НОВІ ЗАСОБИ
КІБЕРНЕТИКИ, ІНФОРМАТИКИ,
ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ТЕХНІКИ
ТА СИСТЕМНОГО АНАЛІЗУ

П.С. КНОПОВ, О.С. САМОСЬОНОК, Г.Д. БІЛА

УДК 519.21

МОДЕЛЬ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ІНФЕКЦІЙНИХ ЗАХВОРЮВАНЬ З ПРИХОВАНИМИ НОСІЯМИ[1]

Анотація. Запропоновано алгоритм оцінювання невідомих параметрів моделі розповсюдження інфекції, що побудована на основі інструментарію марковських полів за допомогою методу максимальної вірогідності. Припускається, що кожен стан ланцюга являє собою певну конфігурацію скінченного марковського випадкового поля, а розподіл ймовірностей станів ланцюга збігається зі спільним розподілом ймовірностей станів елементів гіббсовського випадкового поля.

Ключові слова: марковські поля, локальна взаємодія елементів поля, гіббсовський розподіл, невідомі параметри, алгоритм оцінювання.

ВСТУП

Для багатьох складних біологічних, економічних, технічних систем є характерною структура, що включає окремі, достатньо незалежні підсистеми. Для кожної з них сукупність інших підсистем формує «зовнішнє середовище», з яким така підсистема взаємодіє. Найбільш логічним є припущення, що функціонування складної системи може бути змодельованим згідно з централізованим принципом, тобто для кожної системи визначається певна власна поведінка. Однак у багатьох випадках такий метод керування складними системами не є ефективним. Більш придатною вважають іншу схему, а саме локальної взаємодії. Це означає, що для кожної підсистеми встановлюють лише деякі загальні правила комунікації, а поза цими вимогами вона функціонує згідно з власною структурою і правилами, так, щоб її взаємодія із зовнішнім середовищем та іншими підсистемами була в деякому сенсі оптимальною.

Багато задач, пов’язаних з розташуванням елементів системи на площині, ґрунтуються на твердженні, згідно з яким елементи взаємодіють таким чином, що на кожен елемент впливають лише найближчі до нього, а не всі елементи системи. Наприклад, для біологічних систем це твердження відповідає результатам реальних біологічних експериментів.

[1] Роботу виконано за часткової підтримки Національного фонду досліджень України (грант № 2020.02/0121).

Успішні приклади такого моделювання відображують широкі можливості використання апарату марковських процесів з локальною взаємодією, а дослідження в галузі біології та епідеомології, теорії розпізнавання, побудови комунікаційних мереж пришвидшили вивчення марковських полів.

МАРКОВСЬКІ ВИПАДКОВІ ПРОЦЕСИ З ЛОКАЛЬНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ (МАРКОВСЬКІ ПОЛЯ)

Розглянемо деяку популяцію $S = (1, 2, \dots, N)$ зі скінченною кількістю особин. Нехай $X = (X_1, \dots, X_{|S|})$ — багатовимірна випадкова величина, де кожна компонента X_i є одновимірною випадковою величиною, що набуває значення $x_i \in A$, множина значень A скінченна і відповідає станам, в яких може перебувати окрема особина у визначеній популяції. Вважатимемо, що всі X_i дискретні та визначені на одному ймовірнісному просторі.

Конкретна реалізація $x = (x_1, \dots, x_{|S|})$ випадкової величини X являє собою одночасне настання всіх подій $(X_1 = x_1, \dots, X_{|S|} = x_{|S|})$ і фактично характеризує загальну епідеміологічну ситуацію X. Якщо x — деяка конфігурація X, тоді Λ — множина всіх можливих конфігурацій:

$$\Lambda = \{x = (x_1, \dots, x_{|S|}) \mid x_i \in A, i \in S\}.$$

Існування випадкового поля еквівалентно існуванню спільного розподілу ймовірностей $P(x) = P(x_1, \dots, x_{|S|})$ станів його елементів. Оскільки для взаємозв'язку особин в популяції передбачається існування набору умовних розподілів ймовірностей

$$P(X_i = x_i \mid X_1 = x_1, \dots, X_{i-1} = x_{i-1}, X_{i+1} = x_{i+1}, \dots, X_{|S|} = x_{|S|}),$$

