CATENE DI MARKOV FOR DUMMIES

ANDREA FERRETTI

Introduzione

Quella che segue è una breve introduzione alla teoria delle catene di Markov. Non tratterò l'argomento in modo approfondito, limitandomi ai risultati di base; ho cercato però di dare un'esposizione il più possibile chiara e senza conti. L'idea è di dare una presentazione che possa essere raccontata senza bisogno di una lavagna, se non per qualche passaggio dove non sono riuscito ad evitarlo. Al contrario di molte esposizioni, che cercano di essere il più elementare ed esplicito possibile, ho fatto uso di risultati di matematica standard. In particolare uso l'algebra lineare, la terminologia della teoria della misura e della probabilità, e i teoremi di punto fisso di Brouwer e delle contrazioni.

Penso anche che non ci sia niente di male nell'essere ridondante, e così ho descritto due approcci diversi agli stessi risultati, sperando che questo getti un po' di luce sulla loro natura.

La sezione 1 contiene solo alcune definizioni standard ed esempi, e può essere omessa da chi sa di cosa sto parlando. L'unica eccezione è che nell'equazione (1.3) definisco la matrice di transizione con gli indici invertiti rispetto alle convenzioni standard. Questo perché voglio che la distribuzione stazionaria sia un autovettore nel senso dell'algebra lineare (e non un autovettore sinistro). Di conseguenza tutte le definizioni successive sono adattate a questa convenzione.

Tutti i risultati sono nelle sezioni 2 e 3. La sezione 2 è più elementare, e dimostra i risultati che ci interessano solo nel caso finito, e senza trattare il problema della convergenza. La sezione 3 fa uso di alcuni teoremi di punto fisso, però ha il vantaggio di applicarsi anche nel caso infinito, e di ottenere i risultati di esistenza, unicità e convergenza in un unico teorema.

1. Definizioni di base

Sia (X_n) una successione di variabili aleatorie, a valori in un insieme S numerabile. La successione (X_n) si dice una *catena di Markov di memoria* k se

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}\left(X_{n+k}=i_{n+k} \mid X_{n+k-1}=i_{n+k-1},\ldots,X_0=i_0\right)=\\=&\mathbb{P}\left(X_{n+k}=i_{n+k} \mid X_{n+k-1}=i_{n+k-1},\ldots,X_n=i_n\right),\end{aligned} \tag{1.1}$$

questo per ogni $k,n\in\mathbb{N}$ e per ogni scelta di elementi $i_0,\ldots,i_{n+k}\in S$. In parole questo significa che il valore della variabile aleatoria X_{n+k} dipende solamente dalle k variabili aleatorie precedenti, e non da tutta la storia del processo.

In particolare quando $k=1$, la (1.1) diventa semplicemente

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}\left(X_{n+1}=i_{n+1} \mid X_n=i_n,\ldots,X_0=i_0\right)=\\=&\mathbb{P}\left(X_{n+1}=i_{n+1} \mid X_n=i_n\right);\end{aligned} \tag{1.2}$$

in questo caso parleremo semplicemente di catena di Markov.

Apparentemente il caso di memoria 1 è meno generale, ma in realtà ci si può sempre ricondurre a questo. Infatti:

Date: 19 febbraio 2009.

Proposizione 1.1. *Sia (X_n) una catena di Markov di memoria k. Allora il processo*
$$Y_n = (X_n, \dots, X_{n+k-1})$$
è una catena di Markov di memoria 1.

Il risultato è intuitivo: Y_n ha k fattori; di questi i primi $k-1$ compaiono in Y_{n-1}, mentre l'ultimo dipende solo dai fattori di Y_{n-1}. Vediamo di darne però una dimostrazione.

Dimostrazione. Dobbiamo vedere che per ogni $n \in \mathbb{N}$
$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\left(Y_{n+1} = I_{n+1} \mid Y_n = I_n, \dots, Y_0 = I_0\right) = \\ =&\mathbb{P}\left(Y_{n+1} = I_{n+1} \mid X_n = I_n\right). \end{aligned}$$
dove $I_0, \dots, I_{n+1} \in S^k$. Esplicitamente $Y_j = I_j$ significa
$$X_j = (I_j)_1, \dots, X_{j+k-1} = (I_j)_k.$$
C'è dunque un'ovvia condizione di compatibilità sugli I_j, ovvero
$$(I_j)_l = (I_{j+a})_{l-a}$$
per ogni j, l e a per cui quest'espressione ha senso. Se questa non è soddisfatta tutte le probabilità in gioco sono nulle, e la tesi diventa banale.

Se invece questa è soddisfatta poniamo $i_{j+l-1} = (I_j)_l$ (questo non dipende dalla scelta di j ed l). In questo modo $Y_j = I_j$ se e solo se
$$X_j = i_j, \dots, X_{j+k-1} = i_{j+k-1}.$$
Ne segue che
$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\left(Y_{n+1} = I_{n+1} \mid Y_n = I_n, \dots, Y_0 = I_0\right) = \\ =&\mathbb{P}\left(X_{n+1} = i_{n+1}, \dots, X_{n+k} = i_{n+k} \mid X_{n+k-1} = i_{n+k-1}, \dots, X_0 = i_0\right) \\ =&\mathbb{P}\left(X_{n+k} = i_{n+k} \mid X_{n+k-1} = i_{n+k-1}, \dots, X_0 = i_0\right). \end{aligned}$$
e allo stesso modo
$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\left(Y_{n+1} = I_{n+1} \mid Y_n = I_n\right) = \\ =&\mathbb{P}\left(X_{n+k} = i_{n+k} \mid X_{n+k-1} = i_{n+k-1}, \dots, X_n = i_n\right). \end{aligned}$$

Essendo (X_n) una catena di Markov di memoria k, (Y_n) è una catena di Markov di memoria 1. □

A questo punto ci concentriamo solo sulle catene di Markov di memoria 1, senza specificarlo. Esiste una proprietà equivalente alla (1.2), che getta un po' di luce sul significato intuitivo di catena di Markov.

