

Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Instituto Alberto Luiz Coimbra de  
Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia



Programa de Engenharia de Sistemas e  
Computação

CPS767 - Algoritmos de Monte Carlo e Cadeias de Markov  
Prof. Daniel Ratton Figueiredo

*2ª Lista de Exercícios*

Luiz Henrique Souza Caldas  
email: lhscaldas@cos.ufrj.br

5 de maio de 2025

## Questão 1: Passeios aleatórios enviesados

Considere um grafo não direcionado  $G = (V, E)$  com peso nas arestas, tal que  $w_{ij} > 0$  para toda aresta  $(i, j) \in E$ . Considere um andarilho aleatório que caminha por este grafo em tempo discreto, mas cujos passos são enviesados pelos pesos das arestas. Em particular, a probabilidade do andarilho ir do vértice  $i$  para o vértice  $j$  é dada por  $w_{ij}/W_i$ , onde  $W_i = \sum_j w_{ij}$  (soma dos pesos das arestas incidentes ao vértice  $i \in V$ ). Temos assim um passeio aleatório enviesado linearmente pelos pesos das arestas.

1. Mostre que este passeio aleatório induz uma cadeia de Markov calculando a matriz de transição de probabilidade.

Conforme o enunciado, temos que a probabilidade de transição do estado  $i$  para o estado  $j$  é dada por:

$$P_{ij} = \frac{w_{ij}}{W_i},$$

onde  $W_i = \sum_j w_{ij}$  é a soma dos pesos das arestas incidentes ao vértice  $i$  e  $w_{ij} > 0$  é o peso da aresta que liga os vértices  $i$  e  $j$ .

Como  $w_{ij} > 0$  para todas as arestas  $(i, j) \in E$  e  $W_i > 0$ , temos que  $P_{ij} \geq 0$ , sendo estritamente positivo sempre que houver uma aresta entre  $i$  e  $j$ .

Além disso,

$$\sum_j P_{ij} = \sum_j \frac{w_{ij}}{W_i} = \frac{1}{W_i} \sum_j w_{ij} = \frac{W_i}{W_i} = 1$$

Assim, temos que a soma das probabilidades de transição do estado  $i$  para todos os outros estados  $j$  é igual a 1, o que caracteriza uma matriz de transição de probabilidade.

Portanto, o passeio aleatório enviesado induz uma cadeia de Markov.

2. Determine a distribuição estacionária desta cadeia de Markov (dica: use o método da inspeção).

Uma distribuição estacionária  $\pi$  é uma distribuição de probabilidade que satisfaz a seguinte equação:

$$\pi P = \pi$$

Para cada estado  $i$  da distribuição estacionária, temos que:

$$\pi_i = \sum_j \pi_j P_{ji}$$

Usando o resultado do item anterior, temos que:

$$\pi_i = \sum_j \pi_j \frac{w_{ji}}{W_j}$$

Supondo que a distribuição estacionária é proporcional à soma do peso das arestas incidentes ao vértice  $j$ , ou seja,  $\pi_j = ZW_j$ , onde  $Z > 0$  é uma constante, temos que:

$$\pi_i = \sum_j (ZW_j) \frac{w_{ji}}{W_j} = Z \sum_j w_{ji}$$

Como o grafo é não direcionado, temos que  $w_{ij} = w_{ji}$ , ou seja:

$$\pi_i = Z \sum_j w_{ji} = Z \sum_j w_{ij} = ZW_i$$

Porém, sabemos que  $\sum_k \pi_k = 1$ , ou seja:

$$\sum_k \pi_k = \sum_k ZW_k = 1 \quad \Rightarrow \quad Z = \frac{1}{\sum_k W_k}$$

Portanto, a distribuição estacionária é dada por:

$$\pi_i = \frac{W_i}{\sum_k W_k}$$

3. Determine se esta cadeia de Markov é reversível no tempo.

Uma Cadeia de Markov é dita reversível no tempo se, e somente se, satisfaz a equação de fluxo de massa de probabilidade:

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$$

Aplicando a distribuição estacionária que encontramos no item anterior, temos que:

$$\pi_i P_{ij} = \frac{W_i}{\sum_k W_k} \cdot \frac{w_{ij}}{W_i} = \frac{w_{ij}}{\sum_k W_k} \quad \text{e} \quad \pi_j P_{ji} = \frac{W_j}{\sum_k W_k} \cdot \frac{w_{ji}}{W_j} = \frac{w_{ji}}{\sum_k W_k}$$

Como  $w_{ij} = w_{ji}$ , temos que:

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$$

Portanto, a cadeia de Markov é reversível no tempo.

