Algoritmos aleatorizados: Cadenas de Markov

J. M. Almira

Universidad de Murcia

Parte 1.

Concepto y Primeros ejemplos de Cadenas de Markov

Definición (Cadena de Markov (Finita))

Llamamos cadena de Markov a toda sucesión de variables aleatorias $\{X_n\}_{n=0}^{\infty}$ *que cumple los siguientes requisitos:*

- *Todas las v.a.* X_n *comparten el mismo rango, que es un conjunto finito* $S = \{s_1, \cdots, s_k\}$ *al que denominamos espacio de estados de la cadena. Los elementos de* S *se llaman estados de la cadena.*
- *Existe una matriz* $P = (p_{i,j})_{i,j=1}^{k}$*, llamada matriz de transiciones, tal que*

$$\begin{aligned} &P(X_{n+1} = s_j | X_0 = s_{i_0}, \cdots, X_{n-1} = s_{i_{n-1}}, X_n = s_i) \\ &= P(X_{n+1} = s_j | X_n = s_i) = p_{i,j};\ 1 \leq i,j \leq k; n = 0, 1, 2, \cdots . \end{aligned}$$

Esto significa que el estado futuro de la cadena (X_{n+1}) *solo depende de su estado presente* (X_n) *y no de su historia pasada (los valores* $X_0, X_1, X_2, \cdots, X_{n-1}$*).*

Teorema (Distribución de Probabilidades de X_n)

Sea (X_n) una cadena de Markov finita con matriz de transición $P = (p_{i,j})$. Si

$$\mu^{(0)} = (\mu_1^{(0)}, \cdots, \mu_k^{(0)})$$

es la distribución de probabilidades inicial (i.e., de X_0), entonces, para cada $n \in \mathbb{N}$, la distribución de probabilidades de X_n viene dada por

$$\mu^{(n)} = \mu^{(0)} P^n$$

Notación: Si $\mu = (\mu_1, \cdots, \mu_m)$ y $A = (a_{ij})$, usamos la notación:

$$(\mu)_j = \mu_j \text{ y } (A)_{ij} = a_{ij}$$

Demostración. Asumimos $S = \{1, \cdots, k\}$. Para $n = 0$ es verdad porque $P^0 = I$. Supongamos que el resultado es cierto para n y consideremos

$$\mu^{(n+1)} = (P(X_{n+1} = 1), \cdots, P(X_{n+1} = k))$$

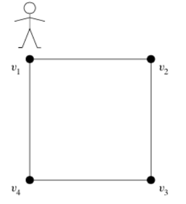
la distribución de probabilidades de X_{n+1}. Entonces

$$\begin{aligned}
\mu_j^{(n+1)} &= P(X_{n+1} = j) = \sum_{i=1}^{k} P(X_{n+1} = j | X_n = i) P(X_n = i) \\
&= \sum_{i=1}^{k} \mu_i^{(n)} P(X_{n+1} = j | X_n = i) \\
&= \sum_{i=1}^{k} \mu_i^{(n)} p_{ij} \\
&= (\mu^{(n)} P)_j \ \text{aplicamos ahora la hipótesis de inducción, } \mu^{(n)} = \mu^{(0)} P^n \\
&= (\mu^{(0)} P^n P)_j = (\mu^{(0)} P^{n+1})_j \text{ para } j = 1, \cdots, k.
\end{aligned}$$

Esto finaliza la prueba.

Un primer ejemplo: caminos aleatorios en grafos

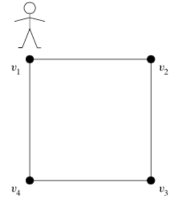
Consideremos el grafo de la figura.



Sobre él colocamos un caminante que va a seguir un paseo aleatorio, de vértice en vértice, cambiando de posición cada segundo. Denotamos por X_n el índice del vértice del grafo ocupado por nuestro caminante en el instante n. Imponemos $X_0 = 1$. A partir de la posición v_i (en cualquier instante n), el caminante saltará (en el instante $n + 1$) con probabilidad $1/2$ a cualquiera de los vértices adyacentes a v_i (y con probabilidad 0 a los vértices no adyacentes a su posición en el instante n)

Un primer ejemplo: caminos aleatorios en grafos

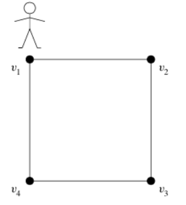
Consideremos el grafo de la figura.



En nuestro caso, la matriz de transición $P=(p_{i,j})$, donde $p_{i,j}=P(X_{n+1}=v_j|X_n=v_i)$, viene dada por:

$$P=\begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & p_{24} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & p_{34} \\ p_{41} & p_{42} & p_{43} & p_{44} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Un primer ejemplo: caminos aleatorios en grafos



Un simple cálculo nos indica que

$$P^2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} ; P^3 = P$$

Se sigue que $P^{2k} = P^2$ y $P^{2k+1} = P$, para todo k.

