UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Procesos de Markov

Evolución sin memoria

Apellidos, nombre	Carpitella, Silvia[1] (carpitella@utia.cas.cz) Izquierdo Sebastián, Joaquín[2] (jizquier@upv.es)
Departamento	[1] Department of Decision-Making Theory [2] Departamento de Matemática Aplicada
Centro	[1] Institute of Information Theory and Automation, Praga [2] Universitat Politècnica de València

1 Resumen

Muchos fenómenos naturales, técnicos, sociales, etc., evolucionan en el tiempo de manera discreta, es decir, discontinua, en etapas, y pueden ser descritos por números (o etiquetas) que describen su estado en cada una de las etapas. Además, la aleatoriedad juega un papel esencial en la forma en que algunos fenómenos evolucionan. Este artículo está pensado como una clase motivadora para el Álgebra (Matricial), asignatura que forma parte del currículo en las Escuelas y Facultades universitarias. Los ejemplos considerados incluyen dos elementos motivadores: las clasificaciones deportivas por rachas, como un primer ejemplo sencillo, y los caminos aleatorios en redes, de gran importancia en la Física (movimiento Browniano, modelos de difusión, teoría cuántica de campos, etc.). En el desarrollo, se muestra la necesidad de determinadas herramientas avanzadas (que forman parte esencial del Álgebra), lo que estimula el interés de aprender tales herramientas.

2 Introducción

Antes de definir lo que se entiende por procesos y por cadenas de Markov, empecemos con un ejemplo sencillo.

2.1 Ejemplo 1: Clasificación de mi equipo según una cierta racha de juego

Considera un equipo que participa en una liga. Cada partido jugado cierra una etapa y el resultado tras jugar el partido (ganado, empatado o perdido) define su estado hasta el próximo partido. Sea cual sea su estado actual, no se puede saber si ganará, perderá o empatará en el siguiente partido. Solemos recurrir a **probabilidades** (realizadas con estadísticas tan amplias como sea posible) para tratar de predecir el estado siguiente. Algunas de estas estadísticas tratan de identificar rachas en el juego. Por ejemplo, supongamos que una estadística es del tipo siguiente: si el equipo ha ganado tiene un 50% de posibilidades de ganar en el partido siguiente, un 10% de empatar y un 40% de perder. Análogamente, una tal estadística puede arrojar las siguientes probabilidades de resultado en el partido siguiente tras un empate: 30% de ganar, 40% de empatar y 30% de perder. Y también, habrá porcentajes para los distintos resultados tras haber perdido el partido anterior.

2.1.1 Ejercicio 1

Añade tú a las estadísticas anteriores una posible estadística para después de un partido perdido. Piensa ahora en un equipo e imagina que empieza la temporada como si hubiese empatado antes. Utiliza **números aleatorios** para decidir una posible evolución del equipo en la liga. Compara la evolución de tu equipo (sumando 3 puntos por victoria, 1 por empate y 0 por derrota) con la evolución del equipo de algún otro compañero (utilizando las mismas y/u otras estadísticas). Quizá quieras escribir un programa en Python que te permita simular una liga entre un número N de equipos/jugadores.

Yo, realizando el ejercicio, añadí, como se pide, determinadas probabilidades para después de haber perdido, y obtuve la siguiente evolución para mi equipo.

