

Difusões Estocásticas com Comutação e Reflexão: Aplicações e Métodos Numéricos para o Problema de Controle Ótimo

Saul Leite

Centro de Matemática, Computação e Cognição
Universidade Federal do ABC
Santo André, SP

23 Abril de 2024

Conteúdo

1. Introdução, definição das difusões estocásticas com comutação;
2. Métodos Numéricos para Resolução de Problemas de Controle Ótimo;
3. Motivação Difusões Estocásticas com Comutação “Refletidas”:
 - ▶ Exemplo de Aplicações em Sistemas de Filas;
 - ▶ Exemplo de Aplicações em Biologia;

Introdução

Difusão Estocásticas com Comutação

Difusões (estocásticas) com comutação podem ser descritas como sendo processos estocásticos compostos por duas componentes:

$$(X(\cdot), \alpha(\cdot)) = (\text{contínua}, \text{discreta}),$$

em que $X(\cdot)$ se comporta como uma difusão estocástica e $\alpha(\cdot)$ é um processo de saltos. Muitas vezes $X(\cdot)$ e $\alpha(\cdot)$ são acoplados, no sentido que $X(\cdot)$ depende de $\alpha(\cdot)$ e $\alpha(\cdot)$ também depende de $X(\cdot)$.

Em qualquer caso, o par $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$ possui (*conjuntamente*) a propriedade de Markov:

$$\mathbb{E} \left[f(X(t), \alpha(t)) \middle| X(u), \alpha(u); u \leq s \right] = \mathbb{E} \left[f(X(t), \alpha(t)) \middle| X(s), \alpha(s) \right],$$

para qualquer f adequada e $s \leq t$.

Algumas Aplicações

1. **Finanças** ([5, 8, 14, 15]): preço de uma ação pode ser representado pela parte contínua e estado discreto pode representar fatores externos, como se o mercado está com tendência de alta ou baixa;
2. **Sistemas de manufatura** ([2, 13]): nível de produção pode ser representado pela parte contínua e estados das máquinas pode ser representado pelo processo discreto;
3. **Sistemas de fila** ([6]): sistemas de filas em condições de tráfego pesado podem ser modeladas com difusões estocásticas, parte discreta pode representar modo de operação;
4. **Biologia** ([1, 4, 11]): Modelos epidemiológicos SIR/SIS; sistemas de reações químicas, utilizado para modelar, por exemplo, redes de regulação gênica.

Referências podem ser encontradas no final dos slides.

Definição

Uma difusão estocástica com comutação é um processo estocástico $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$ definido no espaço de probabilidade filtrado $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}, \mathbb{P})$ satisfazendo as seguintes equações:

$$(1) \quad dX(t) = b(X(t), \alpha(t))dt + \sigma(X(t), \alpha(t))dW(t)$$

$$(2) \quad \mathbb{P}\left(\alpha(t+h) = j \mid \alpha(t) = i, X(s), \alpha(s), s \leq t\right) \\ = q_{ij}(X(t))h + o(h),$$

$i, j \in E$, $i \neq j$, com a condição inicial $(X(0), \alpha(0)) = (X_0, \alpha_0)$

Definição

Uma difusão estocástica com comutação é um processo estocástico $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$ definido no espaço de probabilidade filtrado $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}, \mathbb{P})$ satisfazendo as seguintes equações:

$$(1) \quad dX(t) = b(X(t), \alpha(t))dt + \sigma(X(t), \alpha(t))dW(t)$$

$$(2) \quad \mathbb{P}\left(\alpha(t+h) = j \mid \alpha(t) = i, X(s), \alpha(s), s \leq t\right) \\ = q_{ij}(X(t))h + o(h),$$

$i, j \in E$, $i \neq j$, com a condição inicial $(X(0), \alpha(0)) = (X_0, \alpha_0)$ em que:

1. $E = \{1, 2, \dots, m\}$ conjunto finito de estados para α ;
2. $b : \mathbb{R}^d \times E \rightarrow \mathbb{R}^d$ termo de deriva;
3. $\sigma : \mathbb{R}^d \times E \rightarrow \mathbb{R}^d$ termo de dispersão;
4. $W(\cdot)$ é um *Movimento Browniano*;
5. $Q(x) := \{q_{ij}(x)\}_{i,j \in E}$, com $q_{ij} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, satisfazendo a “ q -propriedade”: $q_{ij}(x) \in [0, \infty)$, $i \neq j$, $q_{ii}(x) = -\sum_{j \neq i} q_{ij}(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}^d$.

Movimento Browniano

Um Movimento Browniano “escalar” padrão, também conhecido como processo de Wiener padrão, é o processo estocástico $W(\cdot)$ com as seguintes propriedades:

1. $W(0) = 0$;
2. para $0 \leq s \leq t$ o incremento $W(t) - W(s)$ tem distribuição Normal com média zero e variância $t - s$. Ou de forma equivalente,

$$W(t) - W(s) \sim \sqrt{t - s}\xi,$$

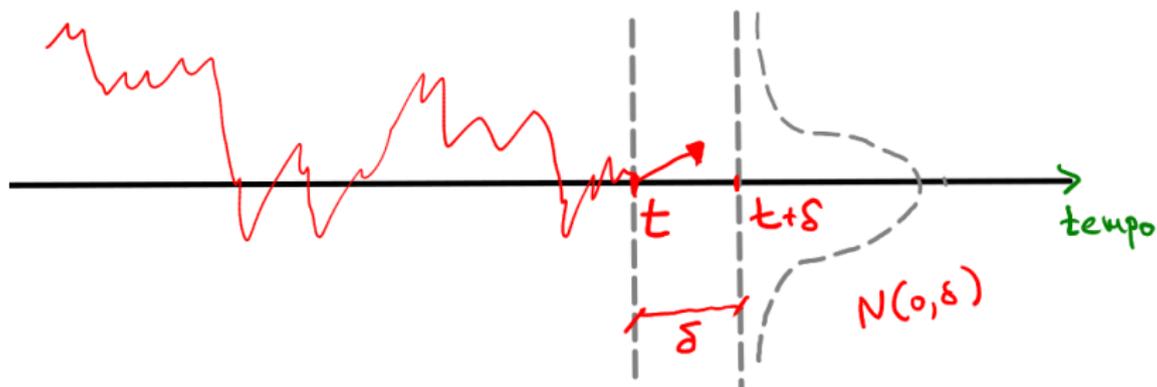
em que ξ é uma variável aleatória com distribuição Normal com média zero e desvio padrão 1.

3. Para $0 \leq s < t < u < v$ os incrementos $W(t) - W(s)$ e $W(v) - W(u)$ são *independentes*.

Movimento Browniano

Como W é um processo estocástico, para cada $\omega \in \Omega$ (espaço amostral), temos que $W(\omega, \cdot)$ é uma função $[0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ representando o caminho percorrido.

Uma ilustração destes caminhos gerados por um movimento Browniano escalar é dado abaixo:



É possível mostrar que estes caminhos são: *contínuos* e *não diferenciáveis* em qualquer ponto, c.p. 1.

Definição

Outra forma de escrever a equação (1) é de forma integral:

$$(1) \quad X(t) = X_0 + \int_0^t b(X(s), \alpha(s))dt + \int_0^t \sigma(X(s), \alpha(s))dW(s).$$

A integral em relação ao movimento Browniano é conhecida com integral de Itô (a noção de integral de Lebesgue–Stieltjes não é adequada já que os caminhos de $W(\cdot)$ não têm variação limitada).

De forma simplificada, a integral de Itô $\int_0^t f(s)dW(s)$ pode ser pensada como limites de expressões como a dada abaixo:

$$\sum_{j=0}^{N-1} f(t_j) \left(W(t_{j+1}) - W(t_j) \right)$$

em que $t_j = j\Delta$ e $\Delta = T/N$ (o fato que avaliarmos $f(\cdot)$ no ponto t_j é importante aqui). Uma boa introdução para EDEs com mesma abordagem da usada aqui é [3].

Equações Diferenciais Estocásticas (EDE) com comutação

Existência e unicidade de soluções para este tipo de equação pode ser obtido sob hipóteses usuais de crescimento linear e continuidade de Lipschitz para os parâmetros b e σ .

Precisamos, além disso, que Q seja contínua e limitada.

Teo.([12, p. 30]) Suponha que $b(\cdot, \cdot)$ e $\sigma(\cdot, \cdot)$ satisfazem:

$$|b(x, i)| + |\sigma(x, i)| \leq K(1 + |x|), \quad i \in E,$$

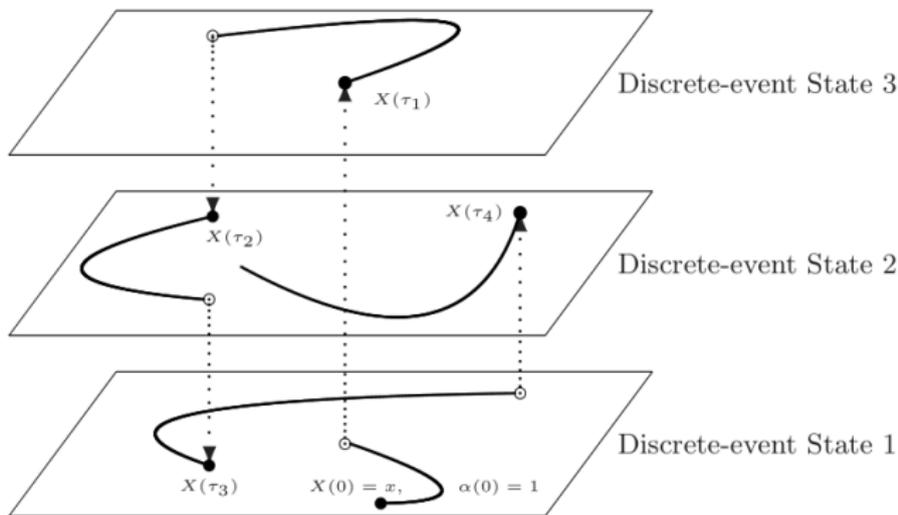
e que para cada $N \geq 1$, existe uma constante positiva M_N tal que para todos os $t \geq 0$, $i \in E$, e todos $x, y \in \mathbb{R}^d$ com $|x| \vee |y| \leq N$,

$$|b(x, i) - b(y, i)| \vee |\sigma(x, i) - \sigma(y, i)| \leq M_N |y - x|.$$

Então existe uma única solução $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$ para a equação (1) e (2).

