



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

MODELOS DE MARKOV OCULTOS
Y
APLICACIONES A LA BIOLOGÍA

XUSHENG ZHENG

Trabajo Fin de Grado

Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas

Tutores

Lidia Fernández Rodríguez

FACULTAD DE CIENCIAS

E.T.S. INGENIERÍAS INFORMÁTICA Y DE TELECOMUNICACIÓN

Granada, a 8 de febrero de 2023

ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN A LAS CADENAS DE MARKOV	7
1.1. Propiedad de Markov	7
1.2. Estados de una cadena de Markov	12
1.2.1. Estados accesibles y comunicables	13
1.2.2. Periodicidad de una cadena de Markov	14
1.2.3. Tiempos de transición	16
1.2.4. Estados recurrentes y transitorios	21
1.3. Comportamiento asintótico de una cadena de Markov	23
2. MODELOS OCULTOS DE MARKOV	29
2.1. Los tres problemas básicos para los HMM	30
2.1.1. Solución al problema 1	32
2.1.2. Solución al problema 2	34
3. SECCIÓN TERCERA	37
Bibliografía	38

RESUMEN

Occaecati expedita cumque est. Aut odit vel nobis praesentium dolorem sed eligendi. Inventore molestiae delectus voluptatibus consequatur. Et cumque quia recusandae fugiat earum repellat porro. Earum et tempora vel voluptas. At sed animi qui hic eaque velit.

Saepe deleniti aut voluptatem libero dolores illum iusto iusto. Explicabo dolor quia id enim molestiae praesentium sit. Odit enim doloribus aut assumenda recusandae. Eligendi officia nihil itaque. Quas fugiat aliquid qui est.

Quis amet sint enim. Voluptatem optio quia voluptatem. Perspiciatis molestiae ut laboriosam repudiandae nihil.

INTRODUCCIÓN A LAS CADENAS DE MARKOV

La cadena de Markov fue introducida por el matemático ruso Andréi Márkov en 1906. Desde su definición, se ha utilizado para describir procesos importantes en la teoría de probabilidad. Hoy en día, tiene aplicaciones en campos como la biología, la economía, la química o por ejemplo en algoritmos para Internet (PageRank).

En este capítulo se va a introducir la teoría de cadenas de Markov, avanzado progresivamente hacia las cadenas de Markov ocultas. Las fuentes principales de este capítulo son [6, Capítulo 4], [1, Capítulos 2 y 3] y [5, Capítulo 6].

1.1 PROPIEDAD DE MARKOV

Sea S un conjunto finito de forma $\{s_1, \dots, s_N\}$, definimos un proceso estocástico sobre S como una sucesión $\{\mathcal{X}_0, \mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2, \dots\}$, o $\{\mathcal{X}_t\}_{t=0}^{\infty}$ para abreviar, donde cada \mathcal{X}_t es una variable aleatoria que toma valores en S .

A pesar de que el índice t puede representar cualquiera magnitud, lo más común es que represente el tiempo. En este caso, la noción de “pasado” y “futuro” aparecen de forma natural, esto es, si $t < t'$, entonces \mathcal{X}_t es una variable “pasada” para $\mathcal{X}_{t'}$, mientras que $\mathcal{X}_{t'}$ es una variable “futura” para \mathcal{X}_t . Sin embargo, esto no sucede siempre: por ejemplo, si el proceso estocástico corresponde al de la secuencia de genoma de un organismo, el conjunto S estará formado por los cuatro símbolos para las subunidades de nucleótidos $\{A, C, G, T\}$ y las secuenciacines tienen un significado más espacial que temporal.

Definición 1.1. Un proceso estocástico $\{\mathcal{X}_t\}_{t=0}^{\infty}$ se dice que posee **la propiedad de Markov**, o es un **proceso de Markov**, si para todo $t \geq 1$ y $(u_0, \dots, u_{t-1}, u_t) \in S^{t+1}$ se tiene que:

$$P[\mathcal{X}_t = u_t | \mathcal{X}_0 = u_0, \dots, \mathcal{X}_{t-1} = u_{t-1}] = P[\mathcal{X}_t = u_t | \mathcal{X}_{t-1} = u_{t-1}] \quad (1.1)$$

Es decir, un proceso con propiedad de Markov es aquella que conocido los anteriores estados, depende únicamente del último.

Por conveniencia, introducimos la notación $\mathcal{X}_j^k = (\mathcal{X}_j, \mathcal{X}_{j+1}, \dots, \mathcal{X}_k)$ para denotar los estados \mathcal{X}_i con $j \leq i \leq k$. Con esta notación, podemos reescribir la Definición 1.1 como sigue: un proceso estocástico $\{\mathcal{X}_t\}$ es un **proceso de Markov** si, para todo $(u_0, \dots, u_{t-1}, u_t) \in \mathbb{S}^{t+1}$ es cierto que:

$$P[\mathcal{X}_t = u_t | \mathcal{X}_0^{t-1} = u_0 \dots u_{t-1}] = P[\mathcal{X}_t = u_t | \mathcal{X}_{t-1} = u_{t-1}] \quad (1.2)$$

Tenemos que por definición de probabilidad condicionada, para cualquier proceso estocástico $\{\mathcal{X}_t\}$ y cualquiera secuencia $(u_0, \dots, u_{t-1}, u_t) \in \mathbb{S}^{t+1}$:

$$P[\mathcal{X}_0^t = u_0 \dots u_t] = P[\mathcal{X}_0 = u_0] \cdot \prod_{i=0}^{t-1} P[\mathcal{X}_{i+1} = u_{i+1} | \mathcal{X}_0^i = u_0 \dots u_i]$$

Sin embargo, si consideramos un proceso de Markov, entonces la fórmula anterior se reduce a:

$$P[\mathcal{X}_0^t = u_0 \dots u_t] = P[\mathcal{X}_0 = u_0] \cdot \prod_{i=0}^{t-1} P[\mathcal{X}_{i+1} = u_{i+1} | \mathcal{X}_i = u_i] \quad (1.3)$$

En probabilidad, es usual referirse con el nombre **cadena de Markov** a un proceso de Markov \mathcal{X}_t donde el parámetro t toma únicamente valores discretos. En este trabajo, pondremos nuestra atención en los casos donde t toma valores en \mathbb{N}_0 .

En (1.3) vemos la importancia del valor:

$$P[\mathcal{X}_{t+1} = u | \mathcal{X}_t = v]$$

al que podemos identificar como una función de tres variables: el estado “actual” $v \in \mathbb{S}$, el estado “siguiente” $u \in \mathbb{S}$ y el “tiempo actual” $t \in \mathbb{N}_0$. Así, teniendo en cuenta que $\mathbb{S} = \{s_1, \dots, s_N\}$, definimos la probabilidad de transición:

$$a_{ij}(t) := P[\mathcal{X}_{t+1} = s_j | \mathcal{X}_t = s_i], \quad \forall t \in \mathbb{N}_0. \quad (1.4)$$

Por tanto, $a_{ij}(t)$ es la probabilidad de realizar una transición desde el estado actual s_i al estado siguiente s_j en el instante t .

Definición 1.2. Sea \mathcal{X}_t una cadena de Markov, la matriz cuadrada de dimensión n , $A(t) = [a_{ij}(t)]$, es la **matriz de transición** de \mathcal{X}_t en el instante t . Una cadena de Markov es **homogénea** si $A(t)$ es constante para todo $t \in \mathbb{N}_0$, en otro caso, es **no homogénea**.

Definición 1.3. Sea \mathcal{X}_t una cadena de Markov que toma valores en un conjunto finito $S = \{s_1, \dots, s_N\}$ y sea $A(t)$ su matriz de transición en el instante t . Entonces $A(t)$ es una **matriz estocástica** (por filas) para todo t , esto es:

$$a_{ij}(t) \in [0, 1], \quad \forall i, j \in \{1, \dots, N\}, \quad t \in \mathbb{N}_0,$$

$$\sum_{j=1}^N a_{ij}(t) = 1, \quad \forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad t \in \mathbb{N}_0.$$

Proposición 1.4. Sea A una matriz positiva (cuyos elementos son no negativos, con al menos un elemento estrictamente positivo) de dimensión $N \times N$:

1. A es estocástica si y solo si $\mathbf{1}$ es un valor propio de A^T con vector propio (a la izquierda) $\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$.
2. si A es estocástica, entonces para todo valor propio λ , se cumple que $|\lambda| \leq 1$.

Demostración.

1. Es suficiente con observar que la condición de estocaticidad para una matriz positiva A es equivalente a que $\mathbf{1} \cdot A^T = \mathbf{1}$.
2. Sea $v = (v_1, \dots, v_N)$ un vector propio asociado (a izquierda pues estamos usando la notación fila) a λ , por ser A positiva y estocástica, tenemos que:

$$\begin{aligned} |\lambda| \sum_{j=1}^N |v_j| &= \sum_{j=1}^N |\lambda v_j| = \sum_{j=1}^N |(vA)_j| = \sum_{j=1}^N \left| \sum_{i=1}^N a_{ij} v_i \right| \\ &\leq \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N a_{ij} |v_i| = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N a_{ij} \right) |v_i| = \sum_{i=1}^N |v_i| \end{aligned}$$

Puesto que $\sum_{r=1}^N |v_r| > 0$, tenemos que $|\lambda| \leq 1$. □

Observación. De la primera afirmación de la Proposición 1.4, podemos ver que el producto de matrices estocásticas sigue siendo estocástica. En efecto, si A, B son dos matrices estocásticas entonces $\mathbf{1} \cdot (AB)^T = \mathbf{1} \cdot B^T \cdot A^T = \mathbf{1} \cdot A^T = \mathbf{1}$.

Para continuar con los estudios de las cadenas de Markov presentamos el siguiente conjunto:

Definición 1.5. El **N-símplex estándar** es el subconjunto de \mathbb{R}^{N+1} dado por:

$$\Delta^N = \{(t_1, \dots, t_{N+1}) \in \mathbb{R}^{N+1} \mid \sum_{i=1}^{N+1} t_i = 1 \text{ y } t_i \geq 0 \text{ para todo } i\}$$

Puesto que para todo t , $\sum_{i=1}^N P[\mathcal{X}_t = s_i] = 1$; para cada instante, podemos representar las probabilidades de que la cadena se encuentre en cada estado con un vector de Δ^{N-1} .

