Pràctica 3
Matrius estocàstiques i cadenes de Markov

Índex

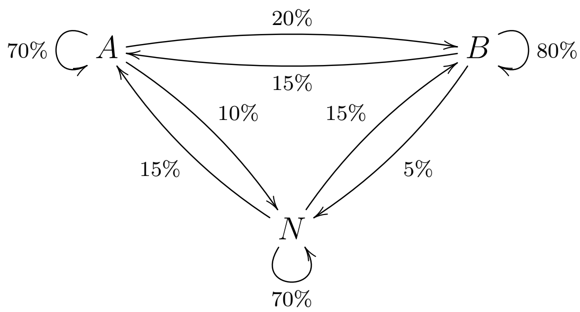
1 Exemple introductori 1

2 Matrius estocàstiques i cadenes de Markov 3

1 Exemple introductori

Una aplicació clàssica del càlcul matricial és l'estudi del moviment de poblacions dins d'un conjunt finit de possibles estats. Vegem un exemple il·lustratiu.

Dos companyies oferixen televisió per cable a una ciutat amb 100.000 vivendes. El canvi anual en la subscripció ve donat en el següent diagrama.



Inicialment la companyia A té 15000 subscriptors, la companyia B 20000, i hi ha 65000 vivendes sense subscripció (N). Calculem tots els subscriptors que tindrà cada companyia després de 10, 20 i 30 anys.

A cada vivenda li correspon un dels estats següents: A, B o N. El **vector d'estats inicials** $\vec{x}_0$, que emmagatzema la proporció inicial de subscriptors en cada estat, és el següent:

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

(Observeu que les components del vector $\vec{x}_0$ s'han calculat dividint el nombre de subscriptors en cada estat pel nombre total de subscriptors, que és 100.000).

Si $\vec{x}_1 = (a, b, n)$ denota el **vector d'estats** que proporciona les proporcions de subscriptors (en A, B i N) després d'un any, a partir del diagrama anterior es deduïx fàcilment el següent:

$$a = 0.70 \cdot 0.15 + 0.15 \cdot 0.20 + 0.15 \cdot 0.65,$$

$$b = 0.20 \cdot 0.15 + 0.80 \cdot 0.20 + 0.15 \cdot 0.65,$$

$$n = 0.10 \cdot 0.15 + 0.05 \cdot 0.20 + 0.70 \cdot 0.65.$$

És a dir:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \\ n \end{bmatrix}}_{\vec{x}_1} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0.70 & 0.15 & 0.15 \\ 0.20 & 0.80 & 0.15 \\ 0.10 & 0.05 & 0.70 \end{bmatrix}}_{\mathsf{P}} \underbrace{\begin{bmatrix} 0,15 \\ 0,20 \\ 0,65 \end{bmatrix}}_{\vec{x}_0}.$$

La matriu que hem denotat per P es denomina **matriu de transició**. Raonant de forma semblant es té que si $\vec{x}_k$ denota el **vector d'estats** després de k anys:

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

i, en general,

$$\vec{x}_k = \mathsf{P}^k\vec{x}_0 \text{ per a tot } k \geq 1.$$

Calculem, amb Scilab, els percentatges de subscriptors en cada estat després de 10, 20 i 30 anys:

```
->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
```

Observeu que, encara que $\vec{x}_{10}$ és prou diferent de $\vec{x}_0$, les diferències entre $\vec{x}_{10}$ i $\vec{x}_{20}$ són xicotetes, i inclús són menors les diferències entre $\vec{x}_{20}$ i $\vec{x}_{30}$. Així, podríem dir que la distribució de subscriptors «tiende a estabilizarse» i que, després de 10 anys, la situació és «casi estable». Calculant més vectors d'estats $\vec{x}_{40}, \vec{x}_{50}, \ldots, \vec{x}_{100}, \ldots$ veuríem que, amb el transcórrer dels anys, la proporció de subscriptors en cada un dels tres estats es va estabilitzant entorn d'un cert valor. Aclarim el significat d'estos conceptes imprecisos:

- «tendix a estabilitzar-se» significa que la successió de vectors $\vec{x}_n$ és **convergent** a un cert vector $\vec{v}$, el supòsit «estado final» o «estado límite». És a dir:

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

- l'expressió «després de 10 anys, la situació és quasi estable» significa que la diferència entre $\vec{x}_{10}$ i els vectors successius $\vec{x}_k$, $k > 10$, és raonablement xicoteta.