Proposizione 1.2. *Sia (X_n) una successione di variabili aleatorie a valori in S. Sono equivalenti:*

i) (X_n) è una catena di Markov;
ii) per ogni $n \in \mathbb{N}$ e per ogni $i \in S$ le variabili aleatorie $(X_{n+1}, X_{n+2}, \dots)$ e $(X_0, \dots, X_{n-1})$ sono indipendenti rispetto alla probabilità $\mathbb{P}(\cdot \mid X_n = i)$.

Il significato intuitivo della condizione ii) è che il passato e il futuro sono indipendenti, una volta che fissiamo il presente.

Dimostrazione. Sia (X_n) una successione di variabili aleatorie, e fissiamo $n \in \mathbb{N}$. Dire che X_{n+1} e $(X_0, \dots, X_{n-1})$ sono indipendenti nota X_n significa che
$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\left(X_{n+1} = i_{n+1}, X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1} \mid X_n = i_n\right) = \\ =&\mathbb{P}\left(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n\right) \cdot \mathbb{P}\left(X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1} \mid X_n = i_n\right). \end{aligned}$$

Moltiplicando entrambi i membri per $\mathbb{P}(X_n = i_n)$ questa è equivalente a

$$\mathbb{P}(X_0 = i_0, \ldots, X_{n+1} = i_{n+1}) = \\ = \mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n) \cdot \mathbb{P}(X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n).$$

ovvero

$$\mathbb{P}(X_0 = i_0, \ldots, X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n) = \\ = \mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n).$$

Ma il membro sinistro è pari a

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n),$$

dunque l'ultima equazione è equivalente alla proprietà di Markov.

Abbiamo dunque visto che (X_n) è di Markov se e solo se per ogni n le variabili aleatorie X_{n+1} e $(X_0, \ldots, X_{n-1})$ sono indipendenti rispetto a $\mathbb{P}(\cdot \mid X_n = i_n)$. Resta da vedere, più in generale, che se (X_n) è di Markov allora per ogni m le variabili aleatorie $(X_{n+1}, \ldots, X_{n+m})$ e $(X_0, \ldots, X_{n-1})$ sono indipendenti rispetto a $\mathbb{P}(\cdot \mid X_n = i_n)$. Questo segue facilmente segue facilmente per induzione su m, ed è lasciato per esercizio. □

Dopo queste generalità considereremo un caso ancora più restrittivo, in cui la transizione non dipende dal tempo.

Definizione 1.3. La catena di Markov (X_n) si dice *omogenea* se per ogni $i, j \in S$, la probabilità

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i)$$

non dipende da n.

In questo caso possiamo costruire una matrice P (eventualmente infinita se S è infinito) indicizzata sugli elementi di S definita da $P = (p_{i,j})$, dove

$$p_{i,j} = \mathbb{P}(X_{n+1} = i \mid X_n = j) \tag{1.3}$$

per un n qualsiasi.

NB: la convenzione che ho scelto è opposta rispetto a quella standard, in cui i e j sono invertiti!!!

La matrice P si chiama *matrice di transizione* della catena di Markov omogenea (X_n). Per costruzione soddisfa la proprietà

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = i) = \sum_{i \in S} \mathbb{P}(X_{n+1} = i \mid X_n = j)\, \mathbb{P}(X_n = j) = \sum_{i \in S} p_{i,j} \mathbb{P}(X_n = j). \tag{1.4}$$

In altre parole, descriviamo lo stato al tempo n tramite un vettore $\mathbf{v}_n$, di componenti

$$(v_n)_i = \mathbb{P}(X_n = i).$$

Allora la (1.4) può essere riscritta semplicemente dicendo che

$$\mathbf{v}_{n+1} = P \cdot \mathbf{v}_n, \tag{1.5}$$

dove il prodotto è l'usuale prodotto righe per colonne. In particolare, nota la distribuzione di probabilità $\mathbf{v}_0$ di X_0, possiamo ricavare quella di X_n iterando la (1.4), ottenendo

$$\mathbf{v}_n = P^n \mathbf{v}_0. \tag{1.6}$$

In molti contesti la (1.6) è scritta per esteso, come

$$\mathbb{P}(X_n = i_n) = \sum_{i_{n-1} \in S} \cdots \sum_{i_0 \in S} p_{i_{n-1}, i_{n-2}} \ldots p_{i_1, i_0} \mathbb{P}(X_0 = i_0). \tag{1.7}$$

La (1.7) (o meglio il suo analogo continuo) è nota come *equazione di Chapman-Kolmogorov.*

Osservazione 1.4. Osserviamo che nel caso infinito, tutte queste somme sono ben definite (cioè non dipendono dall'ordine dei fattori), perché gli addendi sono positivi.

Osservazione 1.5. A priori la distribuzione di probabilità di X_n è una misura di probabilità $\mu_n = (X_n)_*\mathbb{P}$ su S. L'ipotesi che S sia numerabile ci garantisce che questa misura sia completamente determinata dalle misure

$$\mu_n(i) = \mathbb{P}\left(X_n = i\right),$$

visto che per ogni $E \subset S$ si ha

$$\mu_n(E) = \sum_{i \in E} \mu_n(i).$$

Per questo motivo ci interesseremo solamente al vettore di distribuzione $\mathbf{v}_n$.

È utile dare una definizione che astrae le proprietà della matrice di transizione di una catena di Markov.