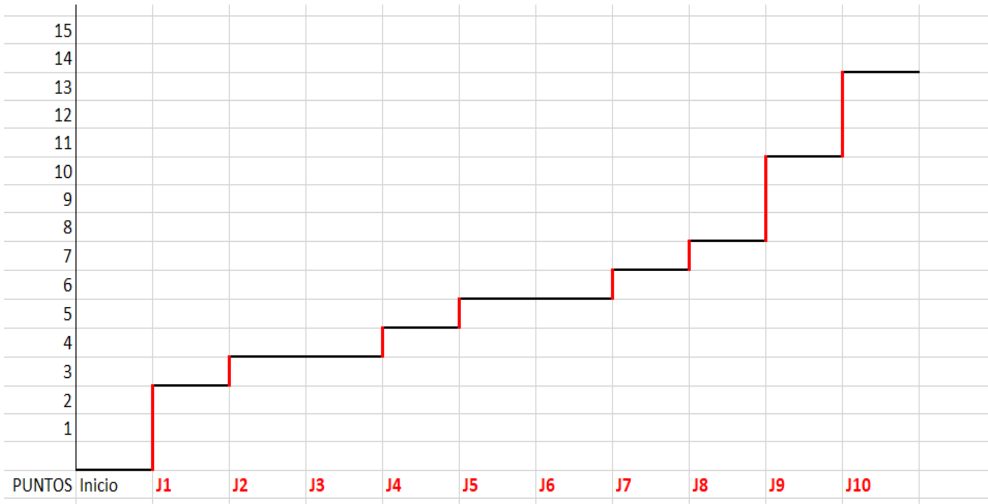

Figura 1. Una posible evolución en la clasificación de mi equipo según una cierta racha caracterizada por ciertas probabilidades de transición entre jornadas

2.2 Primera definición intuitiva

Para concluir esta introducción te doy de manera intuitiva la definición de cadena de Markov, que asociarás sin problema con el ejemplo dado.

- Una **cadena de Markov** es un sistema que evoluciona de manera discreta, de tal forma que **el siguiente estado depende solo del estado actual** y no de todo el historial previo. (Nota: hay procesos de Markov más complejos, a los que no nos referiremos en este artículo, en los que el estado actual sí depende de varios estados anteriores).
- Si una cadena de Markov está en un cierto estado en cierta etapa, las probabilidades de cada estado en la etapa siguiente de la evolución se llaman **probabilidades de transición** de la cadena, y se supone que son cantidades conocidas.

Obviamente, tu equipo no mantendrá la misma racha durante toda la temporada. Pero analizando qué sucederá mientras la racha se mantenga, quizá se obtengan pistas adecuadas que permitan establecer estrategias (motivación, primas, fichajes, etc.), que mejoren el rendimiento (por supuesto, tales estrategias, cambiarán los valores probabilísticos que definen la racha).

En este documento encontrarás **en rojo** conceptos que quizá no conozcas y que vas a ver en la asignatura de Álgebra; y **en azul** encontrarás conceptos que seguramente ya conoces, pero que deberías refrescar (algunos se ven también en las programaciones usuales de la asignatura).

3 Objetivos

Tras concluir con la lectura de este documento, serás capaz de:

- Describir situaciones que pueden modelarse mediante cadenas de Markov
- Explicar con cierto detalle los elementos clave de las cadenas de Markov
- Obtener soluciones de los modelos planteados

4 Desarrollo

Para leer este artículo deberás tener nociones de:

Requisitos
1. Álgebra matricial elemental
2. Solución de sistemas de ecuaciones lineales
3. Operaciones simples en algún entorno computacional

Tabla 1. Requisitos básicos

5 El vigilante aleatorio y el gato de Schrödinger

En Física, los caminos aleatorios son utilizados como modelos simplificados del movimiento browniano y de difusión, tales como el movimiento aleatorio de las moléculas en líquidos y gases. Además, los caminos aleatorios juegan un papel en la teoría cuántica de campos.

Empecemos con un ejemplo muy fácil de entender.

5.1 Ejemplo 2

Este ejemplo describe un proceso muy simple, asimilable a un movimiento browniano.

El vigilante de una empresa debe realizar controles en cinco puestos clave de una instalación. En cada control deberá permanecer una hora en el puesto visitado. Las conexiones entre los puestos son las indicadas en el siguiente grafo. Los relevos se efectúan de forma que la estrategia (que se especifica más abajo) no se vea alterada en el paso de una etapa a la siguiente, es decir, es siempre la misma.

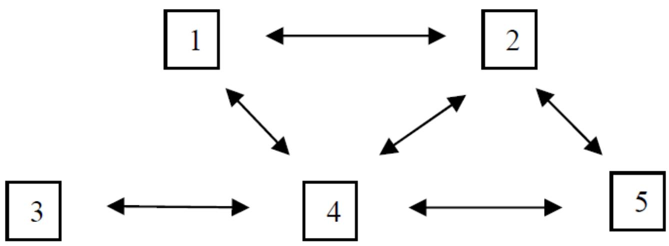

Figura 2. Grafo dirigido de puestos de vigilancia y sus conexiones

Se quieren valorar las dos estrategias siguientes. El vigilante decidirá cuál será su próximo control de manera aleatoria entre los puntos a los que puede acceder directamente desde su punto actual

a) incluyendo en la decisión el propio punto donde está, o
b) sin incluir el punto donde está.