Teorema 1.6. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov con valores en $S = \{s_1, \dots, s_N\}$ y sea $A(t)$ su matriz de transición en el instante t . Supongamos que \mathcal{X}_0 se distribuye de acuerdo con $c^0 = (c_1^0, \dots, c_N^0) \in \Delta^{N-1}$, esto es:

$$P[\mathcal{X}_0 = s_i] = c_i^0, \forall i \in \{1, \dots, N\}$$

Entonces, para todo $t \geq 0$, \mathcal{X}_t se distribuye de acuerdo con:

$$c^t = c^0 A(0) A(1) \cdots A(t-1) \quad (1.5)$$

Demostración. Sea $s_i \in S$, por (1.3) tenemos que:

$$\begin{aligned} P[\mathcal{X}_t = s_i] &= \sum_{u_0 u_1 \dots u_{t-1} \in S^t} P[\mathcal{X}_0 = u_0] \cdot \prod_{i=0}^{t-2} P[\mathcal{X}_{i+1} = u_{i+1} | \mathcal{X}_i = u_i] \cdot P[\mathcal{X}_t = s_i | \mathcal{X}_{t-1} = u_{t-1}] \\ &= \sum_{u_0 u_1 \dots u_{t-1} \in S^t} c_{u_0} \cdot a_{u_0, u_1}(0) \cdots a_{u_{t-2}, u_{t-1}}(t-2) \cdot a_{u_{t-1}, s_i}(t-1) \end{aligned}$$

Notemos que esta última expresión es justamente la componente i -ésima de $c^t = c^0 A(0) A(1) \cdots A(t-1)$ escrita en forma extensa. \square

Ejemplo 1.1. En este ejemplo presentamos una variación del juego de cartas “black-jack”. En este caso, tenemos un dado de cuatro caras con valores 0, 1, 2 y 3, y con probabilidad uniforme en cada lanzamiento. Un jugador lanza el dado de forma repetida y \mathcal{X}_t representa el valor acumulado tras t lanzamientos. Si el total es igual a nueve, el jugador gana; en otro caso se considera que pierde. Podemos asumir que el resultado de cada lanzamiento es independiente de los lanzamientos anteriores.

Tenemos entonces que $\{\mathcal{X}_t\}$ toma valores en el conjunto $S := \{0, 1, \dots, 8, W, L\}$ de cardinalidad 11. Sea \mathcal{Y}_t el resultado del lanzamiento en el instante t :

$$P[\mathcal{Y}_t = 0] = P[\mathcal{Y}_t = 1] = P[\mathcal{Y}_t = 2] = P[\mathcal{Y}_t = 3] = 1/4$$

Examinemos ahora la distribución de \mathcal{X}_t : por definición sabemos que $\mathcal{X}_t = \mathcal{X}_{t-1} + \mathcal{Y}_t$, excepto el caso de que $\mathcal{X}_{t-1} + \mathcal{Y}_t = 9$, consideraremos $\mathcal{X}_t = W$ (ganar); y si $\mathcal{X}_{t-1} + \mathcal{Y}_t > 9$, consideraremos $\mathcal{X}_t = L$ (perder). Si $\mathcal{X}_{t-1} = W$ o L , consideraremos que el juego está acabado y $\mathcal{X}_t = \mathcal{X}_{t-1}$. Estas observaciones se pueden resumir en las siguientes reglas:

- Si $\mathcal{X}_{t-1} \leq 5$:

$$\begin{aligned} P[\mathcal{X}_t = \mathcal{X}_{t-1}] &= P[\mathcal{X}_t = \mathcal{X}_{t-1} + 1] = P[\mathcal{X}_t = \mathcal{X}_{t-1} + 2] \\ &= P[\mathcal{X}_t = \mathcal{X}_{t-1} + 3] = 1/4 \end{aligned}$$

- Si $\mathcal{X}_{t-1} = 6$:

$$P[\mathcal{X}_t = 6] = P[\mathcal{X}_t = 7] = P[\mathcal{X}_t = 8] = P[\mathcal{X}_t = W] = 1/4$$

- Si $\mathcal{X}_{t-1} = 7$:

$$P[\mathcal{X}_t = 7] = P[\mathcal{X}_t = 8] = P[\mathcal{X}_t = W] = P[\mathcal{X}_t = L] = 1/4$$

- Si $\mathcal{X}_{t-1} = 8$:

$$\begin{aligned} P[\mathcal{X}_t = 8] &= P[\mathcal{X}_t = W] = 1/4 \\ P[\mathcal{X}_t = L] &= 1/2 \end{aligned}$$

- Si $\mathcal{X}_{t-1} = W \text{ o } L$:

$$P[\mathcal{X}_t = \mathcal{X}_{t-1}] = 1$$

$\{\mathcal{X}_t\}$ es una cadena de Markov pues la distribución de \mathcal{X}_t depende únicamente del valor de \mathcal{X}_{t-1} y no de cómo se ha alcanzado dicho valor. Notemos que las probabilidades anteriores no dependen de t , con lo cual la matriz de transición de \mathcal{X}_t es una matriz fija y \mathcal{X}_t es homogénea.

La matriz de transición de \mathcal{X}_t es entonces una matriz 11×11 dado por:

$$A = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 2/4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Es natural que el juego comience con el valor inicial igual a cero. Por lo tanto, la distribución de \mathcal{X}_0 está representada por $c_0 \in \mathbb{R}^{11}$ con un 1 en la primera componente y ceros en el resto. Aplicando repetidamente la fórmula (1.5) obtendremos las distribuciones de \mathcal{X}_1 , \mathcal{X}_2 , etc. Así, sea c_t la distribución de \mathcal{X}_t , tenemos:

$$c_0 = (1 \ 0 \ \dots \ 0)$$

$$c_1 = c_0 A = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

$$c_2 = c_1 A = \begin{pmatrix} 1/16 & 1/8 & 3/16 & 1/4 & 3/16 & 1/8 & 1/16 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Cabe destacar que si examinamos la distribución c_t , entonces tenemos que $P[\mathcal{X}_t \in \{0 \dots 8\}]$ tiende a cero conforme $t \rightarrow \infty$. Esto es natural pues el juego terminará eventualmente en victoria (W) o en pérdida (L) y todos los otros estados son transitorios.

1.2 ESTADOS DE UNA CADENA DE MARKOV

A partir de ahora, vamos a centrarnos en el estudio de cadenas de Markov cuyas matrices de transición son constantes, en consecuencia, las probabilidades de transición son independientes del instante t . Nos referiremos a ellas directamente como cadenas de Markov, asumiendo homogeneidad.

Está claro que los estados juegan un papel importante en el estudio de las cadenas de Markov. Para describir con más detalle las propiedades de una cadena de Markov vamos a distinguir los estados que puede tener. [1] Antes de empezar la clasificación, nos interesa saber cómo evoluciona una cadena de Markov tras n instantes:

Definición 1.7. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov, $s_i, s_j \in \mathbb{S}$, $n, m \in \mathbb{N}_0$, denotamos:

$$P_{ij}^{m, m+n} := P[\mathcal{X}_{n+m} = s_j | \mathcal{X}_m = s_i]$$

Si $n = 0$:

$$P_{ij}^{m, m} = P[\mathcal{X}_m = s_j | \mathcal{X}_m = s_i] = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j \\ 0, & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Teorema 1.8 (Ecuación de Chapman-Kolmogorov). En condiciones anteriores, sea $r \in \mathbb{N}_0$:

$$P_{ij}^{m, m+n+r} = \sum_{s_k \in \mathbb{S}} P_{ik}^{m, m+n} P_{kj}^{m+n, m+n+r}$$

Demostración.

$$\begin{aligned} P_{ij}^{m, m+n+r} &= P[\mathcal{X}_{m+n+r} = s_j | \mathcal{X}_m = s_i] \\ &= \sum_{s_k \in \mathbb{S}} P[\mathcal{X}_{m+n+r} = s_j | \mathcal{X}_{m+n} = s_k, \mathcal{X}_m = s_i] P[\mathcal{X}_{m+n} = s_k | \mathcal{X}_m = s_i] \end{aligned}$$

Aplicando la propiedad de Markov:

$$P[\mathcal{X}_{m+n+r} = s_j | \mathcal{X}_{m+n} = s_k, \mathcal{X}_m = s_i] = P[\mathcal{X}_{m+n+r} = s_j | \mathcal{X}_{m+n} = s_k] = P_{kj}^{m+n, m+n+r}$$

Por lo tanto:

$$P_{ij}^{m, m+n+r} = \sum_{s_k \in \mathbb{S}} P_{ik}^{m, m+n} P_{kj}^{m+n, m+n+r}$$

□

Notemos que por ser $\{\mathcal{X}_t\}$, $P_{ij}^{m,m+1}$ es independiente de m , por lo cual aplicando inductivamente la ecuación de Chapman-Kolmogorov, tenemos que $P_{ij}^{m,m+n}$ son independientes de m .

Definición 1.9. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov, $s_i, s_j \in \mathbb{S}$, $n, m \in \mathbb{N}_0$, definimos las probabilidades de transición en n pasos como:

$$a_{ij}^{(n)} := P_{ij}^{m,m+n} = P[\mathcal{X}_{m+n} = s_j | \mathcal{X}_m = s_i]$$

Y la matriz de las probabilidades de transición en n pasos como $A^{(n)} = [a_{ij}^{(n)}]$.

Lema 1.10. La matriz de transición en n pasos cumple que $A^{(n)} = A^n, \forall n \in \mathbb{N}$. Por la observación de la Proposición 1.4, $A^{(n)}$ es estocástica.

Demostración. Expresando la ecuación de Chapman-Kolmogorov en forma matricial tenemos que $A^{(n+r)} = A^{(n)} A^{(r)}$, por ser $A^{(1)} = A$:

$$A^{(n)} = A^{(n-1)} A = A^{(n-2)} A^2 = \dots = A^n \quad \square$$

1.2.1 Estados accesibles y comunicables

Definición 1.11. El estado s_j se dice **alcanzable** o **accesible** desde el estado s_i , representado por $i \longrightarrow j$, si existe $n \in \mathbb{N}_0$ tal que $a_{ij}^{(n)} > 0$. Dos estados, s_i y s_j , que son mutuamente alcanzables, se dicen **comunicables**, representado por $i \longleftrightarrow j$.