## Questão 2: Convergência de passeios aleatórios

Considere um passeio aleatório preguiçoso (com  $p = 1/2$ ) caminhando sobre um grafo com  $n$  vértices. Estamos interessados em entender a convergência da distribuição  $\pi(t)$  em diferentes grafos. Assuma que o passeio sempre inicia sua caminhada no vértice 1, ou seja,  $\pi_1(0) = 1$ . Considere os seguintes grafos: grafo em anel ( $n = 125$ ), árvore binária cheia ( $n = 127$ ), grafo em reticulado (grid) com duas dimensões ( $n = 121$ ).

1. Para cada grafo, construa a matriz de transição de probabilidade (ou seja, determine  $P_{ij}$  para todo vértice  $i, j$  do grafo). Atenção com a numeração dos vértices!

Independente do grafo, a matriz de transição de probabilidade  $P$  é dada por:

$$P_{ij} = \begin{cases} 1/2 & \text{se } i = j \\ 1/2d_i & \text{se } [i \neq j] \wedge [(i, j) \in E] \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

onde  $d_i$  é o grau do vértice  $i$  e  $E$  é o conjunto de arestas do grafo, ou seja, pares  $(i, j)$  que representam arestas entre os vértices  $i$  e  $j$ , se a aresta existir.

- Grafo em anel ( $n = 125$ ):

$$d_i = 2 \quad \forall i \in \{1, \dots, 125\}$$

$$P_{ij} = \begin{cases} 1/2 & \text{se } i = j \\ 1/4 & \text{se } [i \neq j] \wedge [(i, j) \in E] \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- Grafo em árvore binária cheia ( $n = 127$ ):

Começando a numeração do nó raiz como 1, temos:

$$2i \leq 127 \quad \Rightarrow \quad i \leq 63.5$$

Isso significa que os nós  $i \in \{2, \dots, 63\}$  são nós internos, enquanto os nós  $i \in [64, 127]$  são folhas. Assim, temos:

$$d_i = \begin{cases} 2 & \text{se } i \text{ é raiz } (i = 1) \\ 3 & \text{se } i \text{ é nó interno } (i \in \{2, \dots, 63\}) \\ 1 & \text{se } i \text{ é folha } (i \in \{64, \dots, 127\}) \end{cases}$$

$$P_{ij} = \begin{cases} 1/2 & \text{se } i = j \\ 1/4 & \text{se } [i \neq j] \wedge [(i, j) \in E] \wedge [i = 1] \quad (\text{raiz}) \\ 1/6 & \text{se } [i \neq j] \wedge [(i, j) \in E] \wedge [i \in \{2, \dots, 63\}] \quad (\text{nós internos}) \\ 1/2 & \text{se } [i \neq j] \wedge [(i, j) \in E] \wedge [i \in \{64, \dots, 127\}] \quad (\text{folhas}) \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- Grafo em reticulado (grid) com duas dimensões ( $n = 121$ ):

Numerando os vértices de forma crescente da esquerda para a direita e de cima para baixo, temos:

$$d_i = \begin{cases} 2 & \text{se } i \in \{1, 11, 111, 121\} \quad (\text{cantos}) \\ 3 & \text{se } \begin{cases} i \in \{2, \dots, 10\} & (\text{borda de cima}) \\ i \in \{112, \dots, 120\} & (\text{borda de baixo}) \\ i \in \{12, 23, 34, 45, 56, 67, 78, 89, 100\} & (\text{borda da esquerda}) \\ i \in \{22, 33, 44, 55, 66, 77, 88, 99, 110\} & (\text{borda da direita}) \end{cases} \\ 4 & \text{caso contrário (nós internos)} \end{cases}$$

$$P_{ij} = \begin{cases} 1/2 & \text{se } i = j \\ 1/4 & \text{se } i \neq j, (i, j) \in E \text{ e } i \text{ é canto} \\ 1/6 & \text{se } i \neq j, (i, j) \in E \text{ e } i \text{ é borda} \\ 1/8 & \text{se } i \neq j, (i, j) \in E \text{ e } i \text{ é nó interno} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

