

# Cadenas de Markov

## Cadenas de Markov de Monte Carlo

Mauricio Junca

Noviembre de 2023

## Mapa aleatorio de representación

Un **mapa aleatorio de representación** de una cadena con matriz de transición  $P$  es una función  $f : \mathbb{X} \times \Lambda \rightarrow \mathbb{X}$ , junto con una variable aleatoria  $Z$  que toma valores en  $\Lambda$ , tal que para todo  $x, y \in \mathbb{X}$  se tiene que

$$\mathbf{P}(f(x, Z) = y) = P(x, y).$$

Ahora, si tomamos una sucesión i.i.d  $Z_1, Z_2, \dots$  con la misma distribución de  $Z$ , y  $X_0$  con distribución  $\mu$  e independiente de las  $Z$ 's, podemos construir la cadena de Markov así:

$$X_t = f(X_{t-1}, Z_t).$$

Notemos que la propiedad de Markov se sigue del hecho de que  $Z_{t+1}$  es independiente de  $X_0$  y  $Z_1, \dots, Z_t$ , y por lo tanto de  $X_0, \dots, X_t$ .

## Mapa aleatorio de representación

Construyamos ahora un mapa aleatorio de representación, para esto notamos  $\mathbb{X} = \{x_0, x_1, \dots\}$ , y tomamos  $\Lambda = [0, 1]$  y  $Z$  variable uniforme sobre  $\Lambda$ . Para  $i, j \in \mathbb{N}$ , definimos  $F_{i,j} = \sum_{k=0}^j P(x_i, x_k)$  y

$$f(x_i, z) = x_j \quad \text{si } z \in (F_{i,j-1}, F_{i,j}],$$

luego

$$\mathbf{P}(f(x_i, Z) = x_j) = \mathbf{P}(Z \in (F_{i,j-1}, F_{i,j}]) = P(x_i, x_j).$$

La construcción anterior nos da una forma de simular cualquier cadena de Markov. Notemos que los mapas aleatorios de representación no son únicos y es posible encontrar formas más eficientes de simulación en varias ocasiones.

Supongamos ahora que queremos generar una muestra aleatoria con distribución  $\pi$  sobre un conjunto finito  $\mathbb{X}$ , pero posiblemente muy grande y del cual ni siquiera sabemos su tamaño. Por ejemplo, considere  $G = (V, E)$  un grafo no dirigido y  $q \in \mathbb{N}$ ,  $\mathbb{X}$  puede ser el conjunto de  **$q$ -coloraciones** de  $G$ , es decir, asignaciones  $c : V \rightarrow \{1, 2, \dots, q\}$  tal que si  $x \sim y$ , entonces  $c(x) \neq c(y)$ , y  $\pi$  puede ser la distribución uniforme sobre  $\mathbb{X}$ . Una posibilidad para lograr esta muestra aleatoria es construir una cadena de Markov sobre  $\mathbb{X}$  de tal forma que  $\pi$  sea estacionaria para la cadena. Como veremos más adelante, bajo ciertas hipótesis, se tiene que después de cierto tiempo  $\mu_t \approx \pi$ , sin importar la distribución inicial de la cadena.

## Cadenas de Metrópolis

Sea  $\mathbb{X}$  finito y  $\Psi$  una matriz de transición irreducible. Queremos modificar  $\Psi$  y encontrar una matriz  $P$  que tenga a la distribución objetivo  $\pi$  como estacionaria. Consideremos la siguiente dinámica: Cuando la cadena está en  $x$  se selecciona  $y$  con probabilidad  $\Psi(x, y)$  y se acepta este estado con probabilidad  $a(x, y)$ , en cuyo caso la cadena pasa al estado  $y$ , o se rechaza con probabilidad  $1 - a(x, y)$  y en este caso la cadena permanece en  $x$ . Definimos entonces

$$P(x, y) = \begin{cases} \Psi(x, y)a(x, y) & \text{si } y \neq x \\ 1 - \sum_{z \neq x} \Psi(x, z)a(x, z) & \text{si } y = x. \end{cases}$$