Definizione 1.6. Una matrice quadrata A a coefficienti reali si dice *stocastica* se le entrate di A sono non negative e la somma delle entrate di A su ogni colonna è pari a 1, in formule:

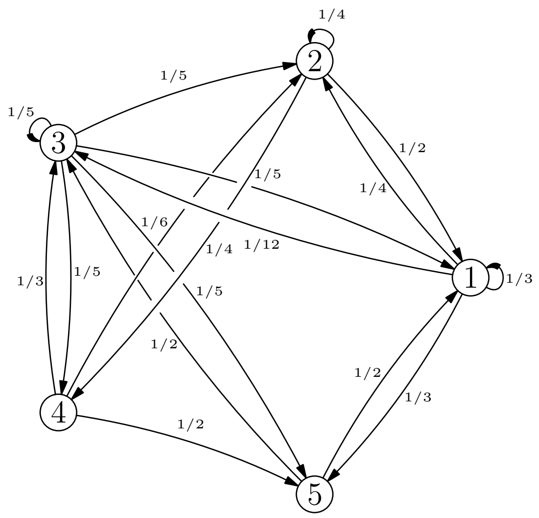
$$\begin{aligned} a_{i,j} &\geq 0 \text{ per ogni } i, j \in S \\ \sum_{i \in S} a_{i,j} &= 1 \text{ per ogni } j \in S. \end{aligned}$$

Per costruzione ogni matrice di transizione è una matrice stocastica; viceversa data una matrice stocastica è facile costruire una catena di Markov che la abbia come matrice di transizione (come?). Ci è anche utile osservare che i vettori distribuzione $\mathbf{v}_n$ soddisfano le proprietà

$$(v_n)_i \geq 0, \qquad \sum_{i \in S} (v_n)_i = 1.$$

Nel seguito considereremo soltanto catene di Markov omogenee. È comodo avere una rappresentazione grafica delle catene di Markov. Disegniamo un grafo orientato in cui i vertici sono gli elementi di S. Due vertici i e j sono collegati (nell'ordine) se $p_{i,j} > 0$, e in questo caso sulla freccia che li unisce scriviamo il numero $p_{i,j}$. Un esempio è dato in figura, corrispondente alla matrice di transizione

$$P = \begin{pmatrix} 1/3 & 1/2 & 1/5 & 0 & 1/2 \\ 1/4 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 0 \\ 1/12 & 0 & 1/5 & 1/3 & 1/2 \\ 0 & 1/4 & 1/5 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 1/5 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}.$$



A questo è bene chiarire che tipo di problemi si vogliono studiare su una catena di Markov. Quello che di solito uno vuole sapere è il comportamento asintotico, ad esempio si vorrebbe capire se i vettori $\mathbf{v}_n$ ammettono limite. Supponiamo che $\mathbf{v}_n \to \mathbf{v}$; allora passando al limite nella (1.5) si ottiene (supponiamo per semplicità che S sia finito, in modo da poter scambiare la somma e il limite) $\mathbf{v} = P\mathbf{v}$. In altre parole $\mathbf{v}$ è lasciato fisso da P. Ne segue che possiamo spezzare il problema del comportamento asintotico in tre domande:

a) Esiste un punto fisso per P (che sia un vettore distribuzione)?
b) Questo punto fisso è unico?
c) Se la risposta alle domande precedenti è positiva, è vero che partendo da una qualsiasi distribuzione $\mathbf{v}_0$ si ha la convergenza delle distribuzioni $\mathbf{v}_n$ al punto fisso?

Nelle sezioni successive vedremo due approcci diversi che daranno delle risposte esaurienti a questi problemi.

Prima di far questo vediamo però qualche esempio di catena di Markov.

Esempio 1.7. La teoria delle catene di Markov entra in gioco nella progettazione dei motori di ricerca. In particolare Google assegna ad ogni sito un valore, detto *PageRank*, che misura l'importanza di questo sito. L'idea è che un sito è tanto più rilevante quanti più siti linkano ad esso. Google considera perciò la catena di Markov costruita nel modo seguente: gli stati corrispondono ai diversi siti internet; da un sito i si può passare ad un altro sito j se esiste un link da i a j, e tra i siti linkati la probabilità di transizione è uniforme. In altre parole se il sito i contiene n link, da i si può passare a ciascuno dei siti linkati con probabilità $1/n$.

Le componenti di un vettore distribuzione che sia un punto fisso per questa catena di Markov corrispondono al PageRank che Google assegna ai diversi siti. Dire che $\mathbf{v}$ è un punto fisso si traduce esplicitamente nell'equazione

$$v_i = \sum_{j=1}^{s} p_{i,j} v_j. \tag{1.8}$$

dove $p_{i,j} = 0$ se j non linka i e $p_{i,j} = 1/n$ se j linka n siti tra cui i.

Tenuto conto che v_i è il PageRank del sito i, questo significa che il PageRank di i è determinato dai siti j che lo linkano. Inoltre il contributo totale che il sito j dà al PageRank dei vari siti è pari a v_j stesso: più rilevante è un sito, più influenza il valore degli altri.

È allora chiaro che la risposta alle domande $a) - c)$ è importante per Google: le prime due garantiscono che il PageRank sia effettivamente ben definito, mentre l'ultima assicura che sia calcolabile in pratica mediante un procedimento di approssimazione. Infatti il sistema lineare (1.8) che determina il PageRank è un sistema $s \times s$, dove s è il numero di siti internet esistenti, e la sua risoluzione esatta è impossibile in pratica.

Esempio 1.8. Consideriamo una popolazione di amebe che si evolve secondo il seguente modello. L'evoluzione avviene a tempi discreti; ad ogni istante di tempo un'ameba può morire, restare invariata oppure riprodursi, dividendosi in 2 o più nuove amebe. Per ogni $k \in \mathbb{N}$ indichiamo con q_k la probabilità che un'ameba generi k discendenti nella sua fase riproduttiva: in particolare q_0 è la probabilità che muoia e q_1 quella che resti invariata. Per costruzione

$$\sum_{k=0}^{\infty} q_k = 1.$$

Supponiamo che la riproduzione di ciascuna ameba sia indipendente dalle altre, e da ciò che è successo nella storia passata.

