Catene di Markov

8 ottobre 2009

Definizione 1. Si dice *catena di Markov* (finita) un sistema dotato di un numero finito n di stati $\{1, 2, \dots, n\}$ che soddisfi la seguente ipotesi: la probabilità che il sistema passi dallo stato i allo stato j al tempo $k - 1$ è $p_{ij}(k)$.

In altre parole, una catena di Markov è un sistema in cui la probabilità di uno stato i al tempo k è determinata univocamente dallo stato del sistema al tempo $k - 1$ e non dalla storia dello stesso.

Definizione 2. Data una catena di Markov e fissato un tempo k, la matrice

$$P_k = \begin{pmatrix} p_{11}(k) & p_{12}(k) & \dots & p_{1n}(k) \\ p_{21}(k) & p_{22}(k) & \dots & p_{2n}(k) \\ \vdots & & & \vdots \\ p_{n1}(k) & & \dots & p_{nn}(k) \end{pmatrix}$$

è detta *matrice di transizione* al tempo k.

In letteratura talvolta si trova indicata come matrice di transizione la trasposta di P_k.

Notiamo che la riga i–esima della matrice P_k descrive la possibile evoluzione dello stato i al tempo k; pertanto la somma di tutti i valori che ivi compaiono deve essere 1. Forniamo la seguente definizione.

Definizione 3. Una matrice P è detta *stocastica* se

- $0 \leq p_{ij} \leq 1$ per ogni $1 \leq i, j \leq n$;
- $\sum_{j=1}^{n} p_{ij} = 1$

Per quanto sopra osservato la matrice di transizione di una catena di Markov è stocastica. Sia ora $\mathbf{s_k} = (s_1^k, s_2^k, \dots, s_n^k)$ un vettore tale che s_i sia la probabilità che al tempo i la catena di Markov sia nello stato i. È facile vedere che

$$\mathbf{s_{k+1}} = \mathbf{s_k} P_{k+1} = \mathbf{s_{k-1}} P_k P_{k+1} = \ldots = \mathbf{s_0} P_{k+1} P_k \cdots P_1. \tag{1}$$

In particolare, quando le matrici P_t sono tutte uguali fra loro e pari a P si dice che la catena di Markov ha *probabilità di transizione stazionarie* ovvero che essa è *omogenea*. In questo caso la (1) diviene più semplicemente

$$\mathbf{s_{k+1}} = \mathbf{s_0} P^{k+1}. \tag{2}$$

Innanzi tutto ci chiediamo se esista un vettore che sia fissato dalla (2).

Lemma 1. *Una matrice quadrata A ha i medesimi autovalori della sua trasposta A^T.*

Dimostrazione.

$$\det(A - \lambda I) = \det(A - \lambda I)^T = \det(A^T - \lambda I).$$

□

Teorema 1. *La matrice P_k^T ha autovalore* 1.

Dimostrazione. Gli autovalori di P_k e P_k^T coincidono. Consideriamo il vettore

$$\mathbf{v} = P_k \mathbf{1},$$

ove per $\mathbf{1}$ si intende il vettore colonna in cui tutte le componenti sono 1. Considerata la stocasticità di P_k abbiamo

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} p_{11} + p_{12} + \ldots + p_{1n} \\ p_{21} + p_{22} + \ldots + p_{2n} \\ \vdots \\ p_{n1} + p_{n2} + \ldots + p_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Pertanto $\mathbf{1}$ è autovettore di P_k di autovalore 1. □

Osserviamo che se $\mathbf{s}$ è un autovettore per P^T di autovalore 1 e abbiamo una catena di Markov omogenea, allora

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}P = \mathbf{s}P^k$$

per ogni $k \in \mathbb{N}$. Non è detto *a priori* che esista un autovettore $\mathbf{s}$ di autovalore 1 *non negativo*, nel senso che $\forall i : s_i \geq 0$.

