Tipos de Cadenas de Markov y estado estacionario

Rodrigo Maranzana



Estado accesible:

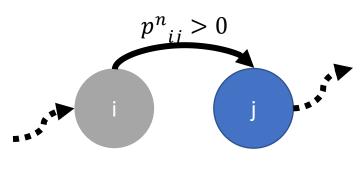
Se puede acceder a estado "j" desde "i" en n pasos.

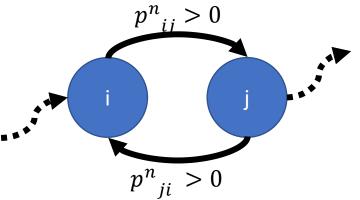
Estados comunicantes:

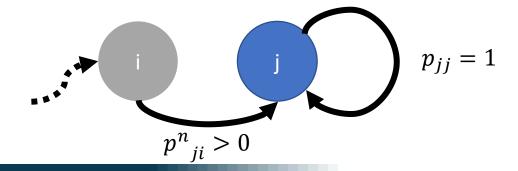
Ambos estados "i", "j" son accesibles entre sí.

Estado absorbente:

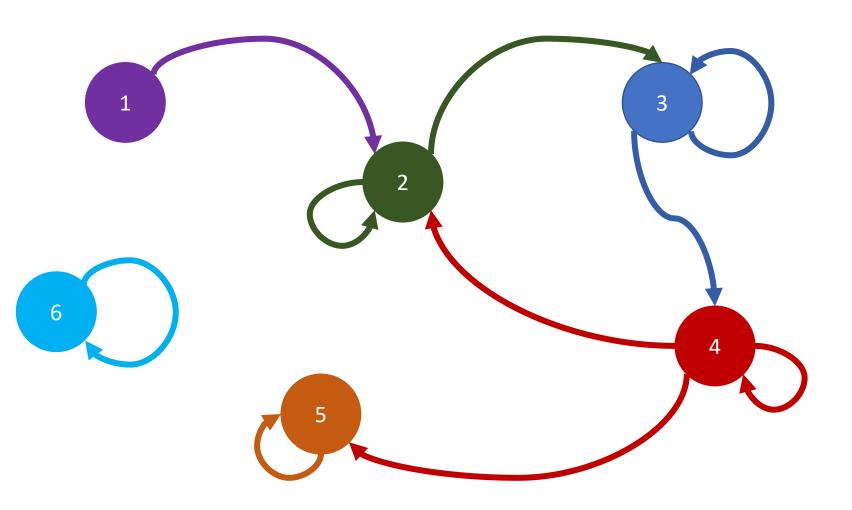
Una vez alcanzado no se puede escapar de él.







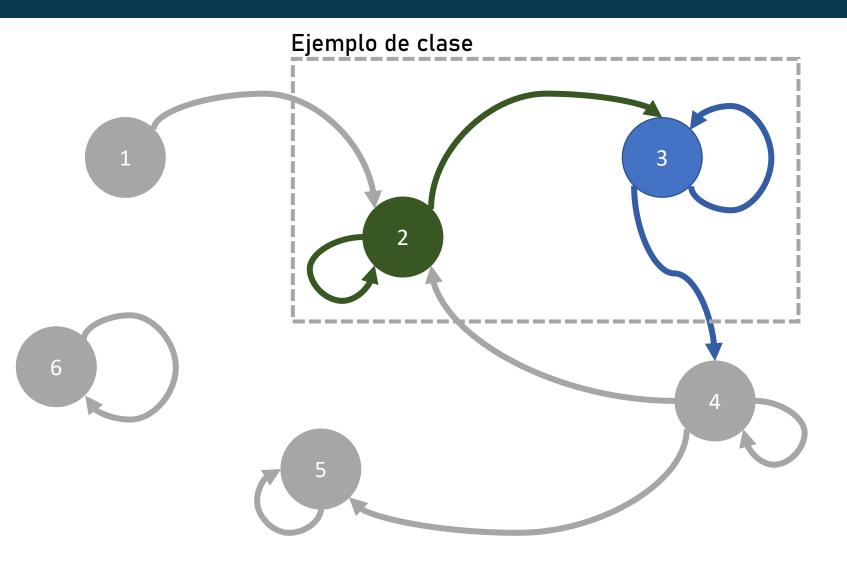




- Estados 1 y 6 no son accesibles desde ningún otro estado
- Estado 2 es accesible desde:
 - Estado 3
 - Estado 4
 - Estado 1
- Estado 2 y 4 son comunicantes.
- Estado 5 es absorbente.



