Оцінювання характеристик частково спостережуваного ланцюга Маркова на двійкових послідовностях

А. В. Цибульник   І. І. Ніщенко

Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених

2023

План доповіді

1. Сфери застосування бінарних послідовностей
2. Моделювання об'єкту дослідження
3. Побудова оцінок невідомих параметрів
4. Результати чисельного експерименту

План доповіді

1. Сфери застосування бінарних послідовностей
2. Моделювання об'єкту дослідження
3. Побудова оцінок невідомих параметрів
4. Результати чисельного експерименту

Сфери застосування бінарних послідовностей

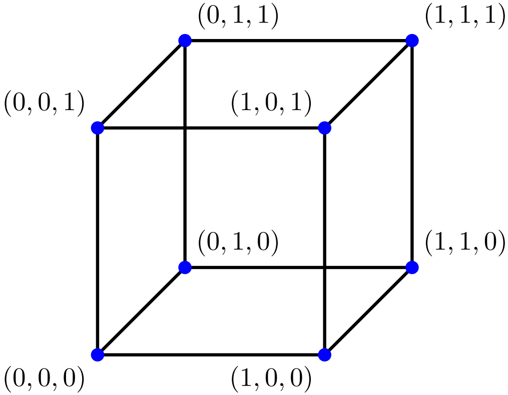
- Еволюція ДНК в біології
- Бінарні послідовності в теорії інформації
- Спінові системи у фізиці

План доповіді

1. Сфери застосування бінарних послідовностей
2. Моделювання об'єкту дослідження
3. Побудова оцінок невідомих параметрів
4. Результати чисельного експерименту

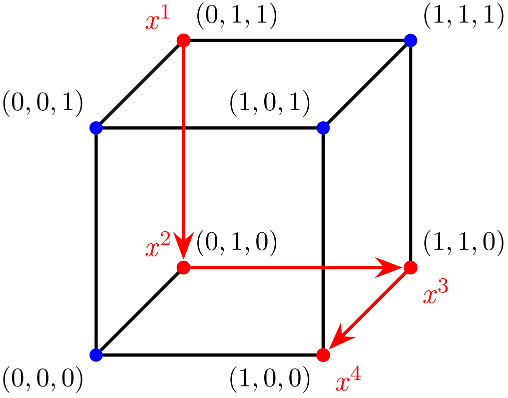
Моделювання об'єкту дослідження

Еволюцію бінарної послідовності довжини N уявимо як випадкове блукання вершинами N-вимірного куба.



Моделювання об'єкту дослідження

Лініве блукання: з імовірністю p залишаємося на місці, з імовірністю $\frac{1-p}{N}$ переходимо в сусідню вершину.



	x^t
$t=1$	$(0,1,1)$
$t=2$	$(0,1,0)$
$t=3$	$(1,1,0)$
$t=4$	$(1,0,0)$

Моделювання об'єкту дослідження

$\{X^t\}_{t=\overline{1,T}}$ є ланцюгом Маркова зі станами в $E = \{0,1\}^N$ з початковим рівномірним розподілом π :

$$\pi_x = P\left(X^1 = x\right) = \frac{1}{2^N}$$

та матрицею перехідних імовірностей A :

$$A_{xx'} = P\left(X^{t+1} = x' \mid X^t = x\right) = \begin{cases} p, & d_H(x,x') = 0 \\ \frac{1-p}{N}, & d_H(x,x') = 1 \\ 0, & \text{інакше} \end{cases}$$

Моделювання об'єкту дослідження

Спостерігаємо набір функціоналів

$$Y^t = (Y_1^t, \ldots, Y_L^t) = (\sum_{i \in I_1} X_i^t, \ldots, \sum_{i \in I_L} X_i^t),$$

де $I_1, \ldots, I_L$ є заданими підмножинами $\{1, 2, \ldots, N\}$.