La definición anterior tiene el significado siguiente: si s_j es accesible desde el estado s_i , entonces existirá un $n \in \mathbb{N}_0$ tal que $P[\mathcal{X}_{m+n} = s_j] > 0$ siempre que $\mathcal{X}_m = s_i$. Es decir, empezando desde el estado s_i , hay una probabilidad positiva de que, en un número finito de transiciones, alcancemos el estado s_j .

Teorema 1.12. La propiedad de comunicación, \longleftrightarrow , es una relación de equivalencia sobre el conjunto de estados \mathbb{S} .

Demostración.

- **Reflexividad:** $a_{ii}^{(0)} = \delta_{ii} = 1 > 0$. Por tanto, $i \longleftrightarrow i$.
- **Simetría:** si $i \longleftrightarrow j$, existen $n, m \in \mathbb{N}_0$ tales que $a_{ij}^{(n)}, a_{ji}^{(m)} > 0$, escogiendo los mismos n y m , tenemos que $j \longleftrightarrow i$.
- **Transitividad:** sean $i \longleftrightarrow j$ y $j \longleftrightarrow k$:
 - Por ser $i \longleftrightarrow j$, existen $n, m \in \mathbb{N}_0$ tales que $a_{ij}^{(n)}, a_{ji}^{(m)} > 0$.
 - Por ser $j \longleftrightarrow k$, existen $r, s \in \mathbb{N}_0$ tales que $a_{jk}^{(r)}, a_{kj}^{(s)} > 0$.

Aplicando entonces la ecuación de Chapman-Kolmogorov tenemos que:

- $a_{ik}^{(n+r)} = \sum_{s_l \in S} a_{il}^{(n)} a_{lk}^{(r)} \geq a_{ij}^{(n)} a_{jk}^{(r)} > 0$
- $a_{ki}^{(s+m)} = \sum_{s_l \in S} a_{kl}^{(s)} a_{li}^{(m)} \geq a_{kj}^{(s)} a_{ji}^{(m)} > 0$

Por lo tanto, $i \longleftrightarrow k$. □

Como resultado, podemos dividir el conjunto de los estados S en clases de equivalencias dependiendo de si existen comunicaciones entre los estados. Esto nos lleva a la siguiente definición:

Definición 1.13. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov sobre un conjunto finito S , $\{\mathcal{X}_t\}$ se dice **irreducible** si hay solo una clase de equivalencia sobre S mediante la relación \longleftrightarrow .

Es decir, una cadena de Markov es irreducible si todos los estados se comunican unos con otros. Tomando el ejemplo de “blackjack”, podemos apreciar que:

- Un estado $s_i \in \{0 \dots 8\}$ no es comunicable con un estado s_j con valor inferior $\implies a_{ij}^{(n)} = 0, \forall n \in \mathbb{N}_0, j < i$.
- Los estados W y L no son modificables $\implies a_{Wi}^{(n)} = a_{Li}^{(n)} = 0, \forall n \in \mathbb{N}_0, i \in \{0 \dots 8, W \text{ o } L\}$

Por simetría, cada estado es únicamente comunicable consigo mismo. En consecuencia, hay 11 clases de equivalencia en S , uno por cada estado y la cadena de Markov no es irreducible.

1.2.2 Periodicidad de una cadena de Markov

Definición 1.14. Sea $a_{ii}^{(n)}$ la probabilidad de transición en n pasos al estado s_i desde s_i , el periodo $\lambda(i)$ de un estado s_i es el máximo común divisor de todos los $n \in \mathbb{N}$ con $a_{ii}^{(n)} > 0$, esto es:

$$\lambda(i) := m.c.d(\{n \in \mathbb{N} \mid a_{ii}^{(n)} > 0\})$$

Si $a_{ii}^{(n)} = 0$ para todo $n \in \mathbb{N}$, entonces definimos $\lambda(i) := 0$.

A continuación indicamos que la periodicidad también es una propiedad de clase. Esto es, si el estado s_i en una clase tiene periodo T , entonces todos los estados de esa clase tienen periodo T .

Teorema 1.15. Si $i \longleftrightarrow j$, entonces $\lambda(i) = \lambda(j)$, es decir, el periodo es constante en cada clase de equivalencia.

Demostración. Si $i = j$ el resultado es trivial. Supongamos que $i \neq j$, entonces existen $n, m \in \mathbb{N}$ tales que $a_{ij}^{(n)}, a_{ji}^{(m)} > 0$, por la ecuación de Chapman-Kolmogorov:

$$a_{ii}^{(n+m)} = \sum_{s_l \in S} a_{il}^{(n)} a_{li}^{(m)} \geq a_{ij}^{(n)} a_{ji}^{(m)} > 0 \implies \lambda(i) \mid (n+m)$$

Sea $s \in \mathbb{N}$ tal que $a_{jj}^{(s)} > 0$:

$$a_{ii}^{(n+m+s)} \geq a_{ij}^{(n)} a_{jj}^{(s)} a_{ji}^{(m)} > 0 \implies \lambda(i) \mid (n+m+s)$$

Por lo tanto, $\lambda(i) \mid s$, como s es arbitrario, $\lambda(i)$ es un divisor común de $\{n \in \mathbb{N} \mid a_{jj}^{(n)} > 0\}$, por definición de periodo, $\lambda(i) \mid \lambda(j)$. Realizando la misma discusión intercambiando los papeles de i y j , obtenemos que $\lambda(j) \mid \lambda(i)$, por lo tanto, $\lambda(i) = \lambda(j)$. \square

Definición 1.16. Un estado s_i se dice **no periódico** o **aperiódico** si $\lambda(i) = 1$.

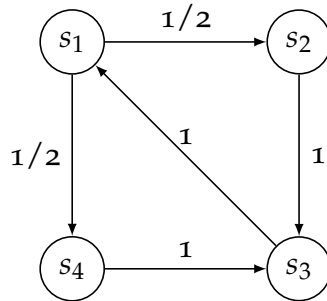
Definición 1.17. Una cadena de Markov se llama **no periódica** o **aperiódica** si todos sus estados son aperiódicos. En caso contrario, se dice **periódica**. Si la cadena de Markov es irreducible, entonces podemos hablar de **periodo de la cadena**.

La periodicidad es una propiedad que se puede apreciar muy bien si representamos la cadena de Markov en forma de grafo. Veamos en el siguiente ejemplo:

Ejemplo 1.2. Sea una cadena de Markov con la siguiente matriz de transición:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Si representamos el grafo de estados:



Observando este grafo, podemos ver que todos los estados tienen periodo 3. Es más, todos los estados son comunicables entre sí luego la cadena es irreducible. En definitiva, tenemos una cadena de Markov periódica con periodo 3.

1.2.3 *Tiempos de transición*

Al inicio de esta sección habíamos visto las probabilidades de transición de n pasos del estado s_i al estado s_j . Con frecuencia queremos hacer afirmaciones en término de probabilidades sobre el número de transiciones necesarias para ir del estado s_i al estado s_j , al que denominaremos *tiempo de transición de s_i hasta s_j* .

Cuando $s_i = s_j$, este tiempo es justo el número de transiciones que se necesita para regresar al estado inicial s_i . En este caso, este tiempo lo denominaremos *tiempo de recurrencia para el estado s_i* .

Definición 1.18. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov. La variable aleatoria:

$$\tau_{ij} := \min\{t \in \mathbb{N} \mid \mathcal{X}_t = s_j \text{ dado } \mathcal{X}_0 = s_i\}, \text{ considerando } \min \emptyset = \infty$$

representa el tiempo mínimo que la cadena necesita para ir desde s_i hasta s_j y se conoce como **tiempo de transición de s_i hasta s_j** . La variable τ_{ii} se llama **tiempo de recurrencia para el estado s_i** .

Definición 1.19. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov, $s_i, s_j \in \mathbb{S}$, definimos para todo $n \in \mathbb{N}$ la **probabilidad de tiempo de transición en n pasos** como la probabilidad de que $\{\mathcal{X}_t\}$ alcance s_j en n pasos partiendo desde s_i :

$$f_{ij}^{(0)} := 0$$

$$f_{ij}^{(n)} := P[\tau_{ij} = n] = P[\mathcal{X}_n = s_j, \mathcal{X}_r \neq s_j, 1 \leq r \leq n-1 \mid \mathcal{X}_0 = s_i]$$

Cuando $i = j$, hablamos de **probabilidad de tiempo recurrencia en n pasos**.

Como ya se dijo en la definición 1.18, los tiempos de transición son variables aleatorias. Sus distribuciones dependen de las probabilidades de transición, en particular, $f_{ij}^{(n)}$ denota la probabilidad de que el tiempo de transición del estado s_i al s_j sea igual a n . Este tiempo de transición es n si la primera transición es del estado s_i a algún estado $s_k \neq s_j$, y después el tiempo de transición del estado s_k al estado s_j es $n-1$.

Por lo tanto, estas probabilidades satisfacen la relación recursiva mostrada en la siguiente proposición:

Proposición 1.20. Las probabilidades de tiempo de transición en n pasos $f_{ij}^{(n)}$, con $n \in \mathbb{N}$, satisfacen la siguiente relación recursiva:

$$f_{ij}^{(1)} = a_{ij}$$

$$f_{ij}^{(n)} = \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} f_{kj}^{(n-1)}, \quad n > 1$$

Para s_i y s_j fijos, las $f_{ij}^{(n)}$ son números no negativos tales que $\sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \leq 1$. Si esta suma es estrictamente menor que 1, significa que una cadena que al inicio se encuentra en el estado s_i puede no alcanzar nunca el estado s_j . Cuando la suma sí es igual a 1, las $f_{ij}^{(n)}$ pueden considerarse como la función de masa de probabilidad de la variable aleatoria tiempo de transición τ_{ij} .

