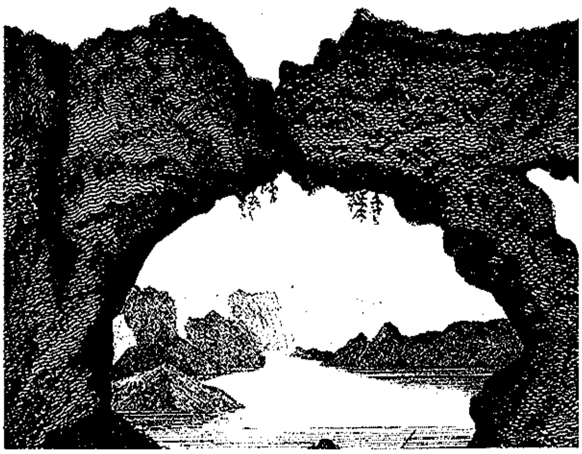
Teoria e prática sobre as Cadeias de Markov

Milo Ricardo Guazzelli[1]

Resumo Este trabalho tem um duplo objetivo: apresentar de modo operacional a teoria das Cadeias de Markov e mostrar ao mesmo tempo como esta pode ser utilizada na análise de problemas de qualidade de água. A aplicação prática apresentada trata da presença de mercúrio em águas superficiais em concentrações acima do limite estabelecido. Esta questão é importante e vem sendo objeto de estudos recentes que buscam o conhecimento dos mecanismos de transferência do mercúrio do sedimento para a água e vice-versa.

ABSTRACT This paper has a double objective: to describe the Markov Chains theory in a practical way as well as to show its application in the water quality analysis. The practical application here described is related to the mercury presence in superficial waters in concentrations above the established limit. This is an important issue that has been the object of recent studies in order to understand the mercury transference mechanisms from the sediment to the water and vice-versa.

A teoria dos processos estocásticos trata de sistemas que evoluem no espaço ou no tempo, de acordo com leis probabilísticas. No processo estocástico temporal, os resultados são "indexados" ou identificados no tempo, em ocasiões específicas. Assim definido, um processo estocástico é um experimento aleatório no tempo, através do qual algum atributo de interesse assume valores numéricos segundo fatores casuais. Este atributo, que pode tratar de valores qualitativos, é denominado variável aleatória.



Um processo estocástico é definido pela família ou conjunto de variáveis aleatórias $\{ X_t \}$, onde t é um parâmetro temporal (índice) de um dado conjunto T.

Um valor específico para a variável aleatória é denominado um "estado". Na terminologia dos processos estocásticos, a variável aleatória X_t é chamada "variável de estado". O espaço dos estados (S) é simplesmente o espaço amostral para todos os valores possíveis de X_t.

1 — Processos estocásticos de estado discreto e parâmetro discreto

Se S contém, exclusivamente, valores discretos, então $\{ X_t \}$ é denominado "processo estocástico de estado discreto". Em outras palavras, S contém os estados (resultados) mutuamente exclusivos e exaustivos associados com o processo (experimento). Em geral, os espaços de estado dis-

[1] Engenheiro Industrial Mecânico e Sanitarista.
Mestre em Saúde Pública pela Faculdade de Saúde Pública da Universidade de São Paulo
Gerente da Divisão de Qualidade de Águas da CETESB

creto podem ser finitos numeráveis (isto é, o número de resultados em S é finito) ou infinitos numeráveis (isto é, o número de resultados em S é infinitamente grande). Da mesma forma, o parâmetro de indexação T pode ser discreto. Se T está restrito a valores inteiros, isto é, T = { 0, 1, 2, ... }, então { X_t } é um "processo estocástico de parâmetro discreto".

2 — Processos markovianos

Uma das classes mais bem conhecidas e úteis no âmbito dos processos estocásticos é a dos processos markovianos.

Um processo estocástico é um "Processo de Markov" quando satisfaz a seguinte condição, conhecida como "Propriedade Markoviana":

> "Dado o conhecimento do estado presente (ou mais recente), a probabilidade condicional do estado seguinte é independente dos estados anteriores ao estado presente (ou mais recente)".

