

Aula 11

Roteiro

- Autovalores, autovetores, decomposição
- Convergência para estacionaridade
- Tempo de mistura
- Spectral gap
- Tempo de mistura de passeios aleatórios

Estacionaridade

- Seja P a matriz de transição de estados de uma CM
- π é uma distribuição estacionária sse

$$\pi P = \pi \quad \pi_s \geq 0 \quad \sum_{s \in S} \pi_s = 1$$

- Seja $\pi(0)$ a distribuição inicial da CM. A distribuição no tempo t é dada por

$$\pi(t) = \pi(t-1)P = \pi(0)P^t$$

- Para qualquer CM aperiódica e irredutível, temos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} d_{TV}(\pi(t), \pi) = 0$$

- Convergência para π é única e independe de $\pi(0)$

Convergência

- Mas o quão rápido é esta convergência?
- Lembrando da distância de variação total entre dois vetores de probabilidade

$$d_{TV}(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_k |\alpha_k - \beta_k| \quad \longleftarrow d_{TV} \text{ tem valor entre 0 e 1}$$

- Como que $d_{TV}(\pi(t), \pi)$ vai a zero com t ?

$$d_{TV}(\pi(t), \pi) = \theta(e^{-at})? \quad \longleftarrow \text{Muito rápido (exponencial)}$$

$$d_{TV}(\pi(t), \pi) = \theta(t^{-b})? \quad \longleftarrow \text{Meio lento (lei de potência)}$$

$$d_{TV}(\pi(t), \pi) = \theta((\log t)^{-c})? \quad \longleftarrow \text{Muito lento}$$

- Depende de $\pi(0)$? Depende de P ?

Autovalores e Autovetores

- Dada uma matriz P , v é chamado de autovetor associado ao autovalor λ , se

$$Pv = \lambda v \quad \longleftarrow \text{Multiplicar } v \text{ por } P \text{ é igual a escalar } v \text{ por } \lambda$$

- P possui até n autovetores linearmente independentes, cada qual associado a um autovalor
- u é chamado de autovetor a esquerda se

$$uP = \lambda u \quad \longleftarrow \text{Multiplicar } u \text{ a esquerda de } P$$

- Se u é autovetor a esquerda, então existe autovetor v tq

$$P'v = \lambda u \quad \longleftarrow P' \text{ é a transposta da matriz } P$$

- Autovalores são os mesmos (esquerda e direita), relação entre autovetores obtida pela transposta da matriz

Autovetores e Matriz P

- π é uma distribuição estacionária da CM com matriz P sse $\pi P = \pi$
- Ou seja, π é o autovetor à esquerda de P associado ao autovalor $\lambda = 1$
- Precisamos ainda $\sum_{s \in S} \pi_s = 1$
- Solução: normalizar o autovetor para garantir soma 1
- **Teorema:** Se P é uma matriz estocástica, temos $|\lambda| \leq 1$ para todo autovalor, e apenas um autovalor $\lambda = 1$
 - matriz estocástica = matriz de transição de probabilidade

Decomposição em Autovetores

- Uma matriz P pode ser escrita através de seus autovetores e autovalores

$$P = Q L Q^{-1}$$

- Onde Q é matriz com autovetores de P como colunas
- L é matriz diagonal, com L_{ii} autovalor associado ao autovetor i (i -ésima coluna de Q)
- Q^{-1} é a inversa da matriz Q

Exemplo

$$P = \begin{pmatrix} .3 & .2 & .5 \\ .4 & .5 & .1 \\ .7 & .2 & 1 \end{pmatrix}$$

- Autovalores: 1, 0.3, -0.4 (de acordo com nosso teorema)
- Autovetores associados: (1, 1, 1), (2, -5, 2), (-43, 13, 55)

$$P = QLQ^{-1}$$

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -43 \\ 1 & -5 & 13 \\ 1 & 2 & 55 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & -0.4 \end{pmatrix}$$

$$Q^{-1} = \begin{pmatrix} 43/98 & 2/7 & 27/98 \\ 3/49 & -1/7 & 4/49 \\ -1/98 & 0 & 1/98 \end{pmatrix}$$

Autovetor à esquerda associado ao $\lambda=1$

↑
Autovetores de P
(um em cada coluna)

↑
Autovalores de P
(correspondentes)

↑
Inversa de Q
 Q^{-1} : autovetores à esquerda de P , um em cada linha!