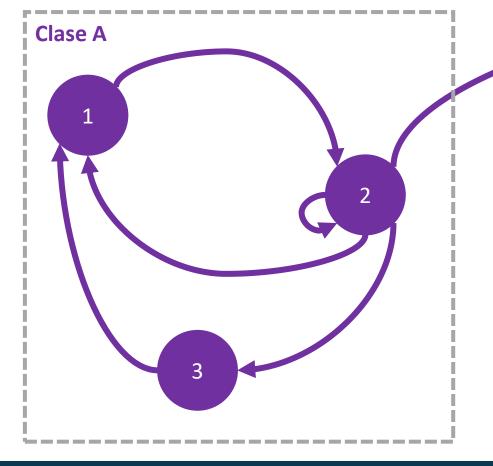
Clasificación de clases

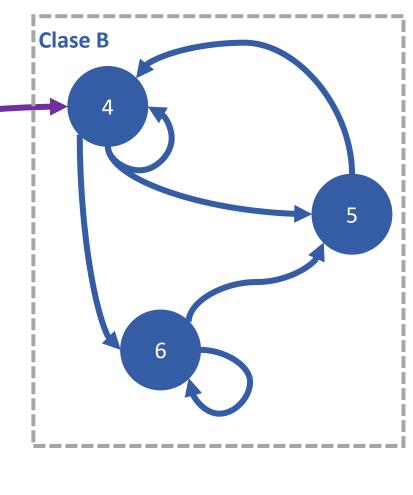


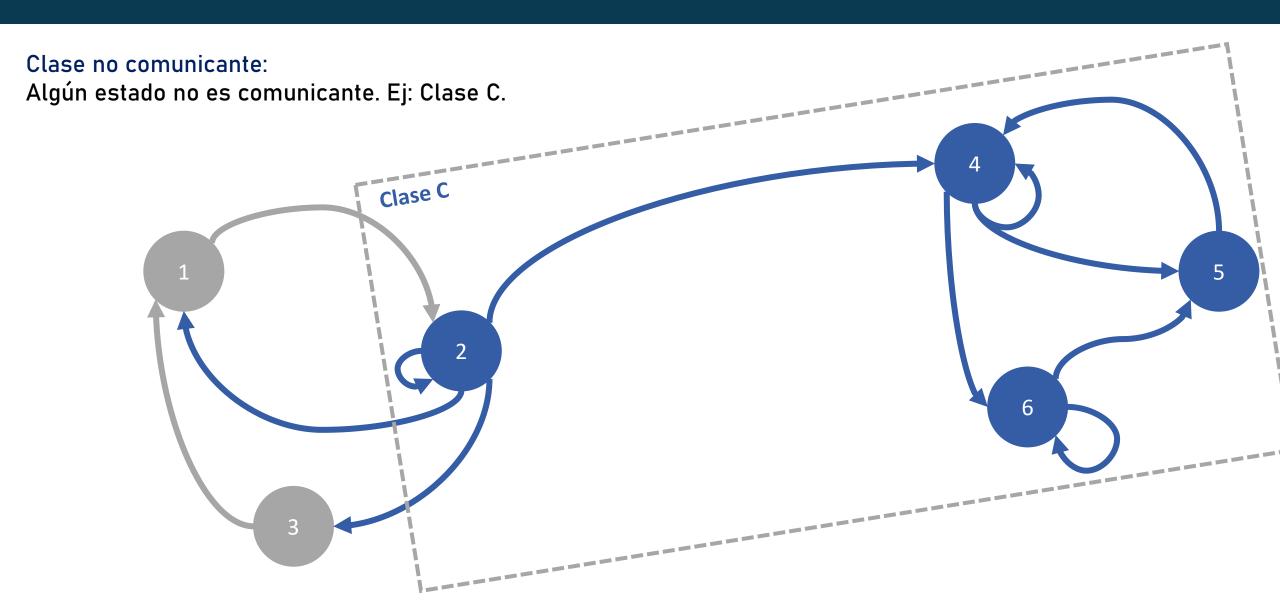
Clase: conjunto de estados.

Clase comunicante:

Todos sus estados son comunicantes. Ej: Clase A y B.

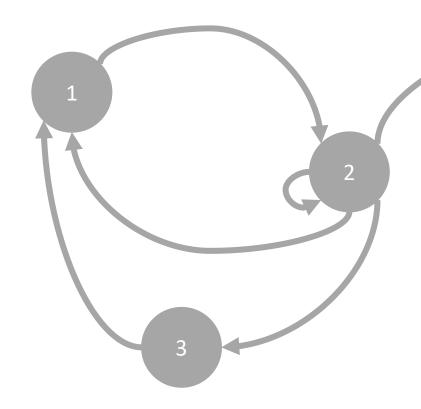


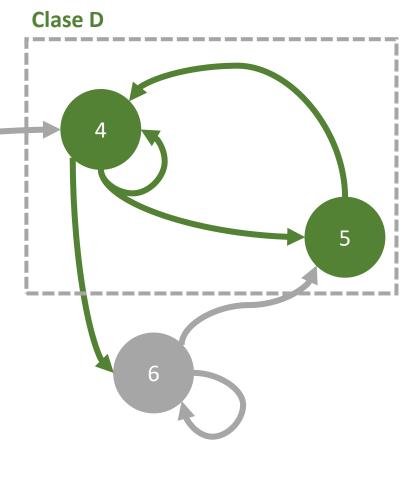




Clase recurrente:

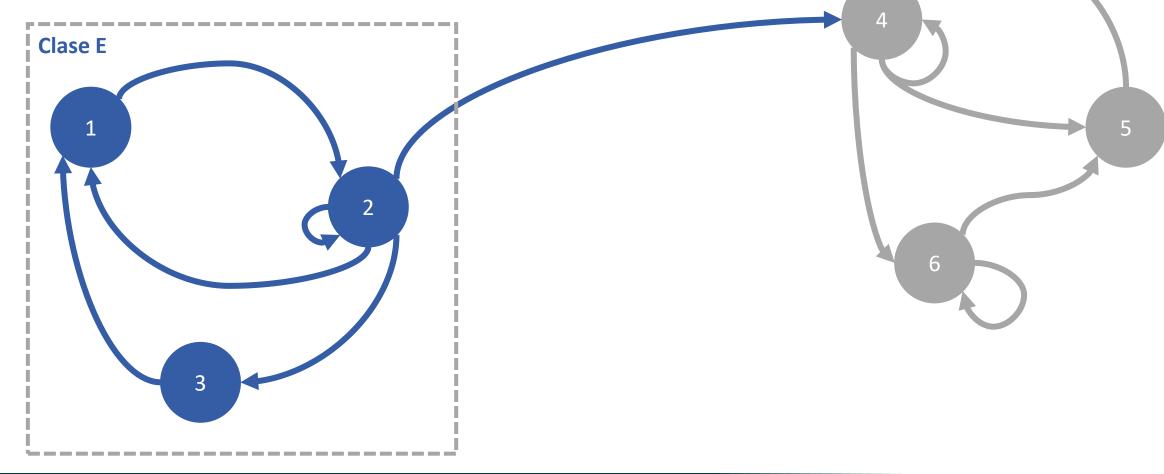
Siempre hay una probabilidad de regresar a la clase despues de n pasos. Ej: clase D.





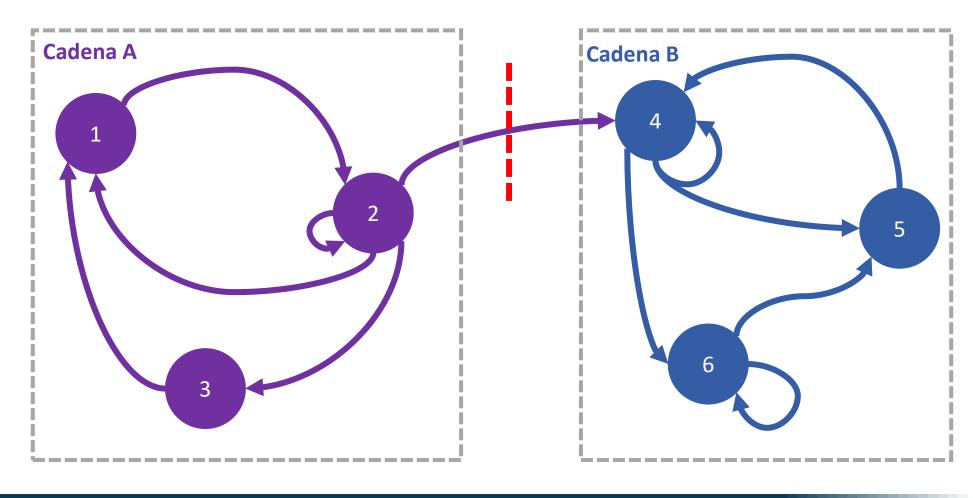
Clase transitoria:

Existe la probabilidad de nunca regresar a la clase después de n pasos. Ej: clase E.