такий набір має бути узгодженим, тобто гарантувати існування спільного розподілу ймовірностей $P(x)$. Зазначимо, що спільний розподіл станів елементів поля, яким і є закрита популяція, може бути виражений безпосередньо через умовні розподіли

$$P(x) = P(x_n \mid x_1, \dots, x_{n-1}) P(x_1, \dots, x_{n-1}).$$

Для одновимірного випадкового поля — ланцюга Маркова, останній множник можна обчислити за умовним розподілом

$$P(x) = P(x_0) \prod_{i=1}^{n-1} P(x_i \mid x_{i-1}),$$

якщо є відомими розподіл ймовірностей станів деякого крайнього елемента X_0 і всі умовні розподіли. Саме тому апарат марковських ланцюгів широко застосовують для моделювання складних біологічних систем. Властивість марковості дає змогу спростити проблему дослідження взаємодії великої (або навіть нескінченної) кількості елементів у моделі з огляду на цілком природне припущення про те, що стан деякого елемента системи залежить лише від станів скінченної кількості сусідніх елементів. Це логічне припущення, яке найчастіше виконується в реальних системах.

Вигляд умовних розподілів суттєво залежить від структури зв'язків між станами особин у популяції. Для якісного опису такого впливу введемо поняття сусідства особин.

Означення 1 [1–3]. Підмножину вершин графа $\partial s \in S$ назвемо околом вершини s, якщо $s \notin \partial s$ і для будь-якої вершини t справедливо, що $s \in \partial t$ тоді і тільки тоді, коли $t \in \partial s$. У цьому разі t і s є сусідами.

Якщо для кожного елемента випадкового поля тим чи іншим способом вказані його сусіди, то вважають, що задано множину околів $\partial = \{\partial s : s \in S\}$ всіх елементів поля, яку називають системою сусідства цього поля. Така система задає структуру взаємозв'язків між станами елементів поля, що ототожнюється з графом, вершинами якого є відповідні елементи поля, і ребрами, що відповідають парам сусідніх елементів. Такий граф називатимемо графом сусідства.

Визначення системи сусідства дає змогу сформулювати важливе означення.

Означення 2. Множина елементів випадкового поля, яка відповідає повнозв'язному підграфу графу сусідства, називається клікою $\chi : \forall s, t \in \chi, s \neq t \Rightarrow t \in \partial s$, а кількість елементів такої множини — порядком кліки.

Кожній кліці χ ставиться у відповідність фактор-потенціал — додатно визначена функція $F_\chi(x_\chi, \upsilon)$, відмінна від константи, що залежить від значень, яких набуває реалізація поля X у точках кліки і деякого параметра υ. Конфігурацію кліки χ позначено x_χ, тобто $x_\chi = \{x_{i_1}, x_{i_2}, \ldots, x_{i_{|\chi|}}\}$, де $i_j \in \chi$.

У цьому випадку марковість означає, що стан деякої особини s популяції залежить лише від станів елементів поля, які належать околу ∂s вершини s. Послідовність станів цієї системи локально незалежна в такому сенсі:

$$\prod_{s \in T} P(x_s | x_{S \setminus s}) = \prod_{s \in T} P(x_s | x_{\partial s}),$$

де T — деяка скінченна підмножина множини вершин S.

Використання системи сусідства випадкового поля дає змогу конкретизувати вигляд умовних розподілів ймовірностей, а також спільного розподілу ймовірностей станів його елементів. У роботі [4] показано, що спільний розподіл ймовірностей станів елементів марковського випадкового поля X на множині його конфігурацій x можна представити у вигляді

$$P(x) = \frac{\prod_{\chi \in S} F_\chi(x_\chi)}{\sum_{x' \in X} \prod_{\chi \in S} F_\chi(x'_\chi)} \qquad (1)$$

за умови: якщо стани $x_1, \ldots, x_n$ елементів $X_1, \ldots, X_n$ спостерігаються індивідуально з ненульовою ймовірністю, то вони спостерігаються спільно теж з ненульовою ймовірністю:

$$(P(x_i) > 0,\ i = 1, \ldots, n) \Leftrightarrow (P(x_1, \ldots, x_n) > 0). \qquad (2)$$

Враховуючи обмеження (2), надалі вважатимемо, що для множини конфігурацій Λ справедливо $\Lambda = \{x : P(x) > 0\}$.

