
$P_i$  – weight of a step

В данной работе исследуется блуждание по 3-мерной кубической решетке.



# Пример траектории: клубок

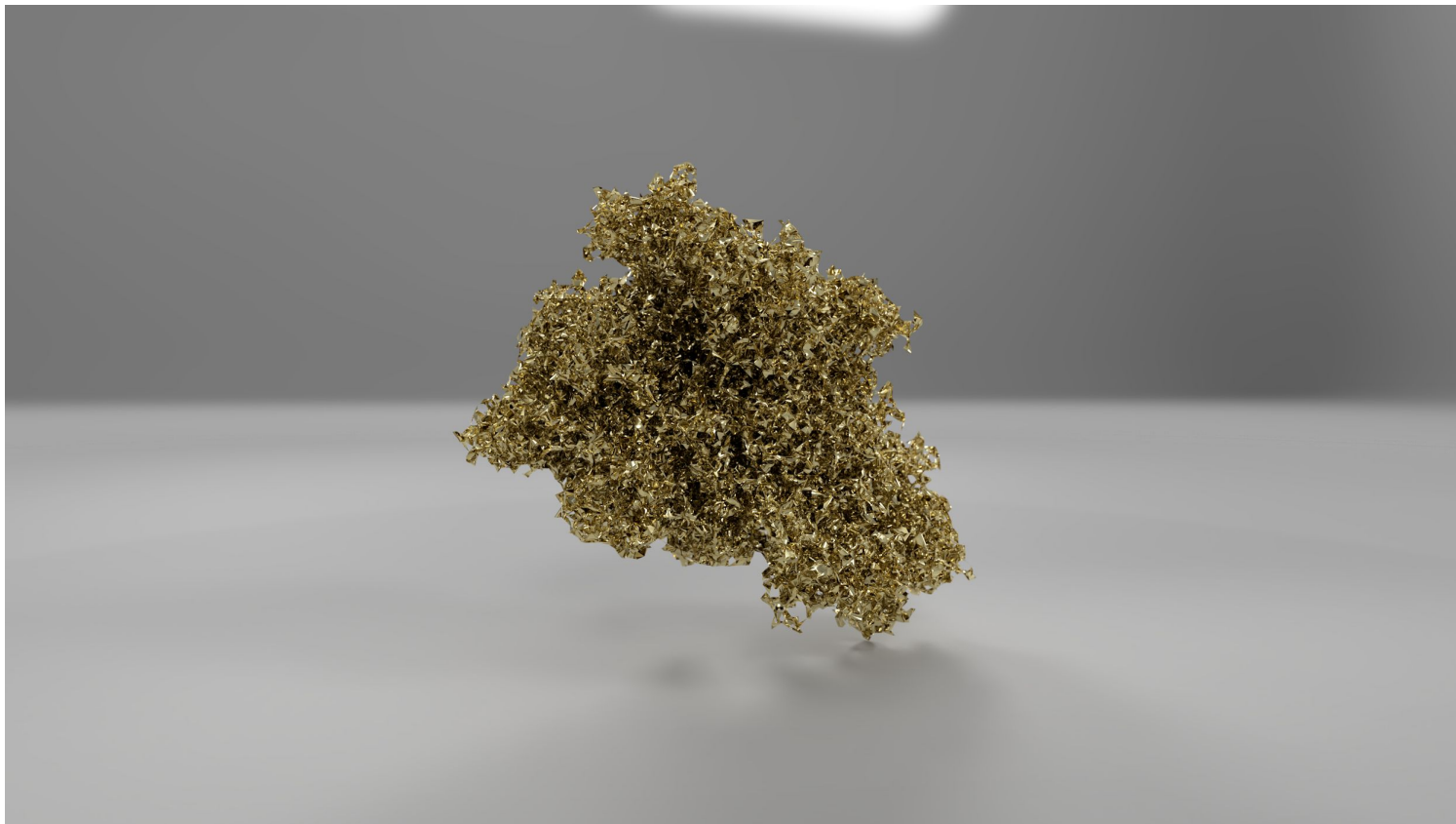
Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





# Пример траектории: глобула

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





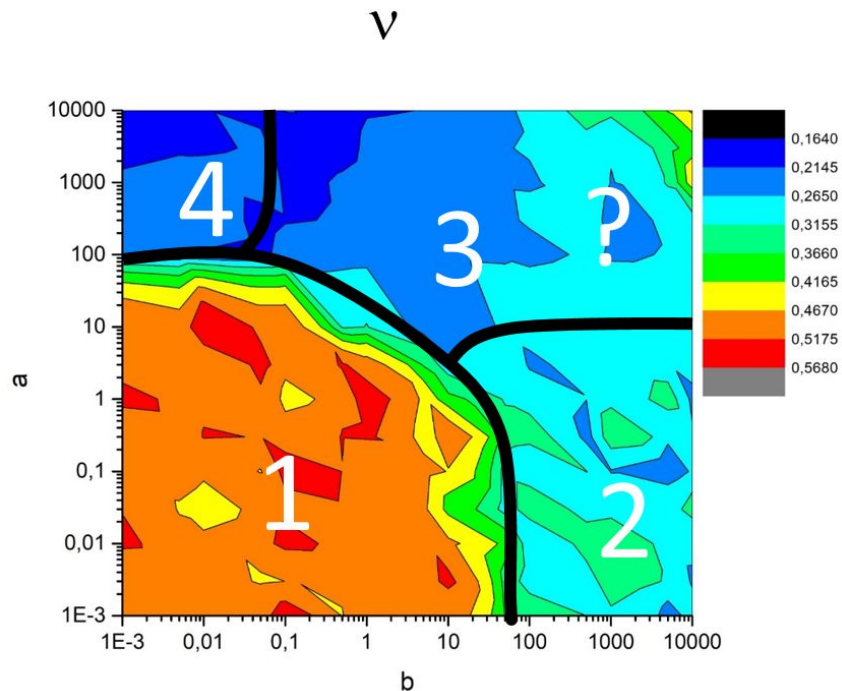
# Цели исследования

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

- Выяснить количество различных типов траекторий.
- Построить фазовую диаграммы модели в координатах  $(a, b)$ 
  - $a$  - коэффициент объемного подкрепления
  - $b$  - коэффициент поверхностного подкрепленияи найти границы раздела фаз.
- Найти макроскопические характеристики, остающиеся инвариантными внутри одной фазы.

# Результаты полученные традиционным методом

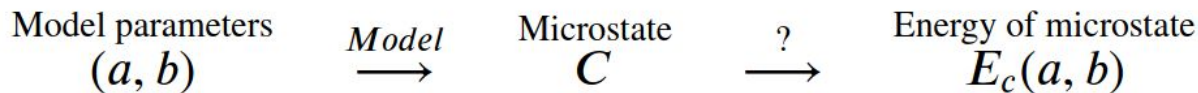
Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова



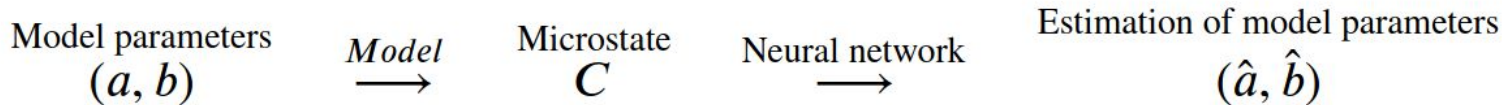
- Эскиз фазовой диаграммы модели в координатах ( $a$ ,  $b$ )  
 $a$  - коэффициент объемного подкрепления  
 $b$  - коэффициент поверхностного подкрепления



## Классический подход



## Используемый в исследовании подход



**Обучение нейронной сети неявно заменяет вычисление статсуммы:**

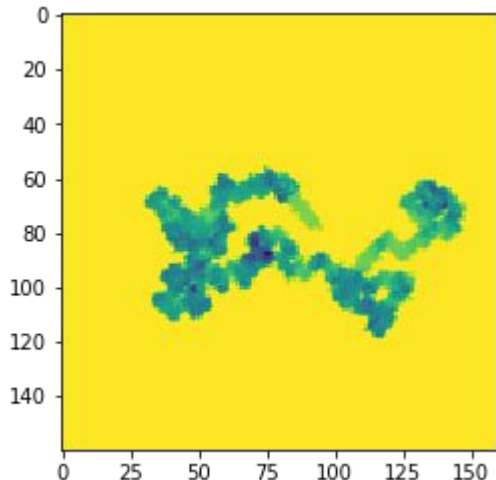
$$(\hat{a}, \hat{b})^T = \frac{\sum_{(a,b)} (a, b)^T e^{-\beta E_{(a,b)}^{-1}(C)}}{\sum_C e^{-\beta E_{(a,b)}^{-1}(C)}}$$





