Práctica 3
Matrices estocásticas y cadenas de Markov

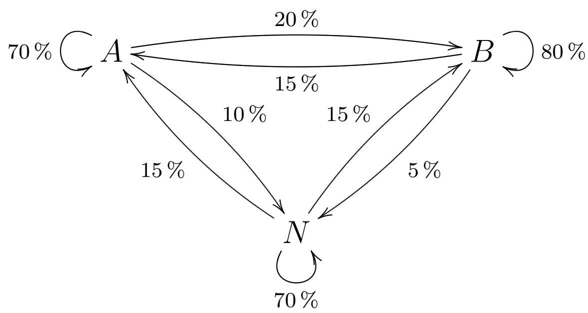
28 de enero de 2014

Índice

1. Ejemplo introductorio

Una aplicación clásica del cálculo matricial es el estudio del movimiento de poblaciones dentro de un conjunto finito de posibles estados. Veamos un ejemplo ilustrativo.

Dos compañías ofrecen televisión por cable a una ciudad con 100000 viviendas. El cambio anual en la suscripción viene dado en el siguiente diagrama.



Inicialmente la compañía A tiene 15000 suscriptores, la compañía B 20000, y hay 65000 viviendas sin suscripción (N). Calculemos cuantos suscriptores tendrá cada compañía después de 10, 20 y 30 años.

A cada vivienda le corresponde uno de los siguientes estados: A, B o N. El **vector de estados iniciales** $\vec{x}_0$, que almacena la proporción inicial de suscriptores en cada estado, es el siguiente:

$$\vec{x}_0 = \begin{bmatrix} 0,15 \\ 0,20 \\ 0,65 \end{bmatrix}.$$

(Observa que las componentes del vector $\vec{x}_0$ se han calculado dividiendo el número de suscriptores en cada estado por el número total de suscriptores, que es 100.000).

Si $\vec{x}_1 = (a, b, n)$ denota el **vector de estados** que proporciona las proporciones de suscriptores (en A, B y N) después de un año, a partir del diagrama anterior se deduce fácilmente lo siguiente:

$$a = 0{,}70 \cdot 0{,}15 + 0{,}15 \cdot 0{,}20 + 0{,}15 \cdot 0{,}65,$$

$$b = 0{,}20 \cdot 0{,}15 + 0{,}80 \cdot 0{,}20 + 0{,}15 \cdot 0{,}65,$$

$$n = 0{,}10 \cdot 0{,}15 + 0{,}05 \cdot 0{,}20 + 0{,}70 \cdot 0{,}65.$$

Es decir:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \\ n \end{bmatrix}}_{\vec{x}_1} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0{,}70 & 0{,}15 & 0{,}15 \\ 0{,}20 & 0{,}80 & 0{,}15 \\ 0{,}10 & 0{,}05 & 0{,}70 \end{bmatrix}}_{\mathsf{P}} \underbrace{\begin{bmatrix} 0,15 \\ 0,20 \\ 0,65 \end{bmatrix}}_{\vec{x}_0}.$$

La matriz que hemos denotado por P se denomina **matriz de transición**. Razonando de forma similar se tiene que si $\vec{x}_k$ denota el **vector de estados** después de k años:

$$\vec{x}_2 = \mathsf{P}\vec{x}_1 = \mathsf{P}\mathsf{P}\vec{x}_0 = \mathsf{P}^2\vec{x}_0$$

y, en general,

$$\vec{x}_k = \mathsf{P}^k\vec{x}_0 \text{ para todo } k \geq 1.$$

Calculemos, con Scilab, los porcentajes de suscriptores en cada estado después de 10, 20 y 30 años:

```
-->x0=[0.15000; 0.20; 0.65];
-->P=[0.70, 0.15, 0.15; 0.20, 0.80, 0.15;0.10, 0.05, 0.70];
-->x10=P^10*x0
 x10  =
    0.33286896
    0.4714703
    0.19566074
-->x20=P^20*x0
 x20  =
    0.33333216
    0.47612439
    0.19054345
-->x30=P^30*x0
 x30  =
    0.33333333
    0.47618958
    0.19047709
```