Se pide la probabilidad en el largo plazo de encontrar al vigilante en cada uno de los puntos dados para cada una de las estrategias.

¿Coincidirán las probabilidades de ambas estrategias? Basados en dichas probabilidades, se puede fundamentar la respuesta a la pregunta: ¿qué estrategia elegir?

Observa que aquí el estado está definido por el puesto de vigilancia en que se encuentra el vigilante; por ejemplo, el estado actual puede consistir en estar en el puesto 1. Por otra parte, su movimiento al siguiente punto de vigilancia viene dictado aleatoriamente. Por ejemplo, supongamos que está en el puesto 1; si utiliza la estrategia b) se trasladará con un 50% de probabilidades a cada uno de los puestos 2 y 4 (conectados con el 1); en cambio, si utiliza la estrategia a), tales probabilidades son 33.33%, siendo el otro 33.33% la probabilidad de quedarse en el puesto 1.

5.1.1 Ejercicio 2

Detalla tú las probabilidades en el resto de los casos, tanto para la estrategia a) como para la b).

Continuando con el Ejemplo 2, centrémonos ahora en la estrategia a).

El puesto en el que el vigilante se encuentra a determinada hora no se conoce. Pero sí se conoce la probabilidad de que acabe en cualquiera de los puestos, sea cual sea el puesto actual en el que esté actualmente. Denotemos por

$$\mathbf{e}^{(n)} = \begin{pmatrix} e_1^{(n)} \\ e_2^{(n)} \\ e_3^{(n)} \\ e_4^{(n)} \\ e_5^{(n)} \end{pmatrix}$$

el **vector de estado** para la hora n. Cada valor $e_i^{(n)}$ denota la probabilidad de que el vigilante se halle en el puesto i a la hora n. Denotemos por $\mathbf{e}^{(0)}$, el vector de estado inicial. Si inicialmente el vigilante está en la posición i entonces el vector de estado tendrá un 1 en la posición i (porque está, de hecho, en dicha posición) y ceros en las demás (porque no está en ellas). Y, a partir de ahí, podemos empezar una caminata aleatoria (paseo aleatorio) utilizando las probabilidades definidas por la estrategia de cambio de puesto.

5.1.2 Ejercicio 3

Realiza alguna caminata aleatoria para el vigilante. Toma un papel cuadriculado y simula, por ejemplo, lanzando un dado, distintas caminatas aleatorias. Quizás quieras escribir un programa que simule caminatas aleatorias (para el vigilante, o en general).

5.2 El gato de Schrödinger

Sin embargo, para el empresario ¿es realmente interesante saber dónde se encuentra el vigilante en cada momento? Está claro que en cada observación estará en un sitio o en otro.

Recuerda el gato de Schrödinger a la vez vivo y muerto (con ciertas probabilidades, claro). Cada vez que se realiza una observación se obtiene uno de los posibles estados (vivo o muerto), con ciertas probabilidades.

O, ¿quizá el empresario necesita una cierta seguridad de que la empresa está razonablemente bien vigilada? Quizá el interés del empresario está en asegurar que cada puesto está cubierto por un porcentaje mínimo de vigilancia con, por ejemplo, al menos un 0.15 de probabilidad.

El interés principal en un **proceso/cadena de Markov** es conocer esas **probabilidades a largo plazo**.

Si consideramos el vector de estado que tenga todas sus componentes iguales a $\frac{1}{5}$, estaremos considerando todos los puestos de vigilancia igual de probables. Pero, ¿son esas las probabilidades (todas iguales) a la larga de encontrar al vigilante en los distintos puestos?