Sia X_n una variabile aleatoria che indica il numero di amebe vive al tempo n. Allora (X_n) è una catena di Markov, che assume valori nello spazio di stati $S = \mathbb{N}$. Anche nel caso in cui solo un numero finito di q_k siano non nulli, lo spazio degli stati è necessariamente infinito, poiché la popolazione potrebbe diventare arbitrariamente grande.

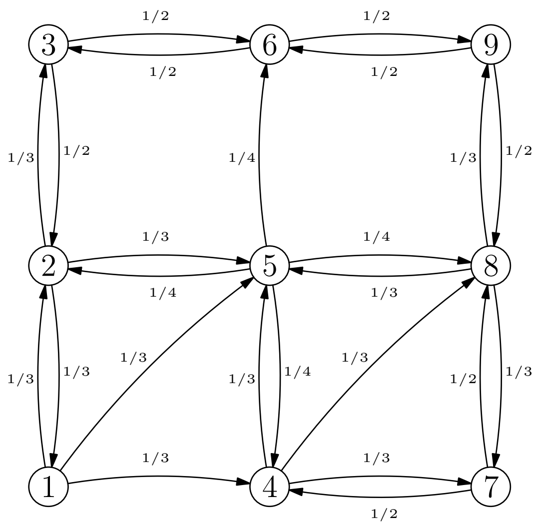
La probabilità di transizione in questo caso è data da

$$p_{i,j} = \mathbb{P}\left(X_{n+1} = i \mid X_n = j\right) = \sum_{i_1 + \cdots + i_j = i} q_{i_1} \dots q_{i_j}.$$

Infatti la k-esima ameba genera i_k discendenti con probabilità q_{i_k} in maniera indipendente dalle altre, e dobbiamo sommare su tutti i casi possibili, con la condizione che la somma del numero di discendenti sia pari ad i.

Esempio 1.9. Supponiamo di voler organizzare il traffico in un quartiere cittadino. Un modello piuttosto primitivo può essere il seguente. La mappa del quartiere è vista come un grafo: gli incroci delle strade corrispondono ai vertici, e le strade sono i lati. Considereremo un grafo orientato, per tenere conto dei sensi unici. Facciamo l'ipotesi (non molto verosimile) che nessuna zona del quartiere sia più interessante delle altre. Allora possiamo immaginare che ad ogni incrocio nessuna strada sia privilegiata rispetto alle altre. Perciò, se dall'incrocio si dipartono k strade, la proporzione dei cittadini che arrivano all'incrocio nell'unità di tempo e sceglie di proseguire lungo una delle vie è pari a $1/k$.

Per studiare il comportamento asintotico del flusso di traffico, e dunque prevedere eventuali ingorghi, possiamo modellare il quartiere con una catena di Markov. Gli stati corrispondono agli incroci, e la probabilità di transizione è uniforme tra le strade disponibili. Un esempio è rappresentato in figura.



Un vettore che sia un punto fisso per questa catena di Markov corrisponderà ad una situazione di traffico stazionaria, e permetterà di vedere in che proporzione si distribuisce il traffico rispetto alle varie zone. Un modello di questo tipo, magari raffinato attribuendo probabilità diverse a seconda delle posizioni dei punti di interesse, consente, ad esempio, di studiare l'impatto che avrebbe sul traffico il cambio di un senso unico o l'apertura di nuove strade.

2. L'approccio tramite algebra lineare

In questa sezione consideriamo in caso in cui l'insieme di stati S è finito; chiamiamo s la sua cardinalità. Una catena di Markov (X_n) a valori in S è dunque rappresentata da una matrice $s \times s$ stocastica P. Sia M il sottoinsieme di $\mathbb{R}^s$ definito da

$$M = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^s \mid v_i \geq 0 \text{ per ogni } i, \sum_{i=1}^{s} v_i = 1\}.$$

L'insieme M è un poliedro chiuso, in particolare è compatto. Gli elementi di M sono i possibili vettori di distribuzione di una variabile aleatoria a valori in S.

Vediamo come rispondere alle domande della sezione precedente: cerchiamo un vettore $\mathbf{v} \in M$ tale che $\mathbf{v} = P\mathbf{v}$. In altre parole stiamo semplicemente cercando un autovettore in M per P con autovalore 1. Chiaramente, dato un autovettore con componenti non negative, è sempre possibile riscalarlo in modo che la somma delle componenti sia 1 e ottenere un elemento di M.

Osservazione 2.1. Sia $\mathbf{v}_0 = (1, \ldots, 1)$ il vettore di $\mathbb{R}^s$ avente tutte le entrate uguali a 1. Allora $\mathbf{v}_0$ è un autovettore di ${}^{\mathrm{t}}P$ con autovalore 1. Questo equivale a dire che la somma dei coefficienti di P su ogni riga è pari a 1. Equivalentemente

$$\mathbf{v}_0 \cdot P = \mathbf{v}_0, \tag{2.1}$$

dove in questo caso $\mathbf{v}_0$ si intende preso come vettore riga.

Osservazione 2.2. Prima di chiederci se P ha un punto fisso su M, è bene osservare che in effetti P manda M in se stesso. Infatti se $\mathbf{v} \in M$, $P\mathbf{v}$ ha coordinate non negative, visto che sia P che $\mathbf{v}$ hanno coefficienti non negativi. Inoltre

$$\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{s} v_i = 1,$$

dunque

$$\sum_{i=1}^{s} (P\mathbf{v})_i = \mathbf{v}_0 \cdot P\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{v} = 1$$

grazie alla (2.1). Dunque P si restringe ad un'applicazione $P\colon M \to M$.

Questo corrisponde al fatto che se $\mathbf{v}$ è il vettore distribuzione della variabile aleatoria X_n, allora $P\mathbf{v}$ è il vettore distribuzione della variabile aleatoria X_{n+1}, dunque ancora un elemento di M.