Equações Diferenciais Estocásticas (EDE) com comutação

Prop. ([12, p. 33]) $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$ possui funções amostras contínuas a direita e com limites a esquerda.



Como $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$ é um processo estocástico, podemos pensar que este induz uma medida de probabilidade sobre o espaço de funções contínuas a direita com limite a esquerda. Cada *realização* deste processo terá caminhos diferentes.

Exemplo

Considere o modelo apresentado em: *Stock trading: An Optimal Selling Rule* por Zhang [14]:

$$\begin{cases} dX(t) = \mu(\alpha(t))X(t)dt + \sigma(\alpha(t))X(t)dW(t) \\ X(0) = X_0, \end{cases}$$

em que:

1. $X(\cdot)$ representa o preço de uma ação no mercado financeiro (exceto pela dependência em $\alpha(\cdot)$, o modelo acima é conhecido como “Movimento Browniano Geométrico” e é muito usado como modelo para preço de ações).
2. $\alpha(\cdot)$ representa períodos de alta e baixa do mercado financeiro, medido por algum índice. O processo toma valor em $E = \{1, 2\}$, 1 = alta, e 2 = baixa. Parâmetro Q é dado por:

$$Q = \begin{bmatrix} -\lambda_1 & \lambda_1 \\ \lambda_2 & -\lambda_2 \end{bmatrix}.$$

λ_i é a taxa com que $\alpha(\cdot)$ sai do estado $i \in E$.

Exemplo



Up-trend		1/2-4/22	6/16-7/20	9/11-9/23	10/9-12/31
Down-trend		4/23-6/15	7/21-9/10	9/24-10/8	

Usando dados de ações da Microsoft durante o ano de 1999 e usando o índice NASDAQ para o mercado, Zhang estimou os seguintes parâmetros:

$$\mu(1) = 1,5968; \quad \mu(2) = -1,41155$$

$$\sigma(1) = 0,44; \quad \sigma(2) = 0,63$$

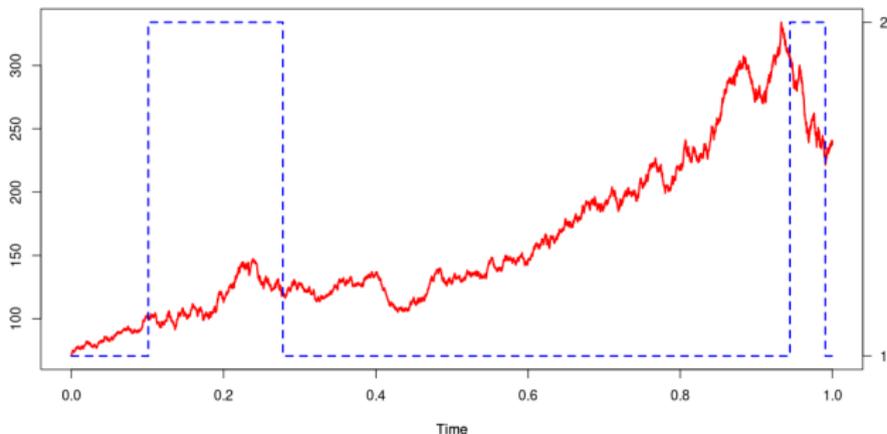
$$\lambda_1 = 6,04; \quad \lambda_2 = 8,90$$

$X_0 = 70,4$ e α_0 tem distribuição inicial $p_0 = (1/2; 1/2)'$.

Exemplo

Como $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$ solução da EDE com comutação acima é um processo estocástico, o par induz uma medida de probabilidade sobre o espaço de funções contínuas a direita com limite a esquerda.

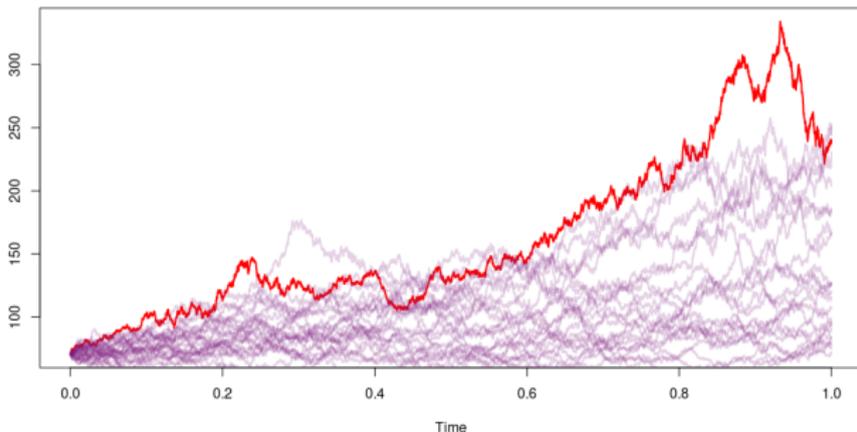
Cada realização $\omega \in \Omega$ corresponde à um ensaio ou possibilidade de caminho para o processo. Abaixo temos a ilustração de *um destes caminhos*:



Simulação de Caminhos

Muitas vezes métodos numéricos são usados para estimar propriedades do processo $(X(\cdot), \alpha(\cdot))$, repetindo a simulação em um processo de Monte Carlo.

Por exemplo, poderíamos estimar a probabilidade da difusão com comutação atingir um preço x dentro de um intervalo de tempo $[0, T]$ repetindo a simulação várias vezes e estimando a probabilidade.



Métodos Numéricos para Problemas de Controle

Controle Ótimo

Vamos considerar um problema de *parada ótima* (que é um dos problemas mais simples de controle).

Suponha que $X(t)$ toma valor em \mathbb{R} e que

$$\tau = \inf \left\{ t \geq 0 : X(t) \in B \right\}$$

em que B é um conjunto na forma $B = (a, b)^c$, $a < b$.

Seja $k : \mathbb{R} \times E \rightarrow \mathbb{R}$ e $g : \mathbb{R} \times E \rightarrow \mathbb{R}$ funções contínuas. Defina o seguinte custo:

$$W(x, i, \tau) := \mathbb{E}_{(x, i)} \left[\int_0^\tau k(X(s), \alpha(s)) ds + g(X(\tau), \alpha(\tau)) \right].$$

Gostaríamos de encontrar o tempo de parada τ (ou o conjunto B associado) que faz esse custo ser mínimo.

Exemplo

Zhang [14] considerou o seguinte problema de parada ótima: encontrar τ que minimiza:

$$\mathbb{E}_{(x,i)} \left[g(S(\tau)) e^{-\beta\tau} \right] = \mathbb{E}_{(x,i)} \left[- \left(\frac{S(\tau) - S_0}{S_0} \right) e^{-\beta\tau} \right],$$

em que $S(t)$ é o preço da ação modelada por uma difusão com comutação:

$$\begin{cases} dS(t) = \mu(\alpha(t))S(t)dt + \sigma(\alpha(t))S(t)dW(t) \\ S(0) = S_0, \end{cases}$$

A constante $\beta > 0$ é um fator de desconto. Em nossa discussão, iremos considerar o caso sem desconto para simplificar.

Controle Ótimo

Para isso, podemos começar caracterizando o custo mínimo (ou função valor) que é dado por

$$V(x, i) := \inf_{\tau} W(x, i, \tau),$$

onde τ varia dentro do conjunto de “tempos de parada” na forma dada acima.

Vamos supor que B é um conjunto ótimo de parada (supondo que ele exista). Então, teremos que:

$$\begin{cases} V(x, i) < g(x, i) & \text{se } x \notin B \\ V(x, i) = g(x, i) & \text{se } x \in B \end{cases}$$

Eq. Programação Dinâmica

A equação de programação dinâmica caracteriza a função valor $V(x, i)$. Vamos ilustrar sua derivação neste slide.

Suponha que o processo anda em passos de tamanho Δ no tempo. A cada tempo $n\Delta$, temos a decisão de **parar** ou **continuar**:

$$\text{parar} \rightarrow g(x, i)$$

$$\text{continuar} \rightarrow k(x, i)\Delta + \mathbb{E}_{(x,i)} \left[V(X(\Delta), \alpha(\Delta)) \right],$$

supondo que $(X(n\Delta), \alpha(n\Delta)) = (x, i)$.

Note que $\mathbb{E}_{(x,i)} \left[V(X(\Delta), \alpha(\Delta)) \right]$ seria a quantidade que ganhamos se continuarmos a partir do tempo $n\Delta$ de forma ótima.