5.3 El Álgebra matricial al rescate

Para determinar el estado $\mathbf{e}^{(1)}$ a partir del $\mathbf{e}^{(0)}$, teniendo en cuenta la estrategia que le lleva a decidir su siguiente puesto de vigilancia, es clave considerar la siguiente expresión:

$$\mathbf{e}^{(1)} = P\mathbf{e}^{(0)},$$

siendo P la denominada **matriz de transición**, que recoge matricialmente la estrategia adoptada. En el caso de la estrategia a) que estamos considerando, se trata de

$$P = \begin{pmatrix} 1/3 & 1/4 & 0 & 1/5 & 0 \\ 1/3 & 1/4 & 0 & 1/5 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/5 & 0 \\ 1/3 & 1/4 & 1/2 & 1/5 & 1/3 \\ 0 & 1/4 & 0 & 1/5 & 1/3 \end{pmatrix}.$$

Compruébalo. Si has hecho el Ejercicio 2.1, no tendrás ningún problema en reconocer todos los elementos de esta matriz.

Se puede probar que la expresión

$$\mathbf{e}^{(k+1)} = P\mathbf{e}^{(k)}$$

proporciona el estado siguiente, $k+1$, conocido el estado actual, k, para $k = 0, 1, \cdots$

Esta expresión permite calcular cualquier vector de estado sucesivo, mediante la **multiplicación de la matriz** P por el vector de estado actual, la cantidad necesaria de veces.

Por ejemplo, si el vigilante está originalmente en el puesto 3, tenemos que $\mathbf{e}^{(0)} = (0,0,1,0,0)^T$, donde el superíndice $(\cdot)^T$, denota la **trasposición matricial**.

Al realizar la multiplicación, se tiene

$$\mathbf{e}^{(1)} = P\mathbf{e}^{(0)} = \begin{pmatrix} 1/3 & 1/4 & 0 & 1/5 & 0 \\ 1/3 & 1/4 & 0 & 1/5 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/5 & 0 \\ 1/3 & 1/4 & 1/2 & 1/5 & 1/3 \\ 0 & 1/4 & 0 & 1/5 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

El vector $\mathbf{e}^{(1)}$ muestra que, tras estar en 3, las probabilidades, según la estrategia a), de estar en el puesto 3 es $1/2$, igual que la de estar en el puesto 4, y cero en los demás puestos. Esto es obvio a partir del grafo de la Figura 2 ya que 3 está solo conectado con 2 y con 4.

Sin embargo, si se suponen probabilidades iguales para todos los puestos (a falta de información más precisa), se empieza con $\mathbf{e}^{(0)} = \left(\frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}\right)^T$. Los cuatro estados sucesivos (valores copiados de Python) son

$\mathbf{e}^{(0)}$ = array([0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2])

$\mathbf{e}^{(1)}$ = array([0.15666667, 0.22333333, 0.14 , 0.32333333, 0.15666667])

$\mathbf{e}^{(2)}$ = array([0.17272222, 0.22494444, 0.13466667, 0.29494444, 0.17272222])

$\mathbf{e}^{(3)}$ = array([0.17279907, 0.23037315, 0.12632222, 0.29770648, 0.17279907])

$\mathbf{e}^{(4)}$ = array([0.17473427, 0.23233397, 0.12270241, 0.29549508, 0.17473427])

Parece observarse una tendencia hacia valores distintos del $\frac{1}{5} = 0.2$ inicial para todos los puestos. Obviamente, esto debe ser confirmado de una manera rigurosa.

5.4 Una definición más precisa de proceso de Markov

El ejemplo anterior incorpora los ingredientes principales de las cadenas de Markov, también denominadas procesos de Markov discretos (hay procesos de Markov continuos, que no abordamos aquí).

El modelo general sería el siguiente:

- El sistema evoluciona por etapas y en cada etapa puede estar en uno de sus n posibles estados sobre los que progresa con el paso (discreto) del tiempo.
- Si una cadena de Markov está en un estado j en una cierta etapa, la probabilidad p_{ij} de que el estado siguiente sea el i se denomina probabilidad de transición.
- La matriz $n \times n$, $P = (p_{ij})$, se llama matriz de transición de la cadena de Markov.
- Una hipótesis distintiva de las cadenas de Markov es que la matriz de transición no depende del estado actual, es decir, es independiente del tiempo (proceso sin memoria).
- Cada **columna** j de la matriz de transición contiene las probabilidades de pasar del estado j al estado correspondiente a cada **fila**.
- Así que una característica clave (aunque evidente) de las cadenas de Markov es que la suma de las columnas de la matriz de transición es 1 para todas ellas. Por esta razón, de la matriz de transición se dice que es una **matriz estocástica**.
- También la suma de las coordenadas de cualquier vector de estado es 1.