Моделювання об'єкту дослідження

Спостерігаємо набір функціоналів

$$Y^t = (Y_1^t, \ldots, Y_L^t) = (\sum_{i \in I_1} X_i^t, \ldots, \sum_{i \in I_L} X_i^t),$$

де $I_1, \ldots, I_L$ є заданими підмножинами $\{1, 2, \ldots, N\}$.

Наприклад, $N = 12$, $I_1 = (1, 2, 3)$, $I_2 = (6, 7, 10, 11, 12)$

	x^t	y^t
$t = 1$	010011101101	$(1, 4)$
$t = 2$	011011101101	$(2, 4)$
$t = 3$	011011111101	$(2, 4)$
$t = 4$	011011111111	$(2, 5)$

Моделювання об'єкту дослідження

Твердження

Послідовність $\{(X^t, Y^t)\}_{t=\overline{1,T}}$ *утворює приховану марковську модель* (π, A, B), *де*

$$B_{xy} = P\left(Y^t = y \,|\, X^t = x\right) = \prod_{k=1}^{L} \mathbb{1}\left(y_k = \sum_{i \in I_k} x_i\right)$$

План доповіді

1. Сфери застосування бінарних послідовностей
2. Моделювання об'єкту дослідження
3. Побудова оцінок невідомих параметрів
4. Результати чисельного експерименту

Постановка задачі

1. Оцінити параметр p за набором спостережень та декодувати послідовність станів прихованого ланцюга;

Постановка задачі

1. Оцінити параметр p за набором спостережень та декодувати послідовність станів прихованого ланцюга;

Метод максимальної правдоподібності

$$P\left(Y = y \,|\, p\right) = \sum_{x \in E^T} P\left(X = x,\, Y = y \,|\, p\right) \longrightarrow \max$$

Функція повної правдоподібності

$$L_{p,x,y} = P\left(X = x,\, Y = y \,|\, p\right)$$

Відтак

$$\widehat{p} = \operatorname*{argmax}_{p} \sum_{x \in E^T} L_{p,x,y}$$

Побудова оцінок невідомих параметрів

Ітераційний алгоритм Баума-Велша:

$$Q\left(p^{(n)}, p\right) = \sum_{x \in E^T} L_{p^{(n)},x,y} \cdot \ln L_{p,x,y} \longrightarrow \max$$

Тож починаючи з деякого $p^{(0)}$

$$p^{(n+1)} = \operatorname*{argmax}_p Q\left(p^{(n)}, p\right)$$

Побудова оцінок невідомих параметрів

Формула переоцінки параметра p :

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} \cdot \frac{\sum_{t=1}^{T-1} \sum_{x \in E} \alpha_t(x)\, B_{xy^{t+1}}\, \beta_{t+1}(x)}{\sum_{t=1}^{T-1} \sum_{x \in E} \alpha_t(x)\, \beta_t(x)},$$

де

$$\alpha_t(x) = P\left(Y^1 = y^1, \ldots, Y^t = y^t,\, X^t = x \,|\, p^{(n)}\right)$$
$$\beta_t(x) = P\left(Y^{t+1} = y^{t+1}, \ldots, Y^T = y^T \,|\, X^t = x,\, p^{(n)}\right)$$

Побудова оцінок невідомих параметрів

Алгоритм Вітербі: пошук такої послідовності прихованих станів $\widehat{X}^1, \widehat{X}^2, \ldots, \widehat{X}^T$, яка найкращим чином описує наявні спостереження:

$$\widehat{X} = \operatorname*{argmax}_{x \in E^T} P\left(X = x \,\middle|\, Y = y,\, \widehat{p}\,\right)$$

Постановка задачі

2. Спостерігаємо значення $Y_{I_*}^t = \sum\limits_{i \in I_*} X_i^t$, де I_* — деяка невідома підмножина множини індексів.

Постановка задачі

2. Спостерігаємо значення $Y^t_{I_*} = \sum_{i \in I_*} X^t_i$, де I_* — деяка невідома підмножина множини індексів.