Eq. Programação Dinâmica

Logo, como desejamos minimizar o custo, escolheríamos o menor destes dois valores. Desta forma:

$$V(x, i) = \min \left\{ g(x, i), k(x, i)\Delta + \mathbb{E}_{(x, i)} \left[V(X(\Delta), \alpha(\Delta)) \right] \right\}.$$

Subtraindo $V(x, i)$ de ambos os lados, tem-se:

$$0 = \min \left\{ g(x, i) - V(x, i), \mathbb{E}_{(x, i)} \left[V(X(\Delta), \alpha(\Delta)) \right] - V(x, i) + k(x, i)\Delta \right\}$$

No caso em que $x \in B$, teríamos $V(x, i) = g(x, i)$. Mas no caso em que $x \notin B$, o segundo termo deve ser zero. Isso implica que:

$$\frac{\mathbb{E}_{(x, i)} \left[V(X(\Delta), \alpha(\Delta)) \right] - V(x, i)}{\Delta} + k(x, i) = 0$$

Eq. Programação Dinâmica

Tomando o limite $\Delta \rightarrow 0$, temos que:

$$(\star) \begin{cases} \mathcal{L}V(x, i) + k(x, i) = 0 & \text{para } x \notin B \\ V(x, i) = g(x, i) & \text{para } x \in B, \end{cases}$$

em que \mathcal{L} é conhecido como “*gerador infinitesimal*” da difusão estocástica com comutação e é dado por:

$$\mathcal{L}f(x, i) = b(x, i)f_x(x, i) + \frac{1}{2}\sigma^2(x, i)f_{xx}(x, i) + \sum_{j \in E} q_{ij}(x)f(x, j),$$

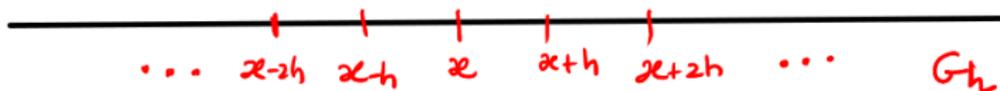
para funções $f(\cdot)$ suf. regulares (f_x e f_{xx} são a primeira e segunda derivadas em relação a x).

A equação (\star) é conhecida como equação de **programação dinâmica** e pode ser usada para determinar $V(\cdot)$. Veremos a seguir o método da Cadeia de Markov aproximada para resolver este problema numericamente.

Método da Cadeia de Markov Aproximada

Queremos uma aproximação discreta para $V(x, i)$, dada por $V^h(x, i)$ tomando valor em um conjunto

$G_h := \{\dots, x - h, x, x + h, \dots\}$, como ilustrado abaixo:



Para isso, usaremos **diferenças finitas** para aproximar a equação de programação dinâmica que discutimos anteriormente.

Método da Cadeia de Markov Aproximada

Usaremos diferenças finitas dadas abaixo:

$$D_h^+ f(x, i) = \frac{f(x + h, i) - f(x, i)}{h},$$

$$D_h^- f(x, i) = \frac{f(x, i) - f(x - h, i)}{h},$$

$$D_h^2 f(x, i) = \frac{f(x + h, i) - 2f(x, i) + f(x - h, i)}{h^2}.$$

Logo, temos a seguinte aproximação para o gerador infinitesimal

$$\begin{aligned} L^h f(x, i) &= D_h^+ f(x, i) b^+(x, i) + D_h^- b^-(x, i) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sigma^2(x, i) D_h^2 f(x, i) + \sum_{j \in E} q_{ij}(x) f(x, j), \end{aligned}$$

em que $b^+(x, i) = \max\{0, b(x, i)\}$ e $b^-(x, i) = \min\{0, b(x, i)\}$.

Método da Cadeia de Markov Aproximada

Desta forma, temos a seguinte versão discretizada da equação de programação dinâmica:

$$\begin{cases} L^h V^h(x, i) + k(x, i) = 0 & \text{para } x \notin B \\ V^h(x, i) = g(x, i) & \text{para } x \in B, \end{cases}$$

Método da Cadeia de Markov Aproximada

Desta forma, temos a seguinte versão discretizada da equação de programação dinâmica:

$$\begin{cases} L^h V^h(x, i) + k(x, i) = 0 & \text{para } x \notin B \\ V^h(x, i) = g(x, i) & \text{para } x \in B, \end{cases}$$

Substituindo a expressão para L^h e rearranjando os termos, teremos o seguinte para $x \notin B$:

$$\begin{aligned} V^h(x, i) = & \left\{ V^h(x + h, i) \left[\frac{hb^+(x, i) + \frac{1}{2}\sigma^2(x, i)}{M(x, i)} \right] \right. \\ & + V^h(x - h, i) \left[\frac{-hb^+(x, i) + \frac{1}{2}\sigma^2(x, i)}{M(x, i)} \right] \\ & \left. + \sum_{j \neq i} V(x, j) q_{ij}(x) \Delta t^h(x, i) + k(x, i) \Delta t^h(x, i) \right\}, \end{aligned}$$

em que $M(x, i) = |b(x, i)|h + \sigma^2(x, i) - q_{ii}(x, i)h^2$ e $\Delta t^h(x, i) = h^2/M(x, i)$.

Método da Cadeia de Markov Aproximada

Note que, se definirmos uma cadeia de Markov a tempo discreto $\{(\zeta_n^h, \vartheta_n^h)\}_{n \geq 0}$ tomando valor no conjunto $G_h \times E$, com probabilidade de transição dada por:

$$p((x+h, i)|(x, i)) = \frac{hb^+(x, i) + \frac{1}{2}\sigma^2(x, i)}{M(x, i)}$$

$$p((x-h, i)|(x, i)) = \frac{-hb^-(x, i) + \frac{1}{2}\sigma^2(x, i)}{M(x, i)}$$

$$p((x, j)|(x, i)) = q_{ij}(x)\Delta t^h(x, i), \quad i \neq j,$$

podemos escrever a equação acima da seguinte forma:

$$V^h(x, i) = \mathbb{E}_{(x, i)}[V^h(\zeta_1^h, \vartheta_1^h)] + k(x, i)\Delta t^h(x, i),$$

para $x \notin B$ e $V^h(x, i) = g(x, i)$ para $x \in B$.

Método da Cadeia de Markov Aproximada

De forma equivalente, poderíamos escrever:

$$V^h(x, i) = \min \left\{ g(x, i), \mathbb{E}_{(x, i)} [V^h(\zeta_1^h, \vartheta_1^h)] + k(x, i) \Delta t^h(x, i) \right\},$$

para $(x, i) \in G_h \times E$.

Da teoria dos processos de decisão de Markov (MDP), sabe-se que esta é a equação de programação dinâmica do seguinte problema: encontrar “tempo de parada” N que minimiza:

$$W^h(x, i, N) = \mathbb{E}_{(x, i)} \left[\sum_{n=1}^{N-1} k(\zeta_n^h, \vartheta_n^h) \Delta t^h(x, i) + g(\zeta_N^h, \vartheta_N^h) \right],$$

Tem-se que $V^h(x, i) = \inf_N W^h(x, i, N)$.

Método da Cadeia de Markov Aproximada

Existem algoritmos eficientes para resolver tais problemas. Por exemplo, podemos definir $V_0^h \equiv 0$ e repetir o processo iterativo:

$$V_{n+1}^h(x, i) = \min \left\{ g(x, i), \mathbb{E}_{(x, i)} [V_n^h(\zeta_1^h, \vartheta_1^h)] + k(x, i) \Delta t^h(x, i) \right\}.$$

É possível mostrar que $V_n^h \rightarrow V^h$.

Conhecendo V^h , podemos determinar se devemos ou não parar a cada par (x, i) verificando qual valor é mínimo:

$$V^h(x, i) = \min \left\{ g(x, i), \mathbb{E}_{(x, i)} [V^h(\zeta_1^h, \vartheta_1^h)] + k(x, i) \Delta t^h(x, i) \right\}.$$

Este algoritmo é conhecido como “Iteração de Valor.”

Método da Cadeia de Markov Aproximada

Para mostrar que este método é adequado, mostra-se que:

1. $\{(\zeta_n^h, \vartheta_n^h)\}_{n \geq 0}$ (ou uma versão interpolada) converge em distribuição para a solução da EDE com comutação - para isso, geralmente precisamos que esta cadeia de Markov seja “localmente consistente” com a difusão com comutação.
2. $V^h(x, i)$ converge para $V(x, i)$ quando $h \rightarrow 0$.

Estes resultados de convergência para o problema de parada ótima foram demonstrados por [10], para o caso em que q_{ij} não depende do estado.

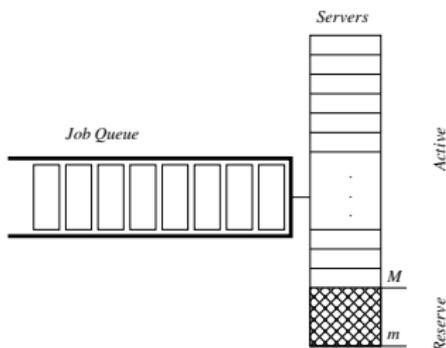
Exemplo de Aplicação

Para ilustrar a aplicação do método, podemos resolver o problema de parada ótima apresentado por Zhang [14].

- Código está disponível para download em um repositório no github (link no final dos slides).

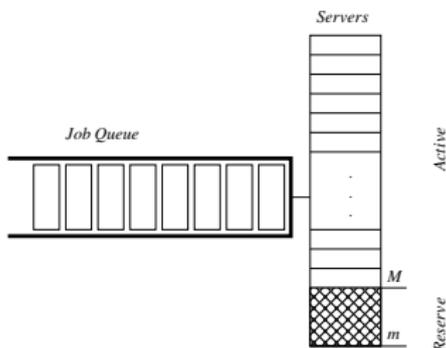
Aplicações em Sistemas de Filas

Modelo de Filas



Um sistema composto por uma fila e vários servidores idênticos. Uma parte dos servidores chamada de **reservas** podem ser ligados e desligados.