$a = 2, b = -4$

Исходные  
параметры



Реализация траектории  
при заданных параметрах

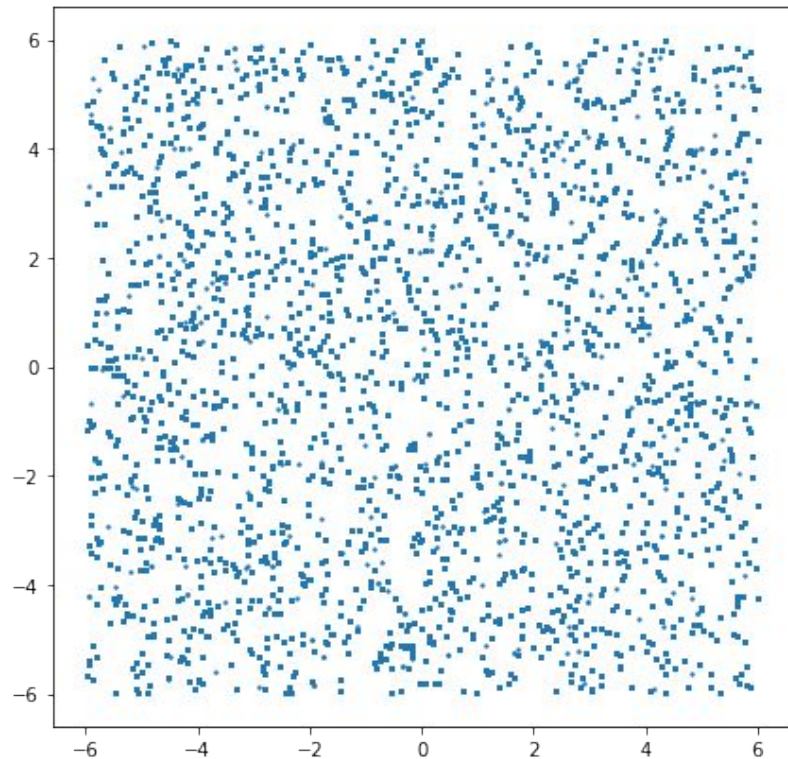
$a' = 1.124, b' = -5.215$

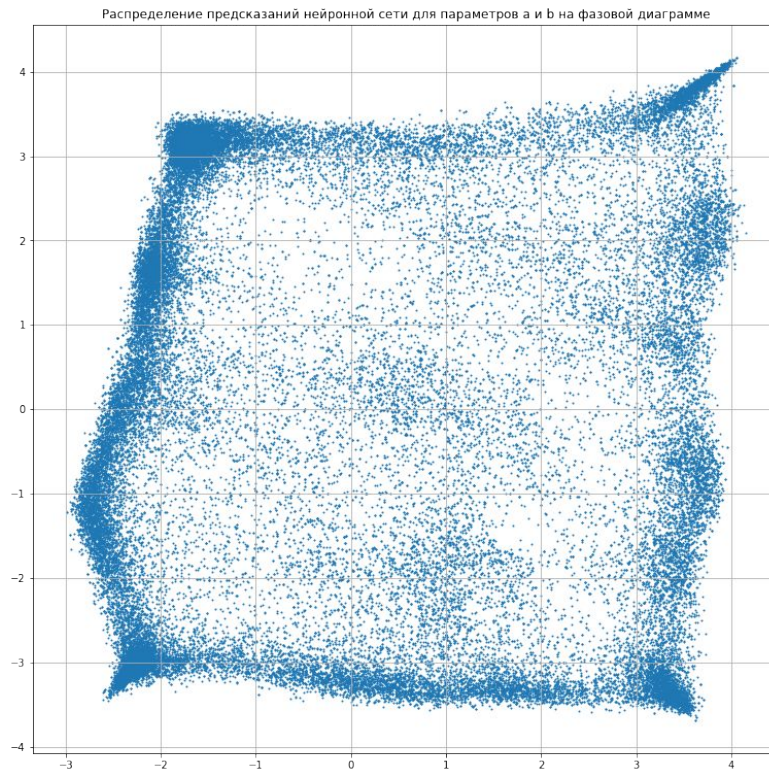
Прогноз нейронной  
сети

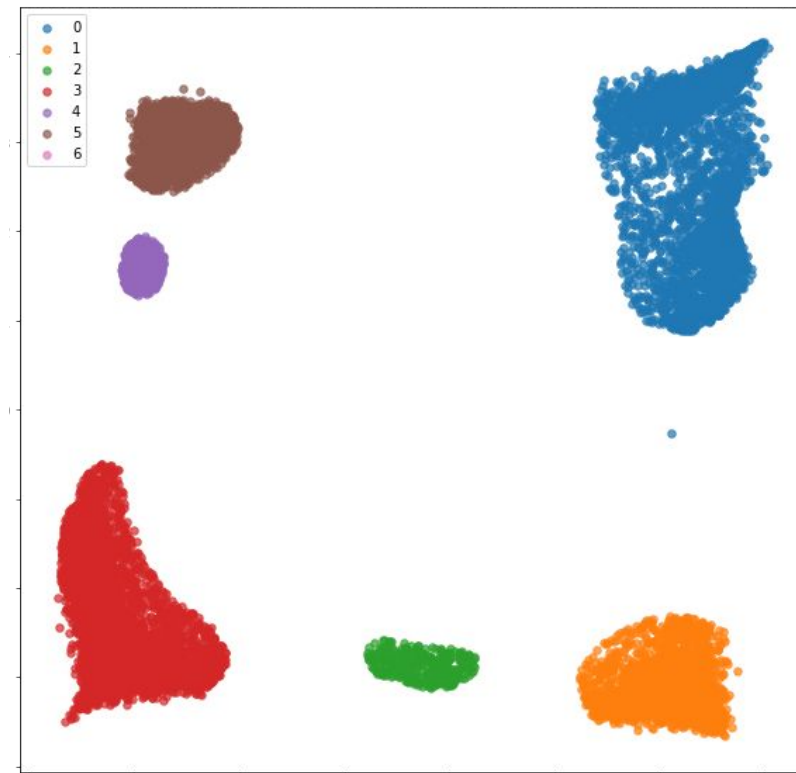


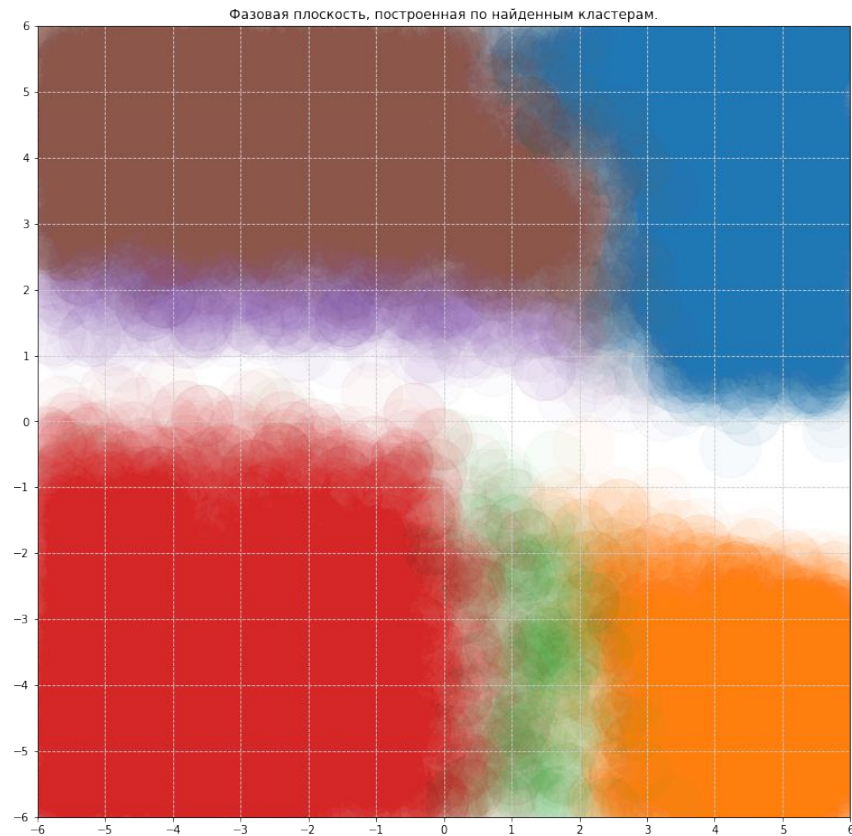
# Методология исследования

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





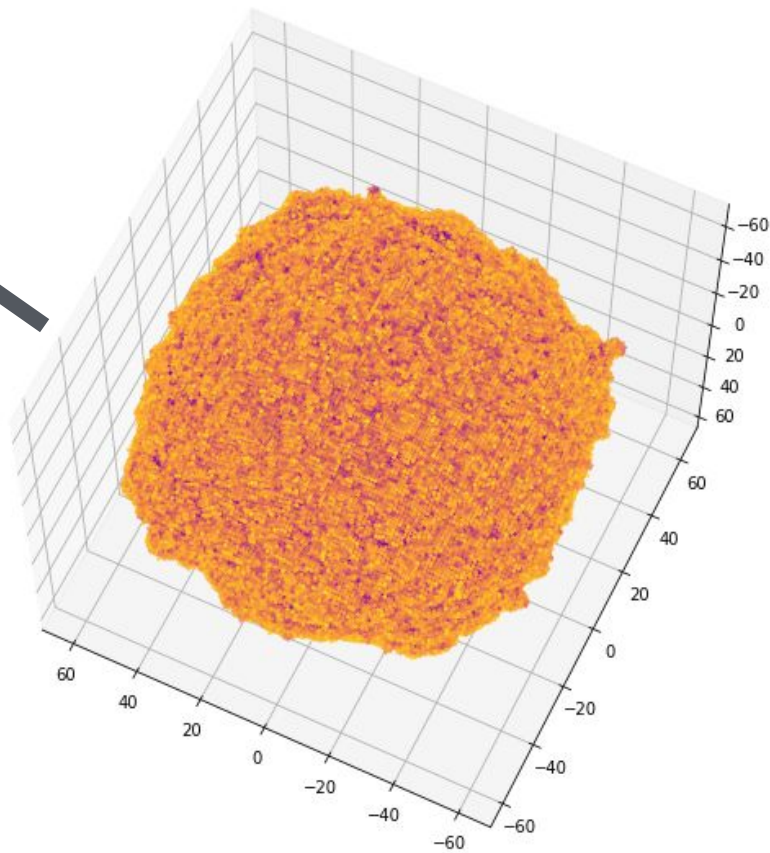