Запишемо фактор-потенціали в експоненціальному вигляді

$$F_\chi(x_\chi, \upsilon) = e^{-H(x_\chi, \upsilon)}.$$

Означення 3. Функції $H(x_\chi, \upsilon)$ називаються потенціальними функціями і задовольняють умову $|H(x_\chi, \upsilon)| < \infty$.

Вважатимемо, що потенціали $H(x_\chi, \upsilon)$ задані з точністю до деяких параметрів, які формують параметричний вектор.

Якщо множина значень станів поля скінченна, то потенціали теж мають лише скінченну кількість значень. Тоді розподіл ймовірностей (1) спостереження певної конфігурації можна записати у вигляді

$$P(X=x)=Z(\upsilon)^{-1}\exp\left(-\sum_{\chi\in\aleph}H(x_\chi,\upsilon)\right), \tag{3}$$

де Z — нормувальний множник, для якого сумування виконується по всій множині конфігурацій:

$$Z(\upsilon)=\sum_{x\in\Lambda}\exp\left(-\sum_{\chi\in\aleph}H(x_\chi,\upsilon)\right).$$

Означення 4. Дискретний розподіл ймовірностей (3) називається розподілом Гіббса.

Більше того, згідно із загальновідомою теоремою Хаммерслі–Кліффорда (наприклад, [5]) дискретне випадкове поле є марковським тоді і тільки тоді, коли розподіл ймовірностей його станів описується розподілом Гіббса.

Означення 5. Сума гіббсовських потенціалів по всіх кліках множини S називається енергетичною функцією (енергією) і має вигляд

$$U(x,\upsilon)=\sum_{\chi\in\aleph}H(x_\chi,\upsilon). \tag{4}$$

Очевидно, що найбільш ймовірна конфігурація станів елементів поля відповідає системі з найменшою енергією. До того ж на цьому факті ґрунтуються різноманітні методи пошуку найбільш стабільної конфігурації.

Цілком природно допустити, що множину клік можна ідентифікувати за геометричним розташуванням взаємодійних елементів. Позначимо її $\mathbb{C}=\{C_i\}$ і вважатимемо, що така множина скінченна.

Нехай кожному типу клік відповідає власний вигляд потенціальної функції, а отже, і окреме значення параметра υ.

З урахуванням наведених припущень гіббсовський розподіл (3) можна записати у такому вигляді:

$$P(x)=Z(\upsilon)^{-1}\exp\left(-\sum_{j=1}^{|\mathbb{C}|}\sum_{\chi\subset S}H_\chi(x_\chi,\upsilon^j)\right),\ \upsilon=(\upsilon^j)_{j=1}^{l}.$$

Розглянемо послідовність незалежних спостережень $\{x^1,\ldots,x^n\}$ за станами особин популяції S. У цьому разі $x_s^i\in A$, $i=1,2,\ldots,n$, позначає стан деякого елемента s в i-му спостереженні. Вважатимемо, що розподіл $P(x,\upsilon)$ станів елементів поля X, відомий з точністю до невідомого параметра $\upsilon\in\Theta$, є гіббсовським і, як наслідок, має марковську властивість. Отже, задача вибору конкретного вигляду розподілу зводиться до оцінювання істинного значення невідомого параметра υ^* або знаходження деякої невідомої функції $F(\upsilon^*)$ з урахуванням результатів спостережень $x\in\Lambda$. Самі оцінки розглядаються як випадкові величини і мають задовольняти певні вимоги, що характеризують їхню відповідність істинному значенню.