2. Determine analiticamente a distribuição estacionária para cada grafo (ou seja, determine  $\pi_i$  para cada vértice  $i$  do grafo).

Independente do grafo (dentre os 3 do enunciado), a matriz de transição de probabilidade  $P$  do passeio preguiçoso é dada por:

$$P = \frac{1}{2}I + \frac{1}{2}P',$$

onde o termo  $\frac{1}{2}I$  representa a probabilidade de permanecer no mesmo vértice, e o termo  $\frac{1}{2}P'$  representa a probabilidade de transitar para um vértice vizinho.

A equação de equilíbrio estacionário fica:

$$\pi = \pi P = \pi \left( \frac{1}{2}I + \frac{1}{2}P' \right) = \frac{1}{2}\pi + \frac{1}{2}\pi P'.$$

Subtraindo  $\frac{1}{2}\pi$  de ambos os lados:

$$\frac{1}{2}\pi = \frac{1}{2}\pi P' \Rightarrow \pi = \pi P'.$$

Ou seja, o *self-loop* introduzido pelo passeio preguiçoso não altera a distribuição estacionária. Basta, portanto, calcular a distribuição estacionária do passeio aleatório padrão, com matriz de transição  $P'$ .

Para o passeio aleatório padrão, a distribuição estacionária é dada por:

$$\pi_i = \frac{d_i}{K}, \text{ onde } K = \sum_i d_i = 2m, \text{ sendo } m \text{ o número de arestas do grafo.}$$

- Grafo em anel ( $n = 125$ ):

$$d_i = 2 \quad \forall i \in \{1, \dots, 125\}$$

$$m = 125$$

$$\pi_i = \frac{2}{2 \cdot 125} = \frac{1}{125} \quad \forall i \in \{1, \dots, 125\}$$

- Grafo em árvore binária cheia ( $n = 127$ ):

$$d_i = \begin{cases} 2 & \text{se } i \text{ é raiz } (i = 1) \\ 3 & \text{se } i \text{ é nó interno } (i \in \{2, \dots, 63\}) \\ 1 & \text{se } i \text{ é folha } (i \in \{64, \dots, 127\}) \end{cases}$$

$$m = 127 - 1 = 126$$

$$\pi_i = \begin{cases} \frac{2}{2 \cdot 126} = \frac{1}{126} & \text{se } i \text{ é raiz } (i = 1) \\ \frac{3}{2 \cdot 126} = \frac{1}{84} & \text{se } i \text{ é nó interno } (i \in \{2, \dots, 63\}) \\ \frac{1}{2 \cdot 126} = \frac{1}{252} & \text{se } i \text{ é folha } (i \in \{64, \dots, 127\}) \end{cases}$$

- Grafo em reticulado (grid) com duas dimensões ( $n = 121$ ):

$$d_i = \begin{cases} 2 & \text{se } i \in \{1, 11, 111, 121\} \quad (\text{cantos}) \\ 3 & \text{se } \begin{cases} i \in \{2, \dots, 10\} & (\text{borda de cima}) \\ i \in \{112, \dots, 120\} & (\text{borda de baixo}) \\ i \in \{12, 23, 34, 45, 56, 67, 78, 89, 100\} & (\text{borda da esquerda}) \\ i \in \{22, 33, 44, 55, 66, 77, 88, 99, 110\} & (\text{borda da direita}) \end{cases} \\ 4 & \text{caso contrário (nós internos)} \end{cases}$$