Un primer ejemplo: caminos aleatorios en grafos

Por tanto, la distribución de probabilidad de X_n oscila entre

$$\mu^{(0)}P^{2k+1} = (1,0,0,0)\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} = (0,\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$$

y

$$\mu^{(0)}P^{2k} = (1,0,0,0)\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2},0)$$

según $n \in \{2k+1, 2k\}$ sea impar o par.

Una nota sobre Potencias de Matrices y Diagonalización de Matrices:

- Sea A matriz cuadrada. Si la descomponemos como

$$A = Q^{-1}DQ$$

con D matriz diagonal (es decir, si A es diagonalizable), entonces

$$A^n = Q^{-1}D^nQ,$$

que es muy fácil de calcular.

Teorema

Una matriz $A \in M_k(\mathbb{R})$ es diagonalizable si y solo si existe una base de $\mathbb{R}^k$ formada por autovectores de A, lo cual es, a su vez, equivalente a que la suma de las dimensiones de los autoespacios de A valga k.

Teorema

Toda matriz simétrica es diagonalizable (con una base ortogonal)

De vuelta al primer ejemplo: caminos aleatorios en grafos

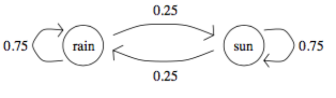
Podemos aplicar lo anterior a nuestro ejemplo, pues $P = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$ es simétrica. Sus autovalores son $\{-1, 1, 0\}$ y la descomposición queda:

$$P = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Se sigue que $P^{2k} = P^2$ y $P^{2k+1} = P$, para todo n, por lo que la distribución de probabilidad de X_n solo depende de la paridad de n, tal como vimos antes.

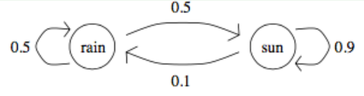
Otro ejemplo: predicción del tiempo

Consideramos dos casos de predicción del tiempo, pues la matriz de transición de probabilidades para los estados de lluvia o sol, dependen de la ubicación de la localidad en la que se va a realizar la predicción. Ejemplo 1: Una localidad del norte de España.



Aquí la matriz de transición es $P = \begin{bmatrix} 0{,}75 & 0{,}25 \\ 0{,}25 & 0{,}75 \end{bmatrix}$

Ejemplo 2: Una localidad del sur de España.



Aquí la matriz de transición es $P = \begin{bmatrix} 0{,}5 & 0{,}5 \\ 0{,}1 & 0{,}9 \end{bmatrix}$

Otro ejemplo: Surfear por la World Wide Web

Si denotamos por $S = \{s_k\}_{k\in\Delta}$ las páginas webs que existen en Internet en un momento dado (y asumimos que dicho número permanece constante para nuestros cálculos) y por X_n la v.a. que nos dice en qué página de la red estamos en el instante n, y asumimos que viajamos a través de la red de forma aleatoria, de modo que en cada momento nos movemos desde la página s_i que ocupamos eligiendo aleatoriamente entre aquellas que están enlazadas a esta, tendremos una Cadena de Markov gigantesca cuya matriz de transición es $P = (p_{ij})$, siendo

$$p_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{d_i} & \text{si } s_j \text{ está enlazada a } s_i \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Aquí $d_i =$ número de enlaces con s_i.

Parte 2.

Simulación de Cadenas de Markov

Cómo simular Cadenas de Markov (X_n)

Hipótesis inicial: Sabemos generar una m.a.s. de $U \sim \mathbf{U}([0,1])$

- La generación de sucesiones de números aleatorios es un problema complicado.
- Suponemos que en efecto disponemos de una m.a.s. (U_n) de la v.a. uniforme con rango $[0,1]$

Nota: Ver el Capítulo 17 de: W.J. Stewart, Probability, Markov Chains, Queues, and Simulation. Princeton University Press. 2009.
También puede verse el Tomo 2 de D.E. Knuth "The art of Programing Computers"(Dedicado a algoritmos seminuméricos).

Problema: Dados P y $\mu^{(0)}$, ¿es posible simular la cadena de Markov asociada (X_n)?

La respuesta es: Sí!

$$\begin{cases} X_0 & = & \Phi(U_0) \\ X_{n+1} & = & \Psi(X_n, U_{n+1}) \end{cases}$$

Para hacerlo necesitamos ($S = \{s_1, \cdots, s_k\}$ denota el espacio de estados de la CM):

- Una función de inicialización $\Phi : [0, 1] \to S$ que proporciona el valor de X_0 de acuerdo con $\mu^{(0)}$
- Una función de actualización $\Psi : S \times [0, 1] \to S$ que genera el resto de valores de la Cadena de Markov.