5.4.1 Ejercicio 4

Comprueba con detalle estos elementos revisando el problema del vigilante.

5.5 Refinando la herramienta algebraica

Otra observación (ya señalada más arriba) que se puede hacer respecto de los sucesivos vectores de estado es que parecen aproximarse a determinados valores. Si esto es así finalmente, se dice que $\mathbf{e}^{(k)}$ converge a cierto estado límite. Para los cálculos anteriores, se puede ver que tal estado límite es array([0.176, 0.235, 0.118, 0.294, 0.176]).

Por cierto, podemos ver aquí cómo el puesto 3 (tercera coordenada del estado límite) no cumple el requisito de estar vigilado al menos el 15% del tiempo.

Sin embargo, hay una forma mejor de calcular tal estado límite, en vez de utilizar la 'fuerza bruta' de multiplicar más y más veces por la matriz P. Es la siguiente.

Supongamos que para la matriz de transición P el proceso de Markov converge a un vector de estado, $\mathbf{e}^\infty = (e_1^\infty, e_2^\infty, e_3^\infty, e_4^\infty, e_5^\infty)^T$. Entonces, $\mathbf{e}^{(k)}$ estará muy próximo a $\mathbf{e}$, para k grande. Lo mismo le ocurrirá a $\mathbf{e}^{(k+1)}$. De este modo, la expresión $\mathbf{e}^{(k+1)} = P\mathbf{e}^{(k)}$ (vista antes) se puede escribir aproximadamente como

$$\mathbf{e}^\infty = P\mathbf{e}^\infty,$$

por lo que $\mathbf{e}^\infty$ debe ser solución de esta ecuación. Pero esta ecuación bien pudiera ser el objetivo de un problema de pruebas de acceso a la Universidad, porque se puede escribir como

$$(P - I)\mathbf{e}^\infty = 0,$$

donde I es la **matriz identidad** (la matriz que tiene 1s en la **diagonal principal** y 0s en el resto de entradas). Así que es un **sistema de ecuaciones lineal homogéneo** (ya que sus términos independientes valen 0). Para el caso del vigilante, es el sistema

$$(P - I)\mathbf{e}^\infty = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{5} & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{3}{4} & 0 & \frac{1}{5} & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{5} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{4}{5} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{5} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1^\infty \\ e_2^\infty \\ e_3^\infty \\ e_4^\infty \\ e_5^\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tienes que recordar que un tal sistema siempre tiene la **solución trivial** (todas las incógnitas igual a cero, nada interesante, por cierto). Y tiene otras soluciones distintas de la trivial (estas sí que interesan) si las ecuaciones son dependientes. Pero fíjate que este es el caso, si sumas todas las ecuaciones, te queda la ecuación $0 = 0$, que muestra claramente la **dependencia lineal entre las ecuaciones**. Esto ocurre porque la suma de cada columna de P es 1, y en el cálculo de $P - I$ justamente se resta 1 a cada elemento de la **diagonal principal**.

Así que este sistema tiene más soluciones que la trivial. De hecho, tiene infinitas soluciones. Es un sistema **uniparamétrico**, es decir, solo hay una **incógnita libre**. Y observa que, de entre todas, hay que elegir una cuyas componentes sumen 1, tal como hemos visto más arriba.

5.5.1 Ejercicio 5

Resuelve el sistema con la condición de que $e_1^\infty + e_2^\infty + e_3^\infty + e_4^\infty + e_5^\infty = 1$, y comprueba que la solución es la dada más arriba: $\mathbf{e}^\infty = (0.176, 0.235, 0.118, 0.294, 0.176)^T$.

Se puede ver que estos valores son los valores límite de multiplicar por la matriz de transición sucesivamente. La figura siguiente muestra la evolución de la probabilidad para el caso en que se empezó con el vigilante en el puesto 3, es decir, con el vector inicial $\mathbf{e}^{(0)} = (0,0,1,0,0)^T$.