Iniziamo con la seguente semplice

Proposizione 2.3. *Sia P una matrice stocastica. Allora P ammette un autovettore con autovalore* 1*.*

Dimostrazione. Abbiamo già osservato che $\mathbf{v}_0$ è un autovettore per ${}^{\mathrm{t}}P$, con autovalore 1. Ma P e la sua trasposta hanno lo stesso polinomio caratteristico, dunque gli stessi autovalori. □

Osserviamo che anche se è molto semplice, la Proposizione precedente dice veramente qualcosa di non banale. Per le condizioni che abbiamo posto, troviamo subito un autovettore di ${}^{\mathrm{t}}P$ con autovalore 1, ma un autovettore di P può essere veramente più "complicato" di $\mathbf{v}_0$.

A questo punto ci chiediamo se un tale autovettore abbia componenti non negative. Questo in generale non è vero, e sarà più chiaro tra poco il motivo. Vale però la

Proposizione 2.4. *Sia P una matrice stocastica e sia $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^s$ un autovettore con autovalore* 1*. Supponiamo che P abbia una riga con tutti coefficienti* strettamente positivi*. Allora $\mathbf{v}$ ha coefficienti tutti positivi (o tutti negativi).*

Osservazione 2.5. Nel caso in cui S è infinito questa non è la condizione giusta: dovremo richiedere che i coefficienti su una riga siano *limitati dal basso* da una costante positiva. Quando questi coefficienti sono in numero finito, questo è chiaramente equivalente a richiedere che siano tutti non nulli.

Dimostrazione. La condizione che $P\mathbf{v} = \mathbf{v}$ si scrive esplicitamente

$$v_i = \sum_{j=1}^{s} p_{i,j} v_j.$$

Dunque dalla disuguaglianza triangolare e dal fatto che $p_{i,j} \geq 0$ si trova

$$|v_i| \leq \sum_{j=1}^{s} p_{i,j} |v_j|.$$

Supponiamo poi che per un certo i tutti i $p_{i,j}$ siano strettamente positivi. Se $\mathbf{v}$ ha componenti sia positive che negative c'è almeno una cancellazione, e vale la disuguaglianza stretta

$$|v_i| < \sum_{j=1}^{s} p_{i,j} |v_j|.$$

Sommando tutte queste disuguaglianze, e tenuto conto che almeno una è stretta, si trova

$$\sum_{i=1}^{s} |v_i| < \sum_{i=1}^{s} \sum_{j=1}^{s} p_{i,j} |v_j| = \sum_{j=1}^{s} \Big(\sum_{i=1}^{s} p_{i,j} \Big) |v_j| = \sum_{j=1}^{s} |v_j|,$$

assurdo (abbiamo usato il fatto che la somma dei coefficienti su una colonna vale 1). □

Questo risolve, sotto le stesse ipotesi per P, anche il problema dell'unicità. Infatti:

Teorema 2.6. *Sia P una matrice stocastica, e supponiamo che P abbia una riga con tutti coefficienti* strettamente positivi. *Allora l'autospazio $V_1(P)$ relativo all'autovalore 1 ha dimensione 1.*

Dimostrazione. Sappiamo già che 1 è autovalore. Per la Proposizione precedente ci basta dimostrare che ogni sottospazio $V \subset \mathbb{R}^s$ di dimensione almeno 2 contiene un vettore con componenti di segno discorde.

Sia $f\colon V \to \mathbb{R}$ il funzionale definito da

$$f(\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{s} v_i.$$

Poiché $\dim V \geq 2$, il nucleo di f è non banale. Se $\mathbf{v} \in \ker f$ è un vettore non nullo, la somma delle componenti di $\mathbf{v}$ è 0, dunque $\mathbf{v}$ ha componenti sia positive che negative. □

A questo punto sappiamo che, sotto l'ipotesi che P abbia almeno una riga priva di 0, esiste un unico autovettore per P a meno di multipli (con autovalore 1), e questo ha componenti dello stesso segno. Dunque un suo multiplo appartiene ad M. In altre parole P ha un unico punto fisso su M. Ma possiamo concludere qualcosa anche nel caso in cui P non soddisfi quest'ipotesi. Innanzitutto sistemiamo il problema dell'esistenza.

Corollario 2.7. *Sia P una matrice stocastica. Allora P ha un punto fisso su M.*

Dimostrazione. Sia J la matrice con tutte le componenti pari a $1/s$. Allora J è una matrice stocastica, con tutte entrate positive. Sia poi

$$P_\varepsilon = (1-\varepsilon)P + \varepsilon J.$$

Allora P_ε è stocastica, con componenti positive, dunque esiste un unico $\mathbf{v}_\varepsilon \in M$ tale che

$$P_\varepsilon \mathbf{v}_\varepsilon = \mathbf{v}_\varepsilon. \tag{2.2}$$

Per compattezza di M esiste una successione $\varepsilon_n \to 0$ tale che $\mathbf{v}_{\varepsilon_n} \to \mathbf{v} \in M$. Passando al limite nella (2.2) si trova $P\mathbf{v} = \mathbf{v}$. □

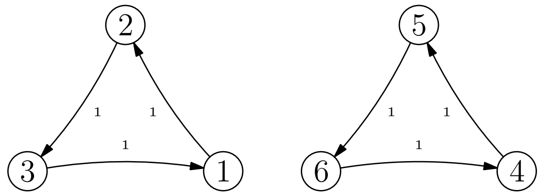
Osservazione 2.8. Torniamo all'Esempio 1.7. In quel caso la catena di Markov in considerazione è quella formata dalla rete Internet, con collegamenti dati dai link. Per attribuire il PageRank Google cerca un autovettore con autovalore 1 di questa catena di Markov, e abbiamo visto che in generale questo non è unico. Per ovviare a questo Google considera esattamente la matrice di transizione modificata P_ε introdotta nella dimostrazione; il valore scelto inizialmente era $\varepsilon = 0,15$.