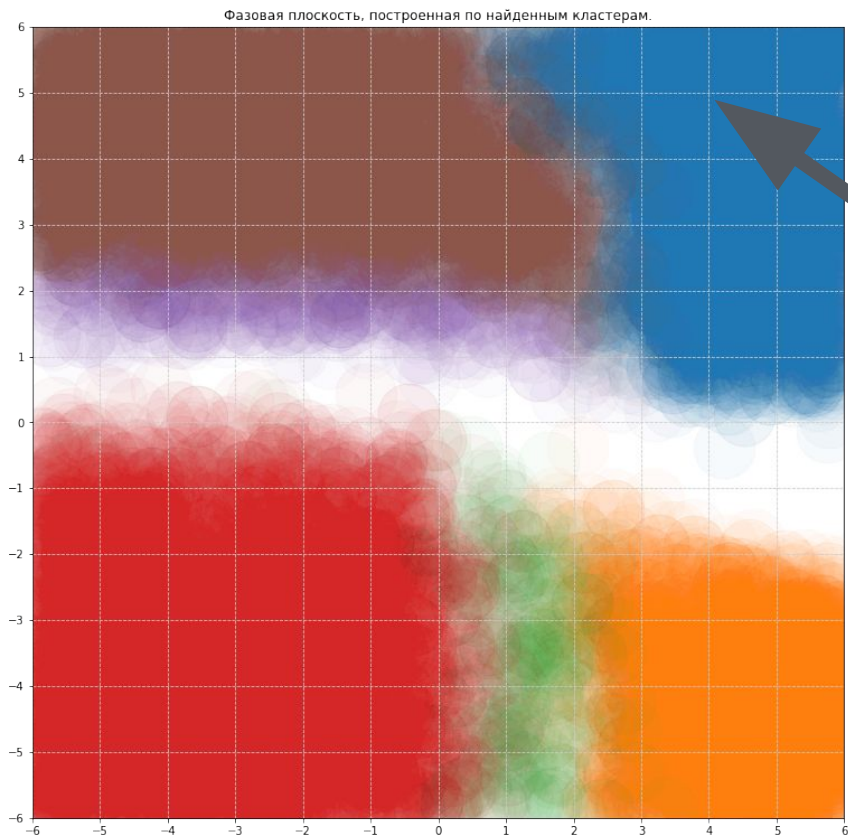






# Визуализация найденных кластеров

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

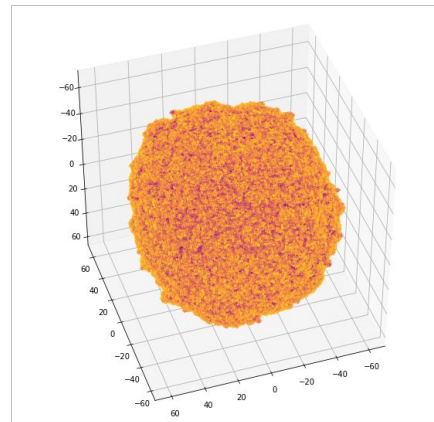
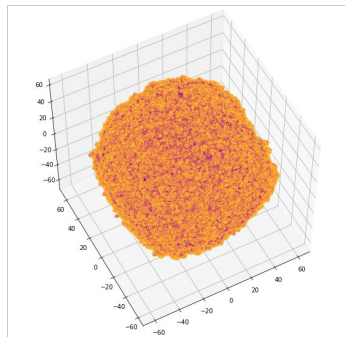
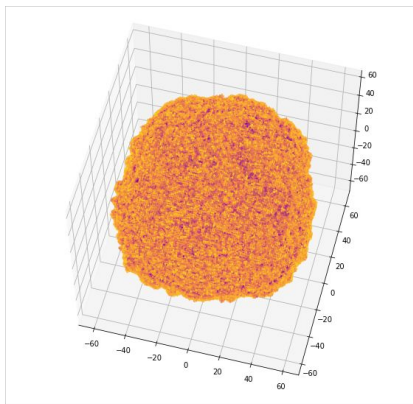
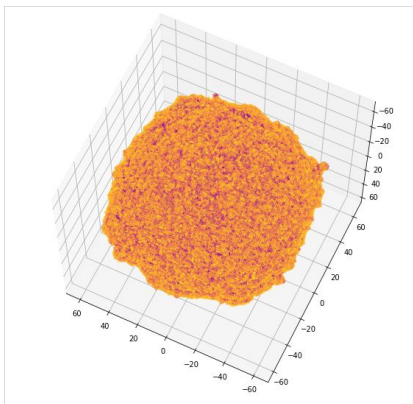
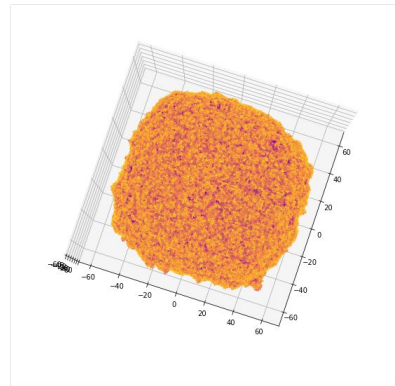
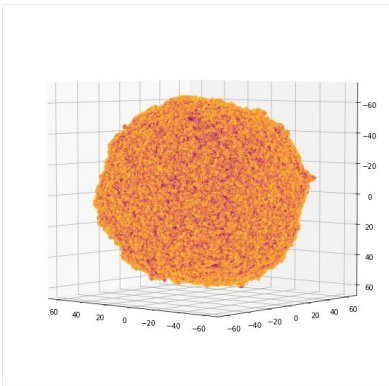
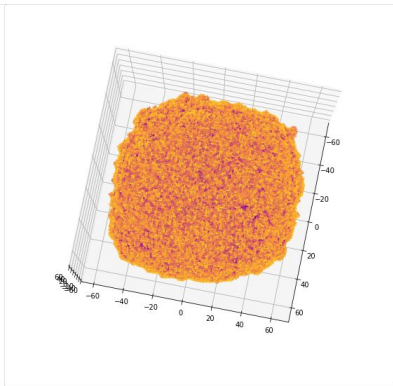
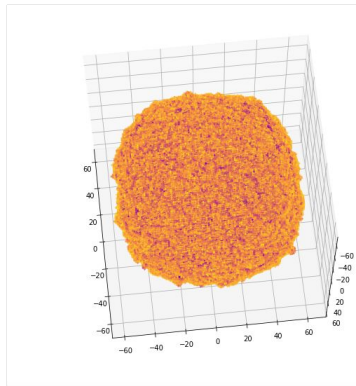