Наприклад, $N = 12$, $I_1 = (1,2,3)$, $I_2 = (6,7,10,11,12)$, $I_* =?$

	x^t	y^t	$y^t_{I_*}$
$t=1$	010011101101	$(1,4)$	3
$t=2$	011011101101	$(2,4)$	3
$t=3$	011011111101	$(2,4)$	4
$t=4$	011011111111	$(2,5)$	4

Постановка задачі

2. Спостерігаємо значення $Y^t_{I_*} = \sum_{i \in I_*} X^t_i$, де I_* — деяка невідома підмножина множини індексів.

Наприклад, $N = 12$, $I_1 = (1, 2, 3)$, $I_2 = (6, 7, 10, 11, 12)$, $I_* =?$

	x^t	y^t	$y^t_{I_*}$
$t = 1$	010011101101	$(1, 4)$	3
$t = 2$	011011101101	$(2, 4)$	3
$t = 3$	011011111101	$(2, 4)$	4
$t = 4$	011011111111	$(2, 5)$	4

Яким чином можна відтворити елементи множини I_* за спостереженнями $Y^1_{I_*}, \dots, Y^T_{I_*}$?;

Побудова оцінок невідомих параметрів

Твердження

Змістовною і незміщеною оцінкою потужності множини I_* *є статистика*

$$\widehat{|I_*|} = \frac{N}{1-p}\left(1 - \frac{1}{T-1}\sum_{t=1}^{T-1} \mathbb{1}\left(Y_{I_*}^t = Y_{I_*}^{t+1}\right)\right)$$

Побудова оцінок невідомих параметрів

Визначення компонент множини I_* :

$$\widehat{I} = \underset{1 \leqslant k \leqslant C_N^{\widehat{|I_*|}}}{\operatorname{argmin}} \, d\left(\widehat{Y}_{\mathtt{I_k}}, \, Y_{I_*}\right),$$

тут

$$\widehat{Y}_{\mathtt{I_k}} = \sum_{i \in \mathtt{I_k}} \widehat{X}_i^t$$

є сумою від декодованих елементів прихованого ланцюга.

Побудова оцінок невідомих параметрів

Визначення компонент множини I_* :

$$\widehat{I} = \underset{1 \leqslant k \leqslant C_N^{\widehat{|I_*|}}}{\operatorname{argmin}} d\left(\widehat{Y}_{\mathtt{I_k}}, Y_{I_*}\right),$$

тут

$$\widehat{Y}_{\mathtt{I_k}} = \sum_{i \in \mathtt{I_k}} \widehat{X}_i^t$$

є сумою від декодованих елементів прихованого ланцюга.

Що обрати в ролі міри близькості d?

Побудова оцінок невідомих параметрів

Середньоквадратична відстань

$$d_S\left(\widehat{Y}_{\mathtt{I_k}},\, Y_{I_*}\right) = \sum_{t=1}^{T}\left(\widehat{Y}^{t}_{\mathtt{I_k}} - Y^{t}_{I_*}\right)^2$$

Зважена відстань Жаккара

$$d_J\left(\widehat{Y}_{\mathtt{I_k}},\, Y_{I_*}\right) = 1 - \frac{\sum\limits_{t=1}^{T}\min\left(\widehat{Y}^{t}_{\mathtt{I_k}},\, Y^{t}_{I_*}\right)}{\sum\limits_{t=1}^{T}\max\left(\widehat{Y}^{t}_{\mathtt{I_k}},\, Y^{t}_{I_*}\right)}$$

Постановка задачі

3. Спостереження на множинах $I_1, \ldots, I_L$ спотворюються ймовірностями $q_1, \ldots, q_L$:

$$Y^t = \left(Y_k^t\right)_{k=\overline{1,L}} = \left(\sum_{i \in I_k} \widetilde{X}_i^t\right)_{k=\overline{1,L}}$$

де для $i \in I_k$

$$\widetilde{X}_i^t = \begin{cases} 1 - X_i^t, & \text{з імовірністю } q_k \\ X_i^t, & \text{з імовірністю } 1 - q_k \end{cases}$$

Оцінити невідомий параметр моделі p та ймовірності спотворень $q_1, q_2, \ldots, q_L$.