Questa catena di Markov modificata modella il comportamento di un utente web che ad ogni passo:

a) con probabilità 85% clicca su un link a caso, oppure
b) con probabilità 15% sceglie un nuovo sito a caso da tutta la rete.

Abbiamo visto che in tutti i casi abbiamo l'esistenza del punto fisso. È facile convincersi con un esempio che senza qualche ipotesi aggiuntiva non possiamo aspettarci né che $V_1(P)$ abbia dimensione 1, né che ogni vettore abbia componenti tutte positive o tutte negative.

Esempio 2.9. Consideriamo infatti il caso in cui la catena di Markov sia data da due componenti come in figura.

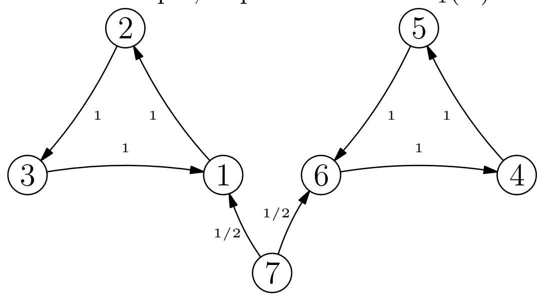


Allora la matrice P ha necessariamente la forma a blocchi

$$\begin{pmatrix} P_1 & 0 \\ 0 & P_2 \end{pmatrix},$$

e le matrici P_1 e P_2 sono a loro volta stocastiche. Perciò ciascuna ha un autovettore, e $\dim V_1(P) \geq 2$. Inoltre dalla dimostrazione della Proposizione 2.6 vediamo che P ha autovettori di autovalore 1 aventi componenti di segno discorde.

Osservazione 2.10. Non si può semplicemente dismettere questo esempio richiedendo che il grafo della catena di Markov sia connesso. Ad esempio la catena di Markov nella figura seguente ha un grafo connesso, ma una volta usciti dal nodo 7 non vi si rientra, perciò il comportamento della catena di Markov è lo stesso di quella dell'esempio, in particolare $\dim V_1(P) = 2$.



L'esempio precedente spiega anche perché per ottenere l'esistenza nel caso generale abbiamo seguito una strada indiretta, per approssimazione. Infatti non tutti gli autovettori di P hanno componenti dello stesso segno, dunque è difficile selezionare il vettore "giusto".

Il Teorema 2.6 ha anche un altro corollario, che in effetti è un suo raffinamento. Osserviamo che dire che P ha una riga con tutte componenti positive equivale a dire che esiste uno stato $i \in S$ tale che la probabilità di transizione da j a i è non nulla per ogni $j \in S$. Diamo allora la seguente

Definizione 2.11. Sia $i \in S$ uno stato. Diciamo che i è *raggiungibile* per ogni $j \in S$ la probabilità di passare da j ad i in un numero finito di passi è non nulla.

Corollario 2.12 (del Teorema 2.6)**.** *Sia P una matrice stocastica, e supponiamo che esista un elemento raggiungibile. Allora l'autospazio $V_1(P)$ relativo all'autovalore* 1 *ha dimensione* 1*.*

Dimostrazione. Se j è raggiungibile tramite un qualche percorso, questo è lungo al più s passi. Inoltre se j è raggiungibile da i in k passi, il coefficiente (i, j) della matrice P^k è positivo. Ne segue che la matrice

$$Q = \frac{I + P + \cdots + P^s}{s + 1}$$

ha tutti coefficienti positivi sulla riga j-esima. Inoltre Q è una media di matrici stocastiche, dunque è stocastica.

Per il Teorema 2.6 $V_1(Q)$ ha dimensione 1. D'altra parte se $P\mathbf{v} = \mathbf{v}$, anche $Q\mathbf{v} = \mathbf{v}$, perciò $\dim V_1(P) = 1$. $\square$

Osserviamo che sotto queste ipotesi è anche vero che ogni autovettore (con autovalore 1) ha componenti dello stesso segno: infatti P ha un autovettore in M, e ogni altro autovettore è multiplo di questo per il Corollario.

I risultati precedenti danno un quadro chiaro del comportamento di una catena di Markov con un numero finito di stati, ma non trattano il problema della convergenza. Nella prossima sezione vedremo un approccio diverso, che include il risultato di convergenza e si applica anche nel caso infinito.

3. L'approccio tramite teoremi di punto fisso

In questa sezione presentiamo un approccio topologico al problema dell'esistenza e unicità di un autovettore per una catena di Markov. Sia M l'insieme delle misure di probabilità sullo spazio degli stati S. Per ipotesi S è numerabile, dunque una misura su S è determinata da quanto vale sui singoli punti. Dunque un elemento di M si può identificare con una successione $\{v_i\}_{i \in S}$ di numeri non negativi, con la condizione che

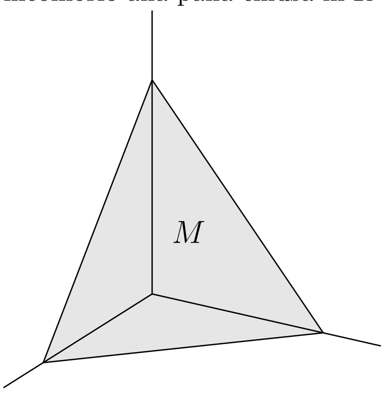
$$\sum_{i \in S} v_i = 1.$$

In particolare M è un sottoinsieme chiuso di $\ell^1 = \ell^1(S)$. È dunque naturale considerare su M la distanza ℓ_1 data da

$$d(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \sum_{i \in S} |v_i - w_i|.$$

Rispetto a questa distanza M è uno spazio metrico completo.

Naturalmente nel caso in cui S è finito con cardinalità s possiamo identificare $\ell^1(S)$ con $\mathbb{R}^s$; in questo caso M è semplicemente un simplesso chiuso, come abbiamo già osservato nella sezione precedente. In questo caso M è anche compatto; in effetti è omeomorfo alla palla chiusa in $\mathbb{R}^{s-1}$.