Especificamente, para um processo estocástico de estado discreto e parâmetro discreto, a probabilidade condicional de um próximo estado específico (isto é, $X_{t+1} = x_{t+1}$) dado o estado presente (isto é, dado $X_t = x_t$) e dados todos os estados que antecedem o estado presente (isto é, dados $X_o = x_o$, $X_1 = x_1 \ldots X_{t-1} = x_{t-1}$) é idêntica à probabilidade condicional de um próximo estado específico, dado o estado presente: $P(X_{t+1} = x_{t+1} | X_o = x_o, X_1 = x_1, \ldots X_t = x_t) = P(X_{t+1} = x_{t+1} | X_t = x_t)$ .... (1)

para t = 0, 1, ... e todas as seqüências possíveis para valores de estado.

Note-se que a letra maiúscula representa a variável aleatória e a letra minúscula um valor específico da variável aleatória.

3 — Probabilidades de transição

A probabilidade condicional dada pelo lado direito da equação (1) representa a chamada "probabilidade de transição". A probabilidade de transição é definida como a probabilidade condicional, de o processo atingir um estado futuro específico dado seu estado mais recente. Essa probabilidade é também denominada "probabilidade de transição de 1-estágio" uma vez que descreve o sistema entre t e t + 1. Analogamente se pode definir probabilidade de transição de m-estágios como a probabilidade condicional que descreve estados no sistema entre t e t + m.

Uma representação conveniente das probabilidades de transição de 1-estágio para o caso discreto é dada pela seguinte "matriz de transição":

DO ESTADO \ PARA O ESTADO

$$P = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ n \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 1 & 2 \ \ldots & n \end{array} \\ \left| \begin{array}{ccc} p_{11} & p_{12} \cdots & p_{1n} \\ \cdot & & \\ \cdot & & \\ \cdot & & \\ & & \\ p_{n1} & p_{n2} \cdots & p_{nn} \end{array} \right| \end{array} \quad \ldots (2)$$

onde n é o número de estados mutuamente exclusivos e exaustivos e p_{ij} é a "probabilidade de transição" do i-ésimo estado presente para o próximo j-ésimo estado. Assim, as linhas representam os estados presentes possíveis e as colunas os estados futuros possíveis. Por definição, os elementos em P devem satisfazer as duas propriedades seguintes:

1. $O \leq p_{ij} \leq 1$ para todos i, j

2. $\sum_{j=1}^{n} p_{ij} = 1, \ i = 1, 2, \ldots, n$

A primeira propriedade segue da definição de probabilidade. A segunda decorre da Regra da Adição para eventos mutuamente exclusivos que são exaustivos; isto é, dado que o sistema está presentemente no i-ésimo estado, a probabilidade de estar em seguida no estado 1 ou estado 2 ou ... estado n é 1.

4 — Cadeias de Markov

Uma "Cadeia de Markov" é um processo estocástico com as seguintes propriedades:

1. Espaço de estado-discreto.
2. Propriedade markoviana.
3. Probabilidades de transição de 1-estágio permanecem constantes ao longo do tempo (denominadas probabilidades de transição estacionárias).

Se, adicionalmente, o estado de espaço discreto tem um número finito de estados, então, fica definida a Cadeia de Markov de Estado Finito.

As cadeias de Markov constituem uma classe proeminente dos processos markovianos, pois têm propriedades computacionais desejáveis à implementação em aplicações práticas. Uma Cadeia de Markov fica completamente determinada uma vez que seja especificada, com certeza, a matriz de transição e o conjunto de probabilidades incondicionais para os estados iniciais.

O conhecimento desses dois conjuntos de probabilidades permite a predição probabilística de estados específicos em pontos futuros, no tempo.

5 — Exemplo de formulação de processo como Cadeia de Markov

Considerem-se os registros históricos de conformidade ou inconformidade, de amostras, apresentados na Tabela 1, relativamente ao padrão para a concentração de mercúrio em águas superficiais, para uma determinada estação de monitoramento bimestralmente amostrada.

Neste caso, a variável de estado é discreta e pode assumir um dentre dois valores.

Seja $X_t = 0$, se a amostra se apresenta "conforme" por ocasião da coleta no bimestre t, e $X_t = 1$, se esta se apresenta "inconforme" no bimestre t.

{ X_t }, nestas condições, é um processo estocástico de estado discreto e parâmetro discreto onde S = { 0,1 } e T = { 1, 2,... }. Para um período de dezoito bimestres,

Tabela 1 — *Registros históricos bimestrais de conformidade ou inconformidade com o padrão para a concentração de mercúrio em águas superficiais.*

Bimestre (t)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Conforme ?	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	1	0

$\{ X_t \} = \{ X_1, X_2, ..., X_{18} \}$ é a representação geral deste processo e $\{ 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0 \}$ é sua realização.