Modelo de Filas

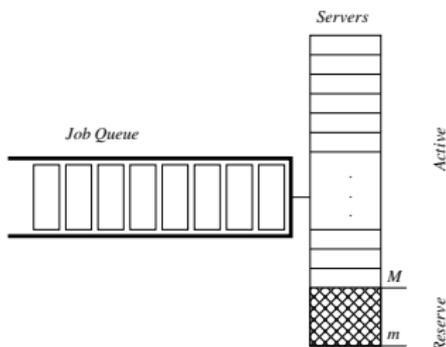


Um sistema composto por uma fila e vários servidores idênticos. Uma parte dos servidores chamada de **reservas** podem ser ligados e desligados.

Δ_l^a : tempo entre a chegada do cliente l e $l - 1$. (iid)

Δ_l^d : tempo de processamento para cliente l . (iid)

Modelo de Filas



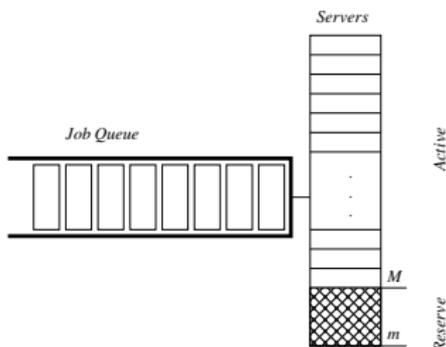
Um sistema composto por uma fila e vários servidores idênticos. Uma parte dos servidores chamada de **reservas** podem ser ligados e desligados.

Δ_l^a : tempo entre a chegada do cliente l e $l - 1$. (iid)

Δ_l^d : tempo de processamento para cliente l . (iid)

Quando Δ_l^a e Δ_l^d possuem distribuição exponencial, o processo do número de clientes na fila é Markoviano “Teoria de Filas clássica” (caso tratado por Mitrani 2013 [9]).

Modelo de Filas



Um sistema composto por uma fila e vários servidores idênticos. Uma parte dos servidores chamada de **reservas** podem ser ligados e desligados.

Δ_l^a : tempo entre a chegada do cliente l e $l - 1$. (iid)

Δ_l^d : tempo de processamento para cliente l . (iid)

Quando Δ_l^a e Δ_l^d possuem distribuição exponencial, o processo do número de clientes na fila é Markoviano “Teoria de Filas clássica” (caso tratado por Mitrani 2013 [9]).

Caso contrário, o processo **não** é Markoviano.

Modelo de Filas

Para tratar casos em que Δ_i^a e Δ_i^d não possuem distribuição exponencial, podemos utilizar aproximações por difusão que aparecem em situação limite - tráfego pesado.

Modelo de Filas

Para tratar casos em que Δ_l^a e Δ_l^d não possuem distribuição exponencial, podemos utilizar aproximações por difusão que aparecem em situação limite - tráfego pesado.

Escrevemos a carga de trabalho total no sistema no tempo t como sendo (assumimos paralelismo entre as máquinas):

$$X(t) = X(0) + \sum_{l=1}^{A(t)} \Delta_l^d - n \int_0^t f(\alpha(s)) ds + Z(t),$$

Modelo de Filas

Para tratar casos em que Δ_l^a e Δ_l^d não possuem distribuição exponencial, podemos utilizar aproximações por difusão que aparecem em situação limite - tráfego pesado.

Escrevemos a carga de trabalho total no sistema no tempo t como sendo (assumimos paralelismo entre as máquinas):

$$X(t) = X(0) + \sum_{l=1}^{A(t)} \Delta_l^d - n \int_0^t f(\alpha(s)) ds + Z(t),$$

em que:

n : número de servidores

$A(t)$: número de clientes até o tempo t

$\alpha(\cdot)$: estado dos servidores reserva $\{0,1,2,3\}$

$f(\cdot)$: fração dos servidores ativos

$Z(\cdot)$: processo de reflexão, mantém X positivo.

Modelo de Filas

Para tratar casos em que Δ_l^a e Δ_l^d não possuem distribuição exponencial, podemos utilizar aproximações por difusão que aparecem em situação limite - tráfego pesado.

Escrevemos a carga de trabalho total no sistema no tempo t como sendo (assumimos paralelismo entre as máquinas):

$$X^n(t) = X^n(0) + \sum_{l=1}^{A^n(t)} \Delta_l^d - n \int_0^t f^n(\alpha^n(s)) ds + Z^n(t),$$

em que:

n : número de servidores

$A(t)$: número de clientes até o tempo t

$\alpha(\cdot)$: estado dos servidores reserva $\{0,1,2,3\}$

$f(\cdot)$: fração dos servidores ativos

$Z(\cdot)$: processo de reflexão, mantém X positivo.

Quando $n \rightarrow \infty$, $x^n = \frac{X}{\sqrt{n}}$ converge em distribuição para uma difusão com comutação, em regime de tráfego pesado.

Aproximação em Tráfego Pesado

O regime de **tráfego pesado** é representado através da seguinte hipótese:

$$\sqrt{n}(\rho^n - f^n(i)) = b^n(i) \rightarrow b(i), \quad n \rightarrow \infty$$

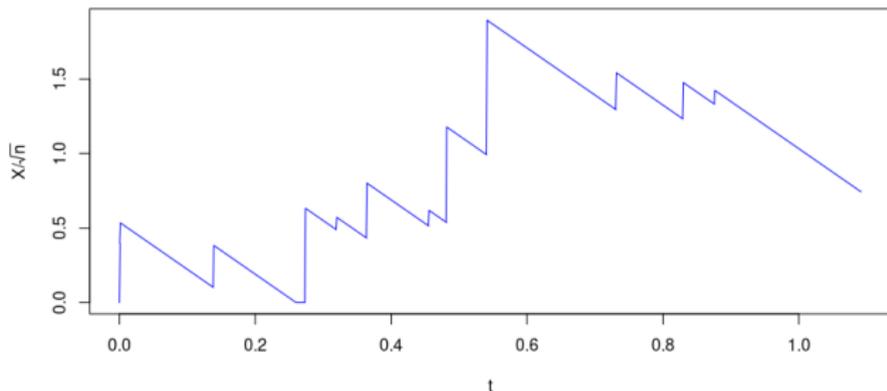
para cada $i \in E = \{0, 1, 2, 3\}$, em que

$$\rho^n = \frac{\mathbb{E}[\Delta_l^d]}{n\mathbb{E}[\Delta_l^{a,n}]} = \frac{\lambda^{a,n}}{n\lambda^d}$$

é chamado de **intensidade de tráfego**. Em particular implica que $\rho^n \rightarrow 1$ quando $n \rightarrow \infty$.

Aproximação em Tráfego Pesado

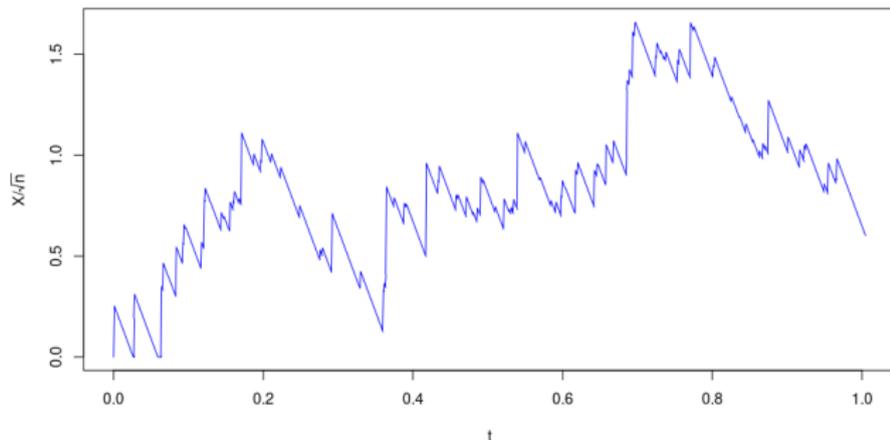
Exemplo com $\mathbb{E}[\Delta_t^{a,n}] = 1/0.9n$, $\mathbb{E}[\Delta_t^d] = 1$, $n = 10$ ($\rho^n = 0.9$ - supondo todos os servidores ativos):



Este é o caminho do processo escalonado: $x^n(\cdot) = X^n(\cdot)/\sqrt{n}$.

Aproximação em Tráfego Pesado

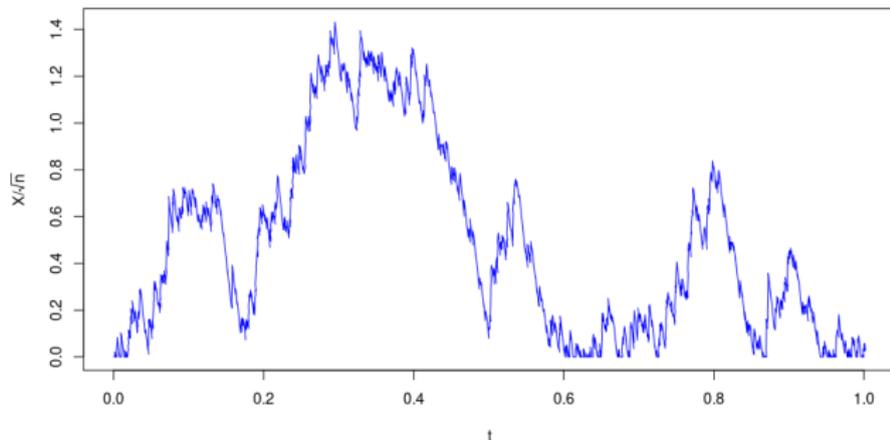
Exemplo com $\mathbb{E}[\Delta_t^{a,n}] = 1/0.9n$, $\mathbb{E}[\Delta_t^d] = 1$, $n = 100$ ($\rho^n = 0.9$ - supondo todos os servidores ativos):



Este é o caminho do processo escalonado: $x^n(\cdot) = X^n(\cdot)/\sqrt{n}$.