Definición 1.21. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov, la probabilidad de que la cadena alcance s_j empezando por s_i lo denominaremos **probabilidad de tiempo de transición**, definido como:

$$f_{ij}^* := \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \leq 1$$

Si consideramos la variable aleatoria τ_{ij} , entonces la probabilidad de que la cadena nunca alcance s_j , empezando desde s_i , es $P[\tau_{ij} = \infty] = 1 - f_{ij}^*$. Y está claro que f_{ii}^* es la probabilidad de que la cadena vuelva por lo menos una vez al estado s_i empezando por s_i . Para calcular estas probabilidades, podemos utilizar lo siguiente:

Teorema 1.22. Las probabilidades de tiempo de transición f_{ij}^* cumplen la ecuación:

$$f_{ij}^* = a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} f_{kj}^* \quad (1.6)$$

Demostración. Por 1.20:

$$\begin{aligned} f_{ij}^* &:= \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} = a_{ij} + \sum_{n=2}^{\infty} f_{ij}^{(n)} = a_{ij} + f_{ij}^{(2)} + f_{ij}^{(3)} + \dots \\ &= a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} f_{kj}^{(1)} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} f_{kj}^{(2)} + \dots \\ &= a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \sum_{n=1}^{\infty} f_{kj}^{(n)} = a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} f_{kj}^* \quad \square \end{aligned}$$

Ejemplo 1.3. Volviendo al ejemplo de “blackjack”, ya vimos que la cadena convergía a W o L con probabilidad 1. Calculemos ahora la probabilidad de ganar o de perder dado un estado inicial. Es claro que $f_{WW}^* = f_{LL}^* = 1$ pues una vez que se gana o se pierde no se modifica más el estado. Por el mismo motivo, tenemos que $f_{WL}^* = f_{LW}^* = 0$. Trabajando hacia atrás, usando 1.6:

$$\begin{aligned} f_{8W}^* &= a_{8W} + \sum_{s_k \neq W} a_{8k} f_{kW}^* = a_{8W} + a_{88} f_{8W}^* + a_{8L} f_{LW}^* \\ &= \frac{1}{4} + \frac{1}{4} f_{8W}^* + \frac{2}{4} f_{LW}^* = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} f_{8W}^* \end{aligned}$$

Despejando tenemos que:

$$f_{8W}^* = \frac{1}{3}$$

De forma similar:

$$\begin{aligned} f_{8L}^* &= a_{8L} + \sum_{s_k \neq L} a_{8k} f_{kL}^* = a_{8L} + a_{88} f_{8L}^* + a_{8W} f_{WL}^* \\ &= \frac{2}{4} + \frac{1}{4} f_{8L}^* + \frac{1}{4} f_{WL}^* = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} f_{8L}^* \end{aligned}$$

Despejando:

$$f_{8L}^* = \frac{2}{3}$$

No es de sorprender que $f_{8W}^* + f_{8L}^* = 1$, pues el juego siempre acabará ganando o perdiendo. Es más, para cualquier estado inicial s_i , es cierto que $f_{iW}^* + f_{iL}^* = 1$. Para calcular la probabilidad de ganar desde el estado 7:

$$\begin{aligned} f_{7W}^* &= a_{7W} + \sum_{s_k \neq W} a_{7k} f_{kW}^* = a_{7W} + a_{77} f_{7W}^* + a_{78} f_{8W}^* + a_{7L} f_{LW}^* \\ &= \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{3} + f_{7W}^* \right) = \frac{1}{3} + \frac{1}{4} f_{7W}^* \end{aligned}$$

Despejando:

$$f_{7W}^* = \frac{4}{9}$$

Si procedemos de esta manera, obtenemos la siguiente tabla:

i	f_{iW}^*	f_{iL}^*
8	1/3	2/3
7	4/9	5/9
6	16/27	11/27
5	37/81	44/81
4	121/243	122/243
3	376/729	353/729
2	1072/2187	1115/2187
1	3289/6561	3272/6561
0	9889/19683	9794/19683

Podemos ver que la probabilidad de ganar es mayor o menor dependiendo de cada estado inicial. En particular, el estado 6 ofrece la mejor perspectiva para ganar. Esto se debe a que desde el estado 6 no es posible perder en la siguiente ronda pero sí es posible ganar.

Ahora que sabemos la probabilidad de alcanzar un estado s_j desde un estado s_i , nos interesa saber cuanto tarda de media:

Definición 1.23. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov, el **tiempo de transición medio** del estado s_i al estado s_j se define por:

$$\mu_{ij} := E[\tau_{ij}] = \begin{cases} \infty, & \text{si } f_{ij}^* < 1 \\ \sum_{n=1}^{\infty} n f_{ij}^{(n)}, & \text{si } f_{ij}^* = 1 \end{cases}$$

Para el caso $i=j$, se llamará **tiempo medio de recurrencia** para el estado s_i .

Este tiempo representa el número medio de transiciones que se necesita para pasar de un estado s_i a otro estado s_j . Para calcularlo, podemos emplear lo siguiente:

Teorema 1.24. Supongamos que para todo $s_k \in \mathbb{S}$, $\mu_{kj} < \infty$. Entonces, sea $s_i \in \mathbb{S}$, el tiempo de transición medio μ_{ij} satisface la ecuación:

$$\mu_{ij} = 1 + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \mu_{kj} \quad (1.7)$$

Demostración. Puesto que $\mu_{ij} < \infty$, debe ser $\mu_{ij} = \sum_{n=1}^{\infty} n f_{ij}^{(n)}$. Por 1.20:

$$\begin{aligned} \mu_{ij} &= a_{ij} + \sum_{n=2}^{\infty} n f_{ij}^{(n)} = a_{ij} + 2f_{ij}^{(2)} + 3f_{ij}^{(3)} + \dots \\ &= a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} 2f_{kj}^{(1)} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} 3f_{kj}^{(2)} + \dots = a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \sum_{n=2}^{\infty} n f_{kj}^{(n-1)} \\ &= a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \sum_{n=1}^{\infty} (n+1) f_{kj}^{(n)} = a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \sum_{n=1}^{\infty} (n f_{kj}^{(n)} + f_{kj}^{(n)}) \end{aligned}$$

Por hipótesis, $\mu_{kj} < \infty$, luego $\sum_{n=1}^{\infty} n f_{kj}^{(n)}$ es una serie convergente por ser una serie de términos no negativos y mayorada. De mismo modo, por definición de μ_{kj} tenemos que $f_{kj}^* = \sum_{n=1}^{\infty} f_{kj}^{(n)} = 1$ es convergente, y en consecuencia, la serie de sumas de términos es convergente con $\sum_{n=1}^{\infty} n f_{kj}^{(n)} + \sum_{n=1}^{\infty} f_{kj}^{(n)} = \sum_{n=1}^{\infty} (n f_{kj}^{(n)} + f_{kj}^{(n)})$. Empleando esto:

$$\begin{aligned} \mu_{ij} &= a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \left(\sum_{n=1}^{\infty} n f_{kj}^{(n)} + \sum_{n=1}^{\infty} f_{kj}^{(n)} \right) = a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} (\mu_{kj} + 1) \\ &= a_{ij} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \mu_{kj} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} = \sum_{s_k \in \mathbb{S}} a_{ik} + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \mu_{kj} \end{aligned}$$

$$= 1 + \sum_{s_k \neq s_j} a_{ik} \mu_{kj} \quad \square$$

Los conceptos anteriores son extensibles a subconjuntos de S . Si tomamos el ejemplo de “blackjack”, podemos considerar el subconjunto $E = \{W, L\}$. Si $\mathcal{X}_t \in E$, implica que el juego ha terminado. Está claro que desde cualquier estado s_i , $f_{iE}^* = 1$ y $\mu_{iE} < \infty$. Podemos reescribir 1.7 como:

$$\mu_{iE} = 1 + \sum_{s_k \notin E} a_{ik} \mu_{kE}$$

Es claro que $\mu_{WE} = \mu_{LE} = 1$. Si $\mathcal{X}_0 = 8$:

$$\mu_{8E} = 1 + a_{88} \mu_{8E} = 1 + \frac{1}{4} \mu_{8E}$$

Despejando:

$$\mu_{8E} = \frac{4}{3}$$

Para $\mathcal{X}_0 = 7$:

$$\mu_{7E} = 1 + a_{77} \mu_{7E} + a_{78} \mu_{8E} = 1 + \frac{1}{4} \mu_{7E} + \frac{1}{4} \frac{4}{3} = \frac{4}{3} + \frac{1}{4} \mu_{7E}$$

Despejando:

$$\mu_{7E} = \frac{16}{9}$$

Si seguimos precediendo de esta manera, obtenemos la siguiente tabla:

i	μ_{iE}	\approx
8	$4/3$	1.333
7	$16/9$	1.778
6	$64/27$	2.370
5	$256/81$	3.160
4	$916/243$	3.700
3	$3232/729$	4.433
2	$11200/2187$	5.121
1	$37888/6561$	5.775
0	$126820/19683$	6.443

Que representa el número de rondas que se necesita para terminar el juego iniciando desde cada estado.

1.2.4 Estados recurrentes y transitorios

Vamos a distinguir ahora entre diversos tipos de estados, lo cual nos va a permitir dividir el espacio de estados en varios grupos. Para ello vamos a utilizar la probabilidad de tiempo de transición f_{ij}^* :

Definición 1.25. Un estado $s_i \in S$ se dice **recurrente** si y sólo si $f_{ii}^* = 1$, en otro caso, se llamará **transitorio**. Si todos los estados son recurrentes, entonces se hablará de una cadena de Markov recurrente, en otro caso, transitoria.

Un estado es transitorio si, después de haber entrado a este estado la cadena puede no regresar nunca a él. Por consiguiente, el estado s_i es transitorio si y sólo si existe un estado $s_j \neq s_i$ que es accesible desde s_i pero no viceversa. Así, si el estado s_i es transitorio y la cadena alcanza dicho estado, existe una probabilidad positiva de que la cadena se moverá al estado s_j y no regrese nunca al estado s_i .

La otra posibilidad es que iniciando desde el estado s_i , la cadena siempre regresará a ese estado. En este caso, decimos que el estado es recurrente.

Estas propiedades también se pueden definir utilizando las probabilidades de transición en n pasos:

Proposición 1.26. Sea $s_i \in S$:

- s_i es recurrente si y sólo si $\sum_{n=1}^{\infty} a_{ii}^{(n)} = \infty$.
- s_i es transitorio si y sólo si $\sum_{n=1}^{\infty} a_{ii}^{(n)} < \infty$.