# Визуализация найденных кластеров

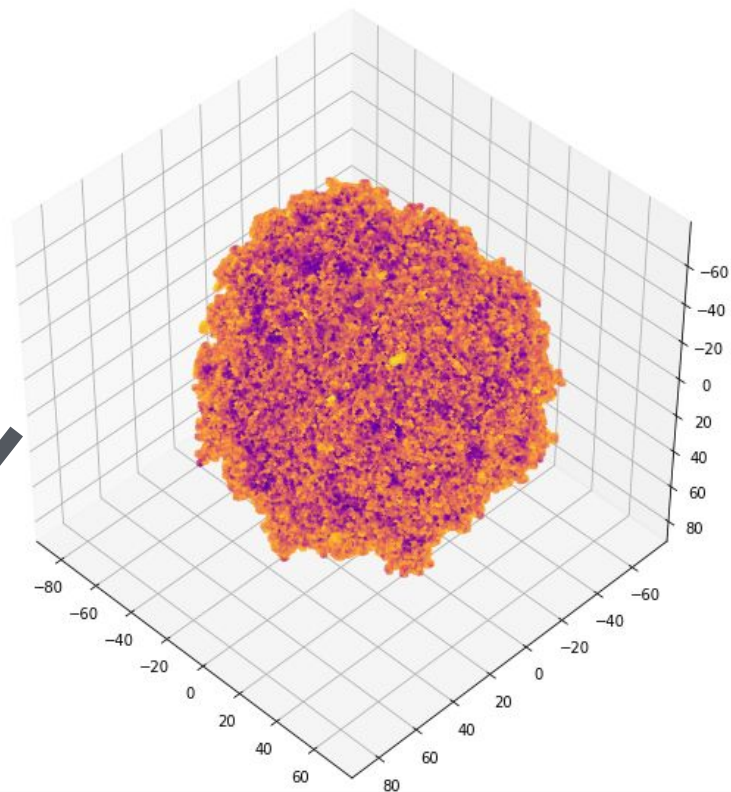
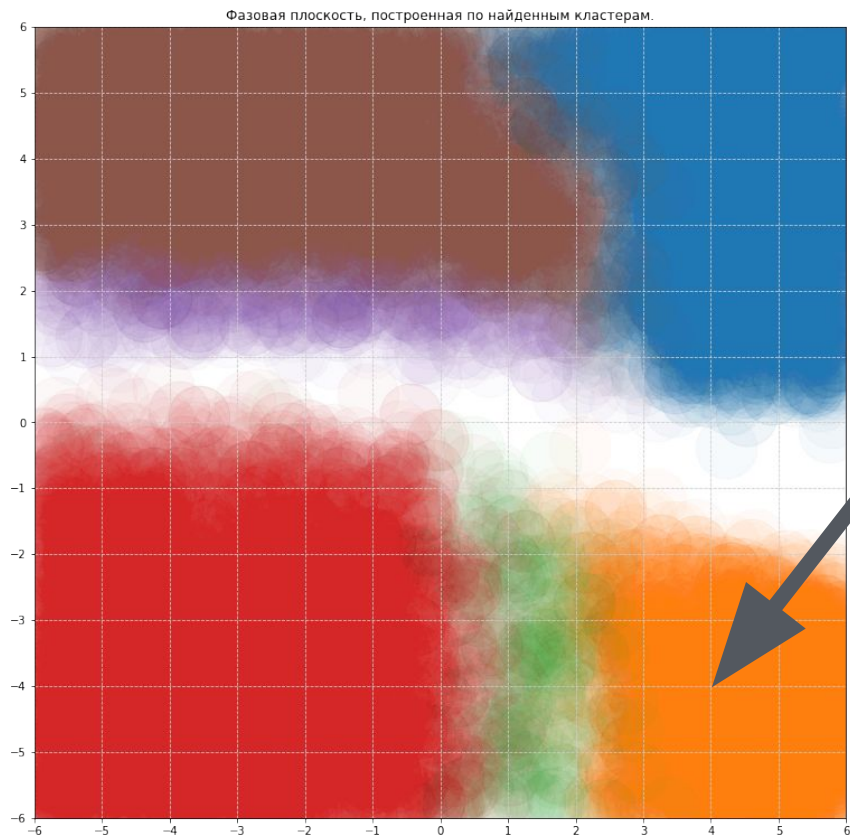
Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





# Визуализация найденных кластеров

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

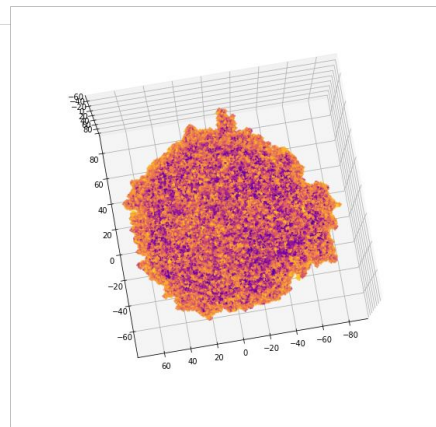
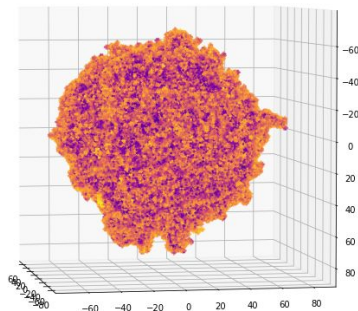
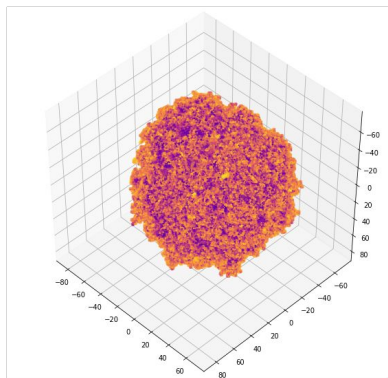
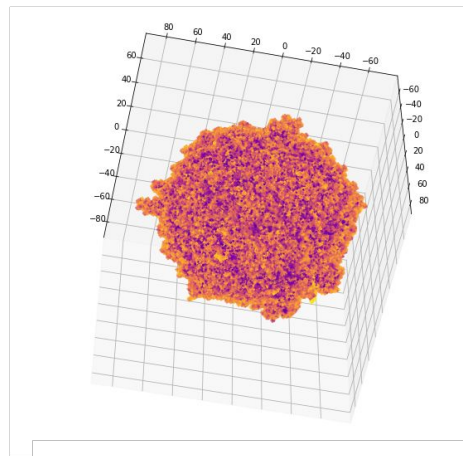
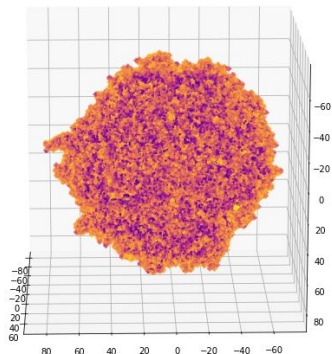
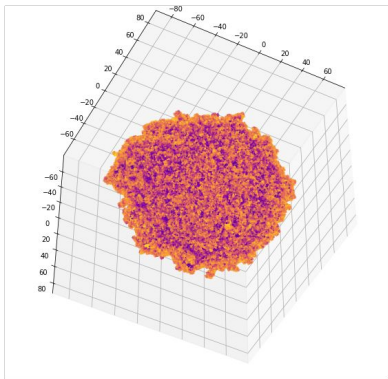