Distribuição no Tempo t

- Seja $\pi(0)$ a distribuição inicial da CM. A distribuição no tempo t é dada por

$$\pi(t) = \pi(t-1)P = \pi(0)P^t$$

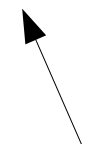
- Mas sabemos que $P = QLQ^{-1}$, então temos

$$\begin{aligned} P^t &= PP \dots P = QLQ^{-1}QLQ^{-1} \dots QLQ^{-1} \\ &= QLIL I \dots LQ^{-1} = QLL \dots LQ^{-1} = QL^t Q^{-1} \end{aligned}$$

- Logo, temos que

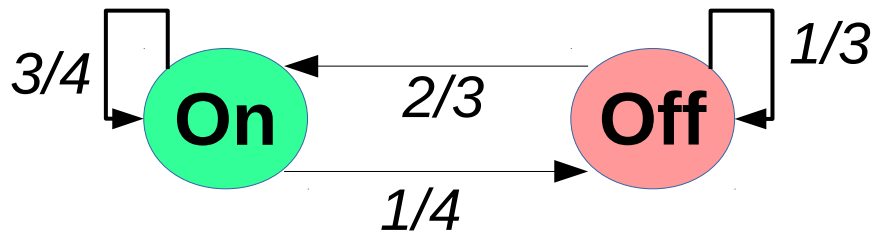
$$\pi(t) = \pi(0)QL^t Q^{-1}$$

Matriz diagonal, com cada elemento elevado a potência t



- Para onde vai L^t com t crescente ?
- $\lambda = 1$ fica no mesmo lugar, todos os outros valores vão a zero, pois $|\lambda| < 1$

Exemplo



$$P = \begin{pmatrix} .75 & .25 \\ .67 & .33 \end{pmatrix}$$

$$\pi = (8/11 \quad 3/11)$$

- Autovalores de P : $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 1/12$
- Autovetores a esquerda de P : $v_1 = (8/3 \ 1)$, $v_2 = (1 \ -1)$
- Temos então $\pi = \left(\frac{8/3}{8/3+1} \quad \frac{1}{8/3+1} \right) = (8/11 \quad 3/11)$

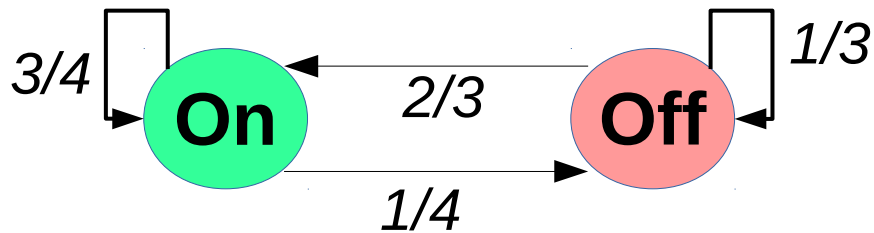
- Supor $\pi(0) = (1 \ 0)$. Podemos escrever

$$\pi(0) = (1 \ 0) = \pi + 3/11 v_2$$

- Temos então

$$\begin{aligned} \pi(t) &= \pi(0) P^t = (\pi + 3/11 v_2) P^t = \pi P^t + 3/11 v_2 P^t \\ &= \pi + 3/11 \lambda_2^t v_2 \\ &= (8/11 + 3/11 (1/12)^t \quad 3/11 - 3/11 (1/12)^t) \end{aligned}$$

Exemplo



$$P = \begin{pmatrix} .75 & .25 \\ .67 & .33 \end{pmatrix}$$

$$\pi = (8/11 \quad 3/11)$$

- Temos então

$$\pi(t) = (8/11 + 3/11(1/12)^t \quad 3/11 - 3/11(1/12)^t)$$

- Distância de variação total

$$d_{TV}(\pi(t), \pi) = \frac{1}{2} \frac{3}{11} (1/12^t + 1/12^t) = \frac{3}{11} 1/12^t = \theta(12^{-t})$$

Converge exponencialmente rápido!

