Cadeias de Markov

Parte IV. Distribuição estacionária

Fernando Lucambio

Departamento de Estatística
Universidade Federal do Paraná

Julho, 2020

Se todos os estados em uma Cadeia de Markov forem transientes, as probabilidades de estado em n passos se aproximam de zero e, se a cadeia tiver alguns estados transientes e outros recorrentes, eventualmente, o processo entra e permanece mudando entre os estados recorrentes. Portanto, podemos nos concentrar na classe dos estados recorrentes ao estudar as probabilidades limites de uma cadeia.

Suponha uma função de probabilidade definida em S tal que, se a nossa Cadeia de Markov começa com distribuição inicial $\pi_0 = \pi$, então nós também temos $\pi_1 = \pi$. Isto é, se a distribuição no tempo 0 é π, então a distribuição no tempo 1 é ainda π. Então π é chamada uma distribuição estacionária.

Definição (Distribuição estacionária).

Seja $\{C_n\}$ uma Cadeia de Markov com espaço de estados S e matriz de probabilidades de transição $\Gamma = (\gamma_{x,y})$. Se $\pi(x)$, com $x \in S$ satisfaz que é formada de números não negativos que somam um e se

$$\sum_x \pi(x)\gamma_{x,y} = \pi(y), \qquad y \in S$$

então π é chamada de distribuição estacionária (Cadeias ergódicas).

Suponha que a distribuição estacionária π exista e satisfaça que

$$\lim_{n\to\infty} \gamma_{x,y}^{(n)} = \pi(y), \qquad y \in S.$$

Nesta seção vamos determinar qual Cadeia de Markov tem distribuição estacionária, quando esta distribuição é única e quando o limite acima se cumpre.

Exemplo

No caso de uma Cadeia de Markov com espaço de estados $S = \{0, 1\}$ e matriz de transição

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} 0 & 1 \end{array} \\ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} & \begin{pmatrix} 1-p & p \\ q & 1-q \end{pmatrix} \end{array},$$

se $p + q > 0$, esta cadeia tem uma única distribuição estacionária π, dada por

$$\pi(0) = \frac{q}{p+q} \quad \text{e} \quad \pi(1) = \frac{p}{p+q}.$$

Podemos mostrar também que se $0 < p + q < 2$, a expressão no limite acima é válida.

Vamos introduzir a noção de "fluxo de probabilidade" de um conjunto A de estados para o seu complemento sob uma distribuição.

Definição (Probabilidade de fluxo).

Seja $\{C_n\}$ uma Cadeia de Markov, $\Gamma = (\gamma_{x,y})$ a matriz de probabilidades de transição e S o espaço de estados. Definimos a probabilidade de fluxo do conjunto de estados $A \subset S$ ao seu complemento, baixo a distribuição π como

$$\gamma_{A,A^c} = \sum_{x\in A}\sum_{y\in A^c} \pi(x)\gamma_{x,y}.$$

Dizemos que $\pi(x)\gamma_{x,y}$ é o fluxo de probabilidade entre x e y. Assim γ_{A,A^c} é o fluxo de probabilidades totais entre cada elemento de A e A^c.

Observemos que ao mencionarmos π como uma distribuição na definição anterior nos referimos a uma função de probabilidade definida em S, não necessariamente sendo a distribuição estacionária. Este conceito é útil para caracterizar a distribuição estacionária, resultado apresentado a continuação.

Teorema

Seja γ_{A,A^c} a probabilidade de fluxo de uma Cadeia de Markov com espaço de estados S. A função π é a distribuição estacionária se, e somente se, $\sum_{x\in S}\pi(x)=1$ e

$$\gamma_{A,A^c}=\gamma_{A^c,A}, \qquad \forall\cdot$$

No caso de cadeias com um número de estados grande, utilizar o resultado deste teorema não é a melhor forma de verificar se a função de probabilidade π é a distribuição estacionária e a definição de distribuição estacionária tem a ver com a probabilidade em um passo. Surge a pergunta, o que acontece com a distribuição estacionária se utilizarmos alguma potência da probabilidade de transição?