# Визуализация найденных кластеров

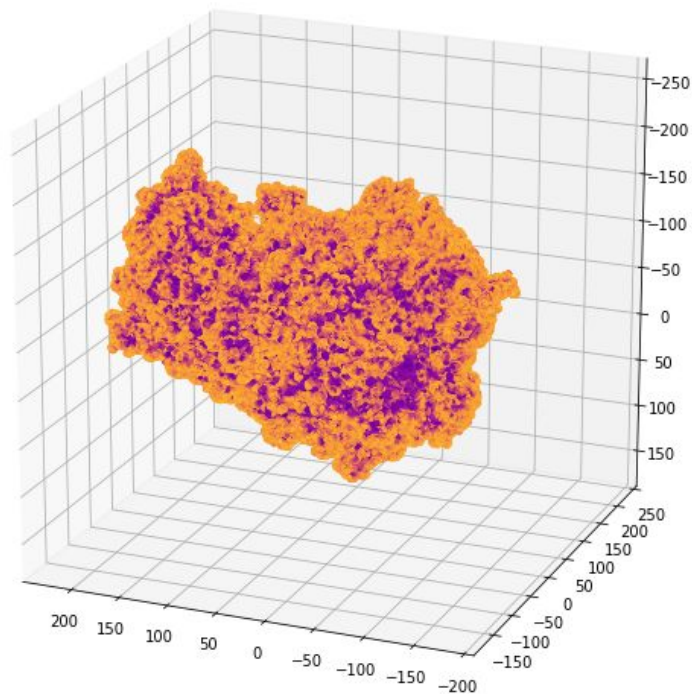
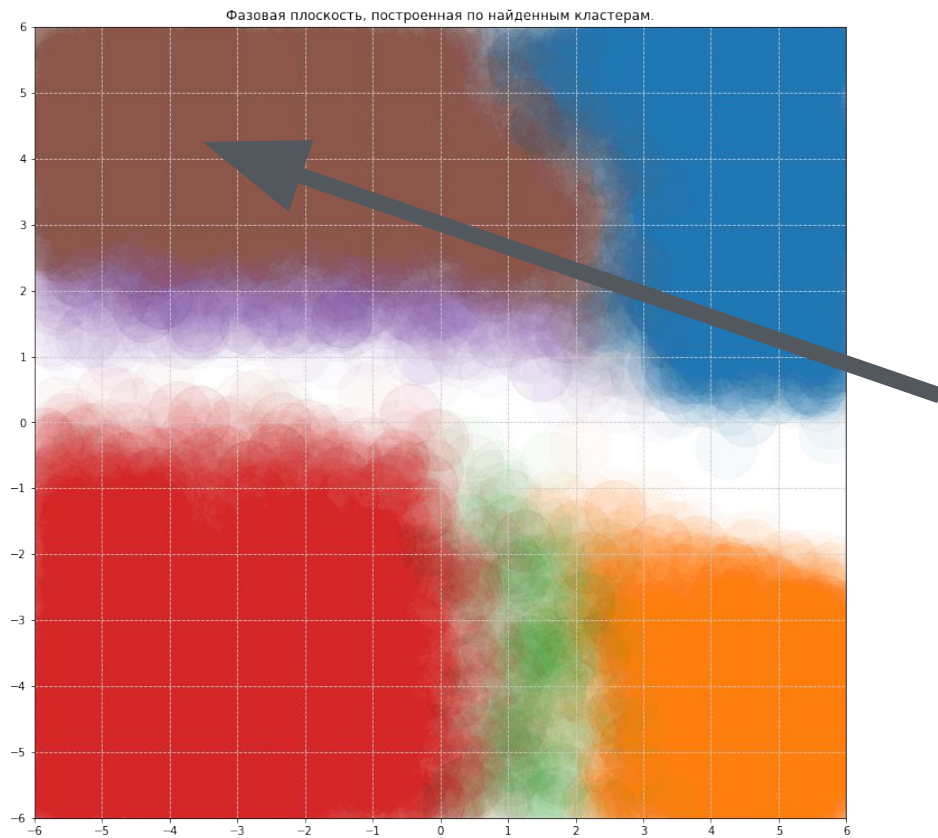
Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





# Визуализация найденных кластеров

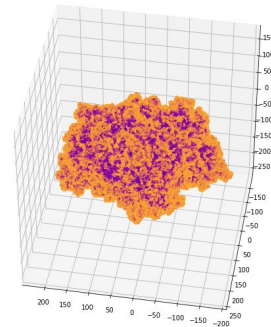
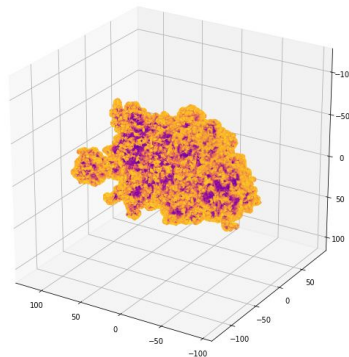
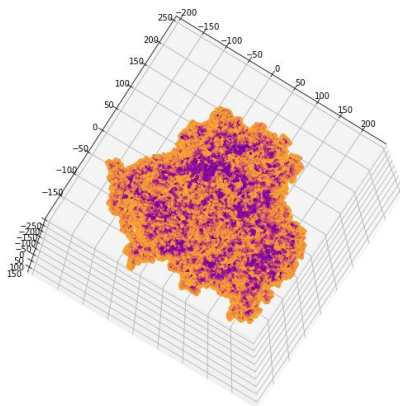
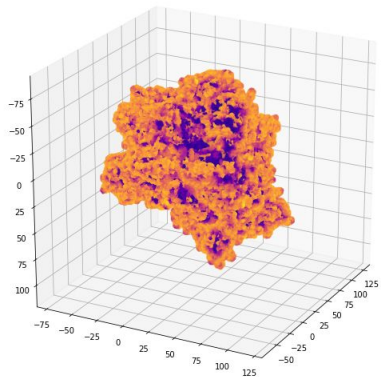
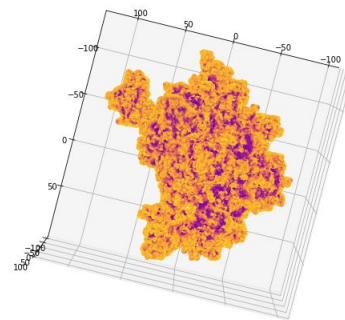
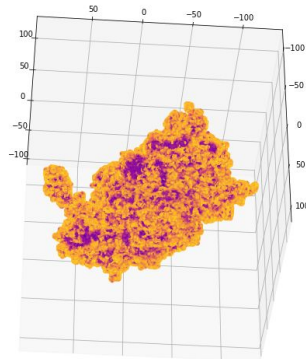
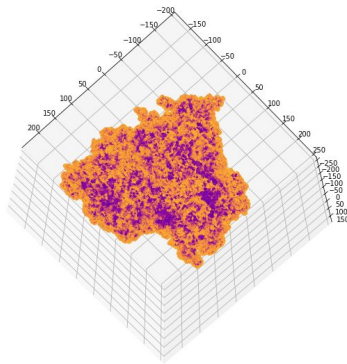
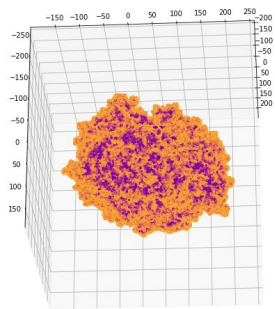
Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