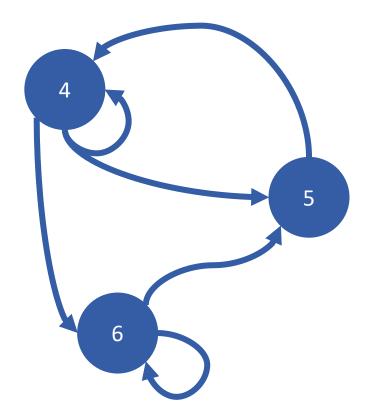
Reducibilidad

Una cadena es reducible, si se puede descomponer en dos o mas subgrafos, entre los cuales, es imposible transicionar en "n" pasos.



Reducibilidad

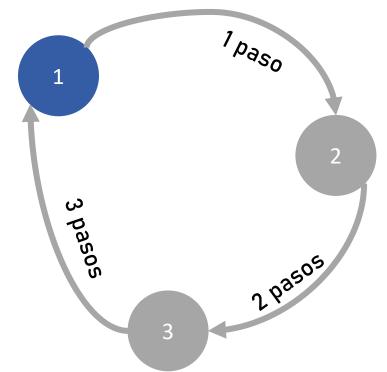
Una cadena es irreducible, si está formada por estados comunicantes, es decir, son recurrentes.



Periodicidad

El período d(i) de un estado "i", es el número de pasos que le toma a una cadena regresar al mismo estado "i". $d(i) \in \mathbb{N}$

Es el Máximo Común Divisor de todas las iteraciones "k" hasta lograr volver al estado.



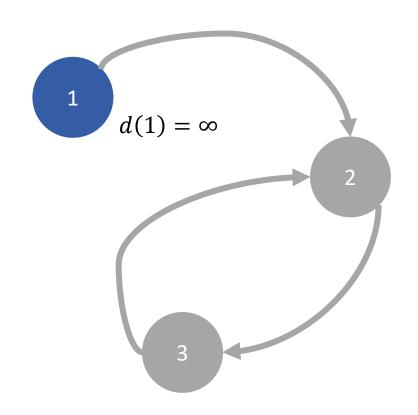
En este caso, $p^n_{11} > 0$, y retorna en $k = \{3, 6, 9, ..., 3 * (vuelta)\}$

Por lo tanto:

$$d(1) = 3$$

Periodicidad

Si un estado no es accesible a sí mismo en "n" pasos (transitorio). Es decir, $p^n_{\ ii}=0$ el período resulta:

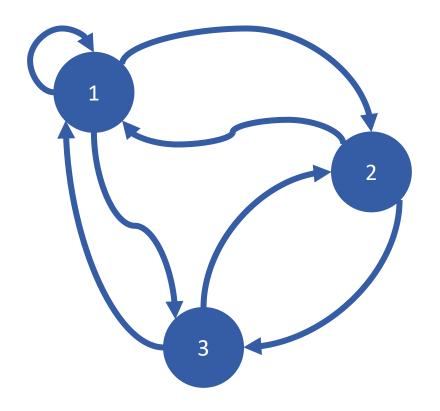


$$d(i) = \infty$$

Periodicidad

Si el período d(i) = 1, se dice que el estado es aperiodico

Ej:
$$d(1) = 1$$



Si una cadena tiene todos sus estados aperiodicos, se dice que la cadena de Markov es aperiódica.

En una cadena irreducible basta con que un estado sea aperiódico para que toda la cadena sea aperiódica.

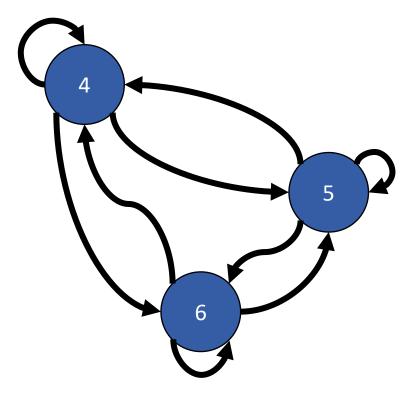
En una cadena irreducible periódica todos los estados tienen el mismo período.

Cadenas de Markov Ergódicas

Una cadena es ergódica si:

- Es irreducible: es una clase comunicante.
- Es aperiódica: no existe periodicidad.

¿Por qué es útil esta categoría? Garantiza la convergencia al estado estacionario, único, desde cualquier distribución inicial.

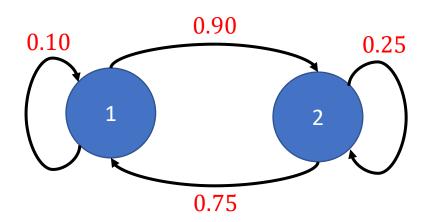


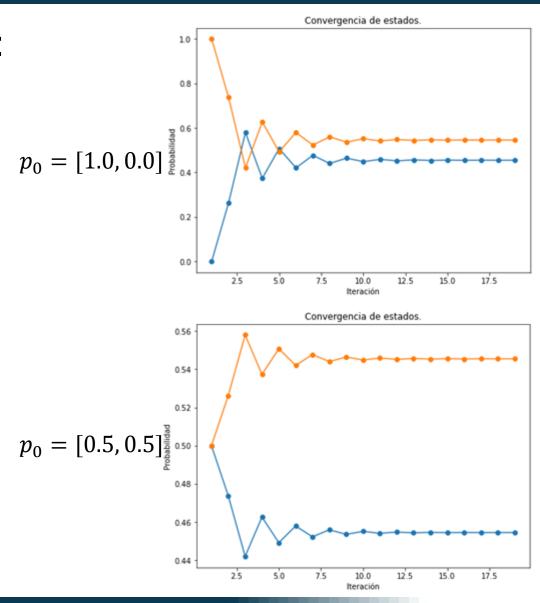
 Es un estado de equilibrio, en el que la probabilidad de estado se mantiene constante a través del tiempo, sin importar el estado inicial.

Cadenas sin estado estacionario único:

- Carecen de estado estacionario.
- Tienen distintos estados de convergencia dependiendo de la posición de inicio.

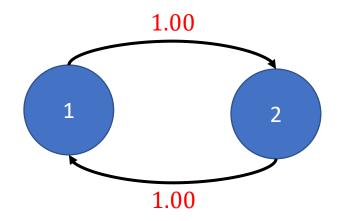
Grafo con estado estacionario:

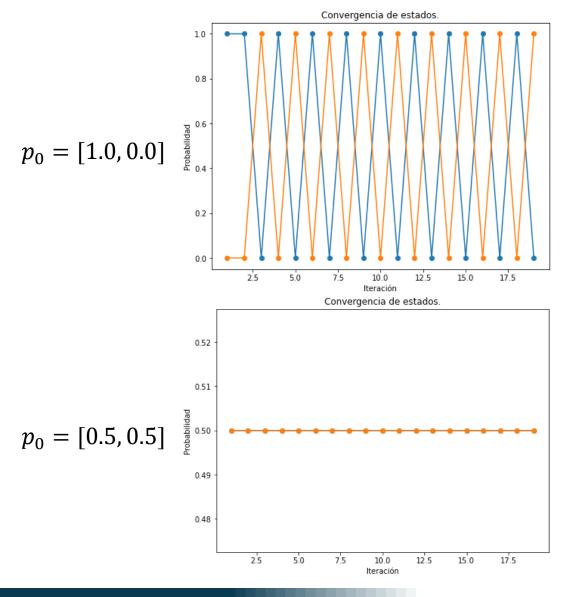




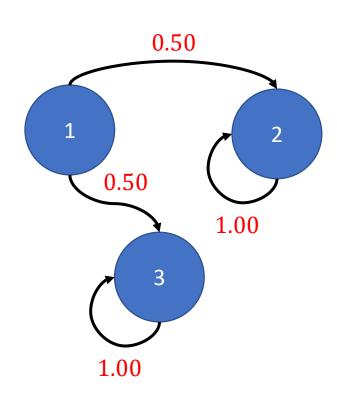


Grafo sin estado estacionario:

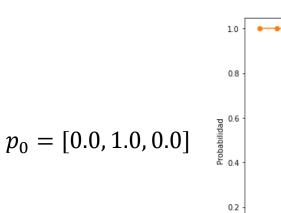


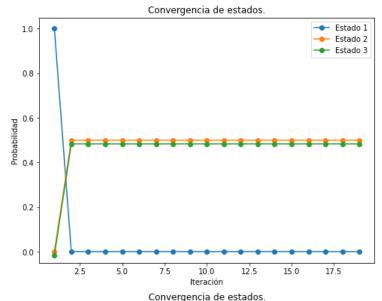


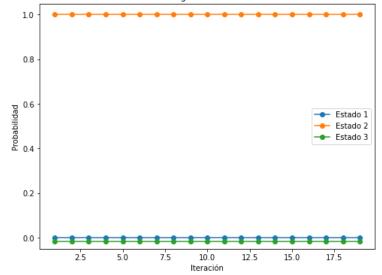
Grafo sin estado estacionario:



$$p_0 = [1.0, 0.0, 0.0]$$

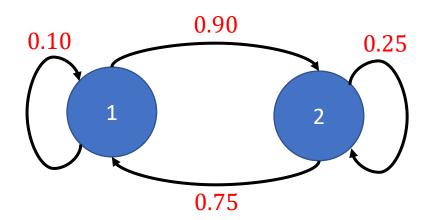


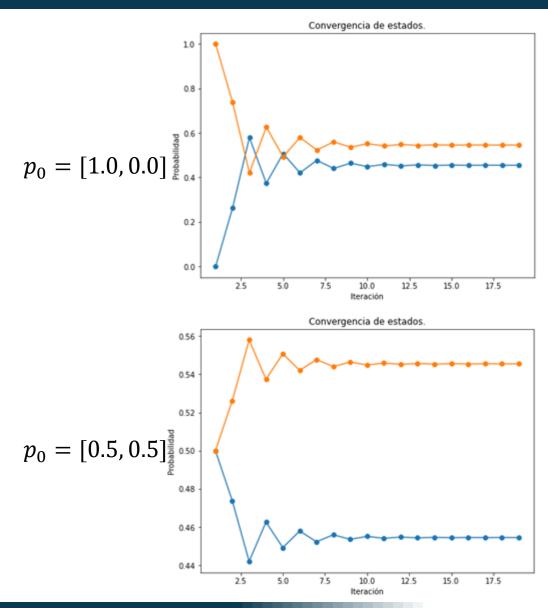






 Una cadena Ergódica garantiza estado estacionario.



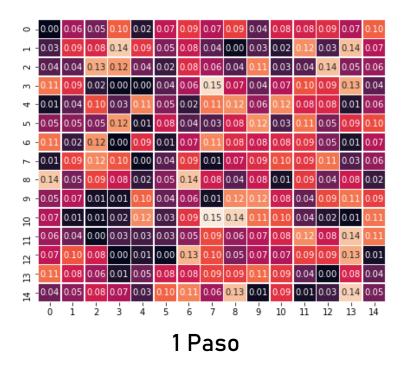




Matriz de Transición y Estado Estacionario

- El estado estacionario no depende del vector de estado inicial.
- Podemos identificarlo directamente sobre la matriz de transición.

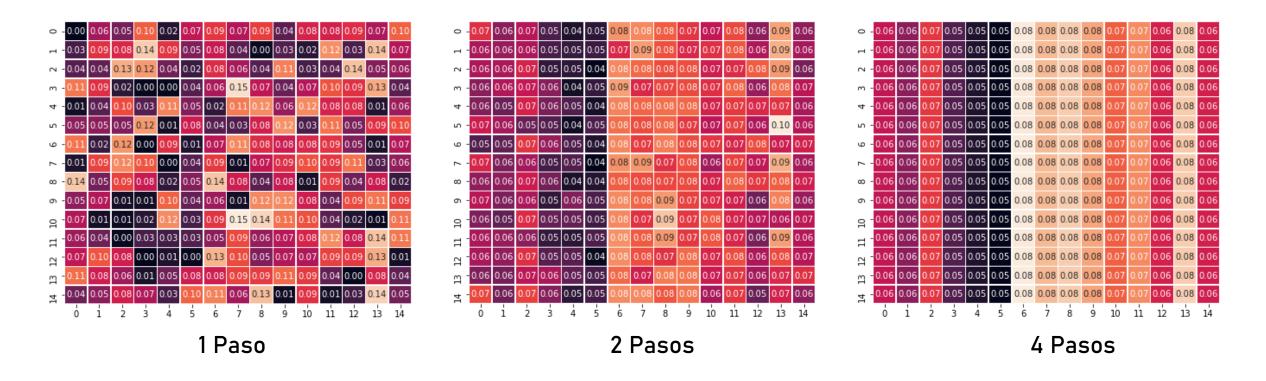
Ejemplo: matriz de transición de 15 estados:





Matriz de Transición y Estado Estacionario

Al aumentar los pasos y acercarnos al estacionario, la probabilidad de ir de "i" a "j" se estabiliza.



Matriz de Transición y Estado Estacionario

Por lo tanto, se cumple:

Dado el estado estacionario:

$$\pi = \begin{bmatrix} \pi_0 & \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_n \end{bmatrix}$$

La matriz de transición resulta:

$$\lim_{n\to\infty}P^n=\begin{bmatrix}\pi_0 & \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_n\\ \pi_0 & \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_n\\ \pi_0 & \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_n\\ \dots & \dots & \dots & \dots\\ \pi_0 & \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_n\end{bmatrix}$$
 Las filas de la matriz de transición tendiendo a infinitos pasos, muestran el estado estacionario.
$$\begin{bmatrix}\pi_0 & \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_n\\ \pi_0 & \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_n\end{bmatrix}$$



Cálculo de estado estacionario (steady-state)

Formas de calcular el estado estacionario en Cadenas Ergódicas:

- Método de fuerza bruta.
- Sistema de ecuaciones Chapman-Kolmógorov.
- Flujos probabilísticos.
- Teorema de Perron-Frobenius



Cálculo de estado estacionario con fuerza bruta

 Evolucionamos la cadena hasta lograr el estado estable.

