

Métodos Computacionales

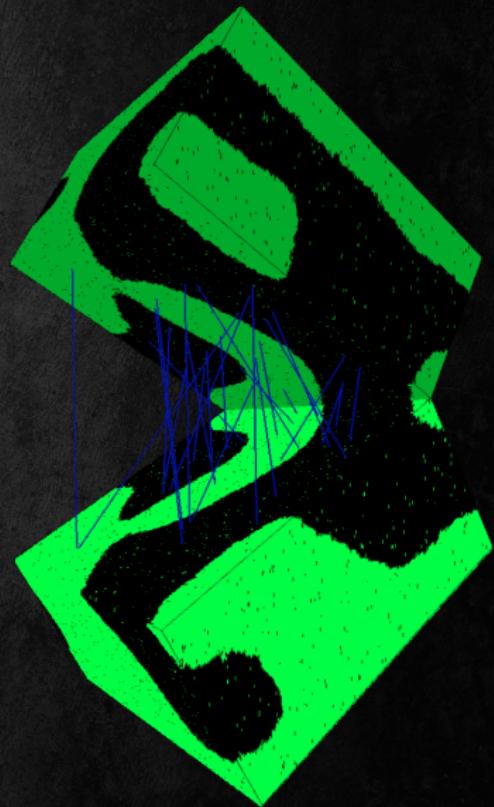
Cadenas de Markov

Octubre 18, 2023

S. Alexis Paz



Departamento de
QUÍMICA TEÓRICA
Y COMPUTACIONAL
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Nacional de Córdoba



Leist et al., J.Comp.Sc. 1(2010)33



Room 544



Room 503



Room 635



Room 703



Room 705



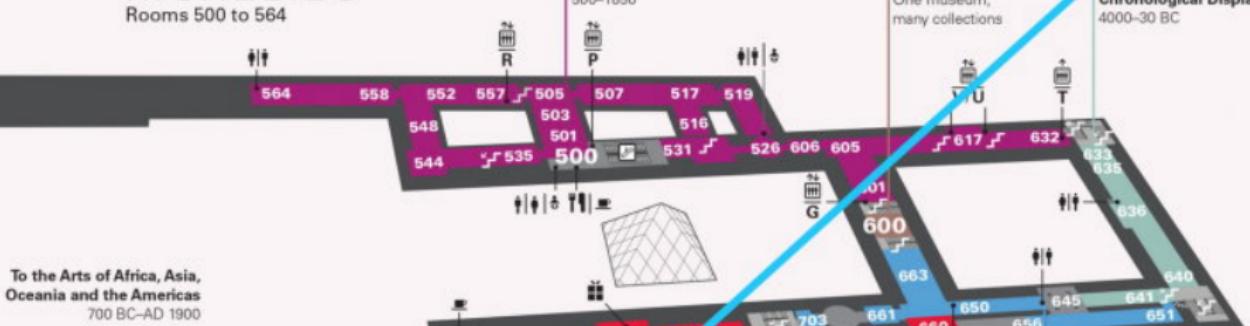
Room 700



Room 711

RICHELIEU

Rooms 500 to 564

Decorative Arts / Europe
500-1850The Pavillon de l'Horloge
One museum,
many collectionsEgyptian Antiquities
Chronological Display
4000-30 BCTo the Arts of Africa, Asia,
Oceania and the Americas
700 BC-AD 1900**DENON**
Rooms 700 to 734Paintings / Spain
1400-1850Paintings / France
1780-1850Paintings / Italy
1250-1800The Galerie d'Apollon /
The French Crown JewelsGreek and Roman Antiquities
700 BC-AD 400