Geralmente, a matriz de transição teórica ou verdadeira é desconhecida, na prática. O procedimento usual para especificar P supõe, primeiramente, que o processo estocástico observado (histórico) constitui uma amostra aleatória do processo real. Se for este o caso, há uma justificativa teórica para calcular as estimativas por ponto das probabilidades de transição, a partir das probabilidades empíricas, obtidas de uma tabela de contingência.

No caso do exemplo apresentado, o processo estocástico histórico pode ser descrito pela Tabela 2.

Note-se (ver Tabela 2) que duas vezes o estado do sistema evoluiu de "conforme" para "conforme" em bimestres contíguos (isto é, de $X_1 = 0$ para $X_2 = 0$ e de $X_9 = 0$ para $X_{10} = 0$); portanto, um 2 é colocado na célula (1,1) da tabela de contingência (Tabela 2). Por definição, p_{11} é a probabilidade de "conforme" no bimestre seguinte dado que subsiste conformidade no bimestre corrente. Da tabela de contingência (Tabela 2), dentre 7 "conformes" nos bimestres vigentes (a soma da linha 1), 2 "conformes" ocorreram nos bimestres seguintes; portanto $p_{11} = 2/7$. Analogamente, $p_{12} = 5/7$ ou 5 bimestres "inconformes" ocorreram subseqüentemente aos bimestres "conformes" dentre os 7 possíveis. Logo, para a matriz temos:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{11} = \frac{2}{7} & p_{12}\frac{5}{7} \\ p_{21} = \frac{5}{10} & p_{22} = \frac{5}{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}29 & 0{,}71 \\ 0{,}50 & 0{,}50 \end{pmatrix}$$

Graficamente, a matriz P pode ser representada da forma mostrada na Figura 1.

6 — Técnicas de cálculo na análise da probabilidade de estados futuros de uma Cadeia de Markov

6.1 — Enfoque Clássico nas Soluções Transientes

Supondo-se que as hipóteses relativas à dependência (propriedade markoviana) e estacionariedade são satisfeitas para o exemplo dado, isto é, assumindo-se a "validade" da Cadeia de Markov, pode-se predizer a probabilidade de qualquer estado futuro, dado qualquer estado presente, tão-somente aplicando as Regras de Adição e Multiplicação de probabilidades dadas pelas seguintes fórmulas:

Regra da Adição

$$P\,(E_1 \text{ "ou" } E_2 \text{ "ou" } \dots \text{ "ou" } E_k) = \sum_{i=1}^{k} P\,(E_i) \quad (3)$$

onde E_i são eventos alternativos mutuamente exclusivos.

Regra da Multiplicação

A probabilidade condicional de E_i relativamente a E_j (isto é, a probabilidade de E_i dada a ocorrência de E_j) é definida como:

$$P(E_i / E_j) = \frac{P\,(E_j \text{ "e" } E_i)}{P\,(E_j)} \quad \dots\dots\dots\dots\dots\dots \quad (4)$$

Figura 1 — *Representação do grafo da matriz de transição para o exemplo dado.*

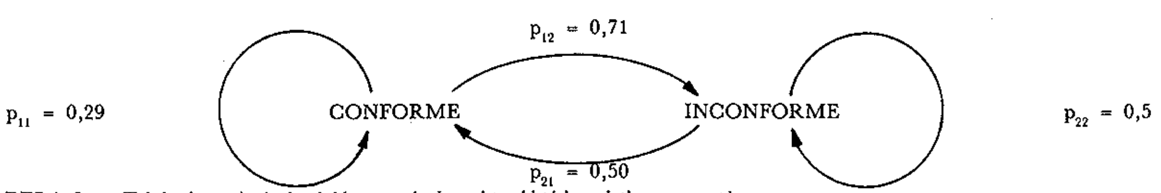


TABELA 2 — *Tabela de contingência obtida a partir do registro histórico relativo ao exemplo.*

DE — um estado específico num dado bimestre	PARA — um estado específico no bimestre seguinte: CONFORME ($X_{t+1} = 0$) :	INCONFORME ($X_{t+1} = 1$)	SOMA DA LINHA
CONFORME ($X_t = 0$)	2	5	7
INCONFORME ($X_t = 1$)	5	5	10
SOMA DA COLUNA	7	10	17

A Figura 2 mostra a árvore de probabilidades que descreve o estado presente no bimestre 18 ("conforme" ou $X_{18} = 0$), bem como os estados futuros nos bimestres 19, 20 e 21.