Observa que, aunque $\vec{x}_{10}$ es bastante distinto de $\vec{x}_0$, las diferencias entre $\vec{x}_{10}$ y $\vec{x}_{20}$ son pequeñas, y aun son menores las diferencias entre $\vec{x}_{20}$ y $\vec{x}_{30}$. Así pues, podríamos decir que la distribución de suscriptores «tiende a estabilizarse» y que, después de 10 años, la situación es «casi estable». Calculando más vectores de estados $\vec{x}_{40}, \vec{x}_{50}, \ldots, \vec{x}_{100}, \ldots$ veríamos que, con el transcurrir de los años, la proporción de suscriptores en cada uno de los tres estados se va estabilizando en torno a un cierto valor. Aclaremos el significado de estos conceptos imprecisos:

- «tiende a estabilizarse» significa que la sucesión de vectores $\vec{x}_n$ es **convergente** a un cierto vector $\vec{v}$, el supuesto «estado final» o «estado límite». Es decir:

$$\vec{v} = \lim_{n\to\infty} \mathsf{P}^n \vec{x}_0.$$

- la expresión «después de 10 años, la situación es casi estable» significa que la diferencia entre $\vec{x}_{10}$ y los vectores sucesivos $\vec{x}_k$, $k > 10$, es razonablemente pequeña.

Acabamos de ver un proceso que tiende a ser estable. La pregunta que nos planteamos es la siguiente: ¿bajo qué condiciones procesos similares a éste tienden a ser estables? En el resto de este boletín daremos respuesta a esta pregunta.

2. Matrices estocásticas y cadenas de Markov

El mismo planteamiento del ejemplo anterior puede hacerse en general. Supongamos que debemos estudiar un proceso similar sobre proporciones de individuos pertenecientes a n estados y que disponemos de una matriz $n \times n$, $\mathsf{P} = [p_{ij}]$, llamada **matriz de transición**, de forma que cada entrada p_{ij} indica la probabilidad de que un miembro de la población cambie del estado j al estado i. Por la teoría de la probabilidad, $0 \leq p_{ij} \leq 1$ para todo i y j, y la suma de entradas de cada columna es 1. Observa que $p_{ij} = 0$ significa que el miembro j no cambiará al estado i (sino a cualquiera de los otros, con determinadas probabilidades), mientras que $p_{ij} = 1$ significa que es seguro que el miembro se moverá del estado j al estado i (y, por tanto, el resto de entradas de la columna j serán nulas). Observa también que p_{ii} representa la probabilidad de permanecer en el mismo estado, de no cambiar.

El **vector de estados iniciales**, $\vec{x}_0$ es un vector de $\mathbb{R}^n$ cuya componente i-ésima es la proporción inicial de individuos en el estado i, para $i \in \{1, \ldots, n\}$. El **k-ésimo vector de estados**, $\vec{x}_k$, es un vector de $\mathbb{R}^n$ cuya componente i-ésima es la proporción de individuos en el estado i tras k «pasos» (usualmente unidades de tiempo), para $i \in \{1, \ldots, n\}$. Nótese que la suma de las componentes de cada vector de estados es siempre igual a 1.

Al igual que en el ejemplo anterior, se pueden obtener los sucesivos vectores de estados $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots$, a partir de la matriz de transición P:

$$\vec{x}_1 = \mathsf{P}\vec{x}_0, \quad \vec{x}_2 = \mathsf{P}\vec{x}_1, \quad \vec{x}_k = \mathsf{P}\vec{x}_{k-1}, \ldots$$

o también

$$\vec{x}_k = \mathsf{P}^k \vec{x}_0 \text{ para todo } k \geq 1.$$

Establezcamos ahora la terminología que se utiliza normalmente para describir y estudiar este tipo de procesos.

Definición 1. Un vector con entradas no negativas, la suma de las cuales es 1, se dirá un **vector de probabilidad**. Una **matriz estocástica** (o **matriz de Markov**) es una matriz cuadrada cuyas columnas son vectores de probabilidad.