Побудова оцінок невідомих параметрів

Наприклад, $N = 12$, $I_1 = (1, 2, 3)$, $I_2 = (6, 7, 10, 11, 12)$

	x^t	$\widetilde{x}^t$	y^t	q
$t = 1$	010011101101	000011101101	$(0, 4)$	(q_1, q_2)
$t = 2$	011011101101	010011101101	$(1, 4)$	(q_1, q_2)
$t = 3$	011011111101	111011111111	$(3, 5)$	(q_1, q_2)
$t = 4$	011011111111	011011111100	$(2, 3)$	(q_1, q_2)

Побудова оцінок невідомих параметрів

Твердження

Якщо множини $I_1, \ldots, I_L$ є попарно неперетинними, то утворена послідовність $\{(X^t, Y^t)\}_{t=\overline{1,T}}$ є прихованою марковською моделлю (π, A, B^q), де

$$B^q_{xy} = P\left(Y^t = y \,|\, X^t = x\right) = \prod_{k=1}^{L} P\left(\xi^k_{01}(x) + \xi^k_{11}(x) = y_k\right),$$

$$\xi^k_{01}(x) \sim Bin\left(|I_k| - \sum_{i \in I_k} x_i,\ q_k\right),\ \xi^k_{11}(x) \sim Bin\left(\sum_{i \in I_k} x_i,\ 1 - q_k\right),\ \ k = \overline{1, L}$$

Побудова оцінок невідомих параметрів

Починаючи з деякого наближення моделі $\left(\pi, A^{(0)}, B^{q^{(0)}}\right)$, формула переоцінки параметра p :

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} \cdot \frac{\sum_{t=1}^{T-1} \sum_{x \in E} \alpha_t(x)\, B^{q^{(n)}}_{xy^{t+1}}\, \beta_{t+1}(x)}{\sum_{t=1}^{T-1} \sum_{x \in E} \alpha_t(x)\, \beta_t(x)}$$

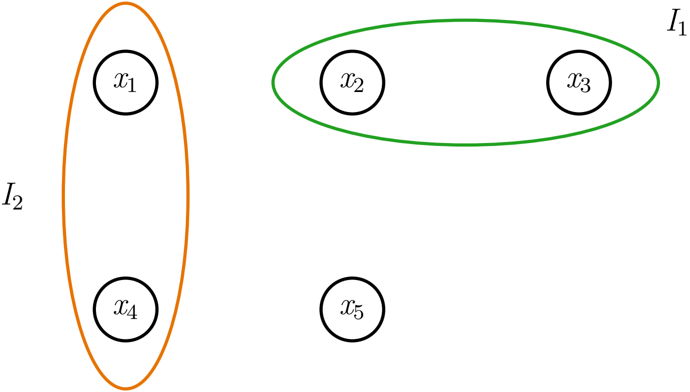
Формула переоцінки компонент вектора q :

$$q_k^{(n+1)} = q_k^{(n)} \cdot \frac{\sum_{t=1}^{T} \sum_{x \in E} \beta_t(x) \sum_{x' \in E} \alpha_{t-1}(x')\, A^{(n)}_{x'x} \sum_{i \in I_k} P^{q^{(n)}}_{x,i}}{|I_k| \sum_{t=1}^{T} \sum_{x \in E} \alpha_t(x)\, \beta_t(x)}$$

План доповіді

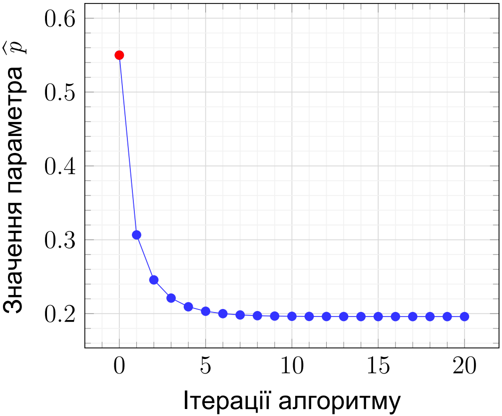
Результати чисельного експерименту

Було згенеровано прихований ланцюг Маркова протягом $T = 200$ моментів часу, $N = 5$ та $p = 0.2$. Множина спостережуваних індексів: $I = \{I_1, I_2\} = \{(2,3),(1,4)\}$.