МЕТОД МАКСИМАЛЬНОЇ ВІРОГІДНОСТІ

Розглянемо метод максимальної вірогідності, запропонований Р. Фішером. Для оцінювання невідомих параметрів гіббсовського розподілу (3) використовують функцію правдоподібності $L_n(x, \upsilon)$, яка будується за послідовністю $\{x^1, x^2, \ldots$ $\ldots, x^n\}$ незалежних спостережень реалізацій випадкового поля X — так званої навчальної вибірки, у такий спосіб:

$$L_n(x, \upsilon) = P(x^1, \upsilon) \cdot P(x^2, \upsilon) \cdot \ldots \cdot P(x^n, \upsilon).$$

Тоді оцінкою оптимального параметра υ^* буде розв'язок задачі максимізації функції правдоподібності

$$\upsilon_n = \arg\max L_n(x, \upsilon).$$

Оцінки параметрів, отримані методом максимальної вірогідності, — випадкові величини, реалізації яких змінюються разом з експериментальними даними. З огляду на це значний інтерес викликає дослідження їхніх властивостей для скінченних вибірок і точності оцінювання для типових обсягів даних. У роботах [5–7] доведено консистентність та асимптотичну нормальність оцінок, отриманих методом максимальної вірогідності, тому зупинимось на практичному алгоритмі пошуку таких оцінок.

Запишемо від'ємну функцію логарифмічної правдоподібності

$$L_n(x, \upsilon) = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{|\mathbb{C}|} \sum_{\chi \subset S} H_\chi (x_\chi^i, \upsilon^j) \right) + n \ln Z(\upsilon) \tag{5}$$

і розглянемо задачу пошуку її мінімуму

$$\upsilon_n = \arg\min_{\upsilon \in \Theta} L_n(x, \upsilon), \tag{6}$$

де множина Θ опукла і замкнута.

Для чисельного пошуку оцінки гіббсовського розподілу методом максимальної вірогідності розглянемо алгоритм, побудований на основі стохастичного квазіградієнтного методу розв'язання задач опуклого стохастичного програмування [8, 9]. Цей метод є розвитком процедур випадкового пошуку і може розглядатися як узагальнення алгоритмів стохастичної апроксимації на багатовимірні негладкі задачі. Особливість квазіградієнтного методу полягає в тому, що він не потребує розрахунку точного значення цільової функції, а використовує її статистичні оцінки та узагальнені градієнти.

Нехай Θ^* — множина оптимальних розв'язків задачі (6); функції $U(x_i, \upsilon)$, $i = 1, \ldots, n$, опуклі і неперервно диференційовні по υ; γ^k — оцінки субградієнтів у точці x^i, що залежать від послідовності $(\upsilon_0, \ldots, \upsilon_k)$ та задовольняють умову

$$E(\gamma^k \mid \upsilon_0, \ldots, \upsilon_k) = a_k \hat{L}_\upsilon(\upsilon_k) + b^k, \ \ k = 0, 1, \ldots,$$

де a_k — невід'ємна випадкова величина, $b^k = (b_1^k, b_2^k, \ldots, b_n^k)$ — випадковий вектор похибок. Вектор $L_\upsilon(\upsilon_k)$ — узагальнений градієнт, тобто вектор, який для будь-яких z задовольняє нерівність $L(z) - L(\upsilon_k) \geq (\hat{L}_\upsilon(\upsilon_k), z - \upsilon_k$.

Визначимо рекурентну послідовність

$$v_{k+1} = \pi_\theta (v_k - \rho_k \gamma^k). \tag{7}$$

Має місце теорема.

Теорема 1 [9]. Нехай виконуються такі умови:

1) $E(||\gamma^k||^2 \mid v_0, \ldots, v_k) \le C$, C — const, $k = 0, 1, \ldots$;

2) $a_k \ge 0$, $||b^k|| \le \beta^k$;

3) $\rho_k \ge 0$, $\sum_{k=0}^{\infty} \rho_k^2 < \infty$, $\sum_{k=0}^{\infty} \rho_k^2 (\beta^k) < \infty$;

4) $\sum_{k=0}^{\infty} \rho_k a_k = \infty$ з ймовірністю 1;

5) множина Θ обмежена.

Тоді послідовність $\{v_k\}$, визначена згідно з (7), збігається до v^* з імовірністю 1 і $\lim_{k \to \infty} v_k \in \Theta^*$.