Nótese que las matrices de transición P antes consideradas son matrices estocásticas y que los vectores de estados $\vec{x}_k$ son vectores de probabilidad. Las secuencias de vectores de estados $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \ldots$ obtenidas a partir de matries de transición P se denominan usualmente **cadenas de Markov**, término que precisamos en la siguiente definición:

Definición 2. Una **cadena de Markov** es una **sucesión de vectores de probabilidad** $\vec{x}_0$, $\vec{x}_1, \ldots$ tal que existe una matriz estocástica P (**matriz de transición**) que verifica

$$\vec{x}_1 = \mathsf{P}\vec{x}_0, \quad \vec{x}_2 = \mathsf{P}\vec{x}_1, \quad \vec{x}_k = \mathsf{P}\vec{x}_{k-1}, \ldots$$

El problema que usualmente se intenta resolver cuando se tiene una cadena de Markov es conocer si la evolución del proceso a lo largo del tiempo tiende a "estabilizarse" y, en caso afirmativo, quiere conocerse ese "estado final". Dicho de otro modo, quiere saberse si existe un **vector de estados límite**

$$\vec{v} = \lim_{k\to\infty} \vec{x}_k.$$

Si tal vector existe, diremos que la cadena de Markov es **convergente**.

Nótese que, **en caso de existir** ese vector límite $\vec{v}$, como $\vec{x}_{k+1} = \mathsf{P}\vec{x}_k$, tomando límites cuando $k \to \infty$ a ambos lados de la igualdad obtenemos que $\vec{v} = \mathsf{P}\vec{v}$. Es decir, $\vec{v}$ **es un vector que queda invariante al multiplicarlo (por la izquierda) por la matriz** P. Dicho de otro modo, $\vec{v}$ es un **vector estacionario** para P, según la terminología precisada en la siguiente definición:

Definición 3. Dada una matriz cuadrada P, diremos que un vector no nulo[1] $\vec{v}$ es **estacionario** para P si $\mathsf{P}\vec{v} = \vec{v}$.

Así pues, se tiene la siguiente propiedad:

Proposición 1. Sea $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \ldots$ una cadena de Markov **convergente** con matriz de transición P. Si $\vec{v} = \lim_{k\to\infty} x_k$ entonces $\vec{v}$ es un vector de probabilidad estacionario para P.

Ejemplo 1. Comprobemos esta propiedad con el ejemplo dado en la primera sección:

```
-->x0=[0.15; 0.20; 0.65];
-->P=[0.70, 0.15, 0.15; 0.20, 0.80, 0.15;0.10, 0.05, 0.70];
```

Calculando $\vec{x}_k$, con k suficientemente grande, obtendremos una buena aproximación del vector límite:

[1] El vector nulo sería estacionario para cualquier matriz cuadrada P de dimensión apropiada, por eso se quita de la definición pues carece de interés.

```
-->v=P^100*x0
 v  =
    0.33333333
    0.47619048
    0.19047619
```

Comprobemos que es un vector estacionario:

```
-->clean(P*v-v)
 ans  =
    0.
    0.
    0.
```

Nota. Observa que cada múltiplo no nulo de un vector estacionario es de nuevo un vector estacionario. De hecho, si $\vec{v}$ es un vector estacionario de una matriz A y λ es un escalar no nulo, utilizando propiedades de matrices obtenemos que

$$\mathsf{A}(\lambda\vec{v}) = \lambda\underbrace{\mathsf{A}\vec{v}}_{\vec{v}} = \lambda\vec{v}.$$

Además, las matrices estocásticas satisfacen las siguientes propiedades (que no probamos):

1. El producto de matrices estocásticas es de nuevo una matriz estocástica.

2. Toda matriz estocástica tiene vectores estacionarios.

Veremos a continuación que la matriz P del ejemplo introductorio **tiene un solo vector de probabilidad estacionario**:

Ejemplo 2. Calcularemos todos los vectores estacionarios de la matriz P del ejemplo introductorio. Observamos que un vector estacionario de P es un vector no nulo cualquiera $\vec{x}$ tal que $\mathsf{P}\vec{x} = \vec{x}$. Pero esto es equivalente a la igualdad $\mathsf{P}\vec{x} = I\vec{x}$ (donde I es la matriz identidad). Pasando $I\vec{x}$ al primer miembro y aplicando la propiedad distributiva obtenemos esta condición equivalente:

$$(\mathsf{P} - I)\vec{x} = \vec{0}.$$

Esta es la expresión matricial de un sistema homogéneo de ecuaciones lineales. Por tanto, los vectores estacionarios de P son exactamente las **soluciones no nulas de este sistema de ecuaciones lineales**, es decir, los vectors no nulos del**núcleo de la matriz** $\mathsf{P}-I$. Calculémoslo usando Scilab:

```
-->A=[0.7 0.15 0.15; 0.2 0.8 0.15; 0.1 0.05 0.7];kernel(A-eye(3,3))
 ans  =
    0.5449493
    0.7784989
    0.3113996
```

Así pues, el conjunto de vectores estacionarios para la matriz P es

$$\left\{ \lambda \begin{bmatrix} 0{,}5449493 \\ 0{,}7784989 \\ 0{,}3113996 \end{bmatrix} \mid \lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \right\}$$

Dividiendo todos los vectores de este conjunto entre la suma de sus componentes obtendremos todos los vectores de probabilidad estacionarios:

$$\left\{ \frac{1}{\lambda(0{,}5449493 + 0{,}7784989 + 0{,}3113996)} \lambda \begin{bmatrix} 0{,}5449493 \\ 0{,}7784989 \\ 0{,}3113996 \end{bmatrix} \mid \lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \right\} = \{ \begin{bmatrix} 0{,}3333333 \\ 0{,}4761905 \\ 0{,}1904762 \end{bmatrix} \}$$

Evidentemente, al dividir, siempre nos sale el mismo vector. Por tanto **solo hay un vector de probabilidad estacionario** que, en virtud de la Proposicion 1, debe de coincidir con el vector límite de la cadena de Markov dada en la Sección 1 (compara con la aproximación del vector límite obtenida). Es más, como sólo hay un vector de probabilidad estacionario, éste debera ser el límite de **cualquier** cadena de Markov convergente con matriz de transicion P, **independientemente del vector de estados iniciales** $\vec{x}_0$!

No todas las matrices de transición P asociadas a una cadena de Markov poseen un único vector estacionario como en el ejemplo anterior, y ello provoca que diferentes cadenas de Markov con la misma matriz de transición P puedan converger a vectores diferentes. Una muestra de ello es el ejemplo siguiente:

Ejemplo 3. Consideremos la matriz estocástica

$$\mathsf{P} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

y la cadena de Markov con matriz de transición P y vector de estado inicial $\vec{x}_0 = (1/3, 2/3, 0)$. Para estudiar la convergencia del proceso escribiremos, en Scilab, las siguientes instrucciones:

```
-->P=[1/2 0 0; 0 1 0; 1/2 0 1];x0=[1/3; 2/3; 0];P^10*x0
 ans  =
    0.0003255
    0.6666667
    0.3330078
-->P^30*x0
 ans  =
    3.104D-10
    0.6666667
    0.3333333
```

```
-->P^50*x0
 ans  =
    2.961D-16
    0.6666667
    0.3333333
-->clean(ans)
 ans  =
    0.
    0.6666667
    0.3333333
```

Vemos claramente que el proceso es convergente al vector de probabilidad $(0, 2/3, 1/3)$. Sin embargo, ¿qué pasa si elegimos un vector de estado inicial diferente? Tomemos, por ejemplo, el vector $\vec{x}_0 = (1/3, 1/3, 1/2)$:

```
-->x0=[1/3; 1/3; 1/3];P^10*x0
 ans  =
    0.0003255
    0.3333333
    0.6663411
-->P^30*x0
 ans  =
    3.104D-10
    0.3333333
    0.6666667
-->P^50*x0
 ans  =
    2.961D-16
    0.3333333
    0.6666667
-->clean(ans)
 ans  =
    0.
    0.3333333
    0.6666667
```

Vemos que el proceso es de nuevo convergente, pero **el límite es diferente**: $(0, 1/3, 2/3)$. Ambos vectores son dos vectores de probabilidad estacionarios diferentes y tampoco es uno múltiplo del otro.