Результати чисельного експерименту

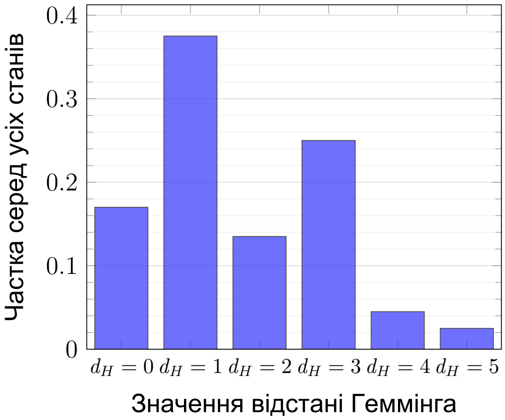
1. Оцінити параметр p за набором спостережень та декодувати послідовність станів прихованого ланцюга;



p	$\widehat{p}$	$\lvert p - \widehat{p} \rvert$
0.2	0.1959	0.0041

Результати чисельного експерименту

1. Оцінити параметр p за набором спостережень та декодувати послідовність станів прихованого ланцюга;

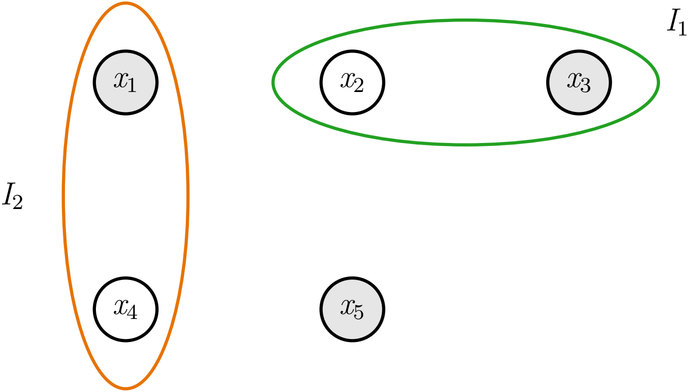


$$d_H\left(X^t, \widehat{X^t}\right) = \sum_{i=1}^{N} \mathbb{1}\left(X_i^t \neq \widehat{X_i^t}\right)$$

Результати чисельного експерименту

2. Відтворити елементи «множини неявних індексів» I_*;

Спостереження $I = \{I_1, I_2\} = \{(2,3),(1,4)\}$, неявні індекси покладемо $I_* = (1,3,5)$:



Результати чисельного експерименту

2. Відтворити елементи «множини неявних індексів» I_*;

Залежність значення оцінки від довжини ланцюга

T	200	400	600	800	1000
$\widehat{p}$	0.1959	0.1823	0.1882	0.2099	0.2092
$\widehat{\lvert I_* \rvert}$	2	2	2	3	3

Результати чисельного експерименту

2. Відтворити елементи «множини неявних індексів» I_*;

Залежність значення оцінки від довжини ланцюга

T	200	400	600	800	1000
$\widehat{p}$	0.1959	0.1823	0.1882	0.2099	0.2092
$\widehat{\lvert I_* \rvert}$	2	2	2	3	3

При малих N можна використати оцінку

$$\widehat{\lvert I_* \rvert}_{\max} = \max_{1 \leqslant t \leqslant T} Y^t_{I_*}$$

Результати чисельного експерименту

2. Відтворити елементи «множини неявних індексів» I_*;