Більш детально зупинимося на використанні цього методу. Оскільки вважаємо потенціальні функції $H_\chi(x_\chi^i, v^j)$ диференційовними, запишемо частинні похідні функції $L_n(x, v)$:

$$\frac{\partial L_n(x, v)}{\partial v^j} = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi^i, v^j)}{\partial v^j} \right) + n \frac{1}{Z(v)} \frac{\partial Z(v)}{\partial v^j}. \tag{8}$$

Розглянемо детальніше нормувальний множник Z_v:

$$Z(v) = \sum_{x \in \Lambda} \exp\left(-\sum_{j=1}^{|\mathbb{C}|} \sum_{\chi \subset S} H_\chi(x_\chi, v^j) \right),$$

$$\frac{\partial Z(v)}{\partial v^j} = -\sum_{x \in \Lambda} \left(\exp\left(-\sum_{j=1}^{|\mathbb{C}|} \sum_{\chi \subset S} H_\chi(x_\chi, v^j) \right) \sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, v^j)}{\partial v^j} \right).$$

Отже,

$$\frac{1}{Z(v)} \frac{\partial Z(v)}{\partial v^j} = -\frac{\sum_{x \in \Lambda} \left(\exp\left(-\sum_{j=1}^{|\mathbb{C}|} \sum_{\chi \subset S} H_\chi(x_\chi, v^j) \right) \sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, v^j)}{\partial v^j} \right)}{\sum_{x \in \Lambda} \exp\left(-\sum_{j=1}^{|\mathbb{C}|} \sum_{\chi \subset S} H_\chi(x_\chi, v^j) \right)} =$$

$$= -\sum_{x \in \Lambda} \left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, v^j)}{\partial v^j} \right).$$

З огляду на складність обчислення суми похідних потенціальних функцій по всіх конфігураціях станів особин популяції застосування традиційних методів пошуку екстремальних точок не є доцільним. Тому потрібно використовувати нові обчислювальні техніки. Такими методами, наприклад, є алгоритми імітаційного моделювання, які є універсальним методом для оцінювання математичного сподівання випадкових величин.

Якщо υ_n є консистентною оцінкою точки мінімуму функції $L_n(x, \upsilon)$, то

$$E\left(\frac{\partial L_n(x, \upsilon)}{\partial \upsilon}\right) = 0$$

і в такому разі запишемо

$$\frac{1}{Z(\upsilon)} \frac{\partial Z(\upsilon)}{\partial \upsilon} = -E\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, \upsilon)}{\partial \upsilon}\right).$$

Тоді рівність (8) набуває вигляду

$$\frac{\partial L_n(x, \upsilon)}{\partial \upsilon^j} = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi^i, \upsilon^j)}{\partial \upsilon^j} - E\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, \upsilon^j)}{\partial \upsilon^j}\right)\right)$$

і відповідно стохастичний квазіградієнт є таким:

$$\tilde{\nabla} L_n(x^i, \upsilon) = \left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi^i, \upsilon^j)}{\partial \upsilon^j} - E\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, \upsilon^j)}{\partial \upsilon^j}\right)\right)_{j=1}^{l}.$$

Отже, найбільш складною розрахунковою частиною алгоритму є пошук математичного сподівання. Саме для цієї задачі можна використати будь-який метод стохастичного моделювання. Розглянемо так звані марковські ланцюги Монте-Карло — MCMC (Markov chain Monte Carlo), що, по суті, є модифікованим методом Монте-Карло. На відміну від звичайного методу Монте-Карло, в якому для апроксимації математичного сподівання

$$E_n(f(y, \upsilon)) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} (f(y^k, \upsilon)), \; n \to \infty,$$

де випадкові величини є незалежними і однаково розподіленими, тут пропонується використовувати послідовність залежних спостережень $y^1, y^2, \ldots,$ які формують марковський ланцюг. Кожен стан новоствореного ланцюга y^i являє собою певну конфігурацію скінченного марковського випадкового поля, причому розподіл ймовірностей станів ланцюга збігається зі спільним розподілом ймовірностей станів елементів гіббсовського випадкового поля.

Якщо стани елементів ланцюга є зв'язними, тобто за скінченний марковський час (кількість кроків по ланцюгу) з будь-якого стану можливо потрапити в будь-який інший стан, то існує єдиний граничний розподіл, що не залежить від початкового розподілу ймовірностей станів ланцюга:

$$\sum_{x \in \Lambda} P(y^i) P(y^j \mid y^i) = P(y^j) \;\; \forall y^j \in \Lambda.$$

Інакше кажучи, у процесі генерації переходів зі стану в стан досягається рівноважне положення.