Richiamiamo che una distribuzione di probabilità $\mathbf{s}$ per un sistema ad n stati è un vettore non negativo di $\mathbb{R}^n$ con la condizione aggiuntiva

$$\sum_{i=1}^{n} s_i = 1.$$

Se P ammette almeno un autovettore non negativo $\mathbf{v}$ di autovalore 1, allora esiste anche una distribuzione di probabilità

$$\mathbf{s} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} v_i}\mathbf{v}$$

tale che, per ogni $k > 0$,

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{s}P^k = \mathbf{s}.$$

Una tale distribuzione è detta *stazionaria*.

Definizione 4. Siano V uno spazio vettoriale su $\mathbb{R}$ o su $\mathbb{C}$ e $\phi : V \to V$ una applicazione lineare continua. Indichiamo con $\iota : V \to V$ l'applicazione identica. Si dice *spettro* di ϕ l'insieme

$$\text{Spec}(\phi) = \{\lambda : \phi - \lambda\iota \text{ non è invertibile}\}.$$

In particolare, se V ha dimensione finita, allora lo spettro di una applicazione lineare ϕ coincide con l'insieme degli autovalori di una qualsiasi matrice A che rappresenta ϕ.

Definizione 5. Il *raggio spettrale* di una applicazione lineare ϕ è il numero

$$\rho(\phi) = \sup\{|\lambda| : \lambda \in \text{Spec}(\phi)\}.$$

Il raggio spettrale di una matrice A è definito come il raggio spettrale di una qualsiasi applicazione lineare rappresentata da A. Esso si indicherà con il simbolo $\rho(A)$.

Teorema 2 (Perron–Frobenius)**.** *Sia A una matrice $n \times n$ con entrate non negative. Allora esiste un autovettore* $\mathbf{s}$ *non negativo di autovalore $\rho(A)$.*

Si noti che il teorema asserisce anche che $\rho(A) \geq 0$ è autovalore per A.

Teorema 3. *Per ogni matrice $A = (a_{ij})$ non negativa si ha*

$$\min_i \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \leq \rho(A) \leq \max_i \sum_{j=1}^{n} a_{ij}.$$

In particolare, ogni matrice stocastica P ha raggio spettrale

$$\rho(P) = 1;$$

pertanto, ogni matrice stocastica ammette almeno una distribuzione di probabilità stazionaria $\mathbf{s}$.

Supponiamo ora di avere una catena di Markov omogenea in cui lo stato finale del sistema (nel senso di $\mathbf{v}_\infty = \lim_k \mathbf{v_0} \lim_k P^k$) non dipenda dalle condizioni iniziali $\mathbf{v_0}$. Più formalmente abbiamo che devono esistere contemporaneamente:

1. $P^\infty = \lim_k P^k$;
2. un vettore di probabilità $\mathbf{f}$ tale che per ogni vettore di probabilità $\mathbf{x}$,

$$\mathbf{x}P^\infty = \mathbf{f}.$$

Supposto che esista il limite, se come $\mathbf{x}$ scegliamo proprio un vettore stazionario $\mathbf{s}$ abbiamo per ogni $k \geq 0$

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}P^k,$$

da cui

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}\lim_k P^k = \mathbf{s}P^\infty = \mathbf{f}.$$

Pertanto il vettore $\mathbf{f}$ deve essere un autovettore non negativo $\mathbf{s}$ per P di autovalore 1. Inoltre, denotati con $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \dots, \mathbf{e_n}$ i vettori della base canonica di $\mathbb{R}^n$ si ha

$$\mathbf{e_1}P^\infty = \mathbf{e_2}P^\infty = \cdots = \mathbf{e_n}P^\infty = \mathbf{s};$$

da questo segue che tutte le righe di P^∞ sono uguali e devono coincidere con $\mathbf{s}$; in altre parole, la matrice P^∞ deve avere la forma

$$P^\infty = \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & \dots & s_n \\ s_1 & s_2 & \dots & s_n \\ \vdots & & & \vdots \\ s_1 & s_2 & \dots & s_n \end{pmatrix}.$$

Per quanto visto sopra, è chiaro che se P ammette più di una distribuzione stazionaria, non è possibile che il limite P^∞ esista. Pertanto, nel seguito di queste note forniremo condizioni sufficienti affinché una catena di Markov ammetta un'*unica* distribuzione stazionaria e mostreremo con quali ulteriori ipotesi si possa garantire che il sistema converga a tale distribuzione indipendentemente dalle condizioni iniziali.

