Chaînes de Markov

1 Introduction et définitions

Une chaîne de Markov (définition formelle à suivre) modélise l'évolution d'un « système » (un individu, la situation au cours d'un jeu, ...) au cours du temps. Le temps est *discrétisé* : c'est une succession d'instants nommés $0,1,2,\dots,n,\dots$
Le système peut être dans r états numérotés $1,2,\dots,r$.
Exemple : un chat peut se trouver, au cours de la journée, dans 3 états :

1. Dormir.
2. Manger.
3. Jouer.

Il évolue selon les règles suivantes :
S'il dort à l'instant n, alors à l'instant $n+1$:

- il dort avec proba 0.6
- il mange avec proba 0.2
- il joue avec proba 0.2

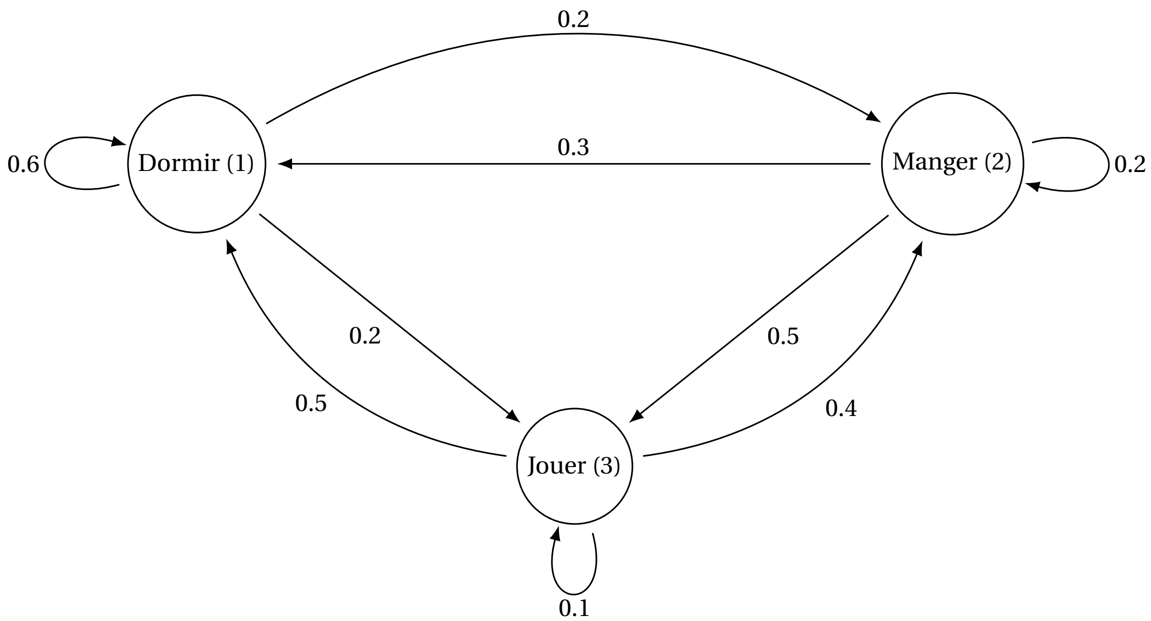
S'il mange à l'instant n, alors à l'instant $n+1$:

- il dort avec proba 0.3
- il mange avec proba 0.2
- il joue avec proba 0.5

S'il joue à l'instant n, alors à l'instant $n+1$:

- il dort avec proba 0.5
- il mange avec proba 0.4
- il joue avec proba 0.1

On peut représenter cette évolution par le graphe suivant :



Pour tout $n \in \mathbb{N}$, la position du chat à l'instant n est donc aléatoire. On peut donc introduire une variable aléatoire X_n qui vaudra le numéro de l'état où se trouve le chat au temps n (ici on aura donc $X_n(\Omega) = \{1,2,3\}$) ; et le parcours du chat au cours du temps est modélisé par une suite de variables aléatoires $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$.

Ces variables aléatoires ne sont pas indépendantes : la position du chat au temps $n+1$ dépend de sa position au temps n. Dans le cas du chat, on lit par exemple sur le graphe précédent :

$$P_{(X_n=1)}(X_{n+1} = 1) = 0.6 \quad \text{(proba de dormir au temps } n+1 \text{ si on dort déjà au temps } n\text{)}$$

$$P_{(X_n=2)}(X_{n+1} = 3) = 0.5 \quad \text{(proba de jouer au temps } n+1 \text{ sachant qu'on mange au temps } n\text{)}$$

etc...

On conçoit que cette modélisation est insuffisante : la probabilité de quitter l'état « dormir » ne dépend pas, de manière réaliste, seulement du fait qu'on soit actuellement endormi, mais du temps passé dans l'état endormi. Pour modéliser cet effet, il faudrait en fait spécifier les probabilités :

$$P_{(X_0=i_0)\cap(X_1=i_1)\cap\cdots\cap(X_n=i_n)}(X_{n+1} = i_{n+1})$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$, et tous $(i_0, i_1, \ldots, i_n, i_{n+1}) \in [\![1, r]\!]^{n+2}$.