Aproximação em Tráfego Pesado

Exemplo com $\mathbb{E}[\Delta_l^{a,n}] = 1/0.9n$, $\mathbb{E}[\Delta_l^d] = 1$, $n = 1000$
($\rho^n = 0.9$ - supondo todos os servidores ativos):



Este é o caminho do processo escalonado: $x^n(\cdot) = X^n(\cdot)/\sqrt{n}$.
Note que o caminho acima se assemelha a um caminho de uma difusão estocástica.

Modelo para o estado dos servidores reservas

Consideramos que α^n é um processo de salto a tempo contínuo controlado tomando valor no seguinte conjunto E de estados:

- 0: reserva desligada
- 1: reserva ligando
- 2: reserva desligando
- 3: reserva ligada

Modelo para o estado dos servidores reservas

Consideramos que α^n é um processo de salto a tempo contínuo controlado tomando valor no seguinte conjunto E de estados:

- 0: reserva desligada
- 1: reserva ligando
- 2: reserva desligando
- 3: reserva ligada

Para controles tomando valor no conjunto \mathcal{U} , α^n possui a seguinte taxa de transição entre estados $i, j \in E, j \neq i$:

$$\begin{aligned}q_{ij}^{n,v}(x^n(t)) &= \int_{\mathcal{U}} q_{ij}^n(u) v(x^n(t), i)(du) \\ &= \lim_{\delta \downarrow 0} \frac{1}{\delta} \mathbb{P}(\alpha^n(t + \delta) = j | \alpha^n(t) = i, x^n(s), \alpha^n(s), s \leq t),\end{aligned}$$

Modelo para o estado dos servidores reservas

Consideramos que α^n é um processo de salto a tempo contínuo controlado tomando valor no seguinte conjunto E de estados:

- 0: reserva desligada
- 1: reserva ligando
- 2: reserva desligando
- 3: reserva ligada

Para controles tomando valor no conjunto \mathcal{U} , α^n possui a seguinte taxa de transição entre estados $i, j \in E, j \neq i$:

$$\begin{aligned}q_{ij}^{n,v}(x^n(t)) &= \int_{\mathcal{U}} q_{ij}^n(u) v(x^n(t), i)(du) \\ &= \lim_{\delta \downarrow 0} \frac{1}{\delta} \mathbb{P}(\alpha^n(t + \delta) = j | \alpha^n(t) = i, x^n(s), \alpha^n(s), s \leq t),\end{aligned}$$

Usamos a representação do controle de forma relaxada. O controle $v(\cdot, \cdot)$ é uma medida de probabilidade sobre o conjunto \mathcal{U} .

Resultado Limite

Teo.([6]) Suponha que a condição inicial para o n -ésimo sistema é $(x^n(0), \alpha^n(0))$ e converge fracamente para (x_0, α_0) , uma variável aleatória tomando valor em $\mathbb{R}_+ \times E$. Seja (x^n, α^n) o modelo para o n -ésimo sistema de fila usando o controle v . Então (x^n, α^n) converge em distribuição para uma **difusão estocástica refletida com comutação** satisfazendo as equações abaixo:

$$x(t) = x(0) + \int_0^t b(\alpha(s))ds + \sigma w(t) + r(t),$$

$$\mathbb{P}(\alpha(t + \delta) = j | \alpha(t) = i, x(s), \alpha(s), s \leq t) = q_{ij}^v(x(t)) + o(\delta),$$

em que $b(\cdot)$ é dado como acima e $\sigma := \sqrt{\lambda^s (\bar{\Delta}^d)^2 (\sigma_a^2 + \sigma_d^2)}$.

Obs. Do melhor do nosso conhecimento, este é o primeiro modelo utilizando difusões estocásticas com comutação e reflexão.

Utilização da aproximação na prática

Na prática aproximamos $X^n \approx \frac{\tilde{x}^n}{\sqrt{n}}$ em que:

$$\tilde{x}^n(t) = x^n(0) + \int_0^t b^n(\alpha^n(s)) ds + \sigma w(t) + z(t), \quad t \geq 0$$

e $b^n(i) = \sqrt{n} (\rho^n - f(i))$.

Utilização da aproximação na prática

Na prática aproximamos $X^n \approx \frac{\tilde{x}^n}{\sqrt{n}}$ em que:

$$\tilde{x}^n(t) = x^n(0) + \int_0^t b^n(\alpha^n(s)) ds + \sigma w(t) + z(t), \quad t \geq 0$$

e $b^n(i) = \sqrt{n}(\rho^n - f(i))$.

Problema de Controle

Agora podemos definir o nosso problema de controle: encontrar v que minimiza o custo:

$$\limsup_T \frac{1}{T} \int_0^T \mathbb{E}_{(x_0, i_0)}^v [N(\alpha^n(s))] ds,$$

em que $N(\alpha(t))$ representa o número de servidores consumindo energia no tempo t , sujeito a seguinte restrição em relação a carga de trabalho média do sistema:

$$\limsup_T \frac{1}{T} \int_0^T \mathbb{E}_{(x_0, i_0)}^u [\sqrt{n}\tilde{x}^n(s)] ds \leq W,$$

Problema de Controle

Para simplificar, vamos considerar um problema sem restrições. Ou seja, o problema é determinar uma política de controle v que minimiza o custo:

$$\gamma(x_0, i_0, v) = \limsup_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \mathbb{E}_{(x_0, i_0)}^v \left[\int_0^T c_1 \sqrt{n} \tilde{x}(s) + c_2 N(\alpha(s)) ds \right],$$

em que $(x_0, i_0) \in G \times E$ são condições iniciais. O termo dentro da integral do lado direito

$$k(x, i) := c_1 \sqrt{n} x + c_2 N(i)$$

é chamado de custo corrente.

Os pesos c_1 e c_2 devem ser escolhidos pelo usuário do modelo.

Equação de Programação Dinâmica

A equação de programação dinâmica para este problema é:

$$\begin{cases} \inf_{u \in \mathcal{U}} \mathcal{L}^u V(x, i) - \gamma + k(x, i) = 0, & (x, i) \in G \times E \\ V_x(x, i) = 0, & \text{for } (x, i) \in \{0, B\} \times E \end{cases}$$

em que $V : G \times E \rightarrow \mathbb{R}$, γ é uma constante real, e para cada $u \in \mathcal{U}$, define-se

$$\mathcal{L}^u f(x, i) := b(x, i) f_x(x, i) + \frac{1}{2} \sigma^2(x, i) f_{xx}(x, i) + \sum_{j \in E} q_{ij}(u) f(x, j),$$

para f_x e f_{xx} representando a primeira e segunda derivada de f em relação ao primeiro argumento.

A ideia é utilizar o método da cadeia de Markov aproximada para encontrar uma solução para este problema.

Solução Numérica

Utilizando a equação de programação dinâmica em conjunto com diferenças finitas, como detalhado anteriormente, pode-se definir uma cadeia de Markov a tempo discreto $\{(\zeta_k^h, \vartheta_k^h)\}_{k \geq 0}$ que aproxima o comportamento da difusão estocástica refletida com comutação.

A cadeia $\{(\zeta_k^h, \vartheta_k^h)\}_{k \geq 0}$ é “localmente consistente” com a solução da EDE com comutação e reflexão.

O problema de controle para a cadeia de Markov pode ser resolvido computacionalmente.

Resultados sobre Convergência

Primeiro resultados:

Teo. Suponha que (x^h, α^h) é uma interpolação contínua da cadeia de Markov que aproxima a solução da EDE com comutação e reflexão e é localmente consistente. Suponha que $(x^h(0), \alpha^h(0))$ converge em distribuição para $(x(0), \alpha(0))$ e que (x^n, α^n) é controlada pelo controle v . Então (x^h, α^h) converge fracamente para a solução da EDE com comutação e reflexão usando o controle v .

Obs. Sob algumas hipóteses sobre o controle v .

Resultados sobre Convergência

Segundo resultados:

Teo. Assuma que o custo corrente $k(\cdot, \cdot)$ é contínuo em relação ao primeiro argumento. Além disso, suponha que para cada $\epsilon > 0$, existe um controle v^ϵ que é ϵ -ótimo e que, usando este controle, a solução associada da EDE com comutação e reflexão tenha uma única medida invariante. Assuma ainda que a cadeia de Markov a tempo discreto é irredutível sob a política ótima, com custo dado por $\bar{\gamma}^h$. Então, tem-se que

$$\bar{\gamma}^h \longrightarrow \bar{\gamma}, \quad \text{as } h \rightarrow 0,$$

em que $\bar{\gamma} = \inf_v \gamma(x_0, \alpha_0, v)$.

Obs. Estamos estudando a possibilidade de obter este resultado sob condições mais fracas.