Teorema

Seja $\{C_n\}$ uma Cadeia de Markov com matriz de probabilidades de transição $\Gamma=(\gamma_{x,y})$ e distribuição estacionária π. Então

$$\sum_{x\in S}\pi(x)\gamma_{x,y}^{(n)}=\pi(y), \qquad y\in S\cdot$$

Suponhamos agora que π seja a distribuição estacionária e que $\lim_{n\to\infty} \gamma_{x,y}^{(n)} = \pi(y)$, $y \in S$ se satisfaça. Seja π_0 a distribuição inicial. Então

$$P(C_n = y) = \sum_{x\in S} \pi_0(x)\gamma_{x,y}^{(n)}, \qquad y \in S \tag{1}$$

Utilizando o fato de $\lim_{n\to\infty} \gamma_{x,y}^{(n)} = \pi(y)$, $y \in S$ e o teorema da convergência limitada, podemos fazer $n \to \infty$ na relação acima, obtém-se que

$$\lim_{n\to\infty} P(C_n = y) = \sum_{x\in S} \pi_0(x)\pi(y)\cdot$$

Desde que $\sum_{x} \pi_0(x) = 1$, concluímos que

$$\lim_{n\to\infty} P(C_n = y) = \pi(y), \qquad y \in S\cdot$$

A expressão em acima estabelece que, independentemente da distribuição inicial, para grandes valores de n a distribuição de C_n é aproximadamente igual à distribuição estacionária π. Implica que π é a distribuição estacionária única.

Nesta seção, vamos considerar duas quantidades descritivas estreitamente relacionadas de interesse para as cadeias ergódicas: o tempo médio de retorno ao estado e o tempo médio para ir de um estado para outro estado.

Considere uma cadeia irredutível de nascimento e morte com distribuição estacionária π. Suponha que $\gamma_{x,x} = 0$, $x \in S$, como na cadeia de Ehrenfest de ruína do jogador. Então, em cada transição a cadeia de nascimento e morte se move ou um passo para a direita ou um passo para a esquerda. Assim, a cadeia pode regressar ao ponto de partida somente após um número par de transições.

Em outras palavras, $\gamma_{x,x}^{(n)} = 0$ para valores ímpares de n. Para tais cadeias a expressão

$$\lim_{n\to\infty} \gamma_{x,y}^{(n)} = \pi(y), \qquad y \in S,$$

não se satisfaz.

Vejamos agora uma nova forma de calcular o número de visitas a um estado. O número médio de visitas a um estado é uma quantidade importante estreitamente relacionada com a distribuição estacionária.

Definição (Número de visitas)

O número de visitas da Cadeia de Markov $\{C_n\}_{n\geq 0}$ ao estado y nos tempos $m = 1, \cdots, n$ é definido como

$$N_n(y) = \sum_{m=1}^{n} 1_y(C_m)\cdot$$

Seja agora

$$G_n(x,y) = \sum_{m=1}^{n} \gamma_{x,y}^{(m)},$$

então o número esperado de visitas ao estado y a partir de x é determinado de acordo com a definição acima e é dado por

$$\mathrm{E}_x[N_n(y)] = G_n(x,y)\cdot$$

Se y for um estado transiente, então

$$\lim_{n\to\infty} N_n(y) = N(y) < \infty \qquad \text{com probabilidade um,}$$

e

$$\lim_{n\to\infty} G_n(x,y) = G(x,y) < \infty, \qquad x \in S\cdot$$

Segue então que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{N_n(y)}{n} = 0 \qquad \text{com probabilidade um}$$

e que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,y)}{n} = 0, \qquad x \in \cdot$$

Observe-se que $N_n(y)/n$ é a proporção de vezes que a cadeia está no estado y nas primeiras n unidades de tempo e que $G_n(x,y)/n$ é o valor esperado dessa proporção para uma cadeia partindo do estado x.

Exemplo

No exemplo da compra de pasta de dentes vamos calcular aproximadamente o valor esperado da proporção de vezes que esta cadeia está em cada estado. A matriz de probabilidades de transição é

$$\mathcal{P} = \begin{array}{c} \\ A \\ B \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \;\;A & \;\;\;\;B \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1/3 & 2/3 \\ 2/3 & 1/3 \end{pmatrix} \end{array}.$$

Utilizando as linhas de comando R a seguir conseguimos calcular aproximadamente, isto é, para um valor de n finito o valor da função $G_n(x, y)$ acima definida.

```
> library(markovchain)
> estados = c("Marca A","Marca B")
> Prob.T=matrix(c(1/3,2/3,2/3,1/3), nrow=2,ncol=2,byrow=T, dimnames=list(estados,estados))
> ProbT = new("markovchain", states=estados, transitionMatrix=Prob.T,
          name="Compras de pasta de dentes")
> Soma = function(M,n=10){mm=0; for(i in 1:n)mm=mm+(M^i)[]; mm}
```

Exemplo (continuação)

A função Soma serve como aproximação ao valor de $G_n(x, y)$, quanto maior seja o número de somandos mais aprimorado será o resultado obtido. Por isso, utilizamos esta função com n=600, a qual produz o seguinte resultado.

```
> Soma(ProbT,600)/600
          Marca A   Marca B
Marca A 0.4997917 0.5002083
Marca B 0.5002083 0.4997917
```

Como resultados temos que em 50% dos casos a cadeia estará em cada um dos estados partindo de qualquer um deles.