- Resultado vale para qualquer CM
 - converge exponencialmente rápido em t
 - constantes dependem de P e $\pi(0)$

Teorema da Convergência

- Considere uma CM aperiódica e irredutível com matriz de probabilidade P com distribuição estacionária π
- Existem constantes α em $(0, 1)$ e $C > 0$, tq

$$\max_{\pi(0)} d_{TV}(\pi(t), \pi) \leq C \alpha^t$$

- Distribuição transiente $\pi(t)$ converge exponencialmente rápido em t para distribuição estacionária π , independente de P e $\pi(0)$

Tempo para Convergência

- Quantos passos até determinar a convergência?
- **Ideia:** definir $\varepsilon > 0$ como distância até equilíbrio
 - calcular t tal $d_{TV}(\pi(t), \pi) = \varepsilon$

- Exemplo anterior

$$d_{TV}(\pi(t), \pi) = \frac{3}{11} 12^{-t} = \varepsilon \quad \longrightarrow \quad t = \frac{\log \varepsilon + \log(11/3)}{-\log 12}$$

- Se $\varepsilon = 10^{-6}$ então $t = 5$
- Poucas transições são necessárias para chegar próximo do equilíbrio
 - em geral, $t = \theta \left(\log \frac{1}{\varepsilon} \right)$
 - constante em θ depende de P e $\pi(0)$

Tempo de Mistura

- τ_ϵ : tempo de mistura- ϵ para constante $\epsilon > 0$

$$\tau_\epsilon = \min \{ t \mid \max_{\pi(0)} d_{TV}(\pi(t), \pi) \leq \epsilon \}$$

- τ_ϵ : menor valor de t tal que para qualquer distribuição inicial, $\pi(t)$ está a distância menor que ϵ da estacionária
- Teorema: Para qualquer CM aperiódica, irreduzível, temos $\tau_\epsilon \leq \tau_{1/4} \log 1/\epsilon$
- Depois de estar perto o suficiente, chegar mais perto é mais fácil (um fator $\log \epsilon^{-1}$)
- Tempo de mistura depende fracamente em ϵ
 - ϵ vai ser tomado como constante

Spectral Gap

- Convergência depende da relação dos autovalores de P
 - segundo maior autovalor (em módulo) domina convergência
- *Spectral Gap* (δ): distância entre os dois maiores (em módulo) autovalores de P (maior é sempre igual a 1)
$$\delta = 1 - \max_{k>1} \{ |\lambda_k| \}$$

← k -ésimo autovalor de P , $\lambda_1 = 1$
- Quanto maior for δ , mais rápido é a convergência
 - base da exponencial que domina a convergência é dada por $|\lambda_2|$ (segundo maior autovalor)
 - todas as outras componentes vão a zero mais rapidamente (menor base)

Exemplo

- Processo de Nascimento e Morte, fila com capacidade K
- p = probabilidade de chegada, q = probabilidade de saída, $r = 1-p-q$ (não chega nem sai ninguém)

$$P = \begin{pmatrix} q+r & p & 0 & 0 & 0 \\ q & r & p & 0 & 0 \\ 0 & q & r & p & 0 \\ 0 & 0 & q & r & p \\ 0 & 0 & 0 & q & p+r \end{pmatrix}$$