Definizione 6. Un *grafo orientato finito* $\Gamma = (V, E)$ è una coppia ordinata di insiemi, ove $V = \{1, 2, \dots, n\}$ è un insieme finito, mentre $E \subseteq V \times V$. Gli elementi di V sono detti *vertici* di Γ; quelli di E, *spigoli*.

Definizione 7. Un *percorso* su Γ è una successione di vertici $(v_1, v_2, \dots, v_t)$ tale che $(v_i, v_{i+1}) \in E$ per ogni $i < t$. Un circuito in Γ è una successione del tipo $(v_1, v_2, \dots, v_t, v_1)$ in cui cioè l'ultimo vertice coincide con il primo.

Definizione 8. Ad ogni grafo con n vertici, è possibile associare una matrice quadrata $n \times n$, detta *matrice di adiacenza*. Tale matrice è la matrice $D = (d_{ij})$ ove

$$d_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } (i, j) \in E \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Chiaramente ad ogni grafo corrisponde una matrice di adiacenza; viceversa, data una matrice binaria D è sempre possibile costruire un grafo Γ che ha D come matrice di adiacenza.

Data una catena di Markov omogenea con matrice di transizione $P = (p_{ij})$, è sempre possibile costruire una matrice binaria $\widetilde{P} = (\widetilde{p_{ij}})$ ponendo

$$\widetilde{p_{ij}} = \begin{cases} 1 & \text{se } p_{ij} > 0 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Chiamiamo Γ il grafo che ha $\widetilde{P}$ come matrice di incidenza. Osserviamo che due vertici in Γ, diciamo i e j, sono collegati da uno spigolo se, e solamente se, è possibile passare dallo stato i allo stato j nella catena di Markov. Inoltre, possiamo vedere che comunque dati altri due vertici k e l in Γ esiste un percorso che collega l con m, se, e solamente se, la probabilità di passare da l ad m dopo un tempo sufficientemente lungo (che sarà pari alla lunghezza k del percorso in oggetto) è maggiore di 0. In altre parole, esiste un percorso che collega l con m se, e solamente se, lo stato m è *raggiungibile* a partire dallo stato l. Osserviamo che questo è equivalente a dire che esiste un intero k, funzione di l e di m, tale che nella potenza P^k della matrice P l'entrata in posizione (l, m), diciamo $p_{lm}^{(k)}$, sia strettamente maggiore di 0.

Definizione 9. Una catena di Markov è detta *irriducibile* se comunque fissati due stati i e j esiste un intero $k = k(i, j)$ tale che dopo k unità di tempo sia possibile passare da i a j.

In altre parole, una catena di Markov è irriducibile se comunque dati due vertici sul grafo ad essa associato esiste almeno un percorso orientato che li collega.

Teorema 4. *Una catena di Markov irriducibile ammette un'unica distribuzione di probabilità stazionaria; conseguentemente, l'autospazio* V_1 *della matrice di transizione associata ha dimensione* 1.

Definizione 10. Una catena di Markov è detta *primitiva* se esiste un intero k tale che in k passaggi sia possibile passare da un *qualsiasi* stato i ad un *qualsiasi* stato j.

In particolare, una catena di Markov è primitiva se, e solamente se, esiste una potenza k della sua matrice di transizione tale che *ogni* entrata in P^k sia strettamente maggiore di 0. Ogni catena di Markov primitiva è chiaramente irriducibile, ma il viceversa non è vero. Ad esempio, la catena di Markov con matrice di transizione

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

è irriducibile, ma non primitiva. L'autospazio di autovalore 1 è generato dal vettore $\mathbf{s} = (0.5, 0.5)$.

Teorema 5 (Teorema ergodico per catene di Markov primitive)**.** *Sia* P *la matrice di transizione di una catena di Markov primitiva e denotiamo con* $s = (s_1, s_2, \ldots, s_n)$ *il suo vettore di stabilità. Allora, quando* $k \mapsto \infty$ *abbiamo*

$$P^k \mapsto P^\infty \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & \ldots & s_n \\ s_1 & s_2 & \ldots & s_n \\ \vdots & & & \vdots \\ s_1 & s_2 & \ldots & s_n \end{pmatrix}.$$

La velocità di convergenza a tale limite è geometrica.