Comparação com o resultado em Mitrani 2013

Temos os seguintes resultados numéricos:

Ex. 1	U	D	Custo Médio	Ex. 2	U	D	Custo Médio
DP	19	17	33.066862*	DP	10	9	14.123313*
HR	19	10	37.356842*	HR	9	4	17.309647*
Ex. 3	U	D	Custo Médio (sim)	Ex. 4	U	D	Custo Médio (sim)
DP	21	17	37.230 (37.227, 37.233)	DP	12	9	16.521 (16.517, 16.525)
HR	19	10	39.020 (39.016, 39.023)	HR	9	4	17.491 (17.487, 17.495)

*calculado usando fórmula fechada apresentada por Mitrani 2013.

Em todos os cenários, tem-se $c_1 = 1$ e $c_2 = 2$

Ex 1 e 2 são: $\Delta_l^a \sim \exp(\lambda)$, $\lambda = 10$, $n = 20$ e $m = 9$ e $\lambda = 4$, $n = 10$ e $m = 5$ respectivamente.

Ex 3 e 4 são: $\Delta_l^a \sim \text{hyperexp}(\lambda, \sigma)$, com $\sigma^2 = 10$, $\lambda = 10$, $n = 20$, $m = 9$ e $\lambda = 4$, $n = 10$, $m = 5$, respectivamente.

Método Numérico Para o Problema com Restrições

Suponha que $(\xi^h, \vartheta^h) := \{(\xi_l^h, \vartheta_l^h)\}_{l=1}^\infty$ é uma cadeia de Markov controlada tomando valores em $\{0, h, \dots, B\} \times E$ com probabilidade de transição $p^h((x, i), (y, j)|u)$. Então o problema de controle original é aproximado pelo problema de encontrar a política u^h que minimiza o custo:

$$\begin{aligned} \gamma(\xi_0, \vartheta_0, u^h) &= \limsup_N \frac{1}{N} \mathbb{E}_{(\xi_0, \vartheta_0)}^{u^h} \left[\sum_{l=0}^N N(\vartheta_l^h) \right] \\ \text{s.t.} \quad & \limsup_N \frac{1}{N} \mathbb{E}_{(\xi_0, \vartheta_0)}^{u^h} \left[\sum_{l=0}^N \sqrt{n} \xi_l^h \right] \leq W, \end{aligned} \tag{1}$$

Método Numérico Para o Problema com Restrições

Suponha que $(\xi^h, \vartheta^h) := \{(\xi_l^h, \vartheta_l^h)\}_{l=1}^\infty$ é uma cadeia de Markov controlada tomando valores em $\{0, h, \dots, B\} \times E$ com probabilidade de transição $p^h((x, i), (y, j)|u)$. Então o problema de controle original é aproximado pelo problema de encontrar a política u^h que minimiza o custo:

$$\begin{aligned} \gamma(\xi_0, \vartheta_0, u^h) &= \limsup_N \frac{1}{N} \mathbb{E}_{(\xi_0, \vartheta_0)}^{u^h} \left[\sum_{l=0}^N N(\vartheta_l^h) \right] \\ \text{s.t.} \quad & \limsup_N \frac{1}{N} \mathbb{E}_{(\xi_0, \vartheta_0)}^{u^h} \left[\sum_{l=0}^N \sqrt{n} \xi_l^h \right] \leq W, \end{aligned} \tag{1}$$

Este problema discretizado pode ser resolvido utilizando sua formulação via programação linear.

Método Numérico Para o Problema com Restrições

Suponha que $(\xi^h, \vartheta^h) := \{(\xi_l^h, \vartheta_l^h)\}_{l=1}^\infty$ é uma cadeia de Markov controlada tomando valores em $\{0, h, \dots, B\} \times E$ com probabilidade de transição $p^h((x, i), (y, j)|u)$. Então o problema de controle original é aproximado pelo problema de encontrar a política u^h que minimiza o custo:

$$\begin{aligned} \gamma(\xi_0, \vartheta_0, u^h) &= \limsup_N \frac{1}{N} \mathbb{E}_{(\xi_0, \vartheta_0)}^{u^h} \left[\sum_{l=0}^N N(\vartheta_l^h) \right] \\ \text{s.t.} \quad & \limsup_N \frac{1}{N} \mathbb{E}_{(\xi_0, \vartheta_0)}^{u^h} \left[\sum_{l=0}^N \sqrt{n} \xi_l^h \right] \leq W, \end{aligned} \tag{1}$$

Este problema discretizado pode ser resolvido utilizando sua formulação via programação linear.

Obs. Nenhum resultado sobre a convergência do método numérico para este problema é conhecida ([trabalho em andamento](#)).

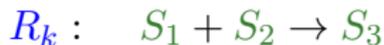
Aplicações em Dinâmica Populacional

Redes de Reações Químicas / Dinâmica Populacional

Considere um tanque “bem misturado” contendo diferentes espécies moleculares:

$$S_1, \dots, S_d$$

Estas moléculas estão envolvidas em r reações químicas R_1, \dots, R_r . Exemplo:



Suponha que $X_i(t)$ é o número de moléculas S_i no tempo t .

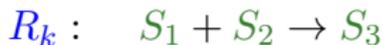


Redes de Reações Químicas / Dinâmica Populacional

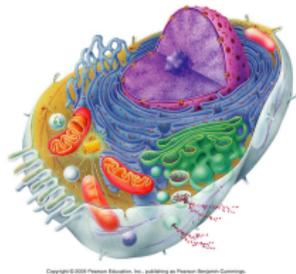
Considere um tanque “bem misturado” contendo diferentes espécies moleculares:

$$S_1, \dots, S_d$$

Estas moléculas estão envolvidas em r reações químicas R_1, \dots, R_r . Exemplo:



Suponha que $X_i(t)$ é o número de moléculas S_i no tempo t . Já que as reações acontecem quando as moléculas envolvidas se encontram, X_i , é um **processo estocástico**.



Redes de Reações Químicas

Considerando a reação química do exemplo anterior,



pensamos intuitivamente que a probabilidade dela ocorrer em um intervalo de tempo $(t, t+h]$ é proporcional ao produto do número de moléculas de S_1 e S_2 e também da duração do intervalo considerado:

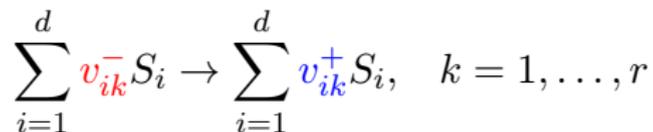
$$\mathbb{P}(\text{prob. reação ocorrer em } (t, t+h] | \mathcal{F}_t) \approx \kappa_k X_1(t) X_2(t) h,$$

em que κ_k é uma constante e \mathcal{F}_t é a informação sobre o sistema até o tempo t .

Isso implica o número de reações R_k que ocorrem durante o tempo possui a propriedade *sem memória*. O que nos leva a concluir que o tempo entre duas reações R_k consecutivas possui *distribuição exponencial*.

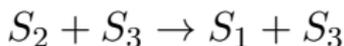
Redes de Reações Químicas

Considere que as reações químicas estão na seguinte forma:



O vetor $v_k = v_k^+ - v_k^-$ denota a troca no estado como efeito da reação k .

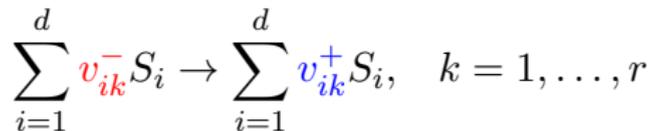
Exemplo:



$$v_k^+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_k^- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_k = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Redes de Reações Químicas

De forma geral, considere que as espécies moleculares S_1, \dots, S_d estão envolvidas em r reações químicas na forma:



O vetor $v_k = v_k^+ - v_k^-$ denota a troca no estado como efeito da reação k .

Taxa de ocorrência pela “lei de ação das massas”:

$$\Lambda_k(X) = \kappa_k \prod_{i:(v_{ik}^- > 0)} X_i (X_i - 1) \cdots (X_i - v_{ik}^- + 1)$$

em que $X = (X_1, \dots, X_d)$.

Modelo Cadeia de Markov

Com isso, a quantidade de moléculas de cada espécie no tempo t , $X(t) = (X_1(t), \dots, X_d(t))$, é dada pela seguinte cadeia de Markov:

$$X(t) = X(0) + \sum_{k=1}^r v_k N_k \left(\int_0^t \Lambda_k(X(s)) ds \right),$$

N_1, \dots, N_r : são processos de Poisson (taxa = 1).

Sua equação progressiva de Kolmogorov é conhecida como a “Equação Mestre da Química” (*chemical master equation*):

$$\frac{d}{dt} p_x(t) = \sum_{k=1}^r \Lambda_k(x - v_k) p_{x-v_k}(t) - \Lambda_k(x) p_x(t)$$

em que $p_x(t)$ é a probabilidade da configuração x no tempo t .

Modelo Cadeia de Markov

Problema:

1. Solução analítica muito difícil para problemas grandes.
2. Quando o número de moléculas no sistema é grande, o tempo de simulação computacional é muito grande (as taxas de reação serão altas, o tempo avançará lentamente).
 - ▶ Isso é agravado porque é preciso repetir a simulação várias vezes.

Uma solução para este problema é aproximar o modelo de Cadeia de Markov por algo mais eficiente de simular.