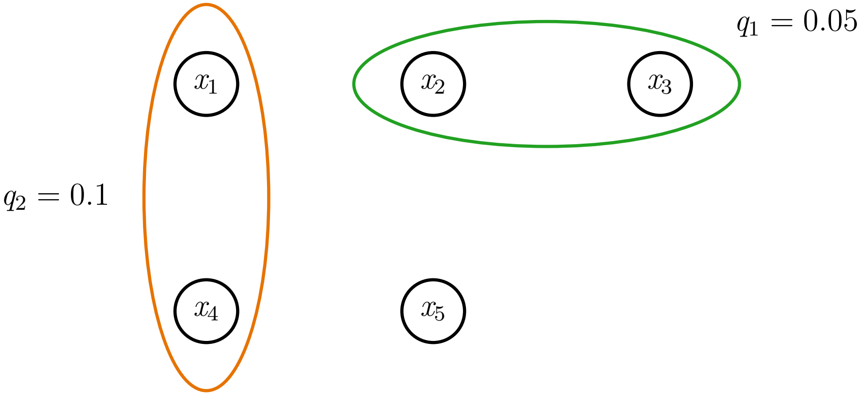
Отримані результати:

Істинна множина I_*	$(1, 3, 5)$
Оцінка $\widehat{I}_S$ за середньоквадратичною відстанню	$(1, 2, 5)$
Оцінка $\widehat{I}_J$ за зваженою відстанню Жаккара	$(1, 2, 3)$

Результати чисельного експерименту

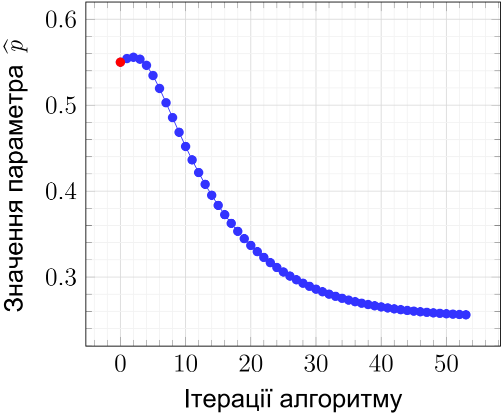
3. Оцінити невідомий параметр моделі p при ймовірностях спотворення $q_1, q_2, \ldots, q_L$.

Для I_1, I_2 було задано такі коефіцієнти спотворення:



Результати чисельного експерименту

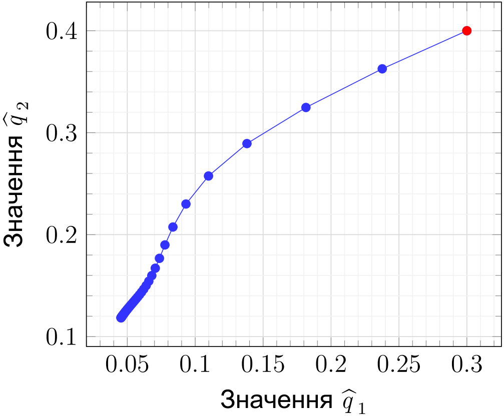
3. Оцінити невідомий параметр моделі p при ймовірностях спотворення $q_1, q_2, \ldots, q_L$.



p	$\widehat{p}$	$\lvert p - \widehat{p} \rvert$
0.2	0.2559	0.0559

Результати чисельного експерименту

3. Оцінити невідомий параметр моделі p при ймовірностях спотворення $q_1, q_2, \ldots, q_L$.



q_1	$\widehat{q}_1$	$\lvert q_1 - \widehat{q}_1 \rvert$
0.05	0.0454	0.0046

q_2	$\widehat{q}_2$	$\lvert q_2 - \widehat{q}_2 \rvert$
0.1	0.1184	0.0184

Висновки

Невідомі параметри заданої моделі були оцінені

- або шляхом побудови змістовних та незміщених статистичних оцінок;
- або за допомогою ітераційного алгоритму Баума-Велша.

Результати чисельного експерименту продемонстрували ефективність використаних методів, зокрема збіжність побудованих оцінок до істинних значень параметрів при збільшенні кількості спостережень.