## Cadenas de Metrópolis

La forma de escoger las probabilidades de aceptación/rechazo va a depender de la distribución  $\pi$  y una forma de hacerlo es que  $P$  y  $\pi$  satisfagan las ecuaciones de balance detallado, esto es, para  $x \neq y$  tales que  $\Psi(x, y) > 0$ ,

$$\pi(x)P(x, y) = \pi(x)\Psi(x, y)a(x, y) = \pi(y)\Psi(y, x)a(y, x) = \pi(y)P(y, x),$$

luego  $a(x, y) = a(y, x) \frac{\pi(y)\Psi(y, x)}{\pi(x)\Psi(x, y)} \leq \frac{\Psi(y, x)\pi(y)}{\Psi(x, y)\pi(x)} \wedge 1$ , pues son probabilidades.

## Cadenas de Metrópolis

Ahora, valores pequeños de  $a(x, y)$  hace que la cadena evolucione muy lentamente y sea ineficiente para la simulación, luego la **cadena de Metrópolis** está dada por

$$P(x, y) = \begin{cases} \psi(x, y) \left( \frac{\pi(y)\psi(y, x)}{\pi(x)\psi(x, y)} \wedge 1 \right) & \text{si } y \neq x \\ 1 - \sum_{z \neq x} \psi(x, z) \left( \frac{\pi(z)\psi(z, x)}{\pi(x)\psi(x, z)} \wedge 1 \right) & \text{si } y = x. \end{cases}$$

## Ejemplos

Supongamos que tenemos un grafo  $G = (V, E)$  del cual no conocemos exactamente su tamaño ni la cantidad de aristas, pero dado un vértice  $x$  podemos conocer sus vecinos, es decir, tenemos solo información local del grafo. Queremos generar una muestra uniforme sobre  $V$ , luego  $\pi(x) = \pi(y)$  para todo  $x, y \in V$ , aunque no sabemos cuál es su valor. Así, si  $x \sim y$ , la matriz de transición dada por

$$P(x, y) = \frac{1}{\deg(x)} \left( \frac{\deg(x)}{\deg(y)} \wedge 1 \right) = \frac{1}{\deg(y)} \wedge \frac{1}{\deg(x)}$$

tiene la distribución uniforme como estacionaria.



## Ejemplos

Supongamos que tenemos un grafo regular  $G = (V, E)$ , es decir, todo nodo tiene el mismo grado, y una función  $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ , el objetivo es encontrar los vértices donde se maximiza esta función. Una primera opción es, dado un vértice del grafo, explorar los vecinos y moverse a un vecino si tiene un valor de la función estrictamente mayor. Este procedimiento puede estancarse en máximos locales, para evitar esto se pueden escoger vértices con valores de  $f$  más bajos con poca probabilidad, así dado  $\lambda > 1$  definimos la distribución

$$\pi(x) = \frac{\lambda^{f(x)}}{Z(\lambda)},$$

donde  $Z(\lambda)$  es la constante de normalización, la cual no es necesario conocerla.

## Ejemplos

Como el grafo es regular, la caminata aleatoria sobre  $G$  es simétrica, luego  $\Psi$  es una matriz simétrica, y tenemos que si  $x \sim y$  con  $f(y) < f(x)$  la cadena de Metrópolis acepta el paso de  $x$  a  $y$  con probabilidad  $\lambda^{f(y)-f(x)}$ . Se puede mostrar que si  $\lambda \rightarrow \infty$  se obtiene el proceso descrito inicialmente, es decir, que solo se puede pasar a vértices con valor de  $f$  mayor. Cómo escoger el parámetro  $\lambda$  es parte esencial para la velocidad y convergencia del método.