Acabem de veure un procés que tendix a ser estable. La pregunta que ens plantegem és la següent: sota quines condicions processos semblants a aquest tendixen a ser estables? En la resta d'aquest butlletí donarem resposta a esta pregunta.

2 Matrius estocàstiques i cadenes de Markov

El mateix plantejament de l'exemple anterior pot fer-se en general. Suposem que hem d'estudiar un procés semblant sobre proporcions d'individus pertanyents a n estats i que disposem d'una matriu $n \times n$, $\mathsf{P} = [p_{ij}]$, anomenada **matriu de transició**, de manera que cada entrada p_{ij} indica la probabilitat que un membre de la població canvie de l'estat j a l'estat i. Per la teoria de la probabilitat, $0 \leq p_{ij} \leq 1$ per a tot i i j, i la suma d'entrades de cada columna es 1. Observa que $p_{ij} = 0$ significa que el membre j no canviarà a l'estat i (sinó a qualsevol dels altres, amb determinades probabilitats), mentres que $p_{ij} = 1$ significa que és segur que el membre es mourà de l'estat j a l'estat i (i, per tant, la resta d'entrades de la columna j seran nul·les). Observa també que p_{ii} representa la probabilitat de romandre en el mateix estat, de no canviar.

El **vector d'estats inicials**, $\vec{x}_0$, és un vector de $\mathbb{R}^n$ la component i-èsima del qual és la proporció inicial d'individus en l'estat i, per a $i \in \{1, \ldots, n\}$. El **k-èsim vector d'estats** , $\vec{x}_k$, és un vector de $\mathbb{R}^n$ la component i-èsima del qual és la proporció d'individus en l'estat i després de k «passos» (usualment unitats de temps), per a $i \in \{1, \ldots, n\}$. Note's que la suma de les components de cada vector d'estats és sempre igual a 1.

Igual que en l'exemple anterior, es poden obtindre els successius vectors d'estats $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots,$ a partir de la matriu de transició 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 també

$$\vec{x}_k = \mathsf{P}^k \vec{x}_0 \text{ per a tot } k \geq 1.$$

Establim ara la terminologia que s'utilitza normalment per a descriure i estudiar aquest tipus de processos.

Definició 1. Un vector amb entrades no negatives, la suma de les quals és 1, se dirà un **vector de probabilitat**. Una **matriu estocàstica** (o **matriu de Markov**) és una matriu quadrada les columnes del qual són vectors de probabilitat.

Note's que les matrius de transició P abans considerades són matrius estocàstiques i que els vectors d'estats $\vec{x}_k$ són vectors de probabilitat. Les seqüències de vectors d'estats $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \ldots$ obtingudes a partir de matrius de transició P es denominen usualment **cadenes de Markov**, terme que necessitem en la definició següent:

Definició 2. Una **cadena de Markov** és una **successió de vectors de probabilitat** $\vec{x}_0$, $\vec{x}_1, \ldots$ tal que hi ha una matriu estocàstica P (**matriu de transició**) 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 usualment intentem resoldre amb una cadena de Markov és conéixer si l'evolució del procés al llarg del temps tendix a "estabilitzarse" i, en cas afirmatiu, conéixer eixe "estat final". Dit d'una altra manera, volem saber si hi ha un **vector d'estats límit**

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

Si tal vector existix, direm que la cadena de Markov és **convergent**.