Cada "nó" na árvore representa um estado específico no bimestre t que é ou "conforme" ($X_t = 0$) ou "inconforme" ($X_t = 1$).

O "ramo" entre dois estados quaisquer representa um caminho possível de trânsito, entre esses dois estados. As probabilidades condicionais ou "de ramo" são mostradas na figura, encimadas em cada ramo.

As "probabilidades de ramo" são, na realidade, as probabilidades de transição entre dois estados sucessivos quaisquer.

A probabilidade de "conforme" no bimestre 19 ($X_{19} = 0$) dado "conforme" no bimestre 18 ($X_{18} = 0$) é dada por:

$$P\,(X_{19} = 0 \mid X_{18} = 0) = p_{11} = 0{,}29$$

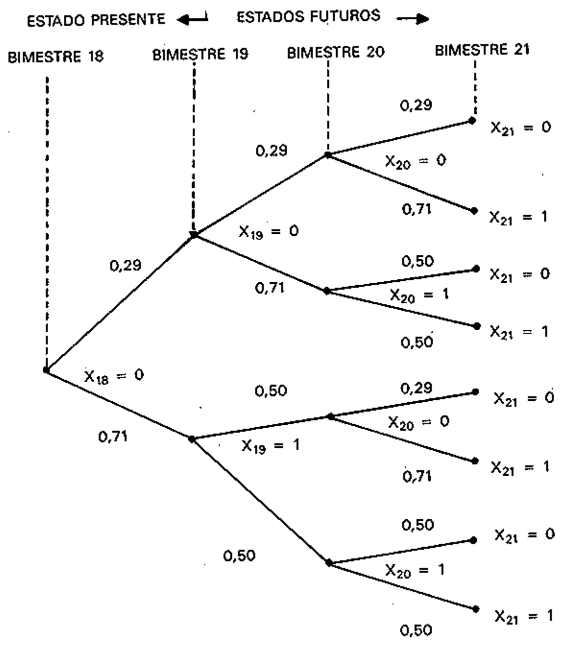
A probabilidade de "conforme" no bimestre 20 ($X_{20} = 0$) dado "conforme" no bimestre 18 é dada por:

$$P(X_{20} = 0 \mid X_{18} = 0) = P(X_{19} = 0 \mid X_{18} = 0) \cdot P(X_{20} = 0 \mid X_{19} = 0)$$

$$+ P(X_{19} = 1 \mid X_{18} = 0) \cdot P(X_{20} = 0 \mid X_{19} = 1)$$

$$P(X_{20} = 0 \mid X_{18} = 0) = (0{,}29) \cdot (0{,}29) + (0{,}71)\,(0{,}50)$$

Figura 2 — *Árvore de probabilidades para o exemplo dado.*



$$P(X_{20} = 0 \mid X_{18} = 0) = 0{,}0841 + 0{,}3550 = 0{,}4391$$

Atentando-se para a árvore de probabilidades (ver Figura 2), verifica-se que é possível atingir $X_{20} = 0$ por dois caminhos. O primeiro vai de $X_{18} = 0$ a $X_{19} = 0$ e daí para $X_{20} = 0$ com probabilidade (0,29)(0,29), conforme a "Regra de Multiplicação" para eventos dependentes. O segundo dirige-se de $X_{18} = 0$ a $X_{19} = 1$ e daí para $X_{20} = 0$ com probabilidade (0,71)(0,50).

Uma vez que esses caminhos são mutuamente exclusivos, a probabilidade de atingir $X_{20} = 0$, dado que se inicipu em $X_{18} = 0$, é dada pela soma das probabilidades calculadas separadamente (0,0841 + 0,3550), conforme a "Regra de Adição" para eventos mutuamente exclusivos.

A probabilidade de "conforme" no bimestre 21, dado "conforme" no bimestre 18 ($X_{18} = 0$), é dada pela soma de quatro caminhos de probabilidades:

$$\begin{aligned} P(X_{21} = 0 \mid X_{18} = 0) &= (0{,}29)(0{,}29)(0{,}29) + (0{,}29)(0{,}71)(0{,}50) \\ &+ (0{,}71)(0{,}50)(0{,}29) + (0{,}71)(0{,}50)(0{,}50) \\ &= 0{,}024389 + 0{,}10295 + 0{,}10295 + 0{,}1775 \\ &= 0{,}407789 \end{aligned}$$

Resumindo, dado "conforme" no bimestre 18, as probabilidades de "confome" nos bimestres 19, 20 e 21 são (0,29), (0,4391000) e (0,407789), respectivamente. Essas probabilidades condicionais para o estado "conforme" são conhecidas como "probabilidades transientes", por se alterarem com o tempo.