Repetimos mientras $\Delta > tol$:

$$p_{i+1} = p_i T^1$$

$$\Delta = \|p_{i+1} - p_i\|_2$$
Siguiente i

Siendo:

- p_i: vector de estado.
- T_st: matriz de transición de 1 paso.
- tol: tolerancia de corte.

```
tol = 10e-4
norma = 999
contador = 1
while norma > tol:
   p_imas1 = np.dot(p_i, T_st)
   norma = np.linalg.norm(dif)
    p_i = p_i mas 1
    contador += 1
```

Cálculo de estado estacionario con fuerza bruta

• Ejemplo:

```
# Matriz de transición.

T_st = np.array(
       [[0.10, 0.90],
       [0.75, 0.25]]
)

# Estado inicial.
p_i = [0.5, 0.5]
```

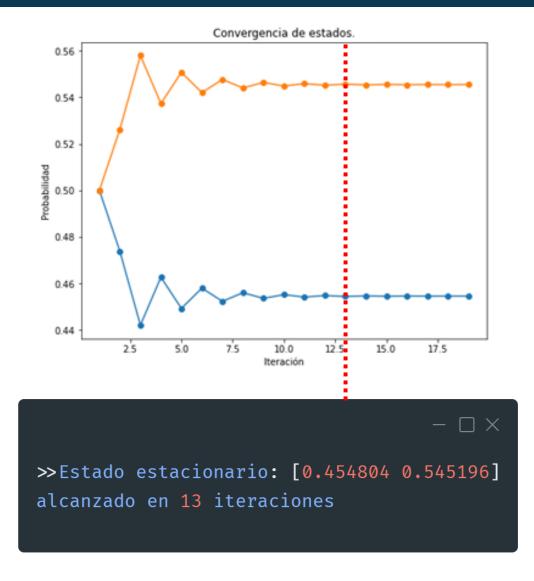
Siendo:

- p_i: vector de estado.
- T_st: matriz de transición.
- tol: tolerancia de corte.

```
tol = 10e-4
norma = 999
contador = 1
while norma > tol:
   p imas1 = np.dot(p i, T st)
   norma = np.linalg.norm(dif)
    p i = p imas1
    contador += 1
```

Cálculo de estado estacionario con fuerza bruta

• Ejemplo:





Sabemos que tendiendo al infinito, si hay distribución estacionaria, el vector de estado se estabiliza:

$$\lim_{n\to\infty} p_{n+1} = \lim_{n\to\infty} p_n T$$

Esto implica que p_{n+1} y p_n se igualan.

$$\pi T = \pi$$

Condición de estado estable:

$$\pi T = \pi$$

$$(\pi_1 \quad \pi_2 \quad \pi_3 \quad \dots \quad \pi_n) \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & \dots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & \dots & p_{2n} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & \dots & p_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{n1} & p_{n2} & p_{n3} & \dots & p_{nn} \end{bmatrix} = (\pi_1 \quad \pi_2 \quad \pi_3 \quad \dots \quad \pi_n)$$

Armamos sistema de ecuaciones:

$$p_{11} \pi_1 + p_{21} \pi_2 + p_{31} \pi_3 + \dots + p_{n1} \pi_n = \pi_1$$
 $p_{12} \pi_1 + p_{22} \pi_2 + p_{32} \pi_3 + \dots + p_{n2} \pi_n = \pi_2$
 $p_{13} \pi_1 + p_{23} \pi_2 + p_{33} \pi_3 + \dots + p_{n3} \pi_n = \pi_3$
...
 $p_{1n} \pi_1 + p_{2n} \pi_2 + p_{3n} \pi_3 + \dots + p_{nn} \pi_n = \pi_n$



$$p_{11} \pi_1 + p_{21} \pi_2 + p_{31} \pi_3 + \dots + p_{n1} \pi_n = \pi_1$$

$$p_{12} \pi_1 + p_{22} \pi_2 + p_{32} \pi_3 + \dots + p_{n2} \pi_n = \pi_2$$

$$p_{13} \pi_1 + p_{23} \pi_2 + p_{33} \pi_3 + \dots + p_{n3} \pi_n = \pi_3$$

$$\dots$$

$$p_{1n} \pi_1 + p_{2n} \pi_2 + p_{3n} \pi_3 + \dots + p_{nn} \pi_n = \pi_n$$

$$(p_{11}-1) \pi_1 + p_{21}\pi_2 + p_{31}\pi_3 + \dots + p_{n1}\pi_n = 0$$

$$p_{12} \pi_1 + (p_{22}-1)\pi_2 + p_{32}\pi_3 + \dots + p_{n2}\pi_n = 0$$

$$p_{13} \pi_1 + p_{23}\pi_2 + (p_{33}-1)\pi_3 + \dots + p_{n3}\pi_n = 0$$

$$\dots$$

$$p_{1n} \pi_1 + p_{2n}\pi_2 + p_{3n}\pi_3 + \dots + (p_{nn}-1)\pi_n = 0$$

Forma matricial:

$$\begin{bmatrix} (p_{11}-1) & p_{21} & p_{31} & \dots & p_{1n} \\ p_{12} & (p_{22}-1) & p_{32} & \dots & p_{2n} \\ p_{13} & p_{23} & (p_{33}-1) & \dots & p_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{1n} & p_{n2} & p_{n3} & \dots & (p_{nn}-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \pi_1 \\ \pi_2 \\ \pi_3 \\ \dots \\ \pi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ \pi_n \end{bmatrix}$$
 Sistema Homogéneo Det(Matriz) = 0 -> Compatible indeterminado



Condición adicional:

$$\sum_{i} \pi_{i} = 1 \rightarrow \pi_{1} + \pi_{2} + \pi_{3} + \dots + \pi_{n} = 1$$

Forma matricial con condición adicional:

$$\begin{bmatrix} (p_{11}-1) & p_{21} & p_{31} & \dots & p_{1n} \\ p_{12} & (p_{22}-1) & p_{32} & \dots & p_{2n} \\ p_{13} & p_{23} & (p_{33}-1) & \dots & p_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{1n} & p_{n2} & p_{n3} & \dots & (p_{nn}-1) \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \pi_1 \\ \pi_2 \\ \pi_3 \\ \dots \\ \pi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Al resolver este sistema de ecuaciones, obtenemos el vector de estado estacionario π



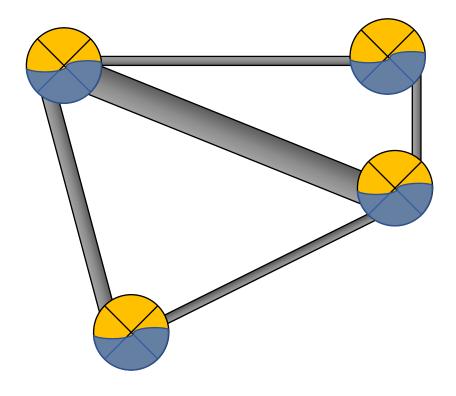
Entendemos la dinámica de la cadena como un grafo de flujo.