$$m_1 = 10 \cdot 11 = 110 \quad (\text{conexões verticais})$$

$$m_2 = 10 \cdot 11 = 110 \quad (\text{conexões horizontais})$$

$$m = m_1 + m_2 = 110 + 110 = 220$$

$$\pi_i = \begin{cases} \frac{2}{2 \cdot 220} = \frac{1}{220} & \text{se } i \in \{1, 11, 111, 121\} \quad (\text{cantos}) \\ \frac{3}{2 \cdot 220} = \frac{3}{440} & \text{se } \begin{cases} i \in \{2, \dots, 10\} \quad (\text{borda de cima}) \\ i \in \{112, \dots, 120\} \quad (\text{borda de baixo}) \\ i \in \{12, 23, 34, 45, 56, 67, 78, 89, 100\} \quad (\text{borda da esquerda}) \\ i \in \{22, 33, 44, 55, 66, 77, 88, 99, 110\} \quad (\text{borda da direita}) \end{cases} \\ \frac{4}{2 \cdot 220} = \frac{1}{110} & \text{caso contrário (nós internos)} \end{cases}$$

3. Para cada grafo, calcule numericamente a variação total entre  $\pi(t)$  e a distribuição estacionária, para  $t = 0, 1, \dots$ . Trace um gráfico onde cada curva corresponde a um grafo (preferencialmente em escala log-log, com  $t \in [1, 10^3]$ ).

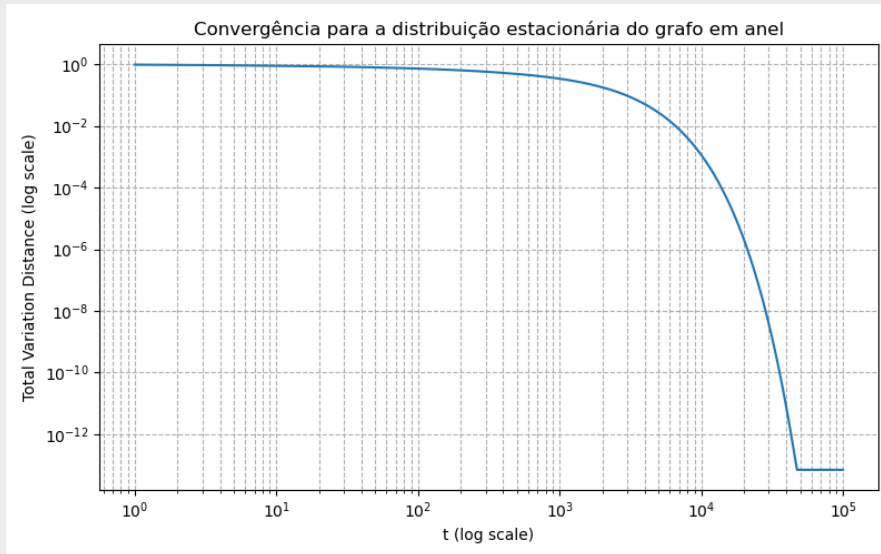
Foi implementado um código em Python para gerar as matrizes de transição de probabilidade  $P$  e as distribuições estacionárias  $\pi$  e calcular a variação total entre  $\pi(t)$  e a distribuição estacionária, utilizando a formula:

$$\text{Variação Total} = \sum_i |\pi_i(t) - \pi_i|$$

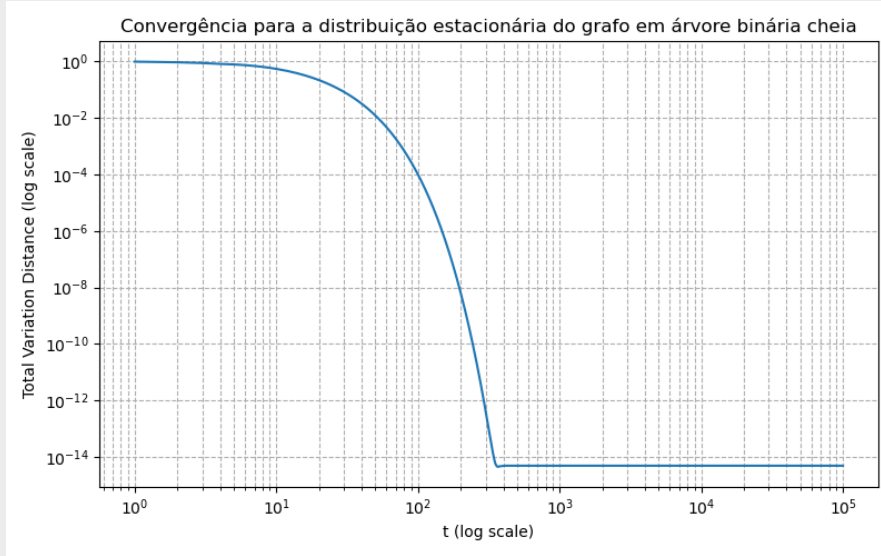
O link para o código está disponível no repositório do GitHub citado no fim deste relatório.