6.2 — Enfoque matricial nas soluções transientes

O método de árvores de probabilidades, para o cálculo das probabilidade transientes, apesar de instrutivo, é incômodo. Um procedimento mais elegante e eficiente envolve a utilização da multiplicação de matrizes.

Para a matriz de transição do exemplo dado:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0{,}29 & 0{,}71 \\ 0{,}50 & 0{,}50 \end{pmatrix},$$

sabe-se que a primeira linha representa as probabilidades condicionais dos estados possíveis no próximo período, dado que o Estado 1 "conforme" é observado no período atual. Assim, dado "conforme" no período atual, p_{11} = 0,29 e p_{12} = 0,71 são as probabilidades de "conforme" e "inconforme", respectivamente, no próximo período. Analogamente, a segunda linha representa as duas probabilidades condicionais no próximo período, dado ter sido observado o Estado 2 ("inconforme") no período corrente (isto é, $p_{21} = 0{,}5$ e $p_{22} = 0{,}5$).

Para determinar todas as probabilidades condicionais de dois períodos no futuro (isto é, $p_{ij}^{(2)}$ para todos os i e j), simplesmente eleva-se **P** ao quadrado como segue:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2 &= \mathbf{P.P} \\ &= \begin{pmatrix} 0{,}29 & 0{,}71 \\ 0{,}50 & 0{,}50 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 0{,}29 & 0{,}71 \\ 0{,}50 & 0{,}50 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0{,}4391000 & 0{,}5609000 \\ 0{,}3950000 & 0{,}6050000 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Esta matriz indica, por exemplo, que $p_{12}^{(2)}$ é a probabilidade de "inconforme" daqui a dois bimestres, dado que no bimestre corrente o estado subsistente é de conformidade.

As probabilidades condicionais para daqui a três bimestres são dadas por:

$$P^3 = P^2 . P$$

$$= \begin{pmatrix} 0{,}4391000 & 0{,}5609000 \\ 0{,}3950000 & 0{,}6050000 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0{,}29 & 0{,}71 \\ 0{,}50 & 0{,}50 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0{,}4077890 & 0{,}5922110 \\ 0{,}4170500 & 0{,}5829500 \end{pmatrix}$$

Para calcular as probabilidades condicionais daqui a quatro bimestres, basta calcular $\mathbf{P}^4$ efetuando-se $\mathbf{P}^3 \cdot \mathbf{P}$ ou $\mathbf{P}^2 \cdot \mathbf{P}^2$. Em geral, as chamadas probabilidades de transição de k-estágios, para k períodos de tempo no futuro, representadas por $p_{ij}^{(k)}$, são obtidas pelo cálculo de $\mathbf{P}^k$.

7 — Probabilidades incondicionais ou absolutas

Na Tabela 2, referente ao exemplo dado, as somas de cada coluna dividida pela soma de ambas as colunas (ou de ambas as linhas) fornecem, respectivamente, as estimativas das probabilidades de uma amostra aleatória, coletada na estação de monitoramento considerada, se apresentar nos estados "conforme" ou "inconforme", no bimestre "vigente" (ver Tabela 2). Essas probabilidades, denominadas probabilidades incondicionais ou absolutas do Estado j no período "vigente", representam as probabilidades incondicionais iniciais. Para o exemplo dado, as probabilidades incondicionais iniciais são representadas pelo seguinte vetor linha:

$$\mu^{(0)} = (0{,}41 \;\; 0{,}59)$$

Se se estiver interessado na Probabilidade Incondicional ou Absoluta do Estado j após k transições ($\mu_j^{(k)}$), o seguinte produto deve ser efetuado:

$$\mu^{(k)} = \mu^{(0)} \cdot \mathbf{P}^k \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (5)$$

onde $\mu^{(k)} = [\mu_1^{(k)}, \mu_2^{(k)} \ldots \mu_n^{(k)}]$ é o vetor linha das probabilidades incondicionais para todos os n estados após k transições, $\mu^{(0)}$ é o vetor linha das probabilidades incondicionais iniciais e $\mathbf{P}$ é a matriz de transição de 1-estágio.