Podemos imaginarlo como un grafo en donde:



- Los nodos son medidores de fluido en un punto.
- Los arcos son tubos de transferencia de fluido.
- 💓 🛮 La probabilidad de estado es la medición de fluido que pasa por el medidor.
- La probabilidad de transición es el caudal de fluido que puede transportar un tubo de un tanque a otro, expresado en % del medidor del que parte.



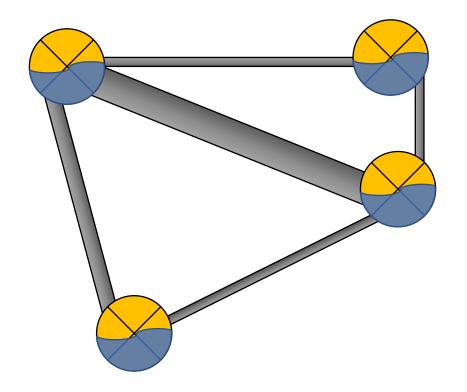


- Dado un estado inicial, el fluido se estabiliza dentro de la red.
- Esto representa el estado estacionario, las probabilidades de estado se estabilizan.

Nota: hay que tener en cuenta que el dibujo muestra un grafo no direccionado sin ciclos. Estamos tratando de resolver grafos direccionados con ciclos.

Solo sirve para ganar intuición sobre el problema.





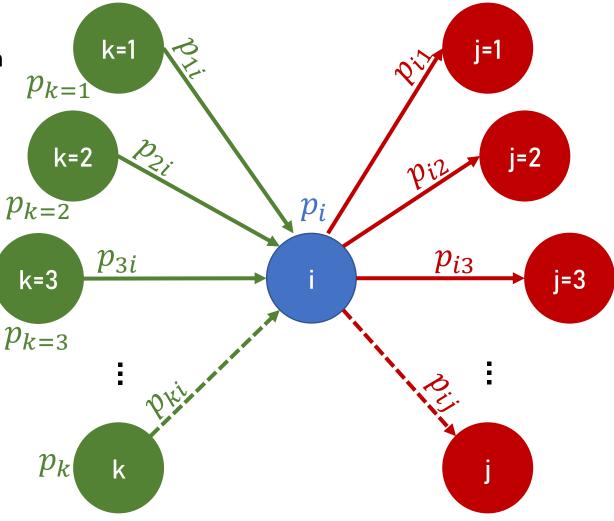
 Importante: el fluido nunca queda en los medidores, siempre los abandona en el siguiente instante de tiempo.

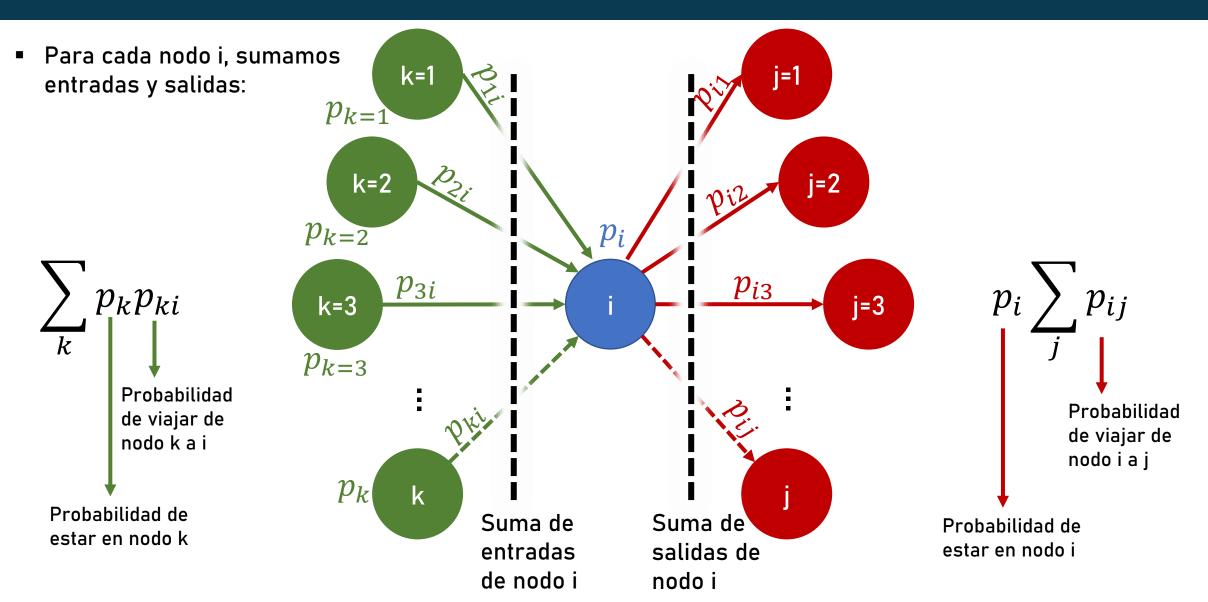
"Todo lo que entra de un medidor sale"

Objeto de análisis: medidor



 Centramos el análisis en cada nodo i, como un balance de flujo:





Dado que es un balance de masa, todo lo que entra a un nodo "i" sale del mismo nodo hacia algún lado.

suma de entradas = suma de salidas

$$\sum_{k} p_{k} p_{ki} = p_{i} \sum_{j} p_{ij} \ \forall i$$

Completamos con la condición de probabilidad de estado:

$$\sum_{i} p_i = 1$$

La resolución de este sistema de ecuaciones lleva al estacionario.

suma de entradas = suma de salidas

$$\frac{p_1p_{11}}{p_1p_{11}} + p_2p_{21} + p_3p_{31} + \dots + p_np_{n1} = \frac{p_1p_{11}}{p_1p_{12}} + p_1p_{12} + p_1p_{13} + \dots + p_1p_{1n}$$

$$p_1p_{12} + \frac{p_2p_{22}}{p_2p_{22}} + p_3p_{32} + \dots + p_np_{n2} = p_2p_{21} + \frac{p_2p_{22}}{p_2p_{22}} + p_2p_{23} + \dots + p_2p_{2n}$$

$$p_1p_{13} + p_2p_{23} + \frac{p_3p_{33}}{p_3p_{33}} + \dots + p_np_{n3} = p_3p_{31} + p_3p_{32} + \frac{p_3p_{33}}{p_3p_{33}} + \dots + p_3p_{3n}$$

$$\dots$$

$$p_1p_{1n} + p_2p_{2n} + p_3p_{3n} + \dots + \frac{p_np_{nn}}{p_np_{nn}} = p_np_{n1} + p_np_{n2} + p_np_{n3} + \dots + \frac{p_np_{nn}}{p_np_{nn}}$$

$$p_1 + p_2 + p_3 + \dots + p_n = 1$$

La resolución de este sistema de ecuaciones lleva al estacionario.