Construcción de la función de inicialización $\Phi : [0,1] \to S$

Proposición

Supongamos que $U_0 \sim \mathbf{U}([0,1])$ *y que* $\Phi : [0,1] \to S$ *es tal que*

$$\int_0^1 \chi_{\{\Phi(x)=s\}}(x)dx = \mu^{(0)}(s) \text{ para todo } s \in S.$$

Entonces $X_0 = \Phi(U_0)$ *sigue una distribución cuya fdp es* $\mu^{(0)}$.

Construcción de la función de inicialización $\Phi : [0,1] \to S$

Proposición

Supongamos que $U_0 \sim \mathbf{U}([0,1])$ *y que* $\Phi : [0,1] \to S$ *es tal que*

$$\int_0^1 \chi_{\{\Phi(x)=s\}}(x)dx = \mu^{(0)}(s) \text{ para todo } s \in S.$$

Entonces $X_0 = \Phi(U_0)$ *sigue una distribución cuya fdp es* $\mu^{(0)}$.

Demostración: En efecto,

$$P[X_0 = s] = P[\Phi(U_0) = s] = \int_0^1 \chi_{\{\Phi(x)=s\}}(x)dx = \mu^{(0)}(s) \text{ para todo } s \in S$$

Construcción de la función de inicialización $\Phi : [0,1] \to S$

Proposición

Supongamos que $U_0 \sim \mathbf{U}([0,1])$ *y que* $\Phi : [0,1] \to S$ *es tal que*

$$\int_0^1 \chi_{\{\Phi(x)=s\}}(x)dx = \mu^{(0)}(s) \text{ para todo } s \in S.$$

Entonces $X_0 = \Phi(U_0)$ *sigue una distribución cuya fdp es* $\mu^{(0)}$.

Por tanto, buscamos $\Phi : [0,1] \to S$ tal que

$$\int_0^1 \chi_{\{\Phi(x)=s\}}(x)dx = \mu^{(0)}(s)$$

para todo $s \in S$.

Construcción de la función de inicialización $\Phi : [0,1] \to S$

Por tanto, buscamos $\Phi : [0,1] \to S$ tal que

$$\int_0^1 \chi_{\{\Phi(x)=s\}}(x)dx = \mu^{(0)}(s)$$

para todo $s \in S$. Basta tomar

$$\Phi(x) = s_i \text{ sii } x \in \left[\sum_{j=1}^{i-1} \mu^{(0)}(s_j), \sum_{j=1}^{i} \mu^{(0)}(s_j)\right)$$

Construcción de la función de actualización $\Psi : S \times [0,1] \to S$

Teorema

Sea (U_n) sucesión de v.a. indep., id. dist. con distribución $U([0,1])$. Sea P la matriz de transición de una CM con $k = \#S$ estados y sea Φ una función de inicialización. Supongamos que $\Psi : S \times [0,1] \to S$ satisface que, para cada i,

$$\int_0^1 \chi_{\{\Psi(s_i,x)=s_j\}}(x)dx = P_{i,j}.$$

Entonces

$$\begin{cases} X_0 & = & \Phi(U_0) \\ X_{n+1} & = & \Psi(X_n, U_{n+1}) \end{cases}$$

define una Cadena de Markov (X_n) con estados en S, matriz de transición P, y distribución inicial $\mu^{(0)}$.

Construcción de la función de actualización $\Psi : S \times [0,1] \to S$

Demostración. En efecto:

$$\begin{aligned}
P[X_{n+1} = s_j | X_n = s_i] &= P[\Psi(X_n, U_{n+1}) = s_j | X_n = s_i] \\
&= P[\Psi(s_i, U_{n+1}) = s_j | X_n = s_i] \\
&= P[\Psi(s_i, U_{n+1}) = s_j] \\
&\quad \text{(pues } U_{n+1} \text{indep. de } X_k \text{ para } k \leq n\text{)} \\
&= \int_0^1 \chi_{\{\Psi(s_i,x)=s_j\}}(x)dx \\
&= P_{i,j}.
\end{aligned}$$

Construcción de la función de actualización $\Psi : S \times [0, 1] \to S$

La función Ψ se construye de forma análoga a lo que se hizo con Φ:

$$\Psi(s_i, x) = s_j \text{ sii } x \in \left[\sum_{h=1}^{j-1} P_{ih}, \sum_{h=1}^{j} P_{ih} \right)$$