Note-se que, como $\mathbf{P}^k = \mathbf{P}^{k-1} \cdot \mathbf{P}$, podemos escrever (5) da seguinte forma:

$$\mu^{(k)} = \mu^{(0)} \cdot \mathbf{P}^{k-1} \cdot \mathbf{P} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (6)$$

Por outro lado, para k-1 estágios, o produto dado por (5) fica:

$$\mu^{(k-1)} = \mu^{(0)} \cdot \mathbf{P}^{k-1} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7)$$

Substituindo-se (7) em (6) obtemos uma fórmula alternativa para o cálculo da Probabilidade Incondicional ou Absoluta do Estado j após k transições, qual seja:

$$\mu^{(k)} = \mu^{(k-1)}\, \mathbf{P} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8)$$

Ilustrando com o exemplo que vimos tratando, se quisermos saber a distribuição de probabilidades dos estados "conforme" e "inconforme", respectivamente, daqui a três bimestres, basta efetuar, usando (5):

$$\mu^{(3)} = (0{,}41 \;\; 0{,}59) \cdot \begin{pmatrix} 0{,}29 & 0{,}71 \\ 0{,}50 & 0{,}50 \end{pmatrix}^3$$

$$= (0{,}41 \;\; 0{,}59) \cdot \begin{pmatrix} 0{,}4077890 & 0{,}5922110 \\ 0{,}4170500 & 0{,}5829500 \end{pmatrix}$$

$$= (0{,}4132530 \quad 0{,}5867470)$$

8 — Soluções de estado estacionário

Para ilustrar a distribuição estacionária da Cadeia de Markov, considerem-se os cálculos apresentados na Tabela 3, para o exemplo dado.

Tabela 3 — Matrizes de transição de 13 estágios para o exemplo dado.

k	$\mathbf{P}^k$
1	$\begin{pmatrix} 0{,}2900000 & 0{,}7100000 \\ 0{,}5000000 & 0{,}5000000 \end{pmatrix}$
2	$\begin{pmatrix} 0{,}4391000 & 0{,}5609000 \\ 0{,}3950000 & 0{,}6050000 \end{pmatrix}$
3	$\begin{pmatrix} 0{,}4077890 & 0{,}5922110 \\ 0{,}4170500 & 0{,}5829500 \end{pmatrix}$
4	$\begin{pmatrix} 0{,}4143643 & 0{,}5856357 \\ 0{,}4124195 & 0{,}5875805 \end{pmatrix}$
5	$\begin{pmatrix} 0{,}4129835 & 0{,}5870165 \\ 0{,}4133919 & 0{,}5866081 \end{pmatrix}$
6	$\begin{pmatrix} 0{,}4132735 & 0{,}5867265 \\ 0{,}4131877 & 0{,}5868123 \end{pmatrix}$
7	$\begin{pmatrix} 0{,}4132126 & 0{,}5867874 \\ 0{,}4132306 & 0{,}5867694 \end{pmatrix}$
8	$\begin{pmatrix} 0{,}4132254 & 0{,}5867746 \\ 0{,}4132216 & 0{,}5867784 \end{pmatrix}$
9	$\begin{pmatrix} 0{,}4132227 & 0{,}5867773 \\ 0{,}4132235 & 0{,}5867765 \end{pmatrix}$
10	$\begin{pmatrix} 0{,}4132232 & 0{,}5867768 \\ 0{,}4132231 & 0{,}5867769 \end{pmatrix}$
11	$\begin{pmatrix} 0{,}4132231 & 0{,}5867769 \\ 0{,}4132232 & 0{,}5867768 \end{pmatrix}$
12	$\begin{pmatrix} 0{,}4132231 & 0{,}5867769 \\ 0{,}4132231 & 0{,}5867769 \end{pmatrix}$
13	$\begin{pmatrix} 0{,}4132231 & 0{,}5867769 \\ 0{,}4132231 & 0{,}5867769 \end{pmatrix}$