Suponha agora que y é um estado recorrente. Seja $m_y = E_y(T_y)$ o tempo de retorno médio a y para uma cadeia a partir de y, se este tempo de retorno tem esperança finita e $m_y = \infty$ caso contrário. Vamos denotar por $1_{\{T_y<\infty\}}$ a variável aleatória indicadora do evento $\{T_y < \infty\}$ assumindo valor 1 se $T_y < \infty$ e 0 se $T_y = \infty$.

Teorema

Seja y um estado recorrente. Então

$$\lim_{n\to\infty} \frac{N_n(y)}{n} = \frac{1_{\{T_y<\infty\}}}{m_y} \qquad \text{com probabilidade um}$$

e

$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,y)}{n} = \frac{\rho_{x,y}}{m_y}, \qquad x\in S\cdot$$

Uma vez que a cadeia atinge y, retornará a y em média a cada m_y unidades de tempo. Assim, se $T_y<\infty$ e n é grande, a proporção de vezes em que a cadeia está no estado y deve ser de cerca $1/m_y$ unidades, nas primeiras n unidades de tempo. Observemos também que a expressão

$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,y)}{n} = \frac{\rho_{x,y}}{m_y},$$

$x\in S$ se obtém tomando esperança em

$$\lim_{n\to\infty} \frac{N_n(y)}{n} = \frac{\mathbf{1}_{\{T_y<\infty\}}}{m_y}, \qquad \text{com probabilidade um}\cdot$$

Exemplo

Seja $\{C_n\}$ uma Cadeia de Markov com matriz de probabilidades de transição

$$\mathcal{P} = \begin{array}{c} \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 0 & 1 & 2 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0.90 & 0.01 & 0.09 \\ 0.01 & 0.90 & 0.09 \\ 0.01 & 0.09 & 0.90 \end{pmatrix} \end{array}.$$

Observamos que

$$\lim_{n\to\infty} \Gamma^n = \begin{array}{c} \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 0 & 1 & 2 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0.0909090 & 0.4354067 & 0.4736842 \\ 0.0909090 & 0.4354067 & 0.4736842 \\ 0.0909090 & 0.4354067 & 0.4736842 \end{pmatrix} \end{array}.$$

Isto faz dela uma cadeia regular, ou seja, alguma potência da matriz de transição não têm zeros e isso implica que nenhum estado é absorvente, também significa que a cadeia é ergódica e, portanto, todos os estados são recorrente.

Exemplo (continuação)

Ainda temos que, segundo a primeira expressão, no Corolário 30

$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,0)}{n} = \frac{1}{m_0} = 0.1644622,$$
$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,1)}{n} = \frac{1}{m_1} = 0.3820475,$$
$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,2)}{n} = \frac{1}{m_2} = 0.4534903,$$

qualquer seja $x \in \{0,1,2\}$. Deste resultado concluímos que

$$m_0 = 6.080426,$$
$$m_1 = 2.617475,$$
$$m_2 = 2.205119\cdot$$

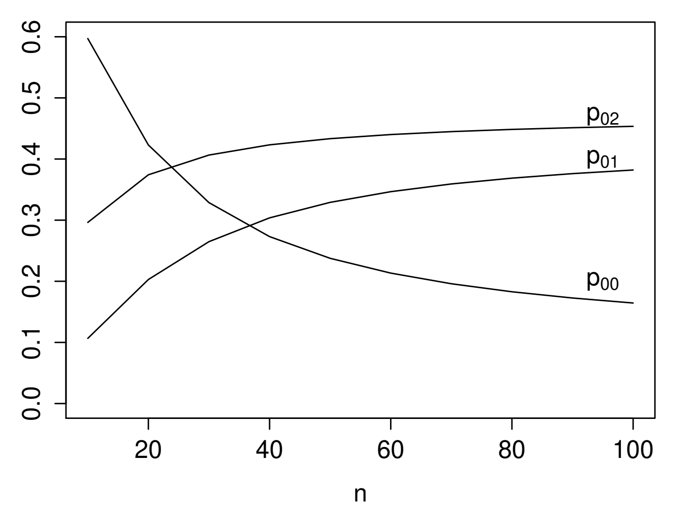

Figure: Convergência ao tempo de retorno médio.