Un ejemplo hecho en SAGE

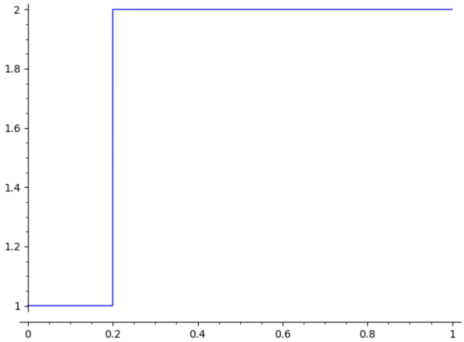
```
P = matrix(CC ,[[0.175 , 0.825],[0.526 ,0.474]])
P
```

```
[0.175000000000000 0.825000000000000]
[0.526000000000000 0.474000000000000]
```

```
Phi=piecewise([[(0,0.2),1],[(0.2,1),2]]);

Phi

plot(Phi(x),(x,0,1))
```



Un ejemplo hecho en SAGE

```
def psi(n,x):
    if n==1 and 0<=x<0.175:
        return 1
    if n==1 and 0.175<=x<=1:
        return 2
    if n==2 and 0<=x<0.526:
        return 1
    if n==2 and 0.526<=x<=1:
        return 2
```

```
psi(2,0.1)
```

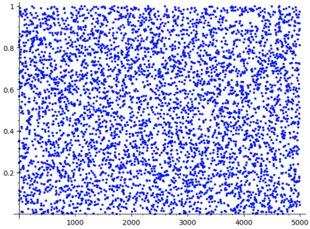
```
    1
```

Un ejemplo hecho en SAGE

```
import numpy as np
U=np.random.uniform(0,1,50000)
U[0:100]
```

```
    array([0.40083746, 0.34835457, 0.82791346, 0.81265363, 0.24592586,
           0.56637186, 0.06589405, 0.11238956, 0.35229126, 0.63509451,
           0.31457454, 0.80275195, 0.67648502, 0.08938754, 0.19994731,
           0.8358177 , 0.8651584 , 0.97309107, 0.61223356, 0.27768768,
           0.39760514, 0.99053884, 0.62899497, 0.96493988, 0.97074842,
           0.73180532, 0.60526306, 0.75091456, 0.7666011 , 0.68757348,
           0.77862637, 0.25376806, 0.97411035, 0.10658911, 0.51654766,
           0.21372431, 0.51079361, 0.9564458 , 0.79047488, 0.07380427,
           0.68786802, 0.07634282, 0.48728061, 0.68317815, 0.50951518,
           0.85263426, 0.17623457, 0.01099148, 0.61374985, 0.41928304,
           0.62900189, 0.68700131, 0.41304873, 0.53957767, 0.27905101,
           0.57188803, 0.94960847, 0.72396035, 0.7202713 , 0.58304391,
           0.34136857, 0.05873661, 0.49491693, 0.12407519, 0.85878075,
           0.22377223, 0.87735199, 0.65901561, 0.66421094, 0.12917705,
           0.00957544, 0.26947027, 0.72470909, 0.69390444, 0.96242346,
           0.23199632, 0.48313533, 0.34083276, 0.23007376, 0.6540411 ,
           0.32836486, 0.31655614, 0.22455553, 0.82357648, 0.21678286,
           0.16214261, 0.32728472, 0.17354589, 0.71079305, 0.08778531,
           0.15032938, 0.77877311, 0.87461913, 0.36241578, 0.57623361,
           0.80728739, 0.27496268, 0.31287885, 0.7851691 , 0.56392331])
```

```
list_plot(U[1:5000])
```



Un ejemplo hecho en SAGE

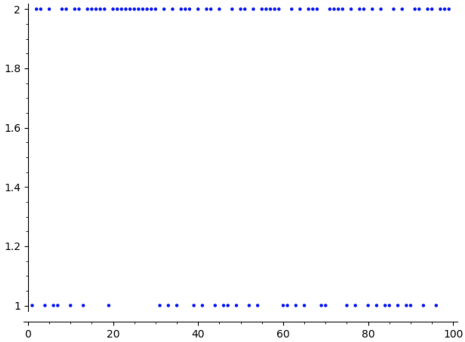
```
def X(n):
    if n==0:
        return Phi(U[0])
    else:
        return psi(X(n-1),U[n])
```

```
[X(0),X(1),X(2),X(3),X(50)]
```

```
[2, 1, 2, 2, 2]
```

Un ejemplo hecho en SAGE

```
list_plot([(k,X(k)) for k in range(1,100)])
```



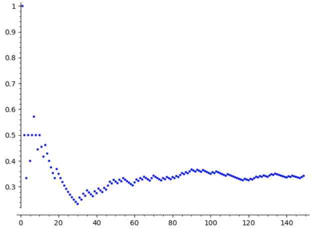
Un ejemplo hecho en SAGE

```
def Y(n):
    if X(n)==1:
        return 1
    else:
        return 0
```

```
def S(n):
    if n==0:
        return Y(0)
    else:
        return Y(n)+S(n-1)
```

Un ejemplo hecho en SAGE

```
list_plot([(k,S(k)/k) for k in range(1,150)])
```




```
list_plot([(k,S(k)/k) for k in range(1,250)])
```