Para cada grafo, foi considerada a distribuição inicial  $\pi_1(1) = 1$  e, apesar do enunciado sugerir  $10^3$  iterações, foram utilizadas  $10^5$  para visualizar melhor a convergência. Todos os graficos estão em escala log-log.

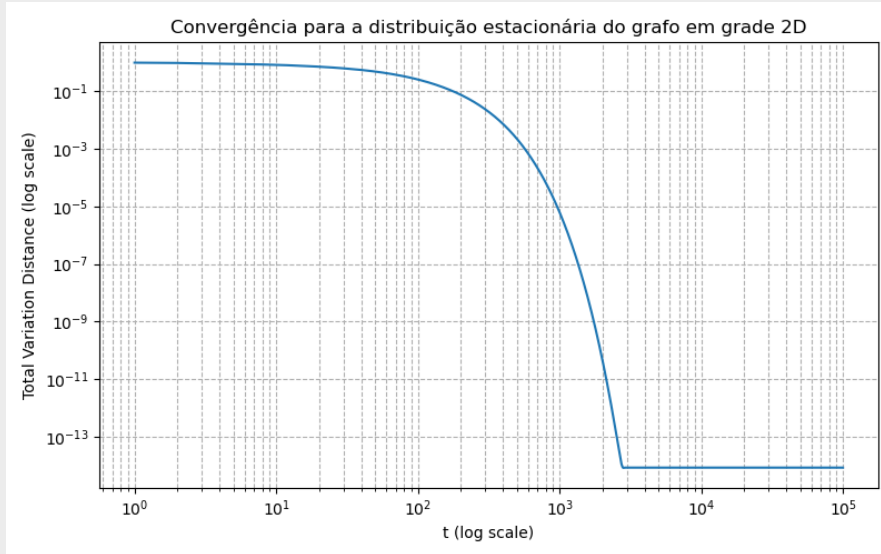
- Grafo em anel ( $n = 125$ ):



- Grafo em árvore binária cheia ( $n = 127$ ):



- Grafo em reticulado (grid) com duas dimensões ( $n = 121$ ):