- $K=4, p=0.3, q=0.4 \rightarrow \lambda_2 \sim 0.86$
 - $\delta = 1 - 0.86 = 0.14$
- $K=4, p=0.1, q=0.8 \rightarrow \lambda_2 \sim 0.56$
 - $\delta = 1 - 0.56 = 0.44$

- Spectral gap depende dos parâmetros do modelo
 - quanto mais simétrico (p e q parecidos) menor é o gap, mais lento será a convergência

Spectral Gap e Tempo de Mistura

- Relação entre δ e τ_ϵ
- Considere CM reversível, irredutível e aperiódica com *spectral gap* δ e $\pi_0 = \min_i \pi_i$ (menor valor de probabilidade da distribuição estacionária)
- Temos a seguinte relação

$$\left(\frac{1}{\delta} - 1\right) \log 1/(2\epsilon) \leq \tau_\epsilon \leq \frac{\log 1/(\pi_0 \epsilon)}{\delta}$$

↑
Limitante inferior para
tempo de mistura

↑
Limitante superior para
tempo de mistura

- Maior δ , menor τ_ϵ
- Maior π_0 , menor τ_ϵ

- Usar limitante superior na prática não é fácil, pois precisamos de π_0 e δ

Exemplo

- Processo de Nascimento e Morte, fila com capacidade K
 - CM é reversível, irredutível e aperiódica
- Supondo $p < q$, podemos calcular π_K , que será o estado menos provável (aula passada)
- $K=4, p=0.3, q=0.4 \rightarrow \lambda_2 \sim 0.86$

- $\delta = 1 - 0.86 = 0.14$

- $\pi_K = 0.015 \rightarrow \pi_0 = \min_i \pi_i = 0.015$

- Assumindo $\epsilon = 10^{-6}$, e substituindo temos

$$\left(\frac{1}{0.14} - 1\right) \log 1/(2 * 10^{-6}) \leq \tau_\epsilon \leq \frac{\log 1/(0.015 * 10^{-6})}{0.14}$$

$$80.6 \leq \tau_\epsilon \leq 128.7$$

- Com $t = 129$ estaremos 10^{-6} próximo de π , para qualquer distribuição inicial

Tempo de Mistura em n

- Resultados anteriores são para CM de tamanho fixo
- Espaço de estados da CM pode crescer muito com o tamanho do problema
- Seja $n = f(k)$ o número de estados da CM
 - $k =$ parâmetro do modelo
 - $n = 2^k$, ex. $S =$ número de colorações de k objetos com duas cores
 - $n = k!$, ex. $S =$ permutações de k cartas
- Como τ depende de n e k ?
 - para algum ε fixo
 - convergência em função de n

Passeios Aleatórios

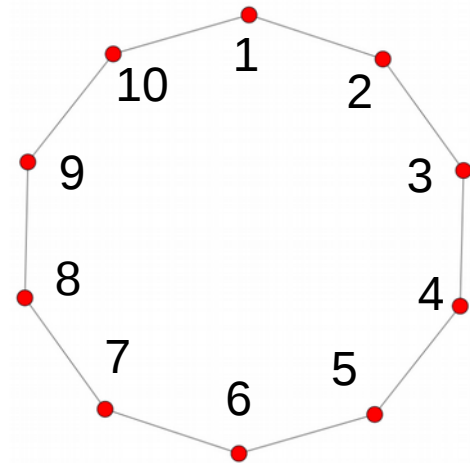
- Tempo de mistura de passeios aleatórios em grafos
 - modelo do grafo parametrizado por n (vértices)
 - grafo completo, grafo em anel, hipercubo, etc
- Passeio aleatório preguiçoso (*lazy random walk*)
 - permanece no vértice atual com prob $\frac{1}{2}$, caso contrário, escolhe vizinho uniformemente
 - implica CM aperiódica e irredutível
- Como que o tempo de mistura depende da estrutura do grafo?
 - τ_n é o tempo de mistura com n vértice para um ε constante