$$p_{2}p_{21} + p_{3}p_{31} + \dots + p_{n}p_{n1} = p_{1} \underbrace{(p_{12} + p_{13} + \dots + p_{1n})}_{p_{1}p_{12} + p_{3}p_{32} + \dots + p_{n}p_{n2}}_{p_{1}p_{13} + p_{2}p_{23} + \dots + p_{n}p_{n3}} = p_{2} \underbrace{(p_{21} + p_{23} + \dots + p_{2n})}_{p_{1}p_{13} + p_{2}p_{23} + \dots + p_{n}p_{n3}}_{= (1 - p_{22})} = (1 - p_{22})$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$p_{1}p_{1n} + p_{2}p_{2n} + p_{3}p_{3n} + \dots = p_{n} \underbrace{(p_{n1} + p_{n}p_{n2} + p_{n}p_{n3} + \dots)}_{= (1 - p_{nn})}$$

$$\vdots$$

$$p_{1} + p_{2} + p_{3} + \dots + p_{n} = 1$$

¡Sistema de ecuaciones con Chapman-Kolmógorov!

$$p_{1}(p_{11} - 1) + p_{2}p_{21} + p_{3}p_{31} + \dots + p_{n}p_{n1} = 0$$

$$p_{1}p_{12} + p_{2}(p_{22} - 1) + p_{3}p_{32} + \dots + p_{n}p_{n2} = 0$$

$$p_{1}p_{13} + p_{2}p_{23} + p_{3}(p_{33} - 1) + \dots + p_{n}p_{n3} = 0$$
...

$$p_1 p_{1n} + p_2 p_{2n} + p_3 p_{3n} + p_n (p_{nn} - 1) = 0$$

$$p_1 + p_2 + p_3 + \dots + p_n = 1$$

¿Por qué sería útil esta variante si llevan a lo mismo?

Conceptualmente el problema de flujo se puede resolver con optimización dinámica o algoritmos específicos de optimización de flujo.

Partiendo de Chapman-Kolmogórov:

$$p_t T = p_{t+1}$$

 p_{n+1} y p_n son vectores fila. Si trasponemos T podemos convertirlos en vectores columna:

$$T^T p_t = p_{t+1}$$

$$\begin{bmatrix} p_{11} & p_{21} & p_{31} & \dots & p_{1n} \\ p_{12} & p_{22} & p_{32} & \dots & p_{2n} \\ p_{13} & p_{23} & p_{33} & \dots & p_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{1n} & p_{2n} & p_{3n} & \dots & p_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1(t) \\ p_2(t) \\ p_3(t) \\ \dots \\ p_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1(t+1) \\ p_2(t+1) \\ p_3(t+1) \\ \dots \\ p_n(t+1) \end{bmatrix}$$

Los vectores de estado "p":

- Cambian su dirección y norma al iterar con la matriz de transición.
- Excepto en el estacionario.

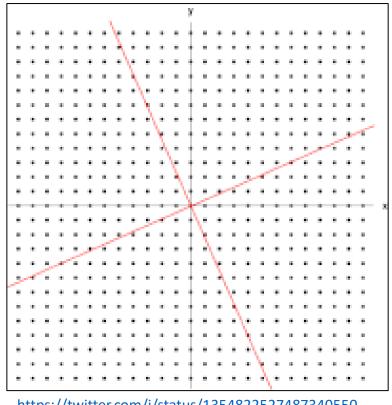
Esta propiedad se puede representar con la ecuación de autovalores/autovectores:

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v}$$

 \vec{v} : autovector

 λ : autovalor

A: matriz nxn



https://twitter.com/i/status/1354822527487340550



Teorema de Perron-Frobenius:

- Dada una matriz no negativa e irreducible, existe el mayor de todos los autovalores, dominante y no negativo.
- El autovalor dominante corresponde a un autovector denominado: vector de Perron-Frobenius.

- Este vector representa la distribución estacionaria.
- En cadenas de Markov Ergódicas el autovalor dominante es 1.

Una matriz ergódica converge a un único estado estacionario.

Al calcular los autovalores de la matriz T^T :

$$eigen(T^T) = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \dots \\ \lambda_n \end{bmatrix}$$

Siempre existe un autovalor $\lambda_i=1$, su autovector \vec{v}_i escalado representa el estado estacionario.



Ejemplo simple anterior:

$$T = \begin{bmatrix} 0.10 & 0.90 \\ 0.75 & 0.25 \end{bmatrix}$$

1) Trasponemos la matriz de transición:

$$T^T = \begin{bmatrix} 0.10 & 0.75 \\ 0.90 & 0.25 \end{bmatrix}$$

2) Calculamos los autovalores:

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

Siendo $A = T^T$

Calculamos el argumento:

$$A - \lambda I = \begin{bmatrix} 0.10 & 0.75 \\ 0.90 & 0.25 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.10 - \lambda & 0.75 \\ 0.90 & 0.25 - \lambda \end{bmatrix}$$

Resolvemos el determinante:

$$\det\left(\begin{bmatrix} 0.10 - \lambda & 0.75 \\ 0.90 & 0.25 - \lambda \end{bmatrix}\right) = (0.10 - \lambda)(0.25 - \lambda) - (0.75 * 0.90)$$



2) Calculamos los autovalores:

$$\det\left(\begin{bmatrix} 0.10 - \lambda & 0.75 \\ 0.90 & 0.25 - \lambda \end{bmatrix}\right) = (0.10 - \lambda)(0.25 - \lambda) - (0.75 * 0.90) = 0$$

$$\lambda^2 - 0.35\lambda - 0.65 = 0$$

Resolvemos:

$$\lambda_1 = 1$$

$$\lambda_2 = -0.65$$

2) Calculamos el autovector para $\lambda_1 = 1$:

$$(A - \lambda_1 I) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Siendo $A = T^T$

$$\begin{bmatrix} 0.10 - \lambda_1 & 0.75 \\ 0.90 & 0.25 - \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -0.90 & 0.75 \\ 0.90 & -0.75 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

2) Calculamos el autovector para $\lambda_1 = 1$:

$$\begin{bmatrix} -0.90 & 0.75 \\ 0.90 & -0.75 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} -0.90x + 0.75y = 0\\ 0.90x - 0.75y = 0 \end{cases}$$

Resolvemos el sistema indeterminado:

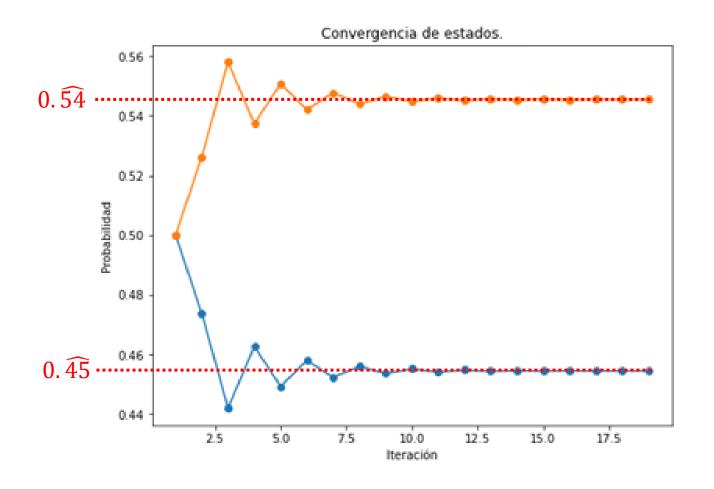
$$\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} 0.8333 \\ 1 \end{bmatrix} u, \text{ si } u \in \mathbb{R}$$



3) Escalamos
$$\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} 0.8333 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\pi = \frac{\vec{v}_1}{\|\vec{v}_1\|_1} = \begin{bmatrix} 0.8\hat{3}/1.8\hat{3} \\ 1/1.8\hat{3} \end{bmatrix}$$

$$\pi = [0.\widehat{45}, 0.\widehat{54}]$$



Cálculo con Python:

```
T = np.array(
    [[0.10, 0.90],
     [0.75, 0.25]
TT = T.T
w, v = np.linalg.eig(TT)
```

```
print(w)
>> array([-0.65, 1. ])
print(v)
>> array([[-0.70710678, -0.6401844 ],
          [ 0.70710678, -0.76822128]])
```

Autovector

a autovalor 1

correspondiente

Cálculo con Python:

```
# El autovector de interés está en la columna de los autovectores correspondiente al autovalor 1.

v_steady = v[:, 1]

print(v_steady)

>> array([-0.6401844 , -0.76822128])
```

```
# Normalizamos
steady_state = v_steady / np.sum(v_steady)
print(f'Estado estacionario: {steady_state}')
>> Estado estacionario: [0.45454545 0.54545455]
```

Spectral Gap

La velocidad de convergencia hacia el estacionario se puede medir con autovalores.

Spectral gap: mide la separación entre los dos mayores autovalores de la matriz de transición.

$$sg = 1 - |\lambda_2|$$

Siendo λ_2 , el segundo autovalor más grande.

sg ↑: convergencia rápida.

sg ↓: convergencia lenta.



Spectral Gap

Ejemplo:

Cadena A:

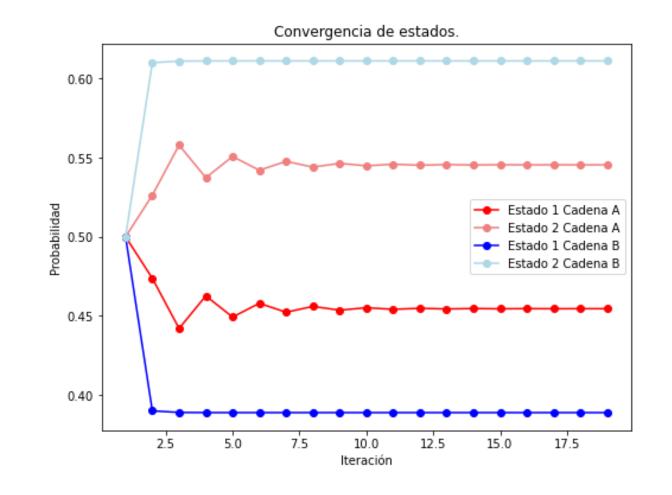
$$\lambda_1 = 1$$
$$\lambda_2 = -0.65$$

$$sg = 1 - |\lambda_2| = 1 - |-0.65| = 0.35$$

Cadena B:

$$\lambda_1 = 1$$
$$\lambda_2 = 0.1$$

$$sg = 1 - |\lambda_2| = 1 - |0.1| = 0.90$$



Caso google PageRank

Algoritmo de ranking de páginas del buscador.

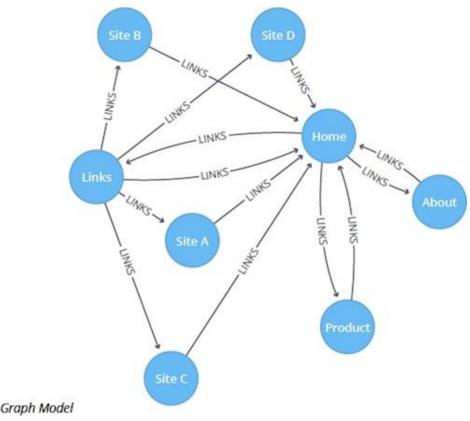
Existe un grafo que explica el viaje de los usuarios por páginas web.

Este grafo suele ser una matriz no ergódica.

El algoritmo la convierte en ergódica y calcula el estacionario para asignar el score.

Brin and Page (1998), "The Anatomy of a Large-Scale Hypertextual Web Search Engine" https://research.google/pubs/pub334/

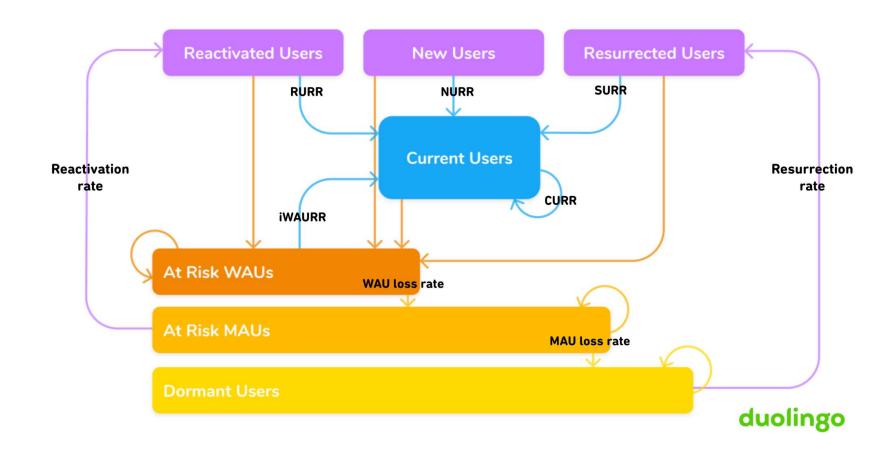




https://neo4j.com/blog/graph-algorithms-neo4j-pagerank



Caso Duolingo: retención de usuarios con Markov



Fuente: Duolingo Blog (2023) Meaningful metrics: How data sharpened the focus of product teams "https://blog.duolingo.com/growth-model-duolingo/

