Zestaw III: Łańcuchy Markowa i paradoksy statystyczne

Jan Betlej
Roztwory stałe i termodynamika defektów

10 listopada 2016

W tym zestawie porzucimy na chwilę rozważania konfiguracji atomowych, w celu oswojenia się z obiektem matematycznym zwanym Łańcuchem Markowa. Najpierw podana zostanie definicja procesu Markowa. Następnie zobaczymy, jak można przedstawić proces Markowa za pomocą tzw. diagramu przejść. Nauczymy się również, w jaki sposób obliczać wielkości takie jak średni czas osiągnięcia stanu, czy prawdopodobieństwa długoterminowe.

Wprowadzenie

Łańcuchy Markowa to ogólna klasa procesów losowych, wykorzystywana w badaniu ewolucji układów dynamicznych. Własność definiująca łańcuch Markowa jest następująca: warunkując względem obecnego stanu, przyszłość i przeszłość układu są niezależne. Będziemy rozważać łańcuchy Markowa w skończonej przestrzeni Ω stanów σ, przy dyskretnej zmiennej czasowej t. Przedstawioną powyżej definicję można wówczas zapisać w bardziej użytecznej formie, następująco:

$$P(\sigma(t_n)|\sigma(t_0); ...; \sigma(t_{n-1})) = P(\sigma(t_n)|\sigma(t_{n-1})) \tag{1}$$

, gdzie $\sigma(t_n)$ jest stanem w chwili czasu t_n. Słownie: prawdopodobieństwo osiągnięcia stanu $P(\sigma(t_n))$ zależy tylko od stanu w chwili poprzedzającej $\sigma(t_{n-1})$

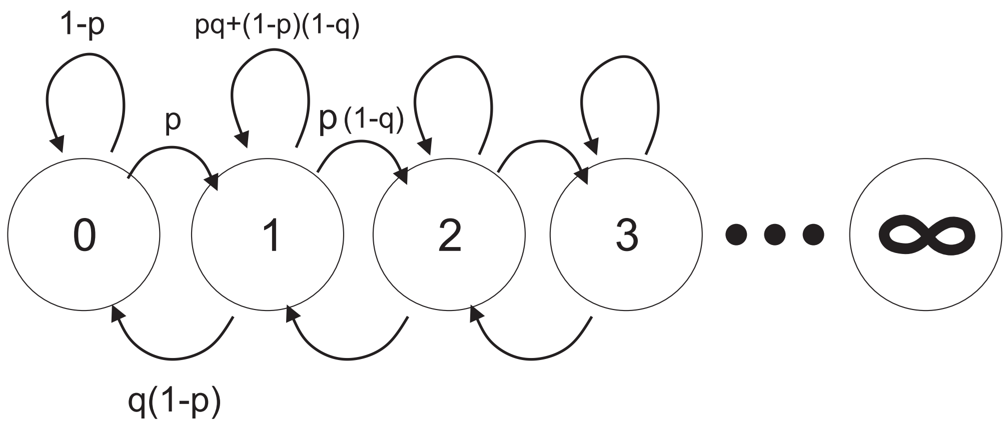
Aby uniknąć czystej abstrakcji, rozważmy proces obsługiwania klientów przy kasie w hipermarkecie. Niech czas będzie zdyskretyzowany: t_1, t_2,...t_N. Dla każdej chwili t_i pojawienie się nowego klienta niech będzie dane *zmienną losową Bernoulliego* X_i(tak, że cały proces pojawiania się klientów to *proces Bernoulliego*):

$$X_i = \begin{cases} 0, & \text{z prawdopodobieństwem 1-p = nikt nowy} \\ 1, & \text{z prawdopodobieństwem p = kolejny klient} \end{cases} \tag{2}$$

Równocześnie przez kasjerkę obsługiwany jest pierwszy klient w kolejce:

$$Y_i = \begin{cases} 0, & \text{z prawdopodobieństwem 1-q = nie obsłużony} \\ 1, & \text{z prawdopodobieństwem q = obsłużony} \end{cases} \tag{3}$$

, przy czym ten proces Bernoulliego przebiega oczywiście tylko pod warunkiem, że przynajmniej jeden klient jest już obecny w kolejce. Jako absolwent UJ, pełnimy kierownicze stanowisko w hipermarkecie i interesuje nas, czy przy kasie będzie powstawał zator. Dlatego musimy monitorować liczbę klientów, która będzie stanowiła kolejne stany σ_j. Prawdopodobieństwa przejść pomiędzy stanami w kolejnych chwilach czasu są niezmienne i można je przedstawić na diagramie (diagram przejść):



Możliwość sporządzenia diagramu, gdzie prawdopodobieństwa przejścia pomiędzy stanami są stałe w czasie, świadczy o tym, że mamy do czynienia z procesem Markowa. Prawdopodobieństwa na strzałkach wychodzących z danego węzła muszą sumować się do jedności.