4. O que você pode concluir sobre a convergência em função da estrutura do grafo?

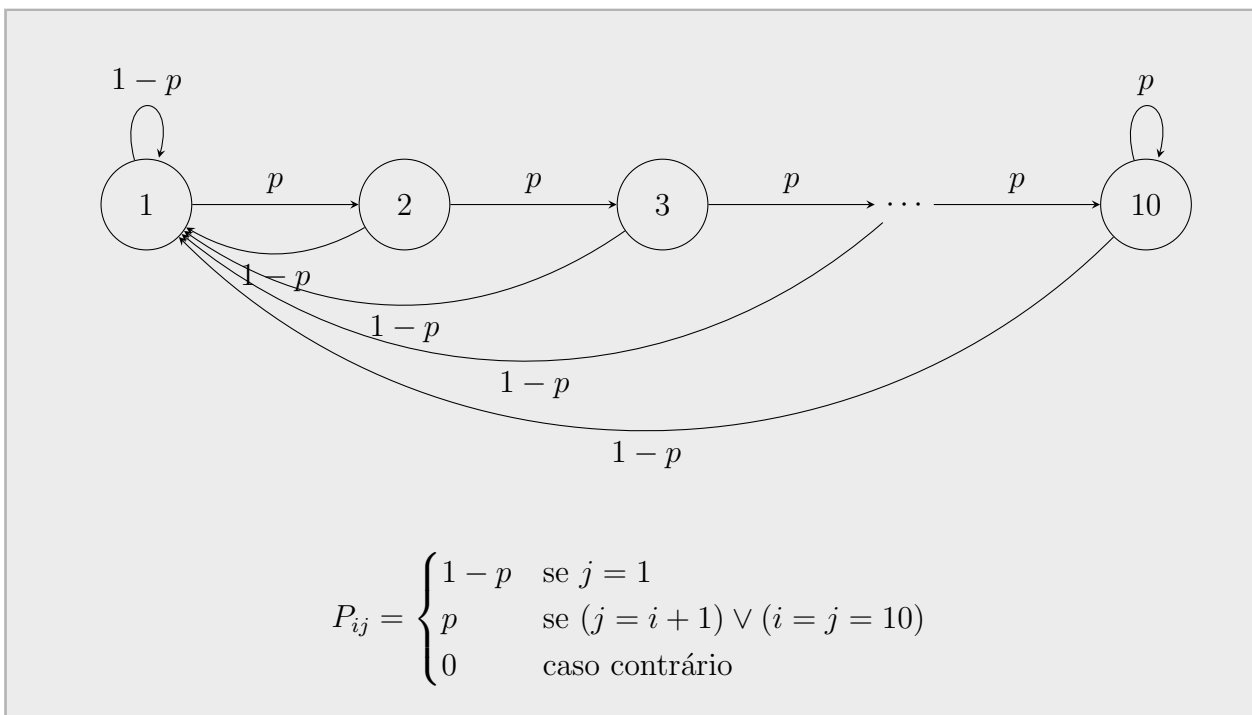
O grafo em árvore binária cheia é o que apresenta convergência mais rápida, seguido pelo grafo em reticulado (grid) e, por último, o grafo em anel. Isso pode ser explicado pela estrutura de cada grafo: a árvore possui uma organização ramificada que permite ao passeio aleatório atingir diferentes regiões rapidamente. O reticulado também possui múltiplos caminhos entre os vértices, facilitando a dispersão da probabilidade ao longo do tempo. Já o grafo em anel, com conexões mais limitadas e estrutura cíclica, dificulta essa dispersão e, portanto, tende a convergir mais lentamente para a distribuição estacionária.



### Questão 3: Tempo de mistura

Considere um processo estocástico que inicia no estado 1 e a cada instante de tempo incrementa o valor do estado em uma unidade com probabilidade  $p$  ou retorna ao estado inicial (estado 1) com probabilidade  $1 - p$ . No estado  $n$  o processo não cresce mais, e se mantém neste estado com probabilidade  $p$ . Assuma que  $n = 10$  e que  $p \in \{0.25, 0.5, 0.75\}$ .

1. Construa a cadeia de Markov deste processo mostrando a matriz de transição de probabilidade em função de  $p$ .



2. Determine numericamente o vão espectral da cadeia de Markov para cada valor de  $p$ .

O vão espectral é dado por:

$$\delta = 1 - |\lambda_2|$$

onde  $\lambda_2$  é o segundo maior autovalor (em módulo) da matriz de transição  $P$ .

- **Para  $p = 0,25$ :**

- Matriz de transição (parcial):

$$\begin{bmatrix} 0.75 & 0.25 & 0 & \cdots & 0 \\ 0.75 & 0 & 0.25 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0.75 & 0 & 0 & \cdots & 0.25 \end{bmatrix}$$

- Maiores autovalores em módulo:

$$|\lambda_1| = 1.0, \quad |\lambda_2| \approx 1.7125 \times 10^{-4}$$

- Vão espectral:

$$\delta = 0.9998287$$

- **Para  $p = 0,5$ :**

- Matriz de transição (parcial):

$$\begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 & 0 & \cdots & 0 \\ 0.5 & 0 & 0.5 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0.5 & 0 & 0 & \cdots & 0.5 \end{bmatrix}$$