Podemos calcular todos los vectores estacionarios de la matriz P calculando el núcleo de $\mathsf{P} - I$:

```
-->P=[1/2 0 0; 0 1 0; 1/2 0 1];kernel(P-eye(3,3))
 ans  =
```

```
0.    0.
0.    1.
1.    0.
```

A partir de aquí deducimos que el conjunto vectores estacionarios consta de los vectores $\lambda_1(0,1,0) + \lambda_2(0,0,1) = (0,\lambda_1,\lambda_2)$, con $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ y alguno $\lambda_i \neq 0$. Dividiendo por la suma de sus componentes (es decir, $\lambda_1 + \lambda_2$) obtendremos todos los vectores de probabilidad estacionarios:

$$\frac{1}{\lambda_1+\lambda_2}(0,\lambda_1,\lambda_2), \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}.$$

Observamos que hay una cantidad infinita.

A continuación daremos una condición suficiente para que una matriz estocástica satisfaga las buenas condiciones del ejemplo introductorio, es decir, que garantice que una cadena de Markov tenga un **único** vector de probabilidad estacionario y, además, sea ese vector su límite **para cualquier vector de estado inicial** que consideremos.

Definición 4. Una matriz estocástica P es **regular** si existe un número natural k tal que todas las entradas de la matriz P^k son estrictamente positivas (P^k no tiene ninguna entrada nula).

Teorema 1. Si P es una matriz estocástica regular, existe un **único** vector de probabilidad estacionario $\vec{v}$ para P. Además, si $\vec{x}_0$ es cualquier vector de probabilidad y $\vec{x}_{k+1} = \mathsf{P}\vec{x}_k$ para todo $k \geq 0$, entonces la cadena de Markov $\{\vec{x}_k\}$ converge a $\vec{v}$.

Nota. Observa que una matriz estocástica sin entradas nulas es siempre regular (véase la matriz P del ejemplo introductorio). Por el contrario, para que no sea regular debe tener muchas componentes nulas (Ejemplo 3). ¿Serán regulares las siguiente matrices:

$$\begin{bmatrix} 1/2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}?$$

Nota. Existen numerosas aplicaciones prácticas (entre las que se encuentra el cálculo del PageRank de Google) en las que interesa calcular un vector de probabilidad estacionario para una cierta matriz estocástica P. En casi todas estas aplicaciones la matriz P es grande y lo que se hace en la práctica, *esencialmente*, es, en lugar de calcular directamente el núcleo de la matriz $\mathsf{P} - I$ (como en nuestro ejemplo), se comienza con un vector inicial $\vec{x} = \vec{x}_0$ y se repite el proceso iterativo $\vec{x} \leftarrow \mathsf{P}\vec{x}$ (almacenando sólo el vector $\vec{x}$ resultante en cada iteración) con la idea de detener el proceso cuando la diferencia entre el x introducido y el obtenido sea, componente a componente, menor que determinada pequeña cantidad ϵ. El vector así obtenido será, por tanto, una aproximación al vector de estados límite de una cadena de Markov y, así, será también un vector de probabilidad estacionario para la matriz de transición P (en virtud de la Proposición 1)[2]. Si la matriz P cumple las condiciones del Teorema 1, quedará garantizada la existencia de

[2]Este método iterativo descrito se conoce como el Método de la Potencia y es comúnmente utilizado en multitud de problemas.

un único vector de probabilidad estacionario; esto es esencial, por ejemplo, en el algoritmo de cálculo del PageRank de Google, que se verá en una práctica posterior.