Abbiamo già visto (nel caso finito) come la matrice di transizione di una catena di Markovdia luogo ad un'applicazione

$$P \colon M \to M;$$

la stessa dimostrazione funziona anche nel caso infinito. Ha perciò senso chiedersi se esista un punto fisso per P su M, o in altre parole una *misura invariante* per l'azione della catena di Markov. Nel caso finito abbiamo la

Proposizione 3.1. *Sia X_n una catena di Markovcon spazio degli stati S finito. Allora esiste una misura invariante per $\{X_n\}$.*

Dimostrazione. Essendo S finito, lo spazio delle misure su S è omeomorfo alla palla chiusa di $\mathbb{R}^{s-1}$, e la tesi segue dal teorema di punto fisso di Brouwer. $\square$

Un'approccio del tutto simile permette di dimostrare un risultato di algebra lineare che generalizza il Corollario 2.7.

Teorema 3.2 (Perron-Frobenius)**.** *Sia A una matrice $s \times s$ a coefficienti non negativi. Allora esiste un autovettore per A con coordinate non negative.*

In effetti quello che di solito si indica come teorema di Perron-Frobenius è un risultato un po' più preciso, che discute anche sotto quali condizioni si ha l'unicità, ma dimostrare l'enunciato più forte ci porterebbe un po' fuori strada.

Dimostrazione. Come sopra costruiamo un'opportuna funzione continua da M in M. Sia $\mathbf{v}$ un vettore di M: allora anche il vettore $A\mathbf{v}$ ha coordinate non negative. Come nella sezione precedente, sia $\mathbf{v}_0$ il vettore riga avente tutte componenti 1, di modo che

$$\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{v} = \sum_{i \in S} v_i.$$

Se la somma delle coordinate di $A\mathbf{v}$ è nulla, sono necessariamente tutte nulle, e così $\mathbf{v}$ è un autovettore per l'autovalore 0. Altrimenti definiamo

$$f(\mathbf{v}) = \frac{A\mathbf{v}}{\mathbf{v}_0 \cdot A\mathbf{v}}.$$

Se il denominatore non si annulla mai, f è una funzione continua da M in M, e dunque ha un punto fisso per il teorema di Brouwer. Questo punto fisso è un autovettore di A. □

Torniamo al problema di esistenza e unicità per una distribuzione invariante per una catena di Markov. Nel caso infinito l'esistenza non è garantita, e daremo tra poco un esempio. Esiste però una situazione in cui si ha esistenza, unicità e convergenza al punto fisso. L'osservazione fondamentale è data dai lemmi seguenti.

Lemma 3.3. *Sia P una matrice stocastica (eventualmente infinita). Allora l'applicazione $P \colon \ell^1 \to \ell^1$ è una Lipschitz di costante 1, ovvero*

$$d(P\mathbf{v}, P\mathbf{w}) \leq d(\mathbf{v}, \mathbf{w})$$

per ogni $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \ell^1$.

Dimostrazione. È equivalente dimostrare che

$$|P\mathbf{v}|_{\ell^1} \leq |\mathbf{v}|_{\ell^1}.$$

Questo è un semplice conto:

$$|P\mathbf{v}|_{\ell^1} = \sum_{i \in S} |(P\mathbf{v})_i| = \sum_{i \in S} |\sum_{j \in S} p_{i,j}\mathbf{v}_j| \leq \sum_{i,j \in S} p_{i,j}|\mathbf{v}_j| = \sum_{j \in S} |\mathbf{v}_j| = |\mathbf{v}|_{\ell^1}.$$

□

Lemma 3.4. *Sia P una matrice stocastica (eventualmente infinita) e supponiamo che P abbia una riga i cui coefficienti sono limitati dal basso. In altre parole se $P = (p_{i,j})$, richiediamo che esista $i_0 \in S$ ed un numero $\alpha > 0$ tale che*

$$p_{i_0,j} \geq \alpha$$

per ogni $j \in S$. Allora l'applicazione $P \colon M \to M$ è una contrazione.

Dimostrazione. Dimostriamo più precisamente che

$$d(P\mathbf{v}, P\mathbf{w}) \leq (1 - \alpha)d(\mathbf{v}, \mathbf{w})$$

per ogni $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in M$. Chiaramente la disuguaglianza non può essere vera per ogni $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \ell^1$, perché P manda M in se stesso; tuttavia dal Lemma 3.3 segue che

$$d(P\mathbf{v}, P\mathbf{w}) \leq d(\mathbf{v}, \mathbf{w})$$

per ogni $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \ell^1$.

Come sfruttare il fatto che $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in M$? Possiamo innanzitutto osservare che la differenza $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$ soddisfa

$$\sum_{i \in S} u_i = 0.$$

D'altra parte possiamo ottenere da P un'altra matrice a coefficienti non negativi, semplicemente sottraendo α a tutti i coefficienti lungo la riga i_0-esima. Sia Q' la matrice così ottenuta: Q' non è stocastica perché la somma lungo le colonne non è 1, ma la matrice

$$Q = \frac{1}{1-\alpha} Q'$$

lo è. Per costruzione

$$P = (1-\alpha)Q + R,$$

dove, grazie all'osservazione precedente,

$$R(\mathbf{v} - \mathbf{w}) = 0.$$

Ne segue che

$$P(\mathbf{v} - \mathbf{w}) = (1-\alpha)Q(\mathbf{v} - \mathbf{w}) + R(\mathbf{v} - \mathbf{w}) = (1-\alpha)Q(\mathbf{v} - \mathbf{w}).$$

Essendo Q stocastica

$$d(P\mathbf{v}, P\mathbf{w}) = |P(\mathbf{v}-\mathbf{w})|_{\ell_1} = (1-\alpha)|Q(\mathbf{v}-\mathbf{w})|_{\ell_1} \leq (1-\alpha)|\mathbf{v}-\mathbf{w}|_{\ell_1} = (1-\alpha)d(\mathbf{v}, \mathbf{w}).$$

□

A questo punto possiamo ricavare facilmente il risultato più generale che daremo sulle catene di Markov.