Estudamos aqui duas classes de estados recorrentes, os recorrentes nulos e os recorrentes positivos, de interesse para a distribuição estacionária.

Definição (Estado recorrente nulo).

Um estado recorrente y é chamado de recorrente nulo se $m_y = \infty$.

Do Teorema 29 podemos perceber que, se y é um estado recorrente nulo, então

$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,y)}{n} = \lim_{n\to\infty} \frac{\sum_{m=1}^{n} \gamma_{x,y}^{(m)}}{n} = 0, \qquad x \in S. \tag{2}$$

Teorema

Seja y é um estado recorrente nulo, então

$$\lim_{n\to\infty} \gamma_{x,y}^{(n)} = 0, \qquad x \in S.$$

Este é um resultado mais forte do que àquele

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} G_n(x,y) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^{n} \gamma_{x,y}^{(m)} = 0, \qquad x \in S\cdot$$

Definição (Estado recorrente positivo).

Um estado recorrente y é chamado de recorrente positivo se $m_y < \infty$.

Do Teorema 29 se y é um estado recorrente positivo, então

$$\lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,y)}{n} = \frac{1}{m_y} > 0, \qquad x \in S\cdot \tag{3}$$

Assim, limites anteriores não são válidos para estados recorrentes positivos. Considere y um estado recorrente. Se y for um estado recorrente nulo, então com probabilidade um, a proporção de tempo que a cadeia está no estado y durante as primeiras n unidades de tempo se aproxima de zero quando $n \to \infty$. Por outro lado, sendo y um estado recorrente positivo, com probabilidade um, a proporção de tempo que a cadeia está em y durante as primeiras n unidades de tempo se aproxima de $1/m_y$, um número positivo, quando $n \to \infty$.

Teorema

Seja x um estado recorrente positivo e suponha que x conduz a y. Então, y é um estado recorrente positivo.

A partir deste teorema e do Teorema 15, vemos que, se C é um conjunto fechado irredutível, então cada estado em C é transiente, cada estado em C é recorrente nulo ou cada estado em C é recorrente positivo.

Definição (Cadeia recorrente nula e recorrente positiva)

Uma Cadeia de Markov é chamada de cadeia recorrente nula se todos os seus estados são recorrentes nulos. Uma Cadeia de Markov é chamada de cadeia recorrente positiva se todos os seus estados são recorrentes positivos.

Vemos, portanto, que uma Cadeia de Markov irredutível é ou uma cadeia transiente, ou uma cadeia recorrente nula ou uma cadeia recorrente positiva.

Nesta seção vamos determinar quais Cadeias de Markov têm distribuições estacionárias e quando há uma única tal distribuição.

Seja agora π a distribuição estacionária e m um número positivo inteiro. Então, sabemos que

$$\sum_{z\in S}\pi(z)\gamma_{z,x}^{(m)}=\pi(x),$$

qualquer seja o valor de m. Somando em $m=1,2,\cdots,n$ e dividindo por n, concluímos que

$$\sum_{z\in S}\pi(z)\frac{G_n(z,x)}{n}=\pi(x), \qquad x\in S\cdot$$

Teorema 36

Seja π a distribuição estacionária de uma Cadeia de Markov com espaço de estados S. Se x é um estado transiente ou recorrente nulo, temos que $\pi(x)=0$.

Decorre disto que uma Cadeia de Markov que não tenha estados recorrentes positivos não tem distribuição estacionária.

Toerema 37 (Existência da distribuição estacionária)

Uma Cadeia de Markov irredutível positiva tem distribuição estacionária única π, dada por

$$\pi(x) = \frac{1}{m_x}, \qquad x \in S\cdot$$

Teorema 42 (Unicidade da distribuição estacionária)

Seja S_P o conjunto dos estados recorrentes positivos em uma Cadeia de Markov.

(a) Se S_P é vazio, a cadeia no possui distribuição estacionária.

(b) Se S_P é não vazio irredutível, a cadeia têm distribuição estacionária única.

(c) Se S_P é não vazio porém não irredutível, a cadeia têm um número infinito de distribuições estacionárias distintas.

Temos visto desde o início que se $\{C_n\}$ for uma Cadeia de Markov recorrente positiva irredutível, sendo π sua distribuição estacionária, então

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{m=1}^{n} \gamma_{x,y}^{(m)} = \lim_{n\to\infty} \frac{G_n(x,y)}{n} = \pi(y), \qquad x,y \in S\cdot$$

Aqui vamos ver quando o resultado mais forte

$$\lim_{n\to\infty} \gamma_{x,y}^{(n)} = \pi(y), \qquad x,y \in S,$$

é válido e o que acontece se deixa de cumprir-se.