Існує багато способів вибору перехідних ймовірностей для досягнення рівноважного розподілу. Тому з практичної точки зору під час генерування нової конфігурації доцільною є зміна стану лише одного елемента поля (стану однієї особини популяції), при цьому на перехідні ймовірності накладають обмеження

$$P(y^i)P(y^j \mid y^i) = P(y^j)P(y^i \mid y^j),$$

що забезпечує зв'язність ланцюга. Отже, основною ідеєю методів MCMC є генерування марковського ланцюга, граничний розподіл якого був би шуканим. Наведені міркування є основою для декількох алгоритмів моделювання випадкових полів. Зупинимось детальніше на двох найпоширеніших: Метрополіса (Metropolis sampling) і Гіббса (Gibbs sampling).

Згідно з гіббсовським алгоритмом породження марковських полів (Gibbs sampling) для генерування нового зразка використовують умовні розподіли $P(x_i \mid x_{\partial i})$. Для досліджуваної моделі, використовуючи результати S. Geman [10], обчислювальний алгоритм можна представити у такому вигляді:

1) випадковим чином вибрати елемент поля $i \in S$;

2) згідно з умовним розподілом ймовірностей

$$P(x_i \mid x_{\partial i}) = Z_{x_i}(\upsilon)^{-1} \exp\left(-\sum_{j=1}^{|\mathbb{C}|} \sum_{\chi \supset i} H_\chi (x_\chi, \upsilon^j) \right)$$

змінити стан елемента поля x_i;

3) повернутися до п. 1.

Зазначимо, що механізм випадкового вибору чергового елемента поля в п. 1 має забезпечувати рівноймовірнісне проходження всіх елементів поля.

У разі збільшення кількості станів $|A|$ елементів поля лінійно зростає обчислювальна складність алгоритму Гіббса. У такому випадку пропонується використовувати алгоритм Метрополіса, який не залежить від значення $|A|$. Його основною відмітністю є лише інший механізм вибору перехідних ймовірностей марковського ланцюга, що генерується:

$$P(y^i \mid y^j) = \begin{cases} c, & \text{якщо } P(y^j) \le P(y^i), \\ c\dfrac{P(y^i)}{P(y^j)}, & \text{якщо } P(y^j) > P(y^i), \end{cases}$$

де c — будь-яка константа, що задовольняє умову нормування

$$P(y^j \mid y^j) = 1 - \sum_{i \ne j} P(y^i \mid y^j).$$

Для гіббсовських випадкових полів метод є особливо зручним, тому що перехідні ймовірності мають вигляд

$$P(y^i \mid y^j) = \begin{cases} c, & \text{якщо } U(x^i, \upsilon) \le U(x^j, \upsilon), \\ c\exp(U(x^i, \upsilon) - U(x^j, \upsilon)), & \text{якщо } U(x^i, \upsilon) > U(x^j, \upsilon). \end{cases}$$

З урахуванням наведених міркувань практична реалізація алгоритму Метрополіса буде мати таку структуру:

1) згенерувати випадковим чином початкову конфігурацію $x^0 \in \Lambda$;

2) на *i*-му кроці вибрати деякий елемент поля $k \in S$ і знайти для нього новий випадковий рівноймовірнісний стан $\bar{x}_k^i \in A$ (це відповідає значенню константи c,

що дорівнює $1/|A|$); у такий спосіб генеруємо нову конфігурацію x^*, що відрізняється від x^i лише станом одного елемента;

3) обчислити різницю енергетичних функцій

$$\Delta U(x^*, \upsilon) = U(x^*, \upsilon) - U(x^i, \upsilon);$$

оскільки конфігурації ідентичні з точністю до одного елемента k, достатньо підрахувати різницю сум потенціалів за всіма кліками, що належать околу розглядуваної позиції:

$$\Delta U(x^*, \upsilon) = U(\bar{x}_k^i, x_{\partial k}, \upsilon) - U(x_k^i, x_{\partial k}, \upsilon);$$

4) якщо $\Delta U(x^*, \upsilon) < 0$, тобто сума потенціалів нової конфігурації x^* не більше за поточну x^i, то новий стан $\bar{x}_k^i \in A$ прийняти з ймовірністю 1, інакше — з ймовірністю $\exp\{-(U(\bar{x}_k^i, x_{\partial k}, \upsilon) - U(x_k^i, x_{\partial k}, \upsilon))\}$;

5) якщо на кроці 4 вирішено акцептувати нову конфігурацію x^*, то покласти $x^{i+1} = x^*$ і перейти до кроку 2.