Demostración. Para demostrarlo, primero veamos la relación que existe entre $a_{ij}^{(n)}$ y $f_{ij}^{(n)}$, recordemos que $a_{ij}^{(n)}$ es la probabilidad de que se produzca una transición de s_i a s_j en n pasos, lo cual incluye posibles transiciones en los pasos $1, 2, 3, \dots, n-1$. De esta forma:

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(1)} &= f_{ij}^{(1)} \\ a_{ij}^{(2)} &= f_{ij}^{(2)} + f_{ij}^{(1)} a_{jj}^{(1)} \\ a_{ij}^{(3)} &= f_{ij}^{(3)} + f_{ij}^{(2)} a_{jj}^{(1)} + f_{ij}^{(1)} a_{jj}^{(2)} \end{aligned}$$

Así, en general:

$$a_{ij}^{(n)} = \sum_{k=1}^n f_{ij}^{(k)} a_{jj}^{(n-k)} = f_{ij}^{(n)} + f_{ij}^{(n-1)} a_{jj}^{(1)} \cdots + f_{ij}^{(1)} a_{jj}^{(n-1)} \quad (1.8)$$

Usando esto:

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_{ii}^{(n)} = \sum_{n=1}^{\infty} \left[f_{ii}^{(n)} + f_{ii}^{(n-1)} a_{ii}^{(1)} \cdots + f_{ii}^{(1)} a_{ii}^{(n-1)} \right]$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^{(n)} + \sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^{(n)} \sum_{k=1}^{\infty} a_{ii}^{(k)} = f_{ii}^* + f_{ii}^* \sum_{n=1}^{\infty} a_{ii}^{(n)}$$

Despejando:

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_{ii}^{(n)} = \frac{f_{ii}^*}{1 - f_{ii}^*}$$

Luego esta claro que:

- s_i es recurrente $\iff f_{ii}^* = 1 \iff \sum_{n=1}^{\infty} a_{ii}^{(n)} = \frac{f_{ii}^*}{1 - f_{ii}^*} = \infty$.
- s_i es transitorio $\iff f_{ii}^* < 1 \iff \sum_{n=1}^{\infty} a_{ii}^{(n)} = \frac{f_{ii}^*}{1 - f_{ii}^*} < \infty$.

Con esta proposición, ya podemos demostrar que las propiedades de recurrencia y transitoriedad son de clase:

Teorema 1.27. Sean $s_i, s_j \in \mathbb{S}$, si s_i es recurrente e $i \longrightarrow j$, entonces $f_{ji}^* = 1$, s_j es recurrente y $f_{ij}^* = 1$.

Demostración. Si $i \longrightarrow j, \exists n \in \mathbb{N}$ tal que $a_{ij}^{(n)} > 0$. Por 1.8, $\exists k \in \{1, \dots, n\}$ tal que $f_{ij}^{(k)} > 0$, luego $f_{ij}^* > 0$. Si fuese $f_{ji}^* < 1$, con probabilidad $1 - f_{ji}^* > 0$ partiendo desde s_j no pasaríamos nunca por s_i . Así que con probabilidad al menos $f_{ij}^*(1 - f_{ji}^*) > 0$ saliendo de s_i no volveríamos a pasar nunca por s_i , lo cual contradice con que s_i sea recurrente.

Puesto que $f_{ji}^* > 0$, existirá $m \in \mathbb{N}$ tal que $f_{ji}^{(m)} > 0$, por 1.8, $a_{ji}^{(m)} > 0$, luego también $j \longrightarrow i$ e $i \longleftrightarrow j$.

Veamos ahora que s_j ha de ser recurrente: puesto que $i \longleftrightarrow j$, existen $n, m \in \mathbb{N}$ tales que $a_{ij}^{(n)} > 0$ y $a_{ji}^{(m)} > 0$, para todo $r \geq m + n$:

$$a_{jj}^{(r)} \geq a_{ji}^{(m)} a_{ii}^{(r-m-n)} a_{ij}^{(n)}$$

Por lo tanto:

$$\sum_{r=1}^{\infty} a_{jj}^{(r)} \geq \sum_{r=1}^{n+m} a_{jj}^{(r)} + \sum_{r=n+m+1}^{\infty} a_{ji}^{(m)} a_{ii}^{(r-m-n)} a_{ij}^{(n)} = \sum_{r=1}^{n+m} a_{jj}^{(r)} + a_{ji}^{(m)} a_{ij}^{(n)} \sum_{r=1}^{\infty} a_{ii}^{(r)}$$

Puesto que s_i es recurrente, $\sum_{r=1}^{\infty} a_{ii}^{(r)} = \infty$ luego también $\sum_{r=1}^{\infty} a_{jj}^{(r)} = \infty$, por la proposición anterior, s_j es recurrente.

Finalmente, $f_{ij}^* = 1$ es clara utilizando que $j \longrightarrow i$, s_j es recurrente y la primera parte de esta demostración. \square

De la demostración, podemos apreciar también que si s_i es recurrente y s_j es transitoria entonces no es posible acceder desde s_i a s_j ($i \not\rightarrow j$). En consecuencia:

Corolario 1.28. Sean $s_i, s_j \in \mathbb{S}$ con $i \longleftrightarrow j$, entonces o son ambos transitorios o son ambos recurrentes.

Vamos a presentar ahora un tipo especial de estado recurrente:

Definición 1.29. Un estado $s_i \in \mathbb{S}$ se llamará **absorbente** si $a_{ii} = 1$.

Si una cadena de Markov ha alcanzado un estado absorbente s_i , se permanecerá allí para siempre pues $a_{ij} = 0$ para todo $s_j \neq s_i$. En consecuencia la clase de equivalencia $[s_i]$ estará formado únicamente por s_i .

Con los resultados anteriores seremos capaces de dividir el espacio de estados \mathbb{S} en dos subconjuntos disjuntos; uno constituido por los estados transitorios y otro por los estados recurrentes. Los estados transitorio son inaccesibles desde los recurrentes. Los estados recurrentes se pueden dividir de manera única en clases de equivalencia mediante la relación de equivalencia $i \longleftrightarrow j$. Notemos que si s_i y s_j están en clases distintas entonces $i \not\rightarrow j$ y $j \not\rightarrow i$ por el teorema 1.27.

De acuerdo con este resultado, podemos hacer una reordenación de los estados de \mathbb{S} (es decir, una reordenación de las filas y columnas de la matriz de transición) que coloque los estados transitorios al final y agrupe los estados de cada una de las clases de equivalencia de los estados recurrentes. Tendremos así, la siguiente estructura para la matriz de transición de una cadena de Markov:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} P_1 & 0 & \dots & 0 & \\ 0 & P_2 & \dots & 0 & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \dots & P_r & \\ \hline & R & & & Q \end{array} \right)$$

donde las submatrices P_i están asociadas a cada clase de equivalencia, R proporciona las probabilidades para pasar desde los estados transitorios a los recurrentes y Q da las probabilidades entre estados transitorios.

1.3 COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO DE UNA CADENA DE MARKOV

Aparte de las definiciones del sección anterior, que nos permiten calcular directamente probabilidades relacionadas con los estados, también nos interesa el comportamiento de una cadena de Markov a largo plazo. Para ello, vamos a estudiar la matriz de transición en n pasos cuando n crece hacia infinito.

En primer lugar, vamos a presentar una distribución especial:

Definición 1.30. Sea A la matriz de transición de una cadena de Markov $\{\mathcal{X}_t\}$, diremos que $\pi \in \Delta^{n-1}$ es una distribución estacionaria si $\pi A = \pi$.

Supongamos que $\{\mathcal{X}_t\}$ es una cadena de Markov con matriz de transición A . Hemos visto que, dependiendo de la distribución inicial, el proceso resultante $\{\mathcal{X}_t\}$ evoluciona de forma distinta a lo largo del tiempo. Sin embargo, existe una distribución estacionaria π , entonces $\pi A^t = \pi$ para todo t . Por ello, si \mathcal{X}_0 tiene la distribución π , por 1.5, \mathcal{X}_t tiene la distribución π para todo t .

Notemos también que π es un vector propio a la izquierda de A con valor propio 1, por la proposición 1.4, sabemos que siempre existe. Una distribución estacionaria podría entender como un punto de equilibrio de la cadena. Es posible que existan varias distribuciones estacionarias pero bajo ciertas condiciones, podemos afirmar que existe una única distribución estacionaria y la cadena converge hacia ella. Para ello, introducimos algunas propiedades de las cadenas irreducible y aperiódicas basadas en contenidos de [2]:

Proposición 1.31. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov aperiódica, entonces existe $N \in \mathbb{N}$ tal que $a_{ii}^{(m)} > 0$ para todo estado $s_i \in \mathbb{S}$ y todo número natural $m \geq N$.

Para demostrarlo utilizaremos siguiente lema de teoría de números:

Lema 1.32. Sea D un conjunto de enteros no negativos tal que:

1. es cerrado para la suma, es decir, si $a \in D$ y $b \in D \implies a + b \in D$
2. $m.c.d(D) = 1$

entonces D contiene a todos los enteros no negativos salvo un subconjunto finito. En consecuencia, existe $N \in \mathbb{N}$ tal que para todo natural $m \geq N$, $m \in D$.

Demostración (proposición 1.31). Para cada estado s_i , consideramos:

$$D_i = \{n \in \mathbb{N} \mid a_{ii}^{(n)} > 0\}$$

puesto que la cadena es aperiódica, todos los estados son aperiódicos y $m.c.d(D_i) = 1$. Sean t, s elementos de D_i , luego $a_{ii}^{(t)} > 0$ y $a_{ii}^{(s)} > 0$. Como:

$$a_{ii}^{(t+s)} \geq a_{ii}^{(t)} a_{ii}^{(s)} > 0 \implies t + s \in D_i, D_i \text{ es cerrado para la suma}$$

por el lema anterior, existe $N_i \in \mathbb{N}$ tal que $\forall m \geq N_i, m \in D_i$. Puesto que el espacio de estados \mathbb{S} es finito, existe $N = \max_{s_i \in \mathbb{S}} \{N_i\}$ tal que $\forall m \geq N, m \in \mathbb{N}, a_{ii}^{(m)} > 0, \forall s_i \in \mathbb{S}$. \square

Proposición 1.33. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov irreducible y aperiódica, entonces existe $M \in \mathbb{N}$ tal que $a_{ij}^{(m)} > 0$ para todo estados $s_i, s_j \in \mathbb{S}$ y número natural $m \geq M$.

Demostración. Puesto que la cadena es aperiódica, por la proposición 1.31, existe $N \in \mathbb{N}$ tal que $a_{ii}^{(m)} > 0$ para todo estado $s_i \in \mathbb{S}$ y todo número natural $m \geq N$.