Primeiro, atente-se para qualquer $p_{ij}^{(k)}$ à medida que k aumenta. Note-se que as oscilações dessas probabilidades transientes são amortecidas em cada estágio. Isso implica que $p_{ij}^{(k)}$ se aproxima, assintoticamente, de um valor de estado estacionário. Por outro lado, concentre-se a atenção nas linhas de $\mathbf{P}^k$, à medida que k aumenta. Note-se que as linhas vão se tornando idênticas. Por exemplo, as linhas de $\mathbf{P}^{(12)}$ são idênticas para 7 dígitos significativos. Isso ilustra o fato interessante de que a probabilidade de qualquer estado futuro vai se tornando independente de seu estado inicial, quanto mais se evolui para o futuro. Esta probabilidade converge para seu valor de estado estacionário (μ_j^*) de cima para baixo (se $p_{ij} > \mu_j^*$) ou de baixo para cima (se $p_{ij} < \mu_j^*$), como mostrado na figura 3.

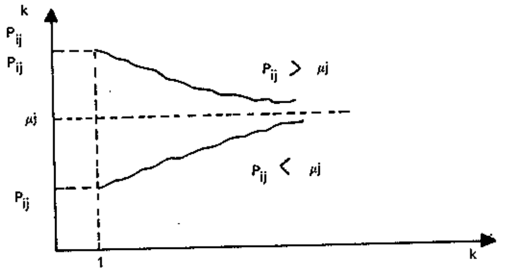


Figura 3 — *A probabilidade transiente assintoticamente se aproxima da probabilidade de estado estacionário.*

A probabilidade de estado estacionário para o estado j indica que a probabilidade de se encontrar o processo estocástico no estado j, após um "grande" número de transições, tende para o valor dado por μ_j^*. Uma vez que essa tendência se manifesta independentemente da distribuição de probabilidade inicial, conclui-se que μ_j^* é a probabilidade "incondicional" para o estado j. Assim, pode-se concluir que as probabilidades absolutas não se alteram, uma vez que o estado estacionário tenha sido atingido. Conseqüentemente, com base na equação (8), a seguinte igualdade deve ser verdadeira.

$$\mu^* = \mu^* \cdot \mathbf{P} \quad \dots \quad (9)$$

onde μ^* é o vetor linha de n probabilidades de estado estacionário. Esta condição, associada ao fato que os elementos de μ^* devem somar 1, isto é

$$\sum_{j=1}^{n} \mu_j^* = 1 \quad \dots \quad (10)$$

permite que imediatamente sejam calculadas as probabilidades de estado estacionário, como a seguir se mostra.

Aplicando-se a equação 9 ao exemplo dado, obtém-se:

$$(\mu_1^* \quad \mu_2^*) = (\mu_1^* \quad \mu_2^*) \cdot \begin{pmatrix} 0{,}29 & 0{,}71 \\ 0{,}50 & 0{,}50 \end{pmatrix}$$

que, após a multiplicação, se transforma em 2 equações com 2 incógnitas.

$$\mu_1^* = 0{,}29 \ \mu_1^* + 0{,}50 \ \mu_2^* \quad (1)$$

$$\mu_2^* = 0{,}71 \ \mu_1^* + 0{,}50 \ \mu_2^* \quad (2)$$

Além destas, a equação (10) permite escrever

$$\mu_1^* + \mu_2^* = 1 \quad (3)$$

O conjunto fornece um total de 3 equações com 2 incógnitas. Desde que μ^*(o o) representa uma solução trivial para (1) e (2), a qual é invalidada por (3), tem-se que uma das duas primeiras equações é redundante. Arbitrariamente, desprezando-se a (2) e resolvendo-se (1) e (3) simultaneamente, obtém-se (para 7 dígitos significativos): $\mu_1^* = 0{,}4132231$ e $\mu_2^* = 0{,}5867769$

Estes resultados indicam que, ao longo do tempo, a proporção de amostras que acusarão o estado "conforme" aumentará de seu valor atual de 0,41 para seu valor de longo prazo, de 0,4132231, enquanto a do estado "inconforme" decrescerá de 0,59 para 0,5867769, se estabilizando neste valor. Note-se, contudo, que sob condições de estado estacionário as circunstâncias que promovem as mudanças de estado ou permanência nos mesmos estados continuam a atuar, segundo a matriz de transição estacionária. São as probabilidades absolutas que se alteram com o tempo para finalmente se estabilizarem.