Teorema 3.5. *Sia (X_n) una catena di Markov con matrice di transizione P, e supponiamo che P soddisfi le ipotesi del lemma precedente. Allora (X_n) ha un'unica misura invariante $\overline{\mathbf{v}}$. Inoltre preso un qualsiasi $\mathbf{v} \in M$ si ha la convergenza*

$$P^n \mathbf{v} \to \overline{\mathbf{v}}$$

in norma ℓ^1.

Dimostrazione. La tesi segue subito dal lemma precedente e dal teorema delle contrazioni. □

Esempio 3.6. Cerchiamo un esempio di non esistenza per la misura di probabilità invariante nel caso infinito. Dal risultato precedente sappiamo che dobbiamo cercare una matrice di transizione P in cui i coefficienti su ogni riga non siano limitati dal basso da una costante positiva. Ovviamente potremmo prendere una matrice avente almeno uno 0 su ciascuna riga. Vediamo se però riusciamo a trovare un esempio più raffinato, in cui i coefficienti di P siano effettivamente tutti positivi. La prima matrice che a me è venuta in mente che soddisfi questi requisiti è $P' = (p'_{i,j})$ dove

$$p'_{i,j} = 2^{-(i+j+1)}$$

(si intende che abbiamo preso $S = \mathbb{N}$ come insieme degli indici). La matrice P' è dunque data da

$$P' = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/4 & 1/8 & \dots \\ 1/4 & 1/8 & \vdots & \\ 1/8 & \dots & & \\ \vdots & & & \end{pmatrix}.$$

La matrice P' non è stocastica, perché la somma delle entrate sulla colonna i è 2^{-i}, però si può ottenere una matrice stocastica sommando a P' un'opportuna matrice diagonale.

Prendiamo P'' la matrice diagonale avente al posto i sulla diagonale il coefficiente $1 - 2^{-i}$. Allora

$$P = P' + P''$$

è una matrice stocastica. Vediamo che non esiste nessun $\mathbf{v} \in M$ tale che $P\mathbf{v} = \mathbf{v}$.

La condizione $P\mathbf{v} = \mathbf{v}$ si può riscrivere come

$$\mathbf{v} - P''\mathbf{v} = P'\mathbf{v},$$

o più esplicitamente

$$\begin{cases} v_1 & = \frac{1}{2}v_1 + \frac{1}{4}v_2 + \frac{1}{8}v_3 + \dots \\ \frac{1}{2}v_2 & = \frac{1}{4}v_1 + \frac{1}{8}v_2 + \frac{1}{16}v_3 + \dots \\ \frac{1}{4}v_3 & = \frac{1}{8}v_1 + \frac{1}{16}v_2 + \frac{1}{32}v_3 + \dots \\ & \vdots \end{cases}$$

Confrontando queste equazioni si trova

$$v_1 = v_2 = v_3 = \dots$$

e dunque è impossibile che

$$\sum_{i=0}^{\infty} v_i = 1.$$

Ne segue che P è una matrice stocastica che non ammette misure di probabilità invarianti. Ovviamente abbiamo già visto che l'unicità può fallire senza opportune ipotesi su P, anche nel caso finito.

Prima di concludere vogliamo fare un'ulteriore osservazione, sul caso di catene di Markov, con spazio di stati S finito. Nella sezione precedente abbiamo visto che una matrice di transizione P ammette sempre 1 come autovalore. Dai risultati di questa sezione vediamo inoltre che se P ha una riga i cui coefficienti sono limitati dal basso, e se $\mathbf{v}$ è un vettore con componenti positive, normalizzato in modo che la somma delle componenti sia 1, allora

$$P^n\mathbf{v} \to \overline{\mathbf{v}},$$

dove $\overline{\mathbf{v}}$ è un autovettore per l'autovalore 1. Questo suggerisce che 1 sia l'autovalore più grande in modulo: infatti iterando l'applicazione lineare data da P, gli autovalori più grandi tendono a "prevalere" sugli altri (in che senso questo può essere reso preciso?). Questa intuizione è confermata dalla seguente

Proposizione 3.7. *Sia P una matrice stocastica (finita), $\lambda \in \mathbb{C}$ un suo autovalore diverso da 1. Supponiamo che esista una riga di P con coefficienti non tutti nulli. Allora $|\lambda| < 1$.*

Dimostrazione. Come nella sezione precedente, sia $\mathbf{v}_0$ il vettore riga avente tutte componenti 1, di modo che $\mathbf{v}_0 \cdot P = \mathbf{v}_0$. Sia $\mathbf{v}$ un autovettore relativo all'autovalore λ. Allora

$$\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v}_0 \cdot P \cdot \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{v},$$

per cui se $\lambda \neq 1$ si trova $\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{v} = 0$, ovvero

$$\sum_{i \in S} v_i = 0.$$

Scegliamo $\alpha > 0$ in modo che P abbia una riga con coefficienti $\geq \alpha$. Allora dalla dimostrazione del Lemma 3.4 vediamo che

$$|P\mathbf{v}|_{\ell^1} \leq (1-\alpha)|\mathbf{v}|_{\ell^1}.$$

Visto che $P\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ ne segue che

$$|\lambda| \leq (1-\alpha) < 1.$$

□

ANDREA FERRETTI: SAPIENZA UNIVERSITÀ DI ROMA, DIPARTIMENTO DI MATEMATICA "G. CASTELNUOVO", PIAZZALE A. MORO 2, I-00185 ROMA, ITALY

E-mail address: ferrettiandrea@gmail.com