Puesto que la cadena es irreducible, para todo par de estados s_i, s_j , existe $n_{i,j} \in \mathbb{N}$ tal que $a_{ij}^{(n_{i,j})} > 0$. Por lo tanto, para $m \geq N + n_{i,j}$:

$$a_{ij}^{(m)} \geq a_{ii}^{(m-n_{i,j})} a_{ij}^{(n_{i,j})} > 0$$

Puesto que el espacio de los estados es finito, basta elegir $M = N + \max_{s_i, s_j \in S} \{n_{i,j}\}$. \square

Definición 1.34. Una cadena de Markov $\{\mathcal{X}_t\}$ es **regular** si su matriz de transición A es primitiva. Esto es, existe $k \in \mathbb{N}$ tal que A^k tiene sólo elementos estrictamente positivos.

Corolario 1.35. Una cadena de Markov es regular si y sólo si es irreducible y aperiódica.

Teorema 1.36. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ una cadena de Markov irreducible, entonces existe una única distribución estacionaria. Si la cadena es además aperiódica, para cada distribución inicial c^0 :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|c^t - \pi\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|c^0 A^t - \pi\| = 0$$

donde π es la distribución estacionaria asociada a $\{\mathcal{X}_t\}$.

El teorema anterior afirma que si la cadena es irreducible, existirá un único punto de equilibrio. Es más, si la cadena es también aperiódica, entonces a largo plazo siempre convergerá hacia dicho equilibrio, sea cual sea la distribución inicial. Para la demostración de este teorema, necesitaremos también algunos resultados relacionados con las matrices:

Definición 1.37. Dada una matriz cuadrada real A , se llama grafo de A ($\text{graf}(A)$) a la gráfica dirigida sobre d nodos $\{N_1, N_2, \dots, N_d\}$ tal que si $a_{ij} > 0$ entonces existe una flecha desde N_i hacia N_j .

Definición 1.38. Se dice que $\text{graf}(A)$ está **fuertemente conectado** si para toda pareja de nodos N_i, N_j existe un camino que los conecta, es decir, se puede ir del nodo N_i al N_j tras m pasos en el grafo de A .

Definición 1.39. Sea A una matriz cuadrada positiva, se dice que A es **irreducible** si $\text{graf}(A)$ está fuertemente conectado.

Esta definición es análoga a la irreductibilidad que hemos dado para los estados. No es difícil ver que si una cadena de Markov es irreducible si y sólo si su matriz de transición A es irreducible.

Teorema 1.40. Sea A una matriz irreducible, entonces:

1. $\lambda_1 = \rho(A)$ es valor propio positivo y simple.

2. Existe un único vector propio u_1 asociado a $\lambda_1 = \rho(A)$ con todos los componentes positivos y $\|u_1\|_1 = 1$, llamado vector de Perron.
3. Todos los valores propios de módulo igual a $\rho(A)$ son simples.

Con el anterior teorema y la proposición 1.4, tenemos que para una cadena de Markov irreducible el vector propio asociado a 1 es único y por lo tanto existe una única distribución estacionaria. Además, por el teorema, sabemos que cada componente de la distribución estacionaria es positivo. Para probar la segunda parte del teorema 1.36 necesitamos algunos resultados más:

Teorema 1.41 (Teorema de Perron-Frobenius). Sea A una matriz primitiva, entonces:

1. A tiene un valor propio λ_1 real, estrictamente positivo y dominante, esto es:

$$|\lambda_i| < \lambda_1, \forall \lambda_i \in \sigma(A) \setminus \{\lambda_1\}$$

$$\text{y } \rho(A) = \lambda_1.$$

2. Se puede tomar un vector propio v_1 asociado al valor propio λ_1 con todas las componentes positivas.

Como consecuencia de este teorema tenemos el siguiente corolario:

Corolario 1.42. Sea A una matriz primitiva de dimensión $d \times d$, λ_1 su valor propio real, estrictamente positivo y dominante, y v_1 vector propio asociado a λ_1 . Entonces, sea X_0 un vector de dimensión d con todos los componentes no negativos y al menos un componente estrictamente positivo, entonces:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\|X_0 A^n\|_1} X_0 A^n = \frac{1}{\|v_1\|_1} v_1$$

Si una cadena de Markov es irreducible y aperiódica, sabemos que es regular. Por lo tanto, usando el corolario anterior (pues $c^0 \in \Delta^{n-1}$) tenemos que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\|c^0 A^t\|_1} c^0 A^t = \frac{1}{\|\pi\|_1} \pi$$

Puesto que para todo t , $c^t = c^0 A^t \in \Delta^{n-1}$ y $\pi \in \Delta^{n-1}$, tenemos claramente la segunda afirmación del teorema 1.36. Reflejamos en el siguiente ejemplo [3] la utilidad del teorema 1.36:

Ejemplo 1.4. Supongamos que una ciudad tiene tres cadenas de supermercados $\{A, B, C\}$. Considerando un determinado periodo de tiempo, observamos que, por diferentes razones como el precio, la calidad, etc, algunos habitantes deciden cambiar de cadena.

Para estudiar este cambio a largo plazo, se utiliza la cadena $\{\mathcal{X}_t\}$ = la cadena de supermercado escogida por el cliente en el día t . Se supone también que la proporción de clientes que cambian de supermercado al día es constante con la siguiente matriz de transición:

$$A = \begin{pmatrix} 0,8 & 0,1 & 0,1 \\ 0,2 & 0,7 & 0,1 \\ 0,1 & 0,3 & 0,6 \end{pmatrix}$$

Está claro que la cadena es regular pues la matriz de transición sólo contiene elementos positivos, el vector propio asociado a 1 es:

$$\pi = (0,45 \quad 0,35 \quad 0,2)$$

Lo cual nos indica que a largo plazo, el 45 % de los clientes se quedarán en el supermercado *A*, el 35 % en el supermercado *B* y el 20 % en el supermercado *C*.

Notemos que para este resultado no ha sido necesario saber cual es la proporción de clientes que acuden a cada supermercado en el momento del que se inicia el estudio. Para comprobar la previsión anterior, podemos suponer una distribución inicial alejada de la distribución estacionaria:

$$c^0 = (0,1 \quad 0,2 \quad 0,7)$$

Tras 5 días:

$$c^5 = c^0 A^5 = (0,3995 \quad 0,3848 \quad 0,2156)$$

Tras 14 días:

$$c^{14} = c^0 A^{14} = (0,44937 \quad 0,3506 \quad 0,20003)$$

MODELOS OCULTOS DE MARKOV

En este capítulo, estudiaremos un tipo especial de proceso estocástico llamado modelo oculto de Markov (HMM). Empezaremos introduciendo estos modelos, para después seguir discutiendo sobre los problemas y algoritmos que conllevan. En adelante, utilizaremos la abreviatura HMM para referirnos a los modelos ocultos de Markov.

Hasta ahora hemos considerado cadenas de Markov en las cuales cada estado es un evento observable (o material). Este modelo es demasiado restrictivo para aplicar a numerosos problemas en los cuales no podemos observar directamente los acontecimientos que nos interesan. Para estudiar estos problemas extendemos el concepto de modelo de Markov para incluir los casos en los que la observación es una función probabilística del estado. Como resultado, obtenemos un proceso estocástico conjunto formado por un proceso subyacente que no es observable (es decir, oculto) pero que produce una serie de consecuencias observables mediante otro proceso estocástico. Para aclarar esta idea, consideramos el siguiente modelo que aparece en [4].

Ejemplo 2.1 (El modelo de urnas y pelotas). Supongamos que hay N urnas de cristal en una habitación. En cada urna hay una variación de pelotas de colores. Asumimos también que hay M colores distintos.

En la habitación hay una persona que, de acuerdo a un proceso aleatorio, elige una de las urnas. De la urna elegida, una pelota es escogida al azar, y su color se toma como observación. La pelota es entonces repuesta en la urna en la cual fue seleccionada. Se elige la siguiente urna dependiendo de la última urna escogida y se repite el proceso de selección de pelota. Tras un número determinado de realizaciones, se publica la secuencia de colores que se ha registrado.

Este proceso genera una secuencia finita de observaciones de colores, del cual queremos modelarlo como la salida observable de un HMM. También es claro que la aparición de un color está condicionada a la urna que se seleccionó. Sin embargo, puesto que las elecciones de urnas no son registradas, son ocultos para el público.

El ejemplo anterior nos da una idea de lo que es un HMM, para concretarlo, lo introducimos con la siguiente definición:

Definición 2.1. Sea $\{\mathcal{X}_t\}$ e $\{\mathcal{Y}_t\}$ procesos estocásticos tomando valores en conjuntos finitos $\mathcal{S} = \{s_1, \dots, s_n\}$ y $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_m\}$ respectivamente, el proceso conjunto $\{(\mathcal{X}_t, \mathcal{Y}_t)\}$ es un modelo de Markov oculto si:

- $\{\mathcal{X}_t\}$ es una cadena de Markov homogénea.
- $P[\mathcal{Y}_t = y_t | \mathcal{X}_0 = x_0, \dots, \mathcal{X}_t = x_t, \mathcal{Y}_0 = y_0, \dots, \mathcal{Y}_{t-1} = y_{t-1}] = P[\mathcal{Y}_t = y_t | \mathcal{X}_t = x_t]$, es decir, la observación en el instante t depende únicamente del estado que se encuentra en dicho momento.

En diversas literaturas, en lugar de dar una definición explícita de HMM nombran los elementos que lo caracteriza. Puesto que son de enorme importancia, vamos a presentarlos también. En definitiva, un HMM es caracterizado por:

1. El conjunto de estados $\mathcal{S} = \{s_1, \dots, s_n\}$, que a pesar de no ser observables, suelen conllevar un significado físico del problema.
2. El conjunto de posibles observaciones $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_m\}$ que corresponden a las salidas materiales del sistema.
3. La matriz de transición A asociada a $\{\mathcal{X}_t\}$ con:

$$a_{ij} = P[\mathcal{X}_{t+1} = s_j | \mathcal{X}_t = s_i]$$

4. Una matriz $B \in [0, 1]^{n \times m}$ estocástica con:

$$b_{jk} = P[\mathcal{Y}_t = v_k | \mathcal{X}_t = s_j] \text{ para todo } t \geq 0$$

Para disminuir la confusión, en adelante utilizaremos la notación $b_j(k)$ para referirnos a estas probabilidades.

5. Una distribución inicial $\pi \in \Delta^{n-1}$ tal que:

$$P[\mathcal{X}_0 = s_i] = \pi_i$$

Es frecuente ver, por ejemplo en [4], utilizar la notación:

$$\lambda = (A, B, \pi)$$

para representar un HMM.