Modelo Cadeia de Markov Escalonado

Podemos escrever o modelo de cadeia de Markov para as *concentrações* de espécies moleculares:

V : volume do recipiente vezes o número de Avogadro.
($\approx 6 \times 10^{23}$)

Definimos o vetor de concentração molecular no tempo t :

$$\bar{X}^V(t) = \frac{X(t)}{V}$$

Satisfaz:

$$\bar{X}^V(t) = \bar{X}^V(0) + \frac{1}{V} \sum_{k=1}^r v_k N_k \left(\int_0^t V \lambda_k^V(\bar{X}^V(s)) ds \right),$$

em que

$$\lambda_k^V(x) = c_k \prod_{i=1}^d x_i^{v_{ik}^-} + V^{-1} \epsilon_k^V(x)$$

Modelo Cadeia de Markov Escalonado

Podemos escrever o modelo de cadeia de Markov para as *concentrações* de espécies moleculares:

V : volume do recipiente vezes o número de Avogadro.
($\approx 6 \times 10^{23}$)

Definimos o vetor de concentração molecular no tempo t :

$$\bar{X}^V(t) = \frac{X(t)}{V}$$

Satisfaz:

$$\bar{X}^V(t) = \bar{X}^V(0) + \frac{1}{V} \sum_{k=1}^r v_k N_k \left(\int_0^t V \lambda_k^V(\bar{X}^V(s)) ds \right),$$

em que

$$\lambda_k^V(x) \approx \lambda_k(x) = c_k \prod_{i=1}^d x_i^{v_{ik}^-}$$

Abordagens Usuais

-Aproximação determinística por EDO

Descreve o comportamento médio do sistema.

-Aproximação por Difusão de van Kampen

Descreve o comportamento médio com flutuações em torno da média: não respeita não-negatividade das concentrações.

-Aproximação por Difusão de Langevin

somente válido até encontrar a fronteira da ortante positiva.

Difusão de Langevin Restrita

Foi mostrado em [7] que é possível aproximar a cadeia de Markov escalonada por uma **difusão estocástica com reflexão**.

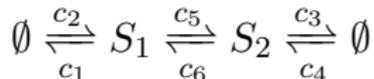
Dada por,

$$Z(t) = \mathcal{X}(0) + \int_0^t \mu(Z(s)) ds + \frac{1}{\sqrt{V}} \int_0^t \sigma(Z(s)) dW(s) \\ + \frac{1}{\sqrt{V}} \int_0^t \gamma(Z(s)) dL(s), \quad t \geq 0,$$

em que $\mathcal{X}(0)$ possui mesma distribuição que $\bar{X}^V(0)$ e W é um movimento Browniano L é um processo não-decrescente que aumenta somente nos instantes que Z^* está na fronteira e γ é o campo vetorial $\gamma(x) = \mu(x)/|\mu(x)|$, para $x \in \partial G$.

Foi demonstrado em [7] a existência e unicidade no sentido das distribuições para as soluções desta equação.

Exemplo I: Duas espécies, seis reações



$$\begin{aligned}\lambda_1(x) &= c_1 x_1, \quad \lambda_2(x) = c_2, \quad \lambda_3(x) = c_3 x_2, \quad \lambda_4(x) = c_4 \\ \lambda_5(x) &= c_5 x_1, \quad \lambda_6(x) = c_6 x_2\end{aligned}$$

em que $c_1 = 10^{-4}$, $c_2 = 1$, $c_3 = 1$, $c_4 = 10^{-4}$, $c_5 = 100$, $c_6 = 1$, $V = 100$, e ponto inicial $x_0 = (0.02, 1.00)$ (próximo do estado estacionário para o modelo determinístico)

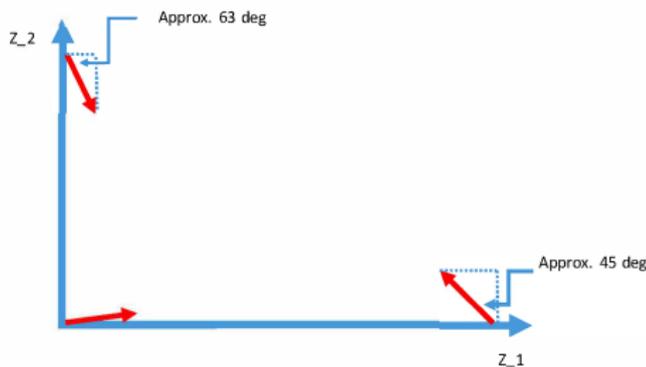
Difusão de Langevin Restrita (CLE)

$$Z(t) = z + \int_0^t \mu(Z(s)) ds + \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\int_0^t \sigma(Z(s)) \cdot dW(s) + \int_0^t \gamma(Z(s)) dL(s) \right)$$

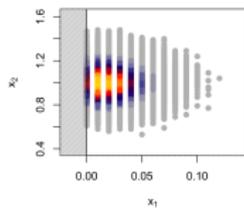
$$\mu_1(x) = \begin{bmatrix} c_2 - c_1x_1 - c_5x_1 + c_6x_2 \\ c_4 - c_3x_2 + c_5x_1 - c_6x_2 \end{bmatrix},$$

$$\Gamma(x) = \sigma\sigma'(x) = \begin{bmatrix} c_2 + c_1x_1 + c_5x_1 + c_6x_2 & -(c_5x_1 + c_6x_2) \\ -(c_5x_1 + c_6x_2) & c_4 + c_3x_2 + c_5x_1 + c_6x_2 \end{bmatrix}$$

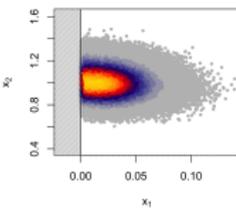
$$\gamma(x) = \mu(x)/|\mu(x)|$$



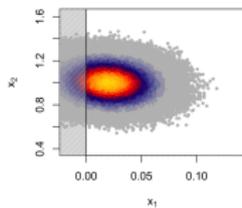
Comparação entre diferentes métodos



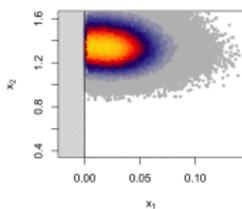
MCM



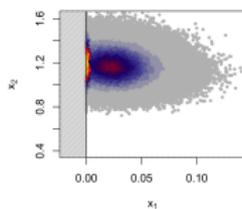
CLE



vKA



CLE-NR



CLE-Chop

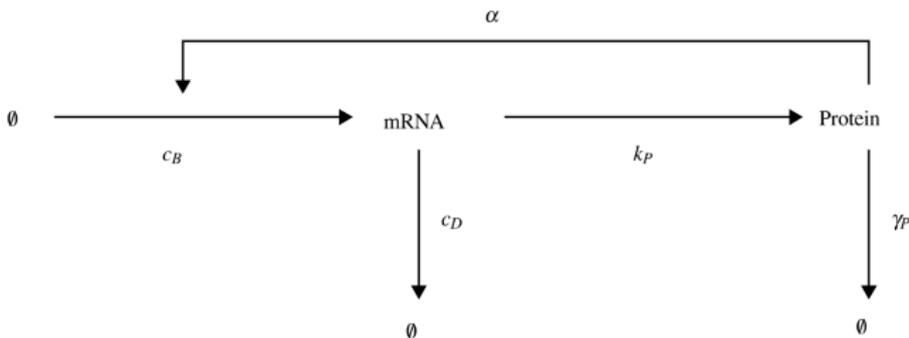
Figura 1: MCM=Markov Chain Model, CLE=Constrained Langevin Equation, vKA=van Kampen Approximation, CLE-NR=CLE with Normal Reflection, CLE-Chop=CLE with Chopping off of negative excursions.

Difusão de Langevin com Comutação Restrita

Processo de “Comutação” $\alpha(\cdot)$ pode ser usado para representar fatores externos que podem afetar as reações químicas.

Autores de “Hybrid simulation of autoregulation within transcription and translation” [4], propuseram utilizar difusão de Langevin em que o estado de espécies moleculares de menor concentração são representadas pelo processo $\alpha(\cdot)$.

- ▶ Proposta foi motivada por um modelo de auto regulação gênica.



Obrigado

saul.leite@ufabc.edu.br

Referências

- [1] Zhongwei Cao, Xu Liu, Xiangdan Wen, Liya Liu, and Li Zu.
A regime-switching SIR epidemic model with a ratio-dependent incidence rate and degenerate diffusion.
Scientific Reports, 9(1):10696, July 2019.
- [2] M. Ghosh, A. Arapostathis, and S. Marcus.
Optimal Control of Switching Diffusions with Application to Flexible Manufacturing Systems.
SIAM Journal on Control and Optimization, 31(5):1183–1204, September 1993.
- [3] D. Higham.
An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations.
SIAM Review, 43(3):525–546, January 2001.

- [4] Desmond J. Higham, Somkid Intep, Xuerong Mao, and Lukasz Szpruch.
Hybrid simulation of autoregulation within transcription and translation.
BIT Numerical Mathematics, 51(1):177–196, March 2011.
- [5] Zhuo Jin, Hailiang Yang, and G. George Yin.
Numerical methods for optimal dividend payment and investment strategies of regime-switching jump diffusion models with capital injections.
Automatica, 49(8):2317–2329, August 2013.
- [6] Saul C. Leite, Marcelo Fragoso, and Rodolfo S. Teixeira.
Switching Diffusion Approximations for Optimal Power Management in Parallel Processing Systems.
Stochastic Models, 2021.