Room 544



Room 503



Room 635



Room 703



Room 705



Room 700



Room 711

RICHELIEU

Rooms 500 to 564

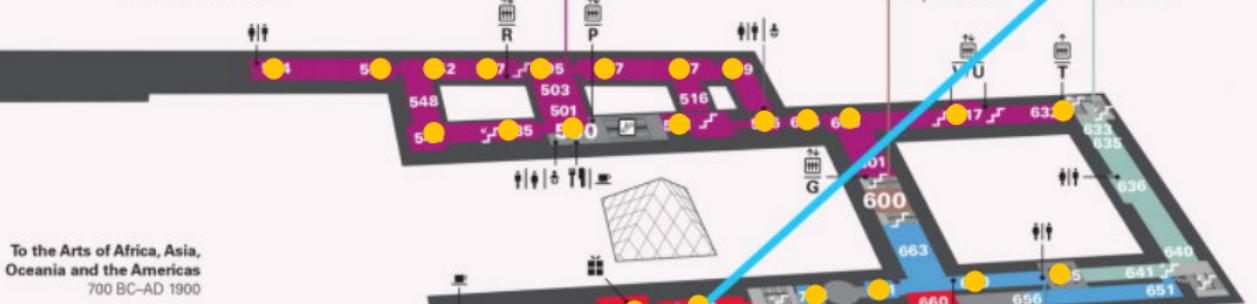
Decorative Arts / Europe 500-1850

R
P
G
U
T
S
C

The Pavillon de l'Horloge

One museum,
many collections

Egyptian Antiquities Chronological Display 4000-30 BC



To the Arts of Africa, Asia,
Oceania and the Americas
700 BC-AD 1900

DENON

Rooms 700 to 734

Paintings / Spain
1400-1850

Paintings / France
1780-1850

Paintings / Italy
1250-1800

The Galerie d'Apollon /
The French Crown Jewels

Greek and Roman Antiquities
700 BC-AD 400



Room 544



Room 503