Повертаючись до задачі пошуку мінімуму від'ємної функції максимальної вірогідності (4), слід зазначити, що запропоновані методи породження випадкових конфігурацій гіббсовського поля застосовуються для пошуку незміщеної оцінки математичного сподівання $E\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, \upsilon)}{\partial \upsilon}\right)$ апроксимацією $\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi^k, \upsilon)}{\partial \upsilon}\right)$. У цьому випадку запропонований практичний алгоритм пошуку оцінки невідомих параметрів можна надати в такому вигляді:

1) з ймовірністю $1/n$ на k-му кроці ($\upsilon = \upsilon_k$) вибрати одне з чисел $i = 1, \ldots, n$, де n — кількість спостережень; позначимо вибране число i_{fix};

2) для поточного значення параметра υ_k за допомогою алгоритму породження марковських ланцюгів методом Метрополіса або Гіббса згенерувати скінченну вибірку $\{\bar{x}(\upsilon_k)\}$ конфігурацій гіббсовського поля довжини p;

3) розрахувати стохастичний квазіградієнт γ^k у точці υ_k:

$$\gamma^k = \tilde{\nabla} L_n(x, \upsilon_k) = \left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi^{i_{\text{fix}}}, \upsilon_k^j)}{\partial \upsilon_k^j} - \frac{1}{p}\sum_{q=1}^{p}\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(\bar{x}_\chi^q, \upsilon_k^j)}{\partial \upsilon_k^j}\right)\right)_{j=1}^{l},$$

якщо функції $H_\chi(x, \upsilon)$ є диференційовними;

4) знайти точку $\upsilon_{k+1} = \pi_\theta\left(\upsilon_k - \frac{1}{k}\gamma^k\right)$; у загальному вигляді для цього потрібно розв'язати оптимізаційну задачу

$$\upsilon_{k+1} = \arg\min_{\upsilon \in \Theta} \| \upsilon_k - \rho_k \gamma^k - \upsilon \|^2,$$

проте якщо параметрична множина Θ компактна, то $\upsilon_{k+1} = \upsilon_k - \frac{1}{k}\gamma^k$;

5) перевірити один вибраний критерій зупинки:

$$|\upsilon_{k+1} - \upsilon_k| < \varepsilon, \quad |L_n(x, \upsilon_{k+1}) - L_n(x, \upsilon_k)| < \varepsilon \text{ або } |\tilde{\nabla} L_n(x, \upsilon_{k+1})| < \varepsilon;$$

якщо він виконується, то вважати, що істинним є значення параметра $\upsilon^* = \upsilon_{k+1}$, інакше $k = k+1$ і повернутися до кроку 1.

Суттєвим недоліком запропонованого алгоритму є висока обчислювальна складність, оскільки для кожної ітерації необхідно здійснювати процес породження марковського ланцюга, тобто генерувати повноцінну вибірку тестових конфігурацій гіббсовського поля. У разі наявності обмежень на обчислювальні ресурси для розв'язання цієї проблеми пропонується модифікувати алгоритм, здійснюючи апроксимацію математичного сподівання $E\left(\sum_{\chi \subset S} \frac{\partial H_\chi(x_\chi, \upsilon)}{\partial \upsilon}\right)$ на кожній ітерації лише за однією згенерованою вибіркою або породжуючи допоміжні конфігурації через певну кількість кроків. Отримана таким чином оцінка найшвидшого напрямку спуску до глобального мінімуму не є оптимальною, і відповідно алгоритм буде потребувати додаткових ітерацій. Однак цей недолік компенсується значним зменшенням обчислювального часу на кожній ітерації.