Lembremos que um número inteiro positivo d é dito ser um divisor do inteiro positivo n se n/d é um número inteiro.

Definição (Máximo divisor comum).

Seja I um conjunto de inteiros positivos não vazio. Definimos o máximo divisor comum de I, denotado por m.d.c. I, o maior inteiro d tal que d é um divisor inteiro positivo de cada elemento $n \in I$.

Segue-se imediatamente que

$$1 \leq m.d.c. I \leq \min\{n : n \in I\}\cdot$$

Em particular, se $1 \in I$, em seguida temos que $m.d.c. I = 1$. Um outro detalhe interessante é que o máximo divisor comum de um conjunto de inteiros positivos pares é 2.

Definição (Período de um estado).

Seja x um estado de uma Cadeia de Markov $\{C_n\}_{n\geq 0}$ tal que $\gamma_{x,x}^{(n)} > 0$ para algum $n \geq 1$, isto é, tal que $\rho_x = P_x(T_x < \infty) > 0$. Definimos o período do estado x, denotado por d_x, como

$$d_x = m.d.c.\{n \geq 1 : \gamma_{x,x}^{(n)} > 0\}\cdot$$

Desta definição vemos que

$$1 \leq d_x \leq \min\{n \geq 1 : \gamma_{x,x}^{(n)} > 0\}\cdot$$

Também, se $\gamma_{x,x} > 0$, então $d_x = 1$.

Exemplo

No Exemplo 24 apresentamos uma Cadeia de Markov com matriz de transição

$$\Gamma = \begin{array}{c} \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{5} & \frac{2}{5} & \frac{1}{5} & 0 & \frac{1}{5} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \end{array}$$

.

Queremos identificar o período de cada um dos estados desta cadeia. Observamos diretamente que $d_x = 1$ para $x = 0, 1, 2, 3, 5$ e somente não é possível identificar diretamente o período do estado 4.

O trabalho agora é procurar a menor potência de Γ na qual a probabilidade de transição $\gamma_{4,4}^{(n)}$ seja positiva. Percebemos rapidamente que $\gamma_{4,4}^{(2)} = 1/6$, logo $d_4 = 2$.

Definição (Cadeia periódica).

Dizemos que uma Cadeia de Markov irredutível é periódica, com período d, se $d > 1$ e é aperiódica se $d = 1$.

Uma condição suficiente simples para uma Cadeia de Markov irredutível ser aperiódica é que $p_{x,x} > 0$ para algum $x \in S$.

Teorema 44 (Distribuição estacionária de uma cadeia recorrente positiva).

Seja $\{C_n\}_{n\geq 0}$ uma Cadeia de Markov recorrente positiva irredutível com distribuição estacionária π. Se a cadeia é aperiódica então

$$\lim_{n\to\infty} \gamma_{x,y}^{(n)} = \pi(y), \qquad x, y \in S\cdot$$

Se a cadeia é periódica com período d, então para cada par de estados $x, y \in S$ existe um inteiro r, $0 \leq r < d$ tal que $\gamma_{x,y}^{(n)} = 0$ a não ser que $n = md + r$ para algum inteiro não negativo m e

$$\lim_{m\to\infty} \gamma_{x,y}^{(md+r)} = d\pi(y), \qquad x, y \in S\cdot$$

Exemplo

No exemplo de modelo de genes (Exemplo 9) temos uma situação de cadeia periódica, como pode ser apreciado olhando a matriz de probabilidades de transição

$$\Gamma = \begin{array}{c} \\ GG \\ Gg \\ gg \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} GG & Gg & gg \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \end{array} \cdot$$

Pode ser observado também que esta é uma cadeia regular, devido a que

$$\Gamma^2 = \begin{array}{c} \\ GG \\ Gg \\ gg \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} GG & Gg & gg \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0.375 & 0.500 & 0.125 \\ 0.250 & 0.500 & 0.250 \\ 0.125 & 0.500 & 0.375 \end{pmatrix} \end{array},$$

do qual deduzimos que o período desta cadeia é $d = 2$. Não é difícil obter que

$$\lim_{n\to\infty} \Gamma^n = \begin{array}{c} \\ GG \\ Gg \\ gg \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} GG & Gg & gg \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0.250 & 0.500 & 0.250 \\ 0.250 & 0.500 & 0.250 \\ 0.250 & 0.500 & 0.250 \end{pmatrix} \end{array} \cdot$$