Room 635



Room 703



Room 705



Room 700



Room 711

RICHELIEU

Rooms 500 to 564

Decorative Arts / Europe 500-1850

R
P2
5
9148
503
601
516

64

648
603
601
516

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

64

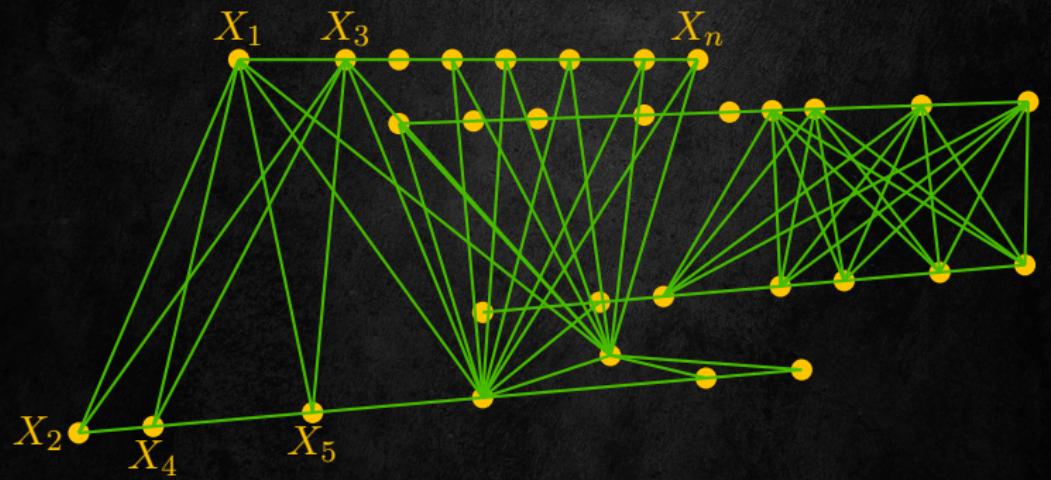
64

64

64

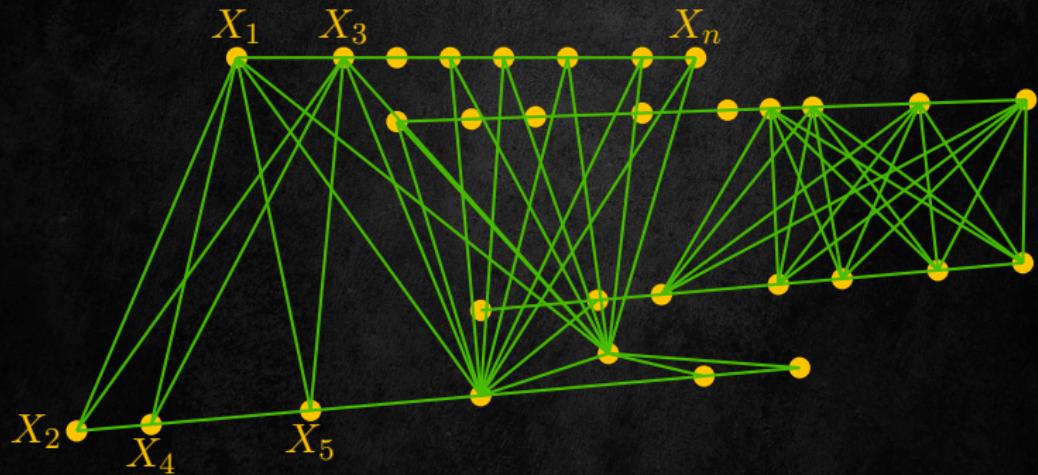
64

64



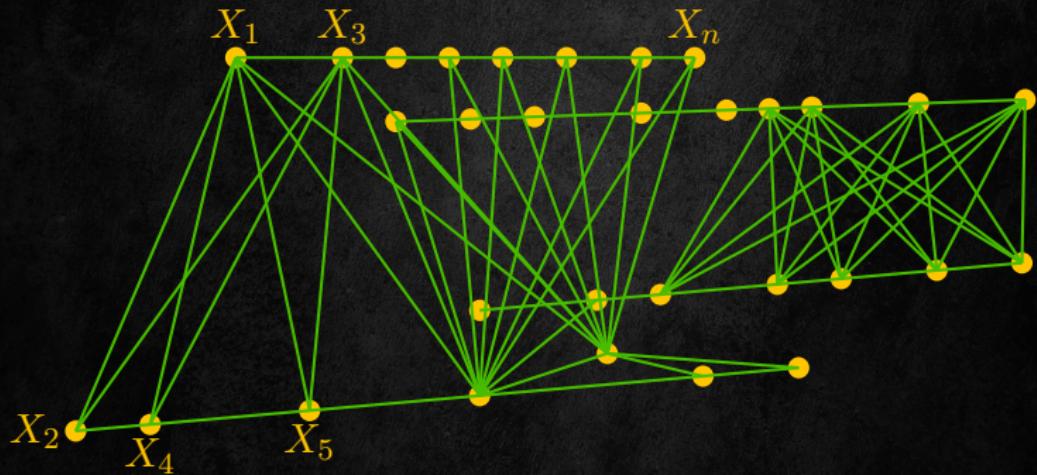
Un caminante forma una cadena de estados

$$X_1(t_0) \rightarrow X_2(t_1) \rightarrow X_1(t_2) \rightarrow X_3(t_3) \rightarrow X_3(t_4) \rightarrow \dots$$



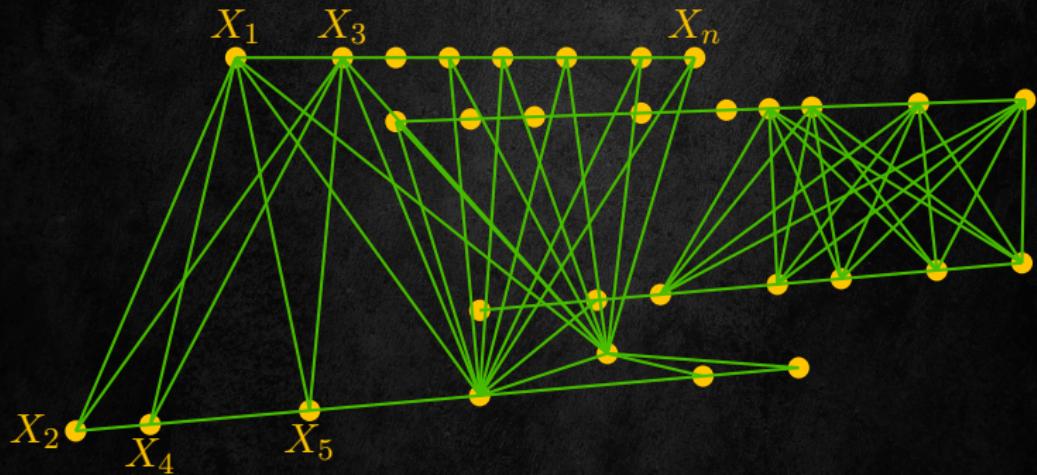
En un instante t la probabilidad de estar en X_i es