2.1 LOS TRES PROBLEMAS BÁSICOS PARA LOS HMM

Dada la forma de HMM que acabamos de presentar, podemos identificar 3 entidades: el modelo, la secuencia de observaciones o de salidas y la secuencia de estados. Existen 3 problemas básicos de interés que involucran a estas entidades [6]:

1. Dada un HMM, ¿cuál es la probabilidad de observar una secuencia particular de salidas?
2. Dada un HMM y una secuencia de salidas, ¿cuál es la secuencia de estados más probable para generar dichas salidas?

3. Dada una secuencia de salidas y conociendo el espacio de estados, ¿cuál es el HMM que maximice la probabilidad de que se observe dichas salidas?

El **problema 1** es un problema de evaluación donde calculamos la probabilidad de observar una secuencia de salidas dado el modelo. También nos permite conocer cómo se ajusta el modelo a dicha secuencia. Esto puede ser útil, por ejemplo, si estamos considerando varios modelos posibles; la solución del **problema 1** nos permitiría elegir el modelo que más se ajuste a las observaciones.

El **problema 2** es donde intentamos cubrir la parte oculta del modelo, es decir, a encontrar la secuencia “correcta” de estados. Está claro que dicha secuencia “correcta” de estados no existe en realidad, pero para situaciones prácticas, utilizaremos criterios de optimalidad para resolver este problema de mejor manera posible.

En el **problema 3** pretendemos optimizar los parámetros del modelo para que describa de mejor manera cómo se produce una secuencia de salidas dada. La secuencia de observaciones usada para ajustar los parámetros del modelo se denomina secuencia de entrenamiento pues es usada para “entrenar” el HMM. El problema de entrenamiento es crucial para aplicaciones de HMM, puesto que nos permite adaptar de forma óptima los parámetros a los datos de entrenamiento observados, es decir, nos permite crear mejores modelos para fenómenos reales.

Como ejemplo [4], podemos considerar un sistema de reconocimiento de voz aislado para reconocer las palabras de un vocabulario de k palabras. Representamos la señal de voz de una palabra como una secuencia de códigos durante el tiempo. Asumimos que la codificación se realiza con un alfabeto de m caracteres. En primer lugar, diseñamos un HMM con n estados para cada una de las palabras, esto se lleva a cabo empleando la solución del **problema 3** para optimizar los parámetros estimados. Para desarrollar el significado físico de los estados del modelo, utilizamos la solución del **problema 2** para transformar cada una de las secuencias de entrenamiento en estados y estudiar las propiedades de los estados que conllevan a las observaciones. El objetivo es tratar de refinar el modelo (por ejemplo añadir más estados o utilizar un alfabeto distinto para codificar las señales) para mejorar su capacidad de modelar las secuencias de palabras habladas. Por último, una vez que obtenemos el conjunto de k HMM, el reconocimiento de una palabra se lleva a cabo usando la solución del **problema 1** para distinguir cada uno de los modelos basándose en la secuencia test de observaciones dada, eligiendo la palabra asociada al modelo que ha obtenido la mayor probabilidad.

En las siguientes subsecciones vamos a intentar solucionar estos problemas siguiendo principalmente la metodología descrita en [4]. Notemos que, por ser $\{\mathcal{X}_t\}$ homogénea e \mathcal{Y}_t depende únicamente del estado en el instante t , el instante en el que se comienza a observar las salidas es indiferente. Por lo tanto, podemos suponer siempre que las observaciones inician en el instante $t = 0$.

2.1.1 Solución al problema 1

Queremos calcular la probabilidad de secuencia de observación concreta, $O = (O_0, O_1, \dots, O_r)$ conocido el modelo. La forma más directa de hacerlo es mediante enumeración de todas las posibles secuencias de estados de longitud $r + 1$. Consideramos una de ellas:

$$Q = (q_0, q_1, \dots, q_r) \in S^{r+1}$$

siendo q_0 el estado inicial. Para facilitar la escritura, introducimos la siguiente notación:

$$\mathcal{Y}_k^l := (\mathcal{Y}_k, \mathcal{Y}_{k+1}, \dots, \mathcal{Y}_{l-1}, \mathcal{Y}_l)$$

Por lo tanto, la probabilidad de secuencia de observación dada la secuencia de estados Q es:

$$P[\mathcal{Y}_0^r = O | \mathcal{X}_0^r = Q] = \prod_{t=0}^r P[\mathcal{Y}_t = O_t | \mathcal{X}_t = q_t]$$

donde aplicamos la independencia entre las observaciones. Por lo tanto:

$$P[\mathcal{Y}_0^r = O | \mathcal{X}_0^r = Q] = b_{q_0}(O_0) \cdot b_{q_1}(O_1) \cdots b_{q_r}(O_r)$$

Y la probabilidad de dicha secuencia de estados Q puede ser calculada como:

$$P[\mathcal{X}_0^r = Q] = \pi_{q_0} \cdot a_{q_0 q_1} \cdot a_{q_1 q_2} \cdots a_{q_{r-1} q_r}$$

Es claro que:

$$P[\mathcal{Y}_0^r = O, \mathcal{X}_0^r = Q] = P[\mathcal{Y}_0^r = O | \mathcal{X}_0^r = Q] \cdot P[\mathcal{X}_0^r = Q]$$

Y la probabilidad de O se puede obtener sumando esta probabilidad mediante todas las posibles secuencias de estados:

$$\begin{aligned} P[\mathcal{Y}_0^r = O] &= \sum_{Q \in S^{r+1}} P[\mathcal{Y}_0^r = O | \mathcal{X}_0^r = Q] \cdot P[\mathcal{X}_0^r = Q] \\ &= \sum_{(q_0, q_1, \dots, q_r) \in S^{r+1}} \pi_{q_0} \cdot b_{q_0}(O_0) \cdot a_{q_0 q_1} \cdot b_{q_1}(O_1) \cdots a_{q_{r-1} q_r} \cdot b_{q_r}(O_r) \end{aligned}$$

Esta manera de calcular, involucra un orden de $2 \cdot (r + 1) \cdot n^{(r+1)}$ operaciones, puesto que existen $n^{(r+1)}$ posibles secuencias de estados, y para cada una de estas secuencias hay que realizar $2 \cdot (r + 1)$ cálculos. Esto hace imposible calcular esta probabilidad, pues incluso si para un modelo de 5 estados, calcular la probabilidad de una secuencia con 100 observaciones ($r = 99$) se necesitaría $2 \cdot 100 \cdot 5^{100} \approx 10^{72}$ operaciones. Afortunadamente, existe una forma más eficiente de resolver **problema 1** y es comúnmente conocido como el **algoritmo de avance-retroceso**.

Definición 2.2. Definimos la **variable de avance** $\alpha_t(i)$ como la probabilidad de observar la secuencia parcial (O_0, O_1, \dots, O_t) y que el estado en el instante t sea s_i :

$$\alpha_t(i) = P[\mathcal{Y}_0^t = (O_0, \dots, O_t), \mathcal{X}_t = s_i]$$

En el instante inicial $t = 0$, para todo $i \in \{1, \dots, n\}$:

$$\alpha_0(i) = P[\mathcal{Y}_0 = O_0, \mathcal{X}_0 = s_i] = P[\mathcal{Y}_0 = O_0 | \mathcal{X}_0 = s_i] \cdot P[\mathcal{X}_0 = s_i] = b_i(O_0) \cdot \pi_i$$

Suponiendo que conocemos las $\alpha_t(i)$ para todo i , podemos calcular fácilmente $\alpha_{t+1}(j)$, que es la probabilidad de observar $(O_0, O_1, \dots, O_{t+1})$ y $\mathcal{X}_{t+1} = s_j$. Puesto que queremos que $\mathcal{X}_{t+1} = s_j$, primero calculamos la probabilidad de mantener la misma secuencia parcial actualizado el estado, esto no es más que la suma de las variables de avance en t multiplicados por las probabilidades de transición:

$$\begin{aligned} P[\mathcal{Y}_0^t = (O_0, \dots, O_t), \mathcal{X}_{t+1} = s_j] &= \\ = \sum_{i=1}^n P[\mathcal{Y}_0^t = (O_0, \dots, O_t), \mathcal{X}_t = s_i] \cdot P[\mathcal{X}_{t+1} = s_j | \mathcal{X}_t = s_i] &= \sum_{i=1}^n \alpha_t(i) \cdot a_{ij} \end{aligned}$$

Dado que \mathcal{Y}_{t+1} depende únicamente de \mathcal{X}_{t+1} , una vez conocida la suma anterior:

$$\begin{aligned} \alpha_{t+1}(j) &= P[\mathcal{Y}_0^{t+1} = (O_0, \dots, O_t, O_{t+1}), \mathcal{X}_{t+1} = s_j] = \\ &= P[\mathcal{Y}_0^t = (O_0, \dots, O_t), \mathcal{X}_{t+1} = s_j] \cdot P[\mathcal{Y}_{t+1} = O_{t+1} | \mathcal{X}_{t+1} = s_j] = \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \alpha_t(i) \cdot a_{ij} \right) \cdot b_j(O_{t+1}) \end{aligned}$$

Luego podemos calcular las variables de avance de forma recursiva:

$$\begin{aligned} \alpha_{t+1}(j) &= \left(\sum_{i=1}^n \alpha_t(i) \cdot a_{ij} \right) \cdot b_j(O_{t+1}), & 0 \leq t \leq r-1 \\ & & 1 \leq j \leq n \end{aligned} \quad (2.1)$$

Finalmente, notemos que:

$$P[\mathcal{Y}_0^r = O] = \sum_{i=1}^n P[\mathcal{Y}_0^r = O, \mathcal{X}_r = s_i] = \sum_{i=1}^n \alpha_r(i) \quad (2.2)$$

Si revisamos el cálculo de las variables de avance $\alpha_t(j)$, podemos ver que para cada estado se necesita $2n$ operaciones en una etapa $t > 0$, puesto que hay n estados, podemos concluir que el cálculo de todas las variables de avance requiere un orden de $2rn^2$ operaciones. Si $n = 5$ y $r = 99$, necesitaríamos alrededor de 5000 operaciones usando el algoritmo de avance, en comparación con 10^{72} operaciones que requiere en el cálculo directo.