Noteu que, **en cas d'existir** eixe vector límit $\vec{v}$, pel fet que $\vec{x}_{k+1} = \mathsf{P}\vec{x}_k$, prenent límits quan $k \to \infty$ a un costat i a l'altre de la igualtat obtenim que $\vec{v} = \mathsf{P}\vec{v}$. És a dir, $\vec{v}$ **és un vector que queda invariant al multiplicar-lo (per l'esquerra) per la matriu** P. Dit d'una altra manera, $\vec{v}$ és un **vector estacionari** per a P segons la terminologia precisada en la definició següent:

Definició 3. Donada una matriu quadrada P, direm que un vector no nul[1] $\vec{v}$ és **estacionari** per a P si $\mathsf{P}\vec{v} = \vec{v}$.

Així, es té la propietat següent:

Proposició 1. Siga $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \ldots$ una cadena de Markov **convergent** amb matriu de transició P. Si $\vec{v} = \lim_{k\to\infty} x_k$ llavors $\vec{v}$ és un vector <u>de probabilitat</u> estacionari per a P.

Exemple 1. Comprovem esta propietat amb l'exemple donat en la primera secció:

```
->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];
```

Calculant $\vec{x}_k$, amb k prou gran, obtindrem una bona aproximació del vector límit:

[1] El vector nul seria estacionari per a qualsevol matriu quadrada P de dimensió apropiada, per això es lleva de la definició perquè no té interés.

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

Comprovem que és un vector estacionari:

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

Nota. Observa que cada múltiple no nul d'un vector estacionari és novament un vector estacionari. De fet, si $\vec{v}$ és un vector estacionari d'una matriu A i λ és un escalar no nul, utilitzant propietats de matrius obtenim que

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

A més, les matrius estocàstiques satisfan les següents propietats (que no provem):

1. El producte de matrius estocàstiques és novament una matriu estocàstica.
2. Tota matriu estocàstica té vectors estacionaris.

Veurem a continuació que la matriu P de l'exemple introductori **té un sol vector estacionari de probabilitat**:

Exemple 2. Calcularem tots els vectors estacionaris de la matriu P de l'exemple introductori. Observem que un vector estacionari de P és un vector no nul qualsevol $\vec{x}$ tal que $\mathsf{P}\vec{x} = \vec{x}$. Però açò és equivalent a la igualtat $\mathsf{P}\vec{x} = I\vec{x}$ (on I és la matriu identitat). Passant $I\vec{x}$ al primer membre i aplicant la propietat distributiva obtenim esta condició equivalent:

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

Aquesta és l'expressió matricial d'un sistema homogeni d'equacions lineals. Per tant, els vectors estacionaris de P són exactament les **solucions no nul·les d'aquest sistema d'equacions lineals**, és a dir, els vectors no nuls del **nucli de la matriu** $\mathsf{P} - I$. Calculem-ho usant 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
```

Així, el conjunt de vectors estacionaris per a la matriu P és

$$\left\{ \lambda \begin{bmatrix} 0.5449493 \\ 0.7784989 \\ 0.3113996 \end{bmatrix} \mid \lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \right\}$$

Dividint tots els vectors d'aquest conjunt entre la suma dels seus components obtindrem tots els vectors de probabilitat estacionaris:

$$\left\{ \frac{1}{\lambda(0.5449493 + 0.7784989 + 0.3113996)} \lambda \begin{bmatrix} 0.5449493 \\ 0.7784989 \\ 0.3113996 \end{bmatrix} \mid \lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \right\} = \{ \begin{bmatrix} 0.3333333 \\ 0.4761905 \\ 0.1904762 \end{bmatrix} \}$$

Evidentment, al dividir, sempre ens ix el mateix vector. Per tant **només hi ha un vector de probabilitat estacionari** que, en virtut de la Proposició 1, deu coincidir amb el vector límit de la cadena de Markov donada en la Secció 1 (compara amb l'aproximació del vector límit obtinguda). És més, com només hi ha un vector de probabilitat estacionari, aquest haurà de ser el límit de **qualsevol** cadena de Markov convergent amb matriu de transició P, **independentment del vector d'estats inicials $\vec{x}_0$!**

No totes les matrius de transició P associades a una cadena de Markov posseïxen un únic vector estacionari com en l'exemple anterior, i això provoca que diferents cadenes de Markov amb la mateixa matriu de transició P puguen convergir a vectors diferents. Una mostra d'això és l'exemple següent:

Exemple 3. Considerem la matriu estocàstica

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

i la cadena de Markov amb matriu de transició P i vector d'estat inicial $\vec{x}_0 = (1/3, 2/3, 0)$. Per a estudiar la convergència del procés escriurem, en Scilab, les instruccions següents:

```
->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
```

Veiem clarament que el procés és convergent al vector de probabilitat $(0, 2/3, 1/3)$. No obstant, què passa si triem un vector d'estat inicial diferent? Prenguem, per exemple, el vector $\vec{x}_0 = (1/3, 1/3, 1/3)$:

```
->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
```

Veiem que el procés és novament convergent, però **el límit és diferent**: $(0, 1/3, 2/3)$. Ambdós vectors són dos vectors de probabilitat estacionaris diferents i tampoc és un d'ells múltiple de l'altre.

Podem calcular tots els vectors estacionaris de la matriu P calculant el nucli de 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 d'ací deduïm que el conjunt vectors estacionaris consta dels vectors $\lambda_1(0,0,1) + \lambda_2(0,1,0) = (0, \lambda_1, \lambda_2)$, amb $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ i algun $\lambda_i \neq 0$. Dividint per la suma dels seus components (és a dir, $\lambda_1 + \lambda_2$) obtindrem tots els vectors de probabilitat estacionaris:

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

Observem que hi ha una quantitat infinita.

A continuació donarem una condició suficient perquè una matriu estocàstica satisfaça les bones condicions de l'exemple introductori, és a dir, que garantisca que una cadena de Markov tinga un **únic** vector de probabilitat estacionari i, a més, siga eixe vector el seu límit **per a qualsevol vector d'estat inicial** que considerem.

Definició 4. Una matriu estocàstica P és **regular** si hi ha un nombre natural k tal que totes les entrades de la matriu P^k són estrictament positives (P^k no té cap entrada nul·la).

Teorema 1. Si P és una matriu estocàstica regular, hi ha un **únic** vector de probabilitat estacionari $\vec{v}$ per a P. A més, si $\vec{x}_0$ és qualsevol vector de probabilitat i $\vec{x}_{k+1} = \mathsf{P}\vec{x}_k$ per a tot $k \geq 0$, llavors la cadena de Markov $\{\vec{x}_k\}$ convergix a $\vec{v}$.

Nota. Observeu que una matriu estocàstica sense entrades nul·les és sempre regular (vegeu la matriu P de l'exemple introductori). Al contrari, perquè no siga regular ha de tindre moltes components nul·les (Exemple 3). Seran regulars les matrius següents:

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

Hi ha nombroses aplicacions pràctiques de les cadenes de Markov en les que es busca l'estat límit del procés. En quasi totes aquestes aplicacions la matriu estocàstica P és gran i, pel cost del procés de calcular el nucli de P − I, el que es fa en la pràctica és un procés iteratiu: es comença amb un vector inicial $\vec{x} = \vec{x}_0$ i es repetix el càlcul $\vec{x} \leftarrow \mathsf{P}\vec{x}$ amb la idea de detindre el procés quan la diferència entre el x introduït i l'obtingut siga, component a component, menor que determinada xicoteta quantitat ϵ. El vector així obtingut serà, per tant, una aproximació al vector d'estats límit i, així, serà també un vector de probabilitat estacionari per a la matriu de transició P (en virtut de la Proposició 1)[2]. Si la matriu P complix les condicions del Teorema 1, la solució és única, per la qual cosa no seria necessari realitzar massa iteracions. Açò és essencial, per exemple, en l'algoritme de càlcul del PageRank de Google, que es veurà en una pràctica posterior.

[2]Aquest mètode iteratiu descrit es coneix com el Mètode de la Potència i és comunament utilitzat en multitud de problemes.