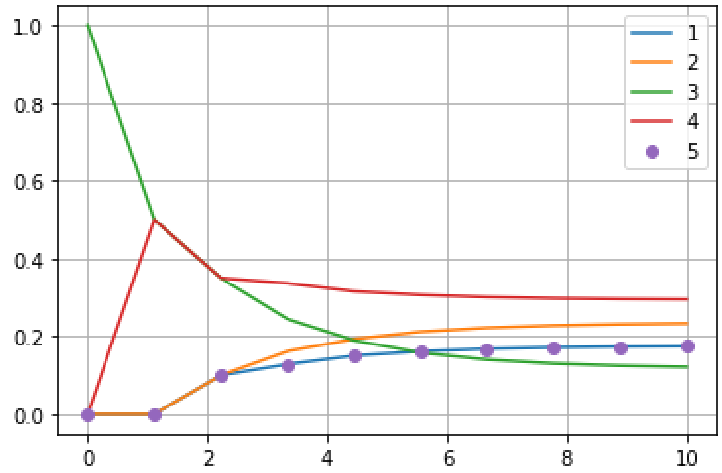

Figura 3. Evolución de las probabilidades para el vigilante

Fíjate cómo todos los valores empiezan en 0, menos el verde, el 3. Otra observación es que las probabilidades sucesivas para 5 se han dibujado con puntos pues, al ser idénticas a las de 1 (fíjate que ambos puestos están conectados con exactamente 2 de los demás puestos, por lo que su comportamiento es el mismo). Así que la línea morada cubriría completamente a la línea azul, lo que le impediría ser vista.

Todo esto no es cierto de manera completamente general, aunque sí lo es en los casos más comúnmente encontrados en las aplicaciones. Es el caso en que la matriz P es una **matriz estocástica regular**. Una matriz estocástica es regular cuando alguna de sus **potencias** es una **matriz positiva**. Y una matriz es positiva cuando todos sus elementos son positivos. Se puede probar que la matriz de transición P es regular (hazlo).

El resultado más importante en conexión con estas ideas es el denominado **Teorema de Perron**, que se ve con cierto detalle en Teoría espectral, una unidad que no falta en ninguna programación de una asignatura de Álgebra.

Discusión y trabajo a desarrollar

La teoría de grafos juega un papel clave en la moderna rama de Sistemas complejos. A su vez, las matrices y sus propiedades son esenciales en dicha teoría. En este artículo te he presentado dos ejemplos (no triviales), aunque de tamaño reducido. En el primer ejemplo, hemos visto una aplicación en clasificaciones deportivas. Aunque el ejemplo puede parecer poco útil, existen múltiples modelos semejantes en diversas ramas de la Ciencia. El segundo ejemplo, a pesar de ser 'de juguete', es la base del algoritmo PageRank que utiliza Google en las búsquedas por internet, que permite clasificar las webs por su orden de importancia espectral que, básicamente, es el cálculo realizado para obtener las probabilidades de encontrar al vigilante en los distintos puestos.

Tarea

1. Programar caminatas aleatorias 1D y 2D
2. Resolver el problema del vigilante
3. Buscar otros problemas de interés modelables por cadenas de Markov
4. Clasificar los nodos de una red más grande por su orden de importancia espectral

6 Cierre

Los procesos de Markov tienen una enorme importancia en Física y en otras ciencias no solo técnicas sino también naturales, sociales, económicas, etc. Las matrices resultan ser una herramienta imprescindible. El Álgebra proporciona las herramientas clave en los procesos de Markov. El contenido de este artículo puede ser utilizado con diversos propósitos motivadores (en una clase inicial de Álgebra, por ejemplo, o en una clase introductoria específica a la Teoría Espectral) dentro de una asignatura típica de Álgebra; también puede ser el punto de partida para una propuesta de trabajo académico a desarrollar por el alumno, ya que, en los recursos y repositorios actualmente disponibles en la red, existen cantidades ingentes de información relacionada.

7 Bibliografía

Izquierdo Sebastián, Joaquín, Torregrosa Sánchez, Juan Ramón, Álgebra y ecuaciones diferenciales. Tomos I y II. Universitat Politècnica de València, Valencia, 1997, SPUPV 97.669.