Mistura em Anel e Árvore

- Anel (um ciclo) com n vértices

$$c n^2 \leq \tau_n \leq n^2$$

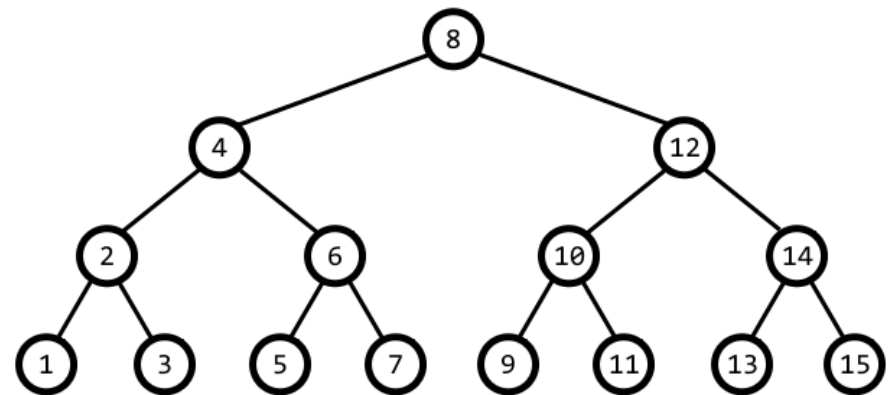
- quadrático no tamanho do anel



- Árvore binária completa com n vértices

$$\tau_n \leq 16 n$$

- linear no tamanho da árvore



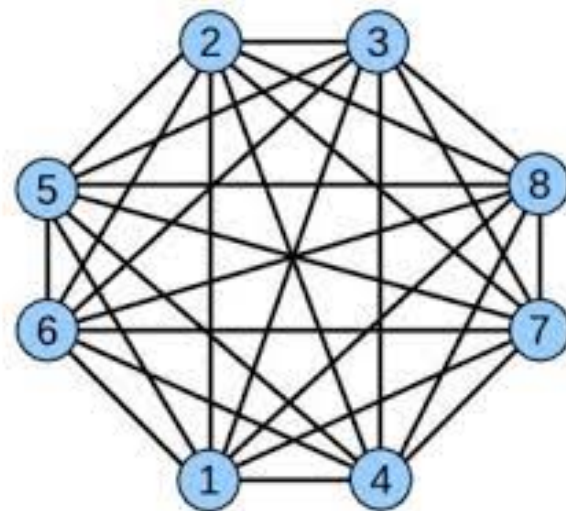
- Passeios misturam muito mais rapidamente em árvores do que anéis!

Mistura em Outros Grafos

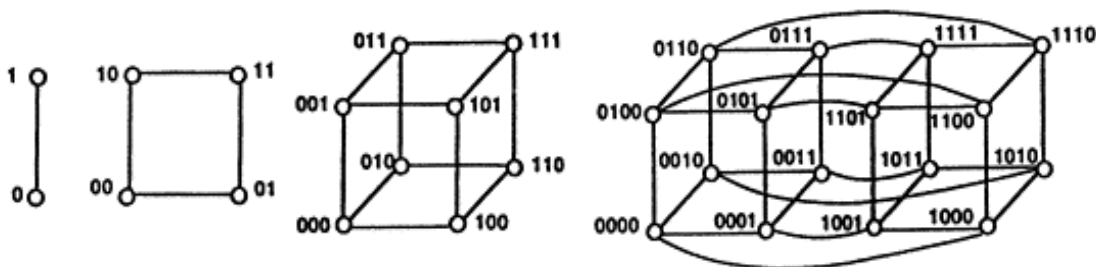
- Grafo completo com n vértices (com *loops* ou se n é grande)

$$\tau_n = 1$$

- tempo constante



- Hipercubo com d dimensões e $n = 2^d$ vértices



$$\tau_n \leq c d \log d \quad \leftarrow \text{chamado de "fast mixing"}$$

- tempo *polylog* do tamanho do grafo

Tema atual de pesquisa na matemática (e computação)