# Визуализация найденных кластеров

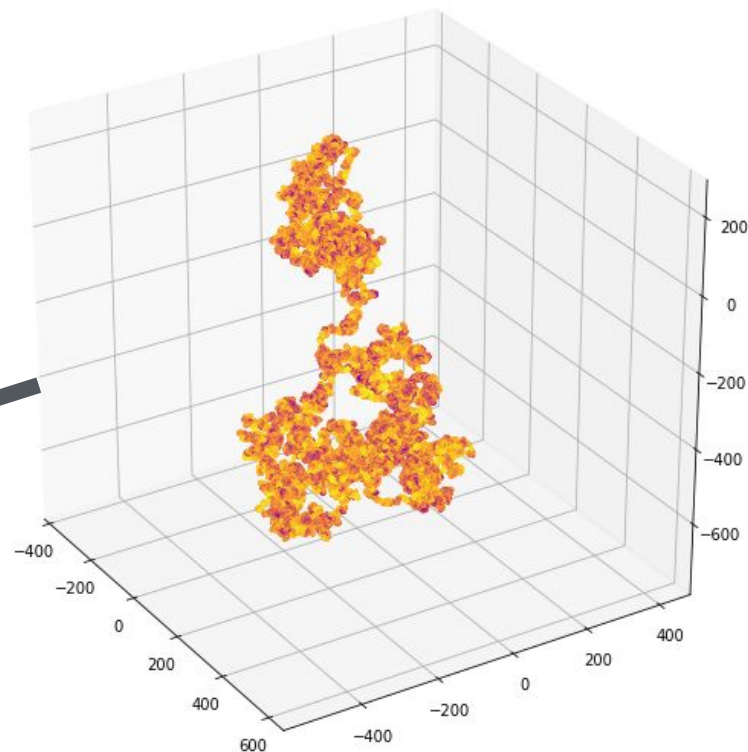
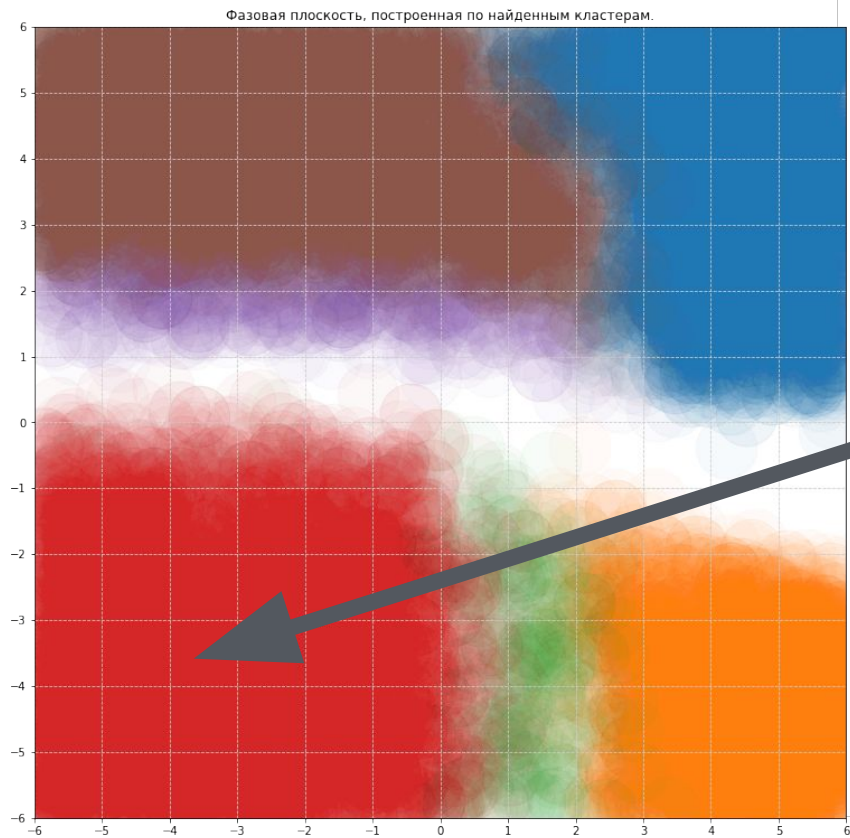
Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





# Визуализация найденных кластеров

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

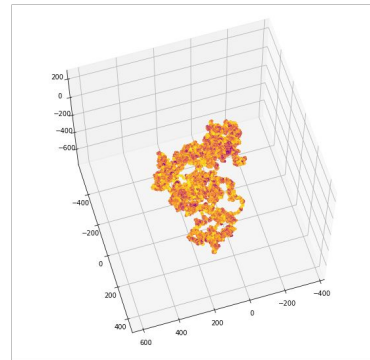
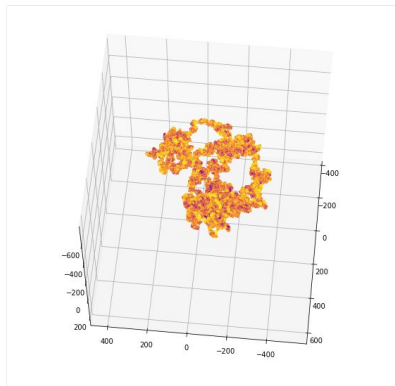
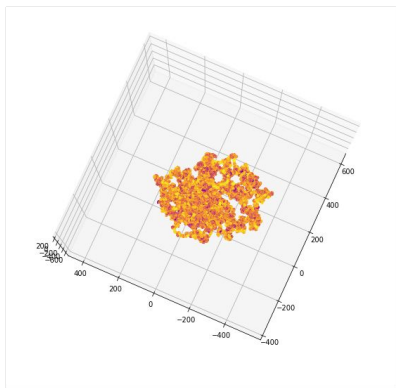
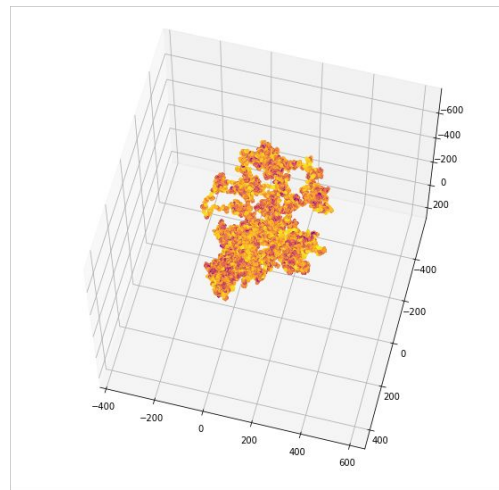
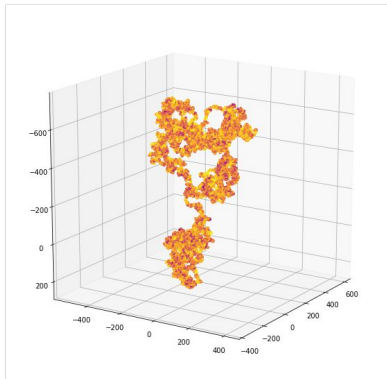
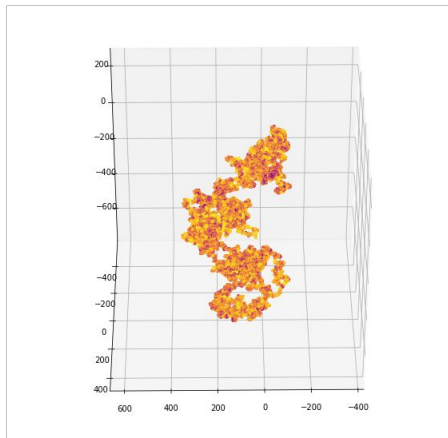






# Визуализация найденных кластеров

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова





# Поиск макроскопических характеристик траектории

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

---

Подходящими кандидатами для величин, характеризующих фазу в целом, оказались

- радиус инерции траектории / среднеквадратичное расстояние между точками траектории
- отношение объема траектории к объему границы

