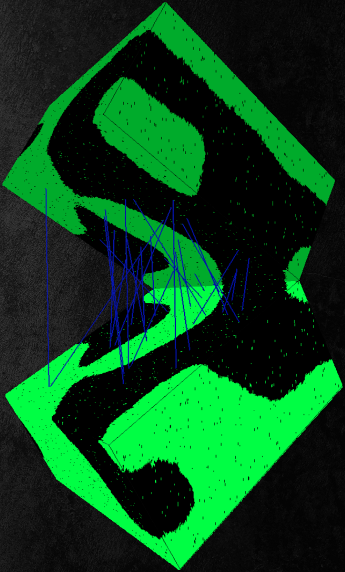
Métodos Computacionales

Cadenas de Markov

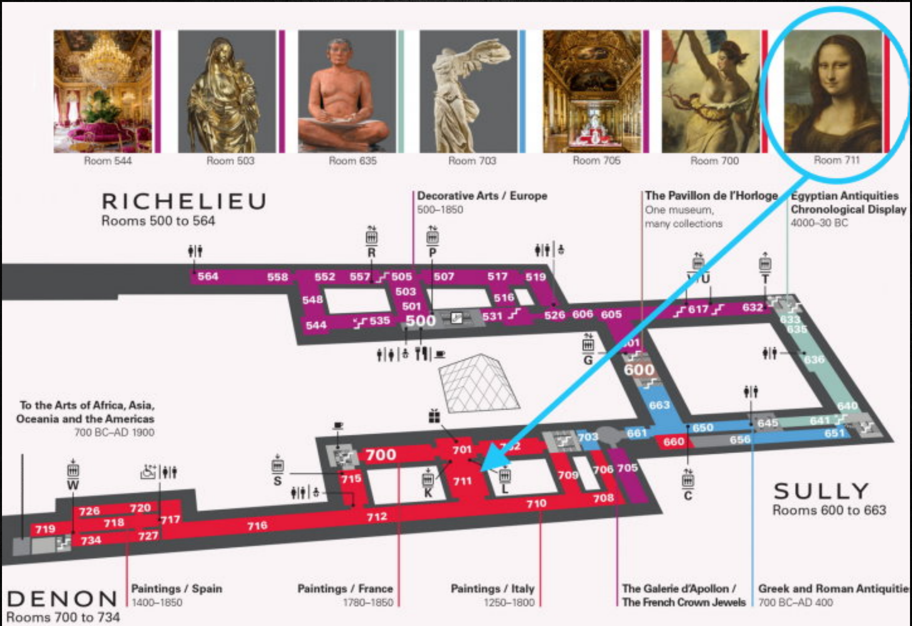
Octubre 14, 2024



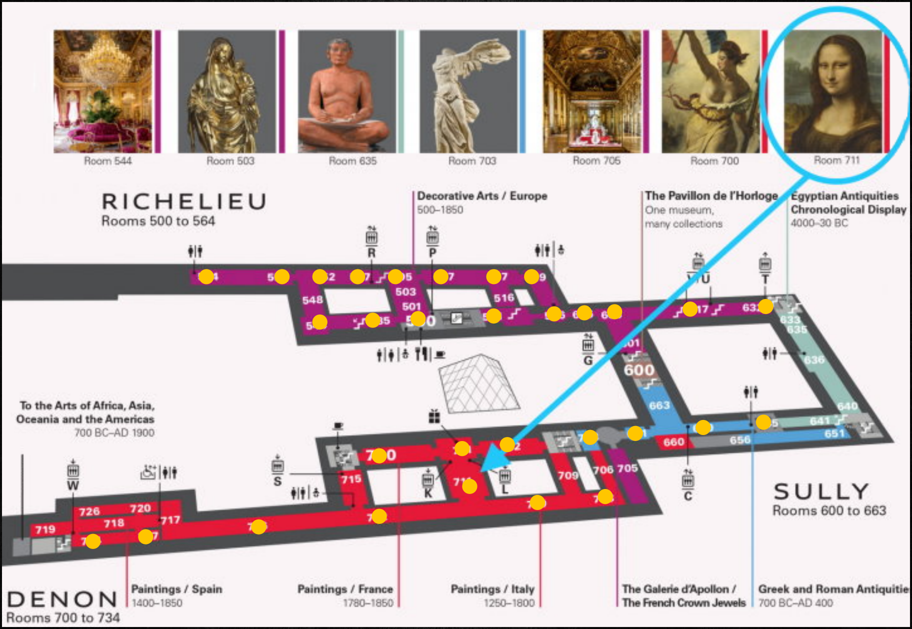
Leist *et al.*, J.Comp.Sc. 1(2010)33

S. Alexis Paz

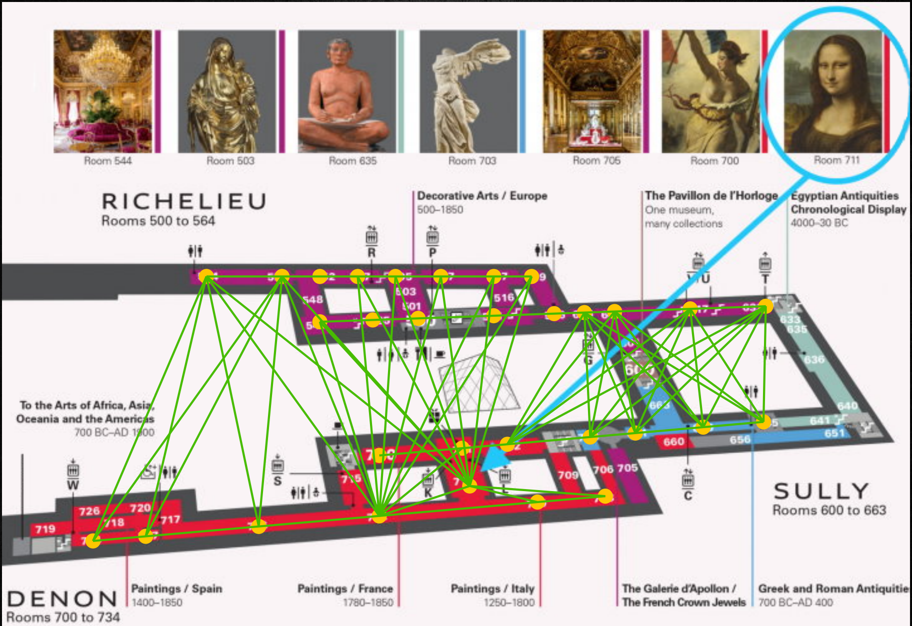
Departamento de
QUÍMICA TEÓRICA
Y COMPUTACIONAL
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Nacional de Córdoba

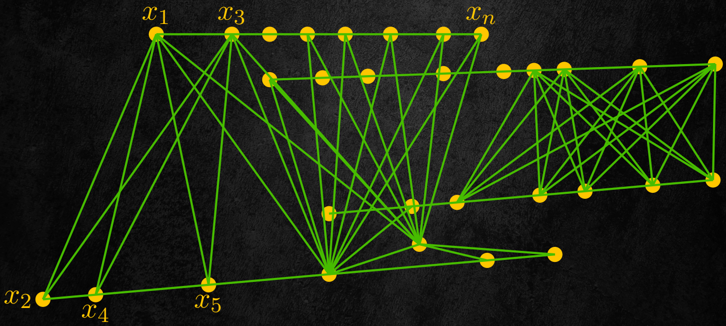


MC2024 - S.A.Paz



MC2024 - S.A.Paz

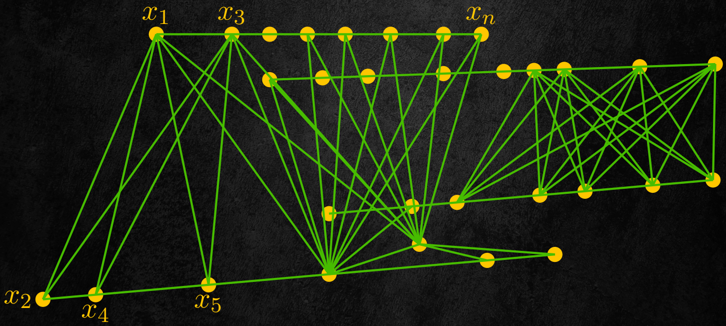

Room 544
Room 503
Room 635
Room 703
Room 705
Room 700
Room 711
RICHELIEU
Rooms 500 to 564
Decorative Arts / Europe
500–1850
The Pavillon de l'Horloge
One museum,
many collections
Egyptian Antiquities
Chronological Display
4000–30 BC
R
P
U
T
G
W
S
K
C
548
503
501
516
633
635
636
640
641
651
656
660
663
709
706
705
726
720
718
717
719
715
To the Arts of Africa, Asia,
Oceania and the Americas
700 BC–AD 1900
SULLY
Rooms 600 to 663
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 Antiquitie
700 BC–AD 400