- Maiores autovalores em módulo:

$$|\lambda_1| = 1.0, \quad |\lambda_2| \approx 3.4251 \times 10^{-4}$$

- Vão espectral:

$$\delta = 0.9996575$$

- **Para  $p = 0,75$ :**

- Matriz de transição (parcial):

$$\begin{bmatrix} 0.25 & 0.75 & 0 & \cdots & 0 \\ 0.25 & 0 & 0.75 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0.25 & 0 & 0 & \cdots & 0.75 \end{bmatrix}$$

- Maiores autovalores em módulo:

$$|\lambda_1| = 1.0, \quad |\lambda_2| \approx 4.3546 \times 10^{-6}$$

- Vão espectral:

$$\delta = 0.9999956$$

3. Determine numericamente a distribuição estacionária para cada valor de  $p$ , e indique o estado de menor probabilidade.

O estado estacionário  $\pi$  de uma cadeia de Markov é um vetor de probabilidade tal que:

$$\pi P = \pi$$

Ou seja, ele é um autovetor à esquerda da matriz de transição  $P$  associado ao autovalor  $\lambda = 1$ . A distribuição estacionária pode ser obtida computando os autovalores e autovetores de  $P^\top$ , selecionando aquele correspondente a  $\lambda = 1$  e normalizando-o para que  $\sum_i \pi_i = 1$ .

- **Para  $p = 0,25$ :**

– Distribuição estacionária:

$$\pi = \begin{bmatrix} 0.75 \\ 0.1875 \\ 0.046875 \\ 0.01171875 \\ 0.00292969 \\ 0.00073242 \\ 0.00018311 \\ 0.00004578 \\ 0.00001144 \\ 0.00000381 \end{bmatrix}$$

- **Para  $p = 0,5$ :**

– Distribuição estacionária:

$$\pi = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.25 \\ 0.125 \\ 0.0625 \\ 0.03125 \\ 0.015625 \\ 0.0078125 \\ 0.00390625 \\ 0.00195312 \\ 0.00195312 \end{bmatrix}$$

- Para  $p = 0,75$ :

– Distribuição estacionária:

$$\pi = \begin{bmatrix} 0.25 \\ 0.1875 \\ 0.140625 \\ 0.10546875 \\ 0.07910156 \\ 0.05932617 \\ 0.04449463 \\ 0.03337097 \\ 0.02502823 \\ 0.07508469 \end{bmatrix}$$

4. Utilizando os dados acima, determine um limitante inferior e superior para o tempo de mistura quando  $\epsilon = 10^{-6}$  para cada valor de  $p$ .

5. O que você pode concluir sobre a influência de  $p$  no tempo de mistura?

## Questão 4: Voltando à origem

Considere uma cadeia de Markov cujo espaço de estados é um látice de duas dimensões sobre os números naturais, ou seja,  $S = \{(i, j) \mid i \geq 1, j \geq 1\}$ . Cada estado pode transicionar para um de seus vizinhos no látice. Entretanto, se afastar da origem (se movimentar para o norte ou para o leste) tem probabilidade  $p/2$ , e se aproximar da origem tem probabilidade  $(1 - p)/2$ , onde  $p$  é um parâmetro do modelo (nas bordas, utilize self-loops). Assuma que  $p \in \{0.25, 0.35, 0.45\}$ .

1. Construa um simulador para essa cadeia de Markov.

2. Utilize o simulador para estimar a distribuição estacionária da origem (estado  $(1, 1)$ ), ou seja  $\pi_{1,1}$ , para cada valor de  $p$ . Dica: utilize os tempos de retorno!

3. Seja  $d(t)$  o valor esperado da distância (de Manhattan) entre  $X_t$  (o estado no tempo  $t$ ) e a origem. Utilize o simulador para estimar  $d(t)$  para  $t \in \{10, 100, 1000\}$ , para cada valor de  $p$ . O que você pode concluir?

## Códigos

Os códigos utilizados para a resolução dos exercícios estão disponíveis no repositório do GitHub:  
[https://github.com/lhscaldas/CPS767\\_MCMC/](https://github.com/lhscaldas/CPS767_MCMC/)