Neste ponto, cabem duas observações. Primeiro, as predições de estado estacionário podem ser inatingíveis, na prática, devido a uma combinação de (1) erro na estimativa de **P**, (2) alterações em **P** com o tempo, e (3) alterações na natureza das relações de dependência entre os estados. Segundo, nem todas as matrizes de transição conduzem às análises de estado estacionário aqui apresentadas, uma vez que as probabilidades de estado estacionário podem inexistir para determinados tipos de cadeias de Markov. Se uma cadeia de Markov for ergódica, então μ_j^* existirá como o limite de $p_{ij}^{(k)}$; isto é $\mu_j^* = \lim_{k \to \infty} p_{ij}^{(k)}$ é assegurado.

Basicamente, uma cadeia de Markov é ergódica se o processo permite que se atinja qualquer estado futuro a partir de qualquer estado inicial, após uma ou mais transições.

Cabe também mencionar os chamados estados absorventes. Um estado s_i de uma cadeia de Markov é dito "absorvente" se o sistema, uma vez atingindo o estado s_i, nele permanece. Um estado s_i é absorvente se, e somente se, a i-ésima linha da matriz de transição **P** contiver 1 na diagonal principal e zero em todas as outras posições. Uma cadeia de Markov absorvente não é ergódica.

9 — Aplicação das Cadeias de Markov no controle da qualidade de água

Um problema que recentemente, tem merecido a atenção dos administradores de qualidade de água é o conhecimento dos mecanismos que levam algumas substâncias tóxicas, presentes em sedimentos de fundo de um corpo d'agua, a emanarem para as águas, sob determinadas condições.

O primeiro sinal de que uma dada situação de qualidade da água é preocupante, pode ser vislumbrado com o conhecimento do vetor μ^*, vetor linha das n probabilidades de estado estacionário, ou melhor, da distribuição de probabilidades dos n estados numa condição estacionária. Porém, antes disso, a "matriz de transição" fornece uma primeira perspectiva de tendência evolutiva no que diz respeito à mudança ou permanência nos estados considerados.

O exemplo utilizado para a conceituação das cadeias de Markov refere-se à poluição por mercúrio. Esta escolha se justifica, pois, quando este material é adicionado a um curso d'água ou lago, sedimenta no lodo, no fundo da água. Aí é transformado por microorganismos anaeróbios em dimetil mercúrio. Este composto é bastante volátil e logo se dissolve do lodo na água, onde é transformado em $CH_3H_g^+$ que é prontamente absorvido pelos animais aquáticos, concentrando-se em seus tecidos gordurosos. Ulteriormente, concentra-se através da cadeia alimentar, podendo ocasionar a morte de seres humanos se esses se alimentarem habitualmente de peixes com grandes quantidades dessa substância tóxica. Até recentemente uma das grandes fontes de poluição por mercúrio era a indústria de cloro-soda. O processo industrial de fabricação desses produtos sofreu alterações para evitar este perigoso tipo de poluição, mas a poluição passada tem de ser avaliada, contudo, quanto aos seus possíveis efeitos na qualidade das águas. Nesta avaliação, o concurso das cadeias de Markov pode ser uma alternativa de enfoque.

10 — Conclusão

Coincidentemente, no caso do exemplo dado, as probabilidades incondicionais iniciais representadas pelo vetor linha $\mu^{(o)} = (0{,}41\ 0{,}59)$ são praticamente iguais ao vetor linha $\mu^* = (0{,}4132231\ 0{,}5867769) \cong (0{,}41\ 0{,}59)$. Como assim aconteceu $\mu^{(k)} = \mu^{(o)} \cdot \mathbf{P}^k = \mu^* \cdot \mathbf{P}^{(k)} = \mu^*$. Neste caso, a probabilidade de subsistir um ou outro estado em todos os estágios do processo é, em média, a mesma. Tal processo é dito estar em equilíbrio. A distribuição de probabilidades para este equilíbrio indica, contudo, ser mais provável (cerca de 60%) o estado de inconformidade com o padrão de mercúrio.

Referências bibliográficas

BUDNICK, Frank S.; MOJENA, Richard; VOLLMANN, Thomas E. Stochastic processes. In: *Principles of operations research for management*. Illinois, Richard D. Irwin, 1977. cap. 15, p. 582-621.

COX, D. R. & MILLER, H. D. Markov Chains. In: *The theory of stochastic processes*. London, Chapman and Hall, 1972. cap.3, p. 76-141.

PERREAULT, Yvon G. Chaines de Markov. In: *Recherche operationnelle: techniques decisionnelles*. 3.ed. Quebec, Gaetan Morim, 1977. sec. 3, p. 235-254.