Il contenuto pratico del teorema è il seguente: dopo un tempo sufficientemente lungo lo stato di una catena di Markov primitiva non dipende dalle condizioni iniziali. Infatti, supponiamo di avere una catena di Markov primitiva con vettore di stabilità $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_n)$ e e consideriamo un vettore di probabilità iniziale arbitrario $\mathbf{u}_0 = (u_1, u_2, \ldots, u_n)$. Chiaramente $\sum_{i=1}^n u_i = 1$. Abbiamo,

$$\lim_{k\to\infty} \mathbf{u}_k = \mathbf{u}_0 \lim_{k\to\infty} P^k = \begin{pmatrix} u_1, & u_2, & \ldots, & u_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & \ldots & s_n \\ s_1 & s_2 & \ldots & s_n \\ \vdots & & & \vdots \\ s_1 & s_2 & \ldots & s_n \end{pmatrix} =$$

$$= \left(s_1 \textstyle\sum_{i=1}^n u_i, \quad s_2 \sum_{i=1}^n u_i, \quad \ldots, \quad s_n \sum_{i=1}^n u_i \right) = \mathbf{s}$$

Per concludere, notiamo che la matrice P di transizione è descritta da n^2 numeri reali, ma il comportamento asintotico del sistema dipende solamente dal vettore **s** che consta di sole n componenti.

Definizione 11. Si dice *ciclo* un percorso su di un grafo orientato che connetta un vertice con se stesso.

Definizione 12. Il *periodo* di uno stato i di una catena di Markov è il massimo comun divisore $d(i)$ della lunghezza di tutti i cicli del grafo associato contenenti i. Se $d(i) = 1$, si dice che lo stato i è *aperiodico*.

Studiamo ora più in dettaglio la struttura degli stati di una catena di Markov.

Definizione 13. Si dice che due stati i e j *comunicano* in una catena di Markov se, e solamente se, esistono percorsi nel grafo associato sia da i verso j che da j verso i.

Sia ora

$$\mathcal{E} = \{i : \exists j \text{ con } i \text{ comunica con } j\}$$

Osserviamo che la relazione di "cominicare con" è di equivalenza sull'insieme $\mathcal{E}$. Infatti,

1. dato uno stato $a \in \mathcal{E}$ esiste almeno un altro stato $b \in \mathcal{E}$ in comunicazione con a. Pertanto, esistono un percorso $l_1 : a \to b$ e un percorso $l_2 b \to a$. Ne segue che il percorso $l_2 l_1$ collega a con se stesso a e dunque la relazione è riflessiva.

2. uno stato a comunica con uno stato b se e solamente se esistono due percorsi $l_1 : a \to b$ e $l_2 : b \to a$; questo chiaramente implica che b comunica anche con a e dunque la relazione è simmetrica.

3. se lo stato a comunica con lo stato b e lo stato b comunica con lo stato c, allora esistono percorsi $l_1 : a \to b$, $l_2 : b \to a$ e $m_1 : b \to c$, $m_2 : c \to b$. Allora, si ha $m_1 l_1 : a \to c$ e $l_2 m_2 : c \to a$; pertanto a comunica con b; ne segue che la relazione è anche transiva.

Le classi di equivalenza in $\mathcal{E}$ della sopramenzionata relazione sono dette *classi comunicati* di M. Osserviamo che nel caso di una catena di Markov irriducibile esiste un'unica classe comunicante.