x_1
x_3
x_n
x_2
x_4
x_5

La trayectoria $x(t)$ de un caminante forma una cadena de estados

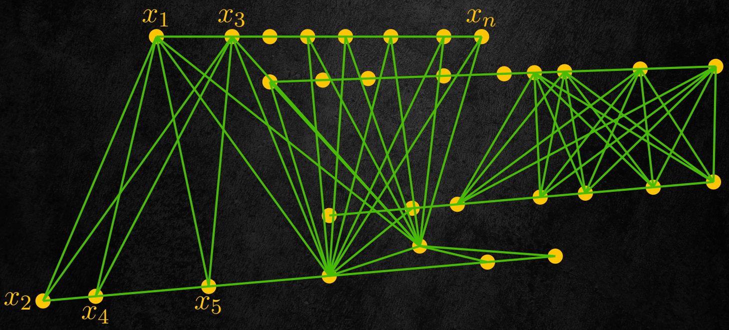
$$x_1(t_0) \rightarrow x_2(t_1) \rightarrow x_1(t_2) \rightarrow x_3(t_3) \rightarrow x_3(t_4) \rightarrow \cdots$$

forma una cadena de estados



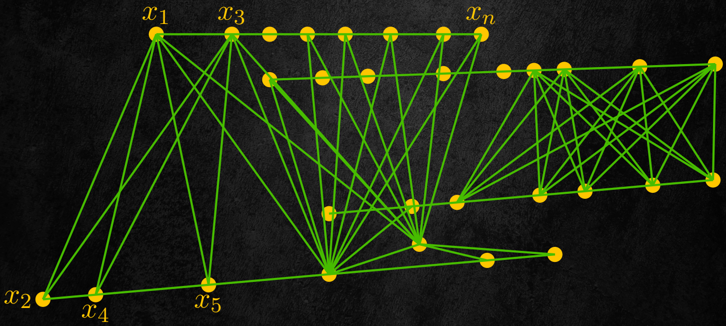
$$X_1 \to X_2 \to X_3 \to X_4 \to X_5 \to \cdots$$

¡Caminar es una forma de generar estad



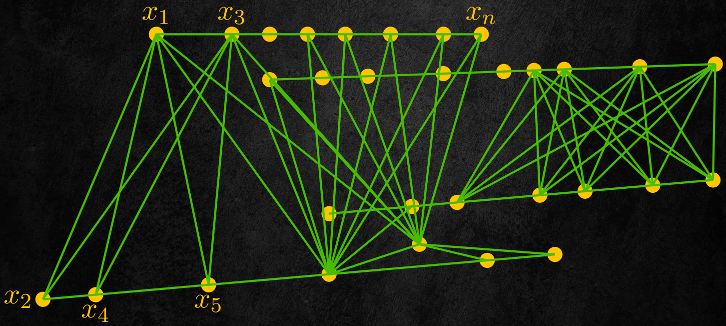
En un instante t la probabilidad de estar en x_i es

$$\rho_i(t) = P\big[X = x_i(t)\big]$$



Estando en x_i a tiempo t_0, la probabilidad de pasar a x_j en t_1 es

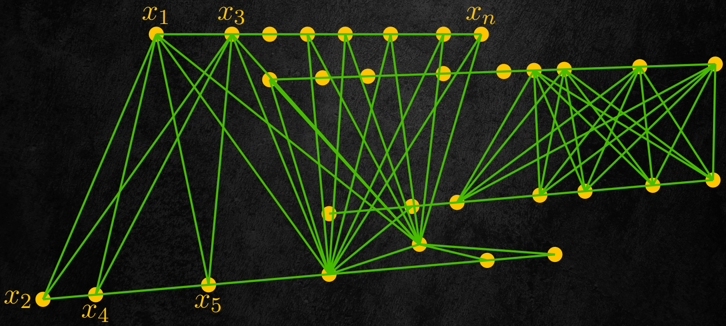
$$t_{i,j}^{(1)} = P[X = x_j(t_1)|x_i(t_0), x_k(t_{-1}), \cdots, x_m(t_{-n})]$$



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

$$t_{i,j}^{(1)} = P[X = x_j | x_i]$$

Como todo proceso determinista



Ecuación Maestra

Puedo armar un vector con la probabilidad en cada estado

y una matriz con las transiciones...

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

La evolución de las probabilidades siguen la ecuación maestra:

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

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

En equilibrio. . .

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

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

$$X_1(t_0) \to X_2(t_1) \to X_1(t_2) \to X_3(t_3) \to X_3(t_4) \to \cdots$$

¡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 $(X_i \to X_j)$ con una cierta probabilidad, cumpliendo con el balance detallado de la distribución de interés.
4. *La cadena resultante converge a esta distribucíon* independientemente del estado X_i inicial.
5. Repito desde 2.

Metropolis–Hastings

¿Cual es la probabildad 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

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