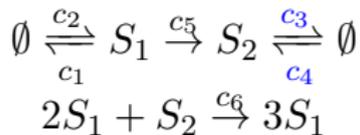
- [7] Saul C. Leite and Ruth J. Williams.
A constrained Langevin approximation for chemical reaction networks.
The Annals of Applied Probability, 29(3):1541–1608, June 2019.
- [8] Siyu Lv, Zhen Wu, and Qing Zhang.
Optimal switching under a hybrid diffusion model and applications to stock trading.
Automatica, 94:361–372, August 2018.
- [9] Isi Mitrani.
Trading Power Consumption against Performance by Reserving Blocks of Servers.
In Mirco Tribastone and Stephen Gilmore, editors, *Computer Performance Engineering*, number 7587 in Lecture Notes in Computer Science, pages 1–15. Springer Berlin Heidelberg, 2013.

- [10] Q. S. Song, G. Yin, and Z. Zhang.
Numerical methods for controlled regime-switching diffusions and regime-switching jump diffusions.
Automatica, 42(7):1147–1157, July 2006.
- [11] Ky Tran and George Yin.
Optimal control and numerical methods for hybrid stochastic SIS models.
Nonlinear Analysis: Hybrid Systems, 41:101051, August 2021.
- [12] George Yin and Chao Zhu.
Hybrid Switching Diffusions: Properties and Applications.
Stochastic Modelling and Applied Probability.
Springer-Verlag, New York, 2010.

- [13] Caojin Zhang, George Yin, Qing Zhang, and Le Yi Wang. Pollution control for switching diffusion models: Approximation methods and numerical results. *Discrete & Continuous Dynamical Systems - B*, 24(8):3667, 2019.
- [14] Q. Zhang. Stock Trading: An Optimal Selling Rule. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 40(1):64–87, January 2001.
- [15] Xun Yu Zhou and G. Yin. Markowitz's Mean-Variance Portfolio Selection with Regime Switching: A Continuous-Time Model. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 42(4):1466–1482, January 2003.

Apêndice

Example II: Brusselator



$$\begin{aligned} \lambda_1(x) &= c_1 x_1, \quad \lambda_2(x) = c_2, \quad \lambda_3(x) = c_3 x_2, \quad \lambda_4(x) = c_4 \\ \lambda_5(x) &= c_5 x_1, \quad \lambda_6(x) = c_6 x_1^2 x_2 \end{aligned}$$

com $c_1 = 1$, $c_2 = 1$, $c_3 = 10^{-4}$, $c_4 = 10^{-4}$, $c_5 = 11$,
 $c_6 = 10$, $V = 100$, e ponto de partida $x_0 = (2, 1)$.

O modelo determinístico de EDO para este sistema de reação química exibe um **ciclo limite estável** (com os parâmetros acima).

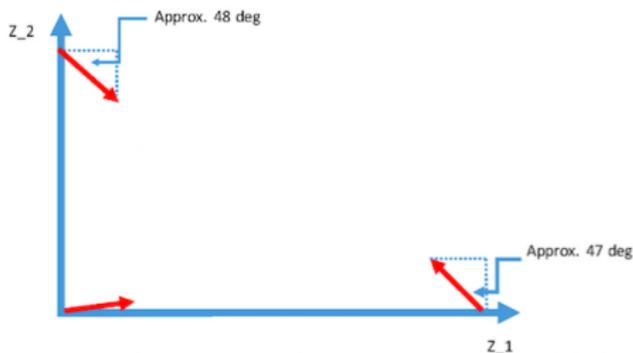
Difusão de Langevin Restrita

$$Z(t) = z + \int_0^t \mu(Z(s)) ds + \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\int_0^t \sigma(Z(s)) \cdot dW(s) + \int_0^t \gamma(Z(s)) dL(s) \right)$$

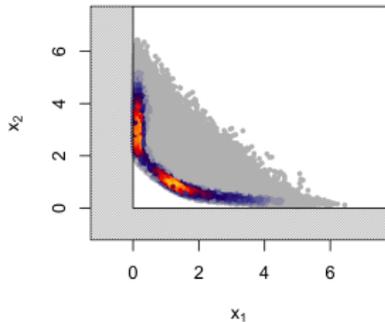
$$\mu(x) = \begin{bmatrix} c_2 - c_1 x_1 - c_5 x_1 + c_6 x_1^2 x_2, \\ c_4 - c_3 x_2 + c_5 x_1 - c_6 x_1^2 x_2 \end{bmatrix}$$

$$\Gamma(x) = \begin{bmatrix} c_2 + c_1 x_1 + c_5 x_1 + c_6 x_1^2 x_2 & -(c_5 x_1 + c_6 x_1^2 x_2) \\ -(c_5 x_1 + c_6 x_1^2 x_2) & c_4 + c_3 x_2 + c_5 x_1 + c_6 x_1^2 x_2 \end{bmatrix}$$

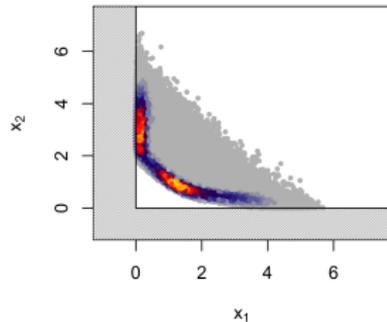
$$\gamma(x) = \mu(x) / |\mu(x)|$$



Comparação MCM e CLE



MCM



CLE

Figura 2: O scatter plot para vKA não foi exibido já que vKA oscila e diverge durante uma simulação longa.

Simulação de MCM, CLE, vKA, e EDO

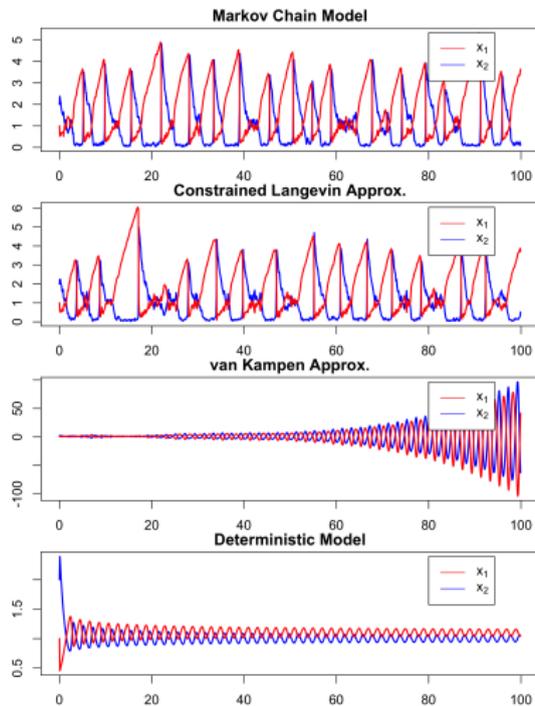
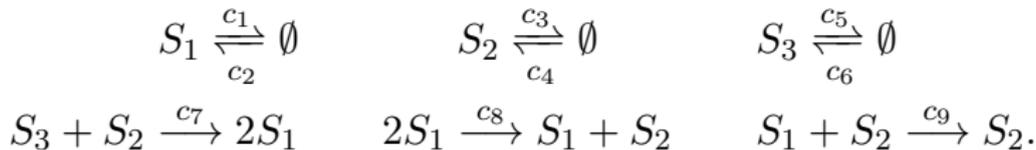


Figura 3: vKA increases in oscillation and diverges during a long simulation.

Example III (Biestabilidade)



com $c_1 = 1/\sqrt{10}$, $c_2 = 0.01$, $c_3 = 1$, $c_4 = 0.01$, $c_5 = 1$, $c_6 = 10$,
 $c_7 = 8/10$, $c_8 = 1$, $c_9 = 1.5/\sqrt{10}$.

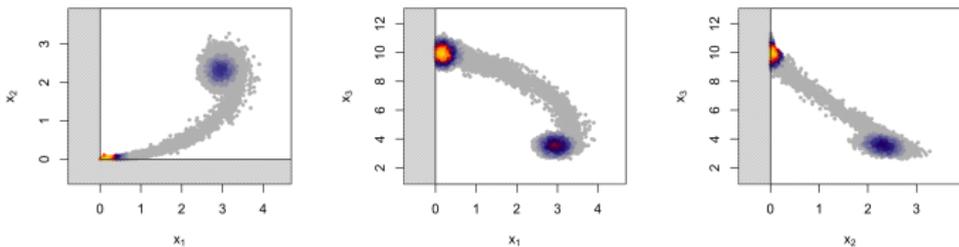
O modelo de EDO determinístico é biestável com dois pontos estacionários reais próximos de

$$x_1 = \begin{bmatrix} 0.12679 \\ 0.00290 \\ 9.97683 \end{bmatrix} \quad e \quad x_2 = \begin{bmatrix} 2.96686 \\ 2.31681 \\ 3.50454 \end{bmatrix}$$

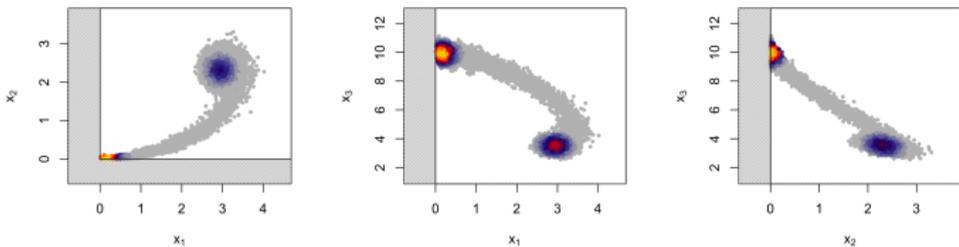
(com os parâmetros usados).

Comparação entre os métodos

MCM



CLE



vKA