Teorema 6. *Il periodo degli elementi è costante su ogni classe comunicante.*

Dimostrazione. Sia P la matrice di transizione e consideriamo due stati comunicanti i e j. Allora, esistono interi M e N tali che $t_{ij}^{(M)} > 0$ e $t_{ji}^{(N)} > 0$. Allora, per ogni intero positivo s tale che $t_{jj}^{(s)} > 0$ (sicuramente ne esistono, in quanto j è in comunicazione con se stesso; si consideri ad esempio il percorso che unisce j con i seguito dal percorso che unisce i con j) si ha

$$t_{ii}^{(M+s+N)} \geq t_{ij}^{(M)} t_{jj}^{(s)} t_{ji}^{(N)} > 0.$$

Questo è conseguenza delle regole del prodotto righe per colonne e della non negatività degli elementi considerati. Osserviamo che se $t_{jj}^{(s)} > 0$, allora anche $t_{jj}^{(2s)} > 0$ e quindi

$$t_{ii}^{(M+2s+N)} > 0.$$

Ne segue che $d(i)$ divide $M + 2s + N - (M + s + N) = s$; dunque, $d(i)$ divide ogni s tale che $t_{jj}^{(s)} > 0$. Ne segue

$$d(i) \leq d(j).$$

Scambiando i ruoli di i e di j si ottiene

$$d(j) \leq d(i).$$

La tesi segue. $\square$

Ha dunque senso definire il periodo di una classe comunicante come il periodo di un suo qualsiasi elemento. È possibile ora caratterizzare le catene di Markov primitive in termini di periodicità.

Teorema 7. *Una catena di Markov irriducibile è primitiva se, e solamente se, è aperiodica.*

In termini di grafo associato, il teorema precedente asserisce che per verificare se una catena è primitiva si devono controllare le seguenti due condizioni:

1. che il grafo sia connesso, nel senso che è possibile passare da ogni vertice fissato i ad un qualsiasi altro vertice j;

2. che il massimo comun divisore della lunghezza dei cicli passanti per uno stato i fissato (e conseguentemente per *tutti* gli stati della catena, alla luce del Teorema 6) sia 1.

Cerchiamo ora condizioni più deboli che pure garantiscano una qualche forma di ergodicità, ovvero l'esistenza di un limite indipendente dalle condizioni iniziali che descriva la matrice di transizione P^k per $k \mapsto \infty$.

Definizione 14. Sia M una catena di Markov; uno stato i per m è detto *essenziale* se, per ogni stato j raggiungibile da i esiste un percorso che da j riconduce ad i ed esiste almeno un j raggiungibile da i. In caso contrario lo stato i è detto *non essenziale*.

In altre parole, uno stato è detto essenziale se esso comunica con ogni stato da esso raggiungibile mediante un percorso. In particolare, in una catena di Markov irriducibile ogni stato è essenziale.

Data una catena non irriducibile è sempre possibile ripartire l'insieme dei suoi stati essenziali in *classi essenziali* a due a due disgiunte. Osserviamo che ogni classe essenziale è, a priori, un sottoinsieme di una classe comunicante.

Il seguente teorema mostra che, in generale, è possibile ignorare gli stati non essenziali quando si è interessati al comportamento asintotico di una catena di Markov.

Teorema 8. *Sia* M *una catena di Markov finita e supponiamo che* Q *sia la sottomatrice di* M *associata alle transizioni fra stati non essenziali. Allora,* $Q^k \mapsto 0$ *in modo geometrico al crescere di* $k \mapsto \infty$.

In generale, una catena di Markov finita ammette sempre almeno una classe essenziale; chiaramente, ristretta ad ogni singola classe essenziale una catena è irriducibile. Di particolare interesse è il caso in cui la catena ristretta risulta anche primitiva ed esiste una sola classe di questo tipo.

Definizione 15. Una catena di Markov è detta *regolare* se i suoi stati essenziali costituiscono una singola classe comunicante aperiodica.

Possiamo ora formulare un teorema di convergenza.

Teorema 9 (Teorema ergodico per catene di Markov regolari)**.** *Una catena di Markov regolare ammette esattamente una distribuzione stazionaria* $\mathbf{v}$. *Inoltre, se supponiamo che i primi* i *stati costituiscano una classe essenziale e che la matrice di transizione di probabilità sia* P, *si ottiene*

$$P^k \mapsto \begin{pmatrix} v_1 & \dots & v_i & 0 & \dots & 0 \\ v_1 & \dots & v_i & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ v_1 & \dots & v_i & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

quando $k \mapsto \infty$ *e la convergenza è geometrica.*