Mając dany stan początkowy w łańcuchu Markowa, możemy co do zasady obliczyć prawdopodobieństwo znalezienia się w dowolnym stanie w dowolnej chwili czasu. Nie jest to jednak praktyczne; np. w symulacji SGCMC, gdzie całkowita liczba stanów w N-elementowym układzie A-składnikowym wynosi A^N ($A > 1$, $N > 10000$), sporządenie diagramu jest możliwe tylko w teorii. W symulacjach MC łańcuch Markowa generujemy zatem na bieżąco, diagram pozostawiając w domyśle. W ogólności, rozważamy dwa interesujące nas przedziały czasowe: zachowanie krótkoterminowe oraz długoterminowe.

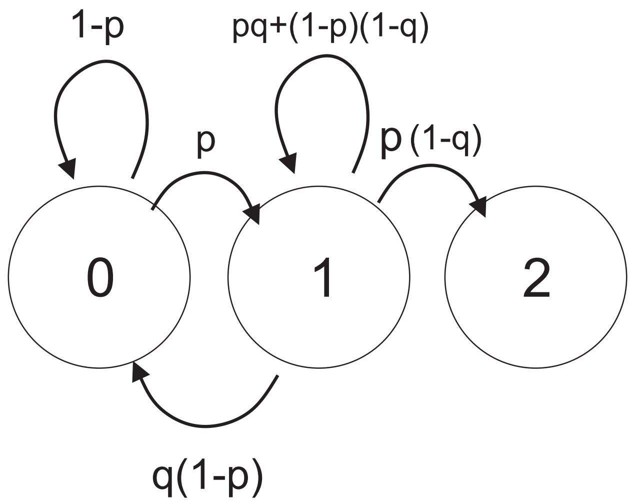
Badając zachowanie krótkoterminowe odpowiadamy na przykład na pytanie: jakie jest prawdopodobieństwo (patrz rysunek), że znajdując się na początku w stanie 2, po dwóch krokach układ nadal będzie w tym samym stanie? Oczywiście, takie prawdopodobieństwo jest silnie zależne od stanu początkowego - przykładowo zaczynając od stanu większego niż 4 nie osiągniemy 2 w dwóch krokach.

Pod tym względem diametralnie innego zachowania spodziewamy się przy zgadywaniu stanu łańcucha Markowa w chwili czasu t_N znacząco odległej (w odniesieniu do rozmiaru przestrzeni fazowej) od t_0. Faktycznie, przy spełnieniu odpowiednich warunków (których dla zwięzłości nie będę tutaj podawać) wartość prawdopodobieństwa znalezienia stanu σ jest zbieżna przy $N \to \infty$ do pewnej wartości ρ_σ niezależnej od stanu początkowego. Asymptotyczne prawdopodobieństwa ρ są związane ze sobą intuicyjnie zrozumiałą relacją:

$$\rho_i = \sum_j \rho_j \times p_{ji} \tag{4}$$

Jest to układ równań liniowych, pozwalający na dokładne wyznaczenie wszystkich $\rho(\sigma)$. W symulacjach SGCMC omawianych na wykładzie $\rho(\sigma)$ to prawdopodobieństwa w stanie stacjonarnym. Do tej kwestii powrócimy w dalszych zestawach.

Można również zadać pytanie: po jakim średnim czasie, zaczynając od stanu 0 osiągnę stan 2, przy którym jeden klient nie będzie obsługiwany? Oznaczmy ten czas przez μ_0. Obetnijmy łańcuch Markowa do trzech pierwszych członów, tak, jak potrzeba dla tego zagadnienia:



Będąc w stanie 0 z pewnością wykonam jeden krok (+1). W tym kroku pozostanę w stanie 0 z prawdopodobieństwem (1-p) $(+\mu_0 \times (1-p))$, lub przejdę do 1 $(+\mu_1 \times p)$. Tak więc:

$$\mu_0 = 1 + \mu_0 \times (1-p) + \mu_1 \times p \tag{5}$$

Niewiadomą pozostaje μ_1, zatem dla niego również potrzeba ułożyć równanie:

$$\mu_1 = 1 + \mu_1 \times (pq + (1-p)(1-q)) + \mu_0 \times q(1-p) \tag{6}$$

Podstawiając μ_1 do μ_0 otrzymujemy ostateczne rozwiązanie. Odpowiedź na nasze pytanie w tym przypadku również zawsze będzie mieć postać układu równań liniowych.