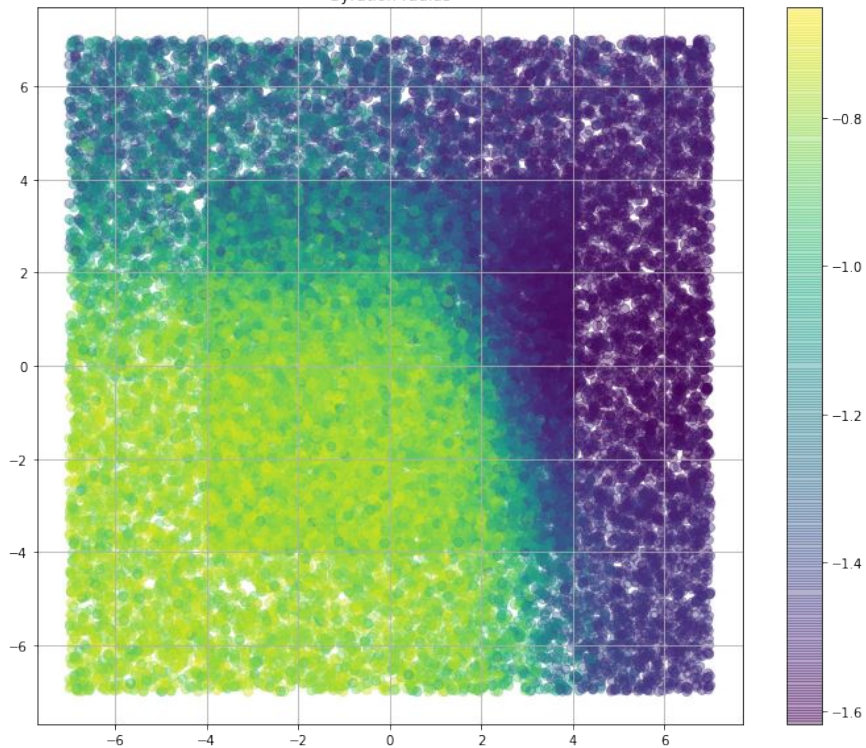
Попробуем предсказать параметры модели используя только эти два числа.



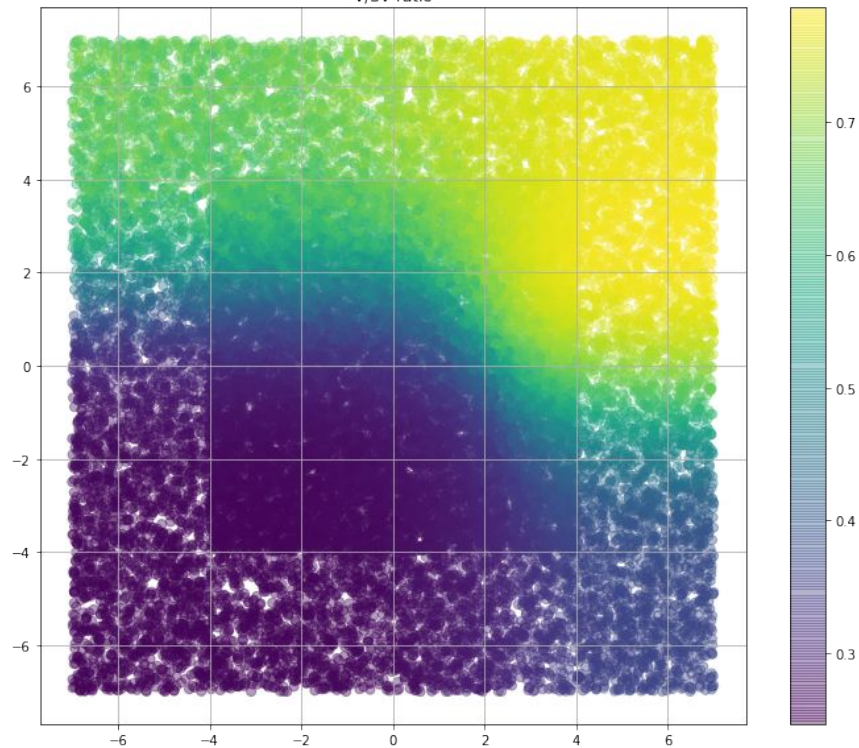
# Поиск макроскопических характеристик траектории

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

Gyration radius



V/SV ratio

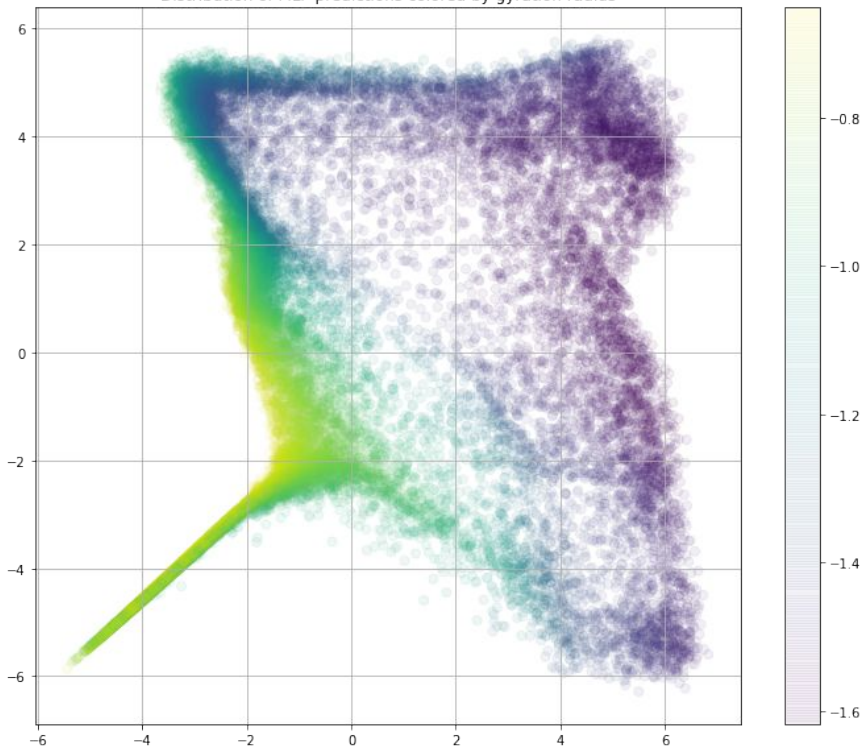




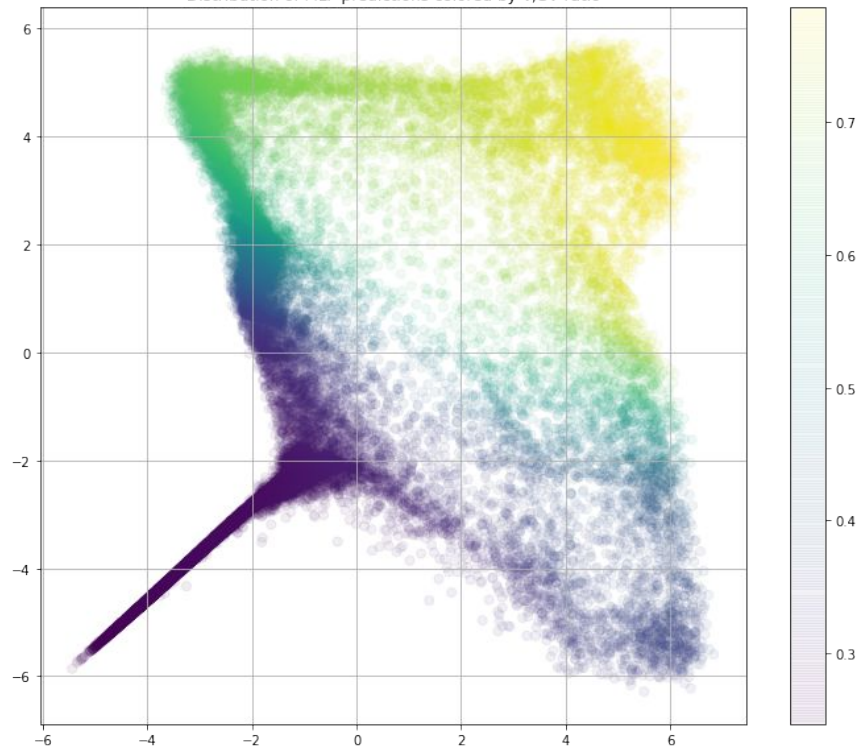
# Поиск макроскопических характеристик траектории