# Dinámica de Glauber

La dinámica de Glauber o el *Gibbs sampler* es una cadena de Markov donde el espacio de estados  $\mathbb{X}$  es un subconjunto de **configuraciones** sobre un grafo  $G = (V, E)$  dado, esto es, un subconjunto de  $S^V = \{f : V \rightarrow S\}$ , donde  $S$  es un conjunto finito. Un ejemplo son las  $q$ -coloraciones que son un subconjunto de  $\{1, \dots, q\}^V$ . Dada una distribución  $\pi$  sobre  $\mathbb{X} \subset S^V$ , la dinámica de Glauber es una cadena reversible con  $\pi$  como distribución estacionaria y probabilidades de transición de la siguiente forma:

# Dinámica de Glauber

Dada una configuración  $f \in \mathbb{X}$

- ▶ Escogemos uniformemente un vértice  $x \in V$ .
- ▶ Definimos el conjunto  $\mathbb{X}(f, x) = \{g \in \mathbb{X} : g(y) = f(y), \forall y \neq x\}$ , el conjunto de configuraciones en  $\mathbb{X}$  que coinciden con  $f$  en todo los vértices distintos a  $x$ .
- ▶ Escogemos  $g \in \mathbb{X}(f, x)$  de acuerdo a la distribución  $\frac{\pi(g)}{\pi(\mathbb{X}(f, x))}$ .

De lo anterior tenemos que  $P(f, g) = \frac{1}{|V|} \sum_{x \in V} \frac{\pi(g)}{\pi(\mathbb{X}(f, x))} 1_{g \in \mathbb{X}(f, x)}$ .

## Ejercicio

3.2 de [LP]

## Ejemplos

Volvamos al caso de las  $q$ -coloraciones, vamos a describir la dinámica de Glauber cuando  $\pi$  es la distribución uniforme. Empezamos por describir el conjunto  $\mathbb{X}(c, x)$  para una coloración  $c \in \mathbb{X}$  y un vértice  $x \in V$ , y para esto definimos el conjunto  $fact(c, x) = \{1, \dots, q\} \setminus \{c(y) : y \sim x\}$ , esto es, el conjunto de colores factibles para el vértice  $x$  con la coloración  $c$ . Así que, dada una coloración  $c$ , escogemos un vértice  $x$  uniformemente, escogemos un color  $j$  uniformemente del conjunto  $fact(c, x)$  y se define  $c(x) = j$ .

## Ejemplos

Otro ejemplo importante es el modelo de Ising. Sea  $G = (V, E)$  y  $\mathbb{X} = \{-1, 1\}^V$ , dada una configuración  $\sigma \in \mathbb{X}$  definimos su energía como:

$$H(\sigma) = - \sum_{x \sim y} \sigma(x)\sigma(y).$$

Se puede ver que la energía disminuye cuando vértices adyacentes tienen el mismo *spin*. Vamos a construir la dinámica de Glauber que tenga como distribución estacionaria a la distribución de Gibbs dada por

$$\mu(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z(\beta)},$$

con  $\beta \geq 0$  y  $Z(\beta)$  la constante de normalización.

## Ejemplos

Notemos que para  $\beta = 0$  la distribución de Gibbs es la uniforme y por tanto las variables  $\{\sigma(x)\}_{x \in V}$  son independientes. Cuando  $\beta$  aumenta, la distribución de Gibbs se va concentrando en configuraciones con poca energía. Ahora, dada una configuración  $\sigma$  y un vértice  $x \in V$  denotamos por  $S(\sigma, x) = \sum_{y \sim x} \sigma(y)$  y notemos que  $|\mathbb{X}(\sigma, x)| = 2$ , cuando el valor en  $x$  es  $+1$  y cuando es  $-1$ , así que la probabilidad de escoger el valor  $-1$  está dado por

$$\frac{e^{-\beta S(\sigma, x)}}{e^{-\beta S(\sigma, x)} + e^{\beta S(\sigma, x)}}.$$