$$\rho_i(t) = P[X_i(t)]$$



Estando en X_i a tiempo t_0 , la probabilidad de pasar a X_j en t_1 es

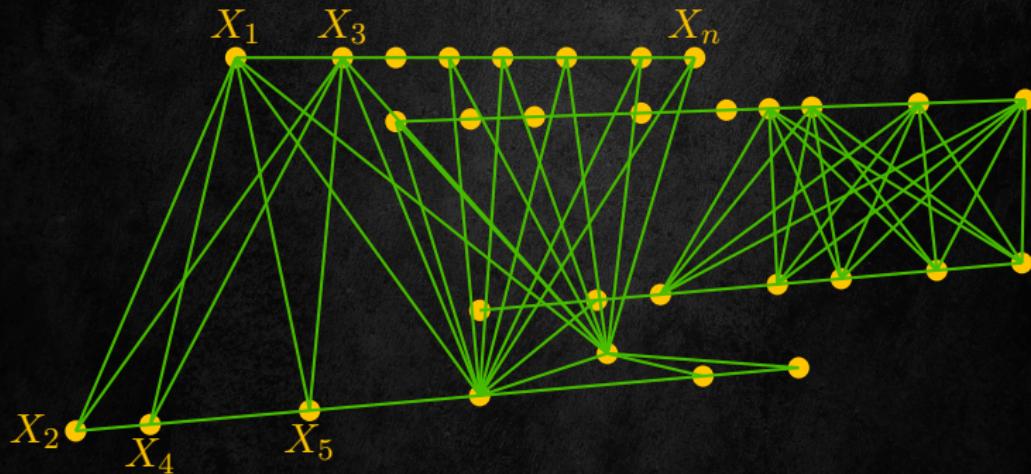
$$t_{i,j}^{(1)} = P[X_j(t_1)|X_i(t_0), X_k(t_{-1}), \dots, X_m(t_{-n})]$$



En un proceso de Markov, la probabilidad de transición no depende de estados pasados

$$t_{i,j}^{(1)} = P[X_j(t_1)|X_i(t_0)]$$

Como todo proceso determinista



Ecuación Maestra

Puedo armar un vector con la probabilidad en cada estado
y una matriz con las transiciones . . .

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_1(t) \\ \rho_2(t) \\ \vdots \\ \rho_n(t) \end{pmatrix} \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1n} \\ t_{21} & t_{22} & \cdots & t_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{n1} & t_{n2} & \cdots & t_{nn} \end{pmatrix}$$

La evolución de las probabilidades siguen la ecuación maestra:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \mathbf{T}\rho(t)$$

\mathbf{T} es independiente del tiempo en un proceso de Markov.

En equilibrio . . .

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \mathbf{T}\rho(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_k t_{ik}\rho_i = 0$$

El flujo de entrada y salida deben ser iguales

Esto también se cumple con un **balance detallado**:

$$t_{ji}\rho_i = t_{ij}\rho_j$$

Metropolis–Hastings

$$X_1(t_0) \rightarrow X_2(t_1) \rightarrow X_1(t_2) \rightarrow X_3(t_3) \rightarrow X_3(t_4) \rightarrow \dots$$

¡Caminar es una forma de generar estados aleatorios!

1. Considerando un proceso Markoviano.
1. Elijo un estado inicial X_i .
2. Perturbo aleatoriamente X_i para generar otro estado posible X_j .
3. Acepto $(X_i \rightarrow X_j)$ con una cierta probabilidad, cumpliendo con el balance detallado de la distribución de interés.
4. *La cadena resultante converge a esta distribución independientemente del estado X_i inicial.*
5. Repito desde 2.

Metropolis–Hastings

¿Cuál es la probabilidad de transición?

$$t_{ji} = M(X_j|X_i)A(X_j|X_i)$$

pero por balance detallado $t_{ji}\rho_i = t_{ij}\rho_j$

$$M(X_j|X_i)A(X_j|X_i)\rho_i = M(X_j|X_i)A(X_j|X_i)\rho_j$$

Eligiendo $M(X_j|X_i) = M(X_i|X_j)$

$$A(X_j|X_i)\rho_i = A(X_j|X_i)\rho_j$$

Lo cual es siempre cierto si elijo

$$A(X_j|X_i) = \min\left[1, \frac{\rho_j}{\rho_i}\right]$$