La parte de retroceso del algoritmo no es necesario para resolver **problema 1**, pero va a ser usada en la solución al **problema 3**, así que vamos a presentarla aquí.

Definición 2.3. Definimos la **variable de retroceso** $\beta_t(i)$ como la probabilidad de observar la secuencia parcial $(O_{t+1}, O_{t+2}, \dots, O_r)$ condicionada a que en el instante t , el estado sea s_i . Es decir:

$$\beta_t(i) = P[\mathcal{Y}_{t+1}^r = (O_{t+1}, O_{t+2}, \dots, O_r) | \mathcal{X}_t = s_i]$$

Puesto que la secuencia de salidas acaba en O_r , $\beta_r(i)$ no se puede determinar usando la definición anterior. En este caso, se define:

$$\beta_r(i) = 1 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$$

De manera similar, podemos calcular $\beta_t(i)$ en base a $\beta_{t+1}(j)$. Puesto que conocemos éstos últimos, solo tenemos que preocuparnos por O_{t+1} . De nuevo, dado que \mathcal{Y}_t depende únicamente de \mathcal{X}_t :

$$\begin{aligned} P[\mathcal{Y}_{t+1}^r = (O_{t+1}, O_{t+2}, \dots, O_r) | \mathcal{X}_{t+1} = s_j] &= \\ = P[\mathcal{Y}_{t+1} = O_{t+1} | \mathcal{X}_{t+1} = s_j] \cdot P[\mathcal{Y}_{t+2}^r = (O_{t+2}, O_{t+3}, \dots, O_r) | \mathcal{X}_{t+1} = s_j] &= \\ = b_j(O_{t+1}) \cdot \beta_{t+1}(j) \end{aligned}$$

Además, puesto que \mathcal{X}_{t+1} depende de \mathcal{X}_t :

$$\begin{aligned} \beta_t(i) &= P[\mathcal{Y}_{t+1}^r = (O_{t+1}, O_{t+2}, \dots, O_r) | \mathcal{X}_t = s_i] = \\ &= \sum_{j=1}^n P[\mathcal{X}_{t+1} = s_j | \mathcal{X}_t = s_i] \cdot P[\mathcal{Y}_{t+1}^r = (O_{t+1}, O_{t+2}, \dots, O_r) | \mathcal{X}_{t+1} = s_j] = \\ &= \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot b_j(O_{t+1}) \cdot \beta_{t+1}(j) \end{aligned}$$

Luego también podemos calcular las variables de retroceso de forma recursiva:

$$\begin{aligned} \beta_t(i) &= \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot b_j(O_{t+1}) \cdot \beta_{t+1}(j), & 0 \leq t \leq r-1 \\ & & 1 \leq i \leq n \end{aligned} \quad (2.3)$$

Para cada estado, se necesita $3n - 1$ operaciones en una etapa con $0 \leq t \leq r - 1$. Dado que existen n estados, se requiere un orden de $3rn^2$ operaciones para calcular todas las variables de retroceso.

Veremos en los siguientes apartados, que las variables de avance y de retroceso serán usadas para resolver los **problemas 2 y 3**.

2.1.2 Solución al problema 2

A diferencia del **problema 1** donde podemos dar una solución exacta, existen varias maneras de resolver **problema 2**, donde queremos encontrar una secuencia de estados "óptima" dada una secuencia de observaciones. En primer lugar, debemos definir lo que es una secuencia de estados óptima. Existen varios criterios de optimalidad, una

de ellas, se trata de escoger estados que son más probables individualmente. Este criterio de optimalidad maximiza el número estimado de estados individuales correctos. Para implementar esta solución al **problema 2**, definimos la siguiente variable:

$$\gamma_t(i) = P[\mathcal{X}_t = s_i | \mathcal{Y}_0^r = (O_0, O_1, \dots, O_r)]$$

es decir, la probabilidad de que el estado en el instante t sea s_i condicionado a observar la secuencia de salidas $O = (O_0, O_1, \dots, O_r)$.

Proposición 2.4. $\gamma_t(i)$ se puede expresar en función de las variables de avance y de retroceso, más concretamente:

$$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i) \cdot \beta_t(i)}{\sum_{j=1}^n \alpha_t(j) \cdot \beta_t(j)}$$

Demostración. Por definiciones de las variables:

$$\begin{aligned} \alpha_t(i) \cdot \beta_t(i) &= \\ &= P[\mathcal{Y}_0^t = (O_0, \dots, O_t), \mathcal{X}_t = s_i] \cdot P[\mathcal{Y}_{t+1}^r = (O_{t+1}, O_{t+2}, \dots, O_r) | \mathcal{X}_t = s_i] = \\ &= P[\mathcal{Y}_0^r = (O_0, O_1, \dots, O_r), \mathcal{X}_t = s_i] \end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_t(i) \cdot \beta_t(i)}{\sum_{j=1}^n \alpha_t(j) \cdot \beta_t(j)} &= \frac{P[\mathcal{Y}_0^r = (O_0, O_1, \dots, O_r), \mathcal{X}_t = s_i]}{\sum_{j=1}^n P[\mathcal{Y}_0^r = (O_0, O_1, \dots, O_r), \mathcal{X}_t = s_j]} = \\ &= \frac{P[\mathcal{Y}_0^r = (O_0, O_1, \dots, O_r), \mathcal{X}_t = s_i]}{P[\mathcal{Y}_0^r = (O_0, O_1, \dots, O_r)]} \end{aligned}$$

Aplicando la definición de probabilidad condicionada tenemos la igualdad del enunciado. \square

Usando estas variables, podemos definir los estados más probables individualmente dada la secuencia de observaciones O :

Definición 2.5. Sea $O = (O_0, O_1, \dots, O_r)$, definimos el estado más probable individualmente en el instante t como:

$$q_t = \underset{1 \leq i \leq n}{\operatorname{argmax}} \{ \gamma_t(i) \} = \{ s_i \in \mathbb{S} \mid \forall s_j \in \mathbb{S} : \gamma_t(j) \leq \gamma_t(i) \} \quad (2.4)$$

A pesar de que 2.4 maximiza el número estimado de estados correctos, puede haber problemas con la secuencia de estados resultante. Por ejemplo, si existen estados inalcanzables desde una de ellas, la secuencia de estados “óptima” puede ser inválida.

Esto se debe a que la solución proporcionada por 2.4 sólo determina los estados más probables en cada instante, sin tener en cuenta en ningún momento la probabilidad de que la secuencia resultante suceda.

Una posible solución a este problema es modificar el criterio de optimalidad. Por ejemplo, se puede considerar secuencia de estados que maximice el número estimado de parejas (q_t, q_{t+1}) o de tripleta (q_t, q_{t+1}, q_{t+2}) de estados correctas. A pesar de que estos criterios pueden ser razonables para ciertas aplicaciones, el criterio más utilizado es de encontrar la secuencia $Q = (q_0, q_1, \dots, q_r)$ que maximice $P[\mathcal{X}_0^r = Q | \mathcal{Y}_0^r = O]$, lo cual es equivalente a maximizar $P[\mathcal{X}_0^r = Q, \mathcal{Y}_0^r = O]$. Una técnica formal para encontrar dicha secuencia Q existe, se basa en métodos de programación dinámica y se llama algoritmo de Viterbi.

SECCIÓN TERCERA

El siguiente código es un ejemplo de coloreado de sintaxis e inclusión directa de código fuente en el texto usando minted.

```
-- From the GHC.Base library.
class Functor f where
    fmap      :: (a -> b) -> f a -> f b

    -- | Replace all locations in the input with the same value.
    -- The default definition is '@fmap' . 'const'@, but this may be
    -- overridden with a more efficient version.
    (<$)      :: a -> f b -> f a
    (<$)      = fmap . const

-- | A variant of '<*>' with the arguments reversed.
(<*>) :: Applicative f => f a -> f (a -> b) -> f b
(<*>) = liftA2 (\a f -> f a)

-- Don't use \$ here, see the note at the top of the page

-- | Lift a function to actions.
-- This function may be used as a value for `fmap` in a `Functor` instance.
liftA :: Applicative f => (a -> b) -> f a -> f b
liftA f a = pure f <*> a
-- Caution: since this may be used for `fmap`, we can't use the obvious
-- definition of liftA = fmap.

-- | Lift a ternary function to actions.
liftA3 :: Applicative f => (a -> b -> c -> d) -> f a -> f b -> f c -> f d
liftA3 f a b c = liftA2 f a b <*> c

{-# INLINABLE liftA #-}
{-# SPECIALISE liftA :: (a1->r) -> IO a1 -> IO r #-}
{-# SPECIALISE liftA :: (a1->r) -> Maybe a1 -> Maybe r #-}
{-# INLINABLE liftA3 #-}
```

```

{-# SPECIALISE liftA3 :: (a1->a2->a3->r) -> IO a1 -> IO a2 -> IO a3 -> IO r #-}
{-# SPECIALISE liftA3 :: (a1->a2->a3->r) ->
    Maybe a1 -> Maybe a2 -> Maybe a3 -> Maybe r #-}

-- | The 'join' function is the conventional monad join operator. It
-- is used to remove one level of monadic structure, projecting its
-- bound argument into the outer level.
join :: (Monad m) => m (m a) -> m a
join x = x >>= id

```

Vivamus fringilla egestas nulla ac lobortis. Etiam viverra est risus, in fermentum nibh euismod quis. Vivamus suscipit arcu sed quam dictum suscipit. Maecenas pulvinar massa pulvinar fermentum pellentesque. Morbi eleifend nec velit ut suscipit. Nam vitae vestibulum dui, vel mollis dolor. Integer quis nibh sapien.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Barbosa Correa, R. (2016). *Procesos estocásticos con aplicaciones*.
- [2] Klappenecker, A. (2019). Apuntes de csce-658 randomized algorithms. Accedido el 10-01-2023.
URL https://people.engr.tamu.edu/andreas-klappenecker/csce658-s19/markov_chains.pdf
- [3] Núñez Velázquez, J. J. (2011). *Análisis dinámico mediante procesos estocásticos para actuarios y finanzas*.
- [4] Rabiner, L. R. (1989). A tutorial on hidden markov models and selected applications in speech recognition. 2.
- [5] Salinelli, E., & Tomarelli, F. (2013). *Discrete Dynamical Models*. Springer.
- [6] Vidyasagar, M. (2011). *Hidden Markov Processes: Theory and Applications to Biology*.