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

Distribution of MLP predictions colored by gyration radius



Distribution of MLP predictions colored by V/SV ratio



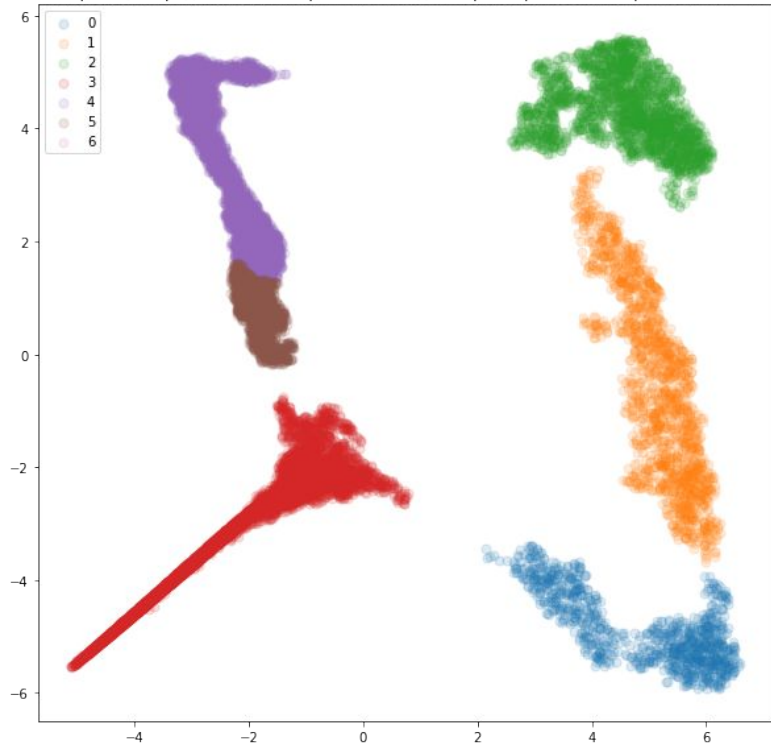




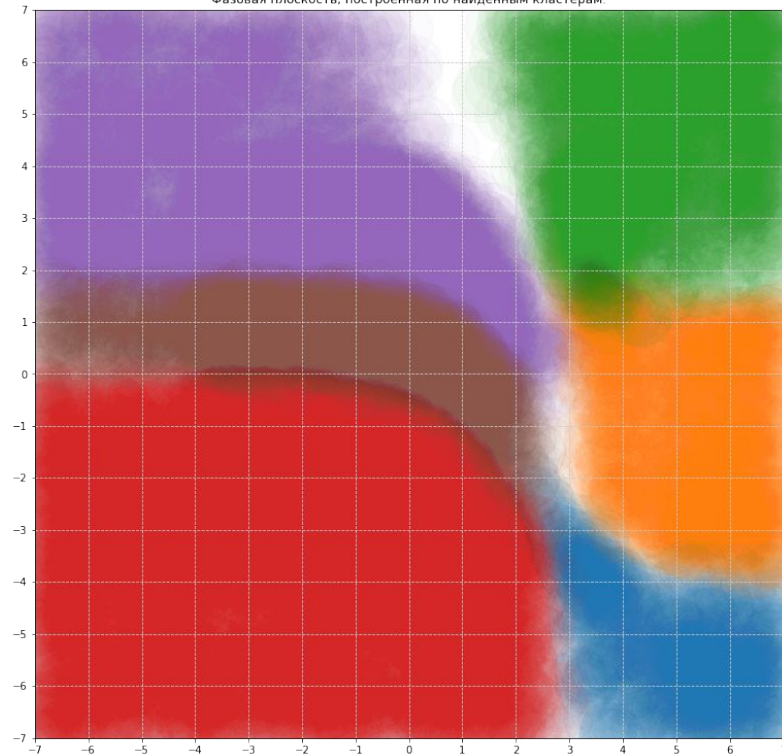
# Поиск макроскопических характеристик траектории

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

Кластеризация предсказаний нейронной сети для параметров  $a$  и  $b$  на фазовой плоскости



Фазовая плоскость, построенная по найденным кластерам

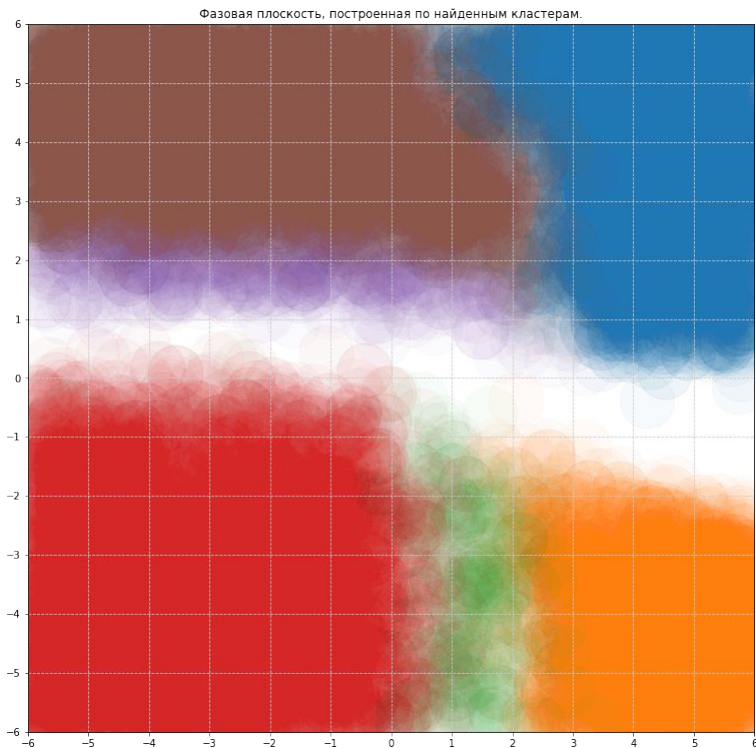




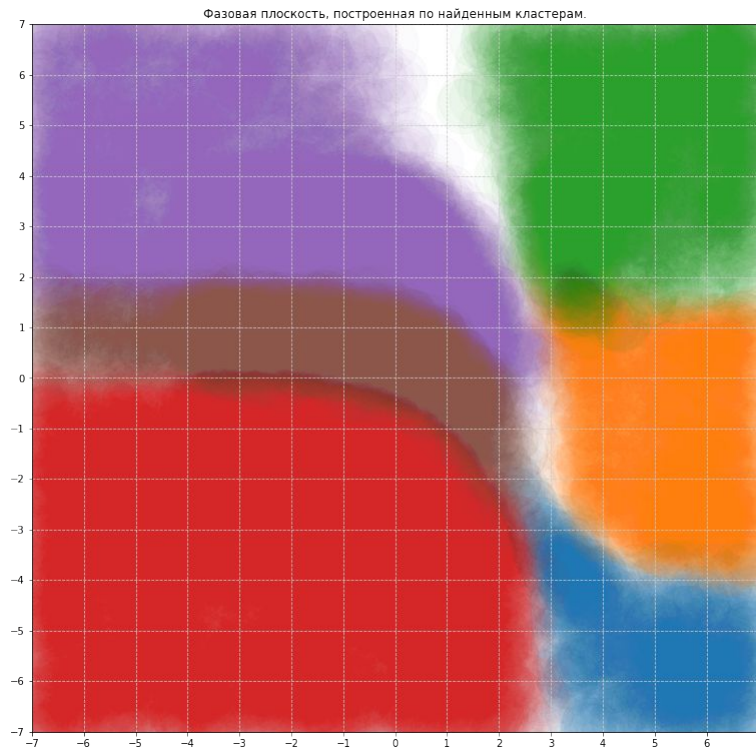
# Сравнение фазовых диаграмм

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова

Используется изображение траектории



Используется радиус инерции  
и фрактальная размерность





В работе были найдены две новые фазы, ранее не упоминавшиеся в литературе, и было показано, что все найденные фазы можно различить по двум параметрам: радиусу инерции и фрактальной размерности траектории.

Подробное описание используемых архитектур моделей, программ симуляции и визуализации, а также исходные коды можно найти по ссылке

[https://github.com/akrisroof/reinforced\\_random\\_walk](https://github.com/akrisroof/reinforced_random_walk)



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