ВИСНОВКИ

У роботі розглянуто модель розповсюдження інфекції, що побудована за допомогою інструментарію марковських полів. Основна задача полягає в оцінюванні невідомих параметрів моделі, які описують приховані носії інфекції. Припускається, що кожен стан ланцюга Маркова є конфігурацією скінченного марковського випадкового поля, а розподіл ймовірностей станів ланцюга збігається зі спільним розподілом ймовірностей станів елементів гіббсовського випадкового поля. Для чисельного пошуку оцінки гіббсовського розподілу методом максимальної вірогідності запропоновано практичний алгоритм, побудований на основі стохастичного квазіградієнтного методу розв'язання задач опуклого стохастичного програмування.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Liggett T. Interacting particle systems. New York: Springer-Verlag, 1989. 550 p.
2. Chornei R.K., Daduna H., Knopov P.S. Controlled Markov fields with finite state space on graphs. *Stochastic Models*. 2005. Vol. 21, Iss. 4. P. 847–874.
3. Daduna G., Knopov P.S., Chornei R.K. Local control of Markovian processes of interaction on a graph with a compact set of states. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2001. Vol. 37, N 3. 348–360.
4. Besag J.E. Spatial interaction and the statisctical analysis of latticesy systems. *J. Royal Stat. Soc. Lond. Ser. B*. 1974. Vol. 36, N 2. P. 192–236.
5. Самосёнок А.С. Асимптотические свойства оценки максимального правдоподобия для гиббсовских полей. *Компьютерная математика.* 2012. № 1. С. 142–149.
6. Golodnikov A.N., Knopov P.S., Pepelyaev V.A. Estimation of reliability parameters under incomplete primary information. *Theory and Decision.* 2004. Vol. 57, N 4. P. 331–344.
7. Самосёнок А.С. Исследование эмпирических оценок параметров гиббсовского распределения, полученных методом максимального правдоподобия. *Кибернетика и системный анализ.* 2013. № 2. С. 178–187.
8. Knopov P.S., Kasitskaya E.J. On large deviations of empirical estimates in a stochastic programming problem with time-dependent observations. *Cybernetics and Systems Analysis.* 2010. Vol. 46, N 5. P. 724–728.

9. Ermoliev Yu.M., Knopov P.S. Method of empirical means in stochastic programming problems. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2006. Vol. 42, N 6. P. 773–785.

10. Geman S., Geman D. Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 1984. Vol. PAMI-6, N 6. P. 721–741.

Надійшла до редакції 22.02.2021

П.С. Кнопов, А.С. Самосёнок, Г.Д. Била

МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ИНФЕКЦИОННЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ СО СКРЫТЫМИ НОСИТЕЛЯМИ

Аннотация. Предложен алгоритм оценки неизвестных параметров модели распространения инфекции, построенной на основе инструментария марковских полей с помощью метода максимального правдоподобия. Предполагается, что каждое состояние цепи представляет собой некоторую конфигурацию конечного марковского случайного поля, а распределение вероятностей состояний цепи совпадает с общим распределением вероятностей состояний элементов гиббсовского случайного поля.

Ключевые слова: марковские поля, локальное взаимодействие элементов поля, гиббсовское распределение, неизвестные параметры, алгоритм оценки.

P.S. Knopov, O.S. Samosonok, G.D. Bila

A MODEL OF INFECTIOUS DISEASE SPREAD WITH HIDDEN CARRIER

Abstract. The authors consider an algorithm for estimating the unknown parameters of the infection spread model based on the Markov field tools using the maximum likelihood method is considered. It is assumed that each state of the Markov chain represents some configuration of a finite random Markov field, and the probability distribution of the chain states is the same as general probability distribution of the states of elements of the Gibbs random field.

Keywords: Markov fields, local interaction of field elements, Gibbs distribution, unknown parameters, estimation algorithm.

Кнопов Павло Соломонович,
чл.-кор. НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор, завідувач відділу Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, e-mail: knopov1@yahoo.com.

Самосьонок Олександр Сергійович,
кандидат фіз.-мат. наук, науковий співробітник Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, e-mail: samosyonok@gmail.com.

Біла Галина Дмитрівна,
кандидат фіз.-мат. наук, науковий співробітник Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, e-mail: bila.galyna@gmail.com.