Le cadre théorique des chaînes de Markov est donc une version simplifiée, où le conditionnement ne dépend que de l'étape précédente :

Définition 1. *On appelle* chaîne de Markov *toute suite de variables aléatoires* $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$*, telle que pour tout entier n, on a* $X_n(\Omega) = [\![1, r]\!]$ *(X_n prend la valeur de l'état dans lequel se trouve le système au temps n) ; et vérifiant la* propriété de Markov *:*
Pour tout $n \in \mathbb{N}$*, et tous* $(i_0, i_1, \ldots, i_n, i_{n+1}) \in [\![1, r]\!]^{n+2}$*, on a*

$$P_{(X_0=i_0)\cap(X_1=i_1)\cap\cdots\cap(X_n=i_n)}(X_{n+1} = i_{n+1}) = P_{(X_n=i_n)}(X_{n+1} = i_{n+1})$$

Définition 2. *La loi de* X_n*, rangée dans une matrice ligne de* $\mathcal{M}_{1,r}(\mathbb{R})$*, est appelée* n-ème état probabiliste *de la chaîne.*
On notera $V_n = \begin{pmatrix} P(X_n = 1) & P(X_n = 2) & \ldots & P(X_n = r) \end{pmatrix}$*, qui appartient bien à* $\mathcal{M}_{1,r}(\mathbb{R})$ *(bien qu'assez souvent, on pourra abusivement la considérer comme élément de* $\mathbb{R}^r$*).*

Définition 3. *On dit que la chaîne de Markov est homogène si les probabilités conditionnelles qui la définissent sont indépendantes du temps, ie :*

$$\textit{Pour tous } (i, j) \in [\![1, r]\!]^2,\ P_{(X_n=i)}(X_{n+1} = j) \textit{ est indépendant de } n$$

Dans le cadre de ce cours on ne traitera que des chaînes de Markov homogènes.

2 Graphe probabiliste et matrice de transition

2.1 Rappels sur les graphes

Définition 4 (Avec les mains...)**.** *Un graphe est constitué de sommets, et d'arêtes qui relient ces sommets.*
Un graphe est dit orienté si les arêtes sont fléchées : une arête « va de a vers b » , au lieu de seulement « relier les sommets a et b » .
Un graphe est dit pondéré si les arêtes sont munies d'un « poids » (le plus souvent un réel positif). Par exemple si les arêtes des graphes sont des pays, et les arêtes des trajets aériens reliant ces pays, le poids d'une arête peut être le prix du billet.

Quelques exemples de graphes, avec leurs listes d'ajacence et matrices d'adjacence :

On a principalement deux représentations mathématiques possibles pour un graphe : les listes d'adjacence et la matrice d'adjacence. Pour un graphe à r sommets :

- les listes d'adjacence sont r listes, telles que la liste i contienne les sommets reliés à i par une arête.
- la matrice d'adjacence est une matrice de $\mathscr{M}_r(\mathbb{R})$ telle que $m_{i,j}$ est égal au nombre[1] d'arêtes liant les sommets i et j (c'est donc une matrice symétrique si le graphe n'est pas orienté).

Dans le cas d'un graphe orienté :

- la liste d'adjacence i contient les sommets j tels qu'il existe une arête allant de i vers j ;
- la matrice d'adjacence est telle que $m_{i,j}$ est égal au nombre d'arêtes allant de i vers j (et ici elle n'est plus forcément symétrique).

Dans le cas d'un graphe pondéré, on peut aussi généraliser la matrice d'adjacence en faisant l'hypothèse qu'il y a au plus une arête entre deux sommets donnés : on forme alors la matrice dont le coefficient (i, j) vaut la poids de l'arête $i - j$ (ou de l'arête $i \to j$ dans le cas orienté).

2.2 Graphe probabiliste

Un graphe probabiliste est un graphe qui représentera le processus d'évolution associé à une chaîne de Markov. Les sommets sont les états, et les arêtes les transitions possibles d'un état vers un autre. On voit alors que les propriétés suivantes doivent être vérifiées.

Définition 5. *Un graphe probabiliste est un graphe orienté et pondéré, donc on numérotera les sommets* $1, 2, \dots, r$*, tel que :*

- *Si* i *et* j *sont deux entiers de* $[\![1, r]\!]$*, il existe au plus une flèche allant de* i *vers* j *(mais on peut aussi avoir une arête allant de* j *vers* i*)*
- *Pour tout* $i \in [\![1, r]\!]$*, la somme des poids des flèches « sortantes » de* i *vaut 1.*
  NB : une boucle allant de i *vers* i *est aussi comptabilisée comme arête sortante.*

Dans ce cas on définit la **matrice de transition** de manière similaire à une matrice d'adjacence :

Définition 6. *La matrice de transition d'un graphe probabiliste de sommets* $1, 2, \dots, r$ *est la matrice* $\mathrm{M} \in \mathscr{M}_r(\mathbb{R})$ *telle que , pour tous* i, j *,* $m_{i,j}$ *est le poids de la flèche* $i \to j$ *(ou* $m_{i,j} = 0$ *s'il n'y a pas d'arête de* i *vers* j*).*

Exemple 1.

- Donner la matrice de transition pour la chaîne de Markov représentant le chat présenté en introduction de ce cours.
- On effectue une succession ininterrompue de lancers d'une pièce. La pièce tombe sur Pile avec une probabilité p, et sur Face avec une probabilité $q = 1 - p$.
  Pour $n \geqslant 2$, on définit « l'état du système » comme le résultat des 2 derniers lancers. Il y a donc 4 états :

  1. PP
  2. PF
  3. FP
  4. FF

  À chaque lancer on change (ou pas...) d'état de manière aléatoire. Construire le graphe et la matrice de transition de la chaîne de Markov représentant cette expérience.

[1] qui vaut 0 ou 1 dans le cas d'un graphe sans « arête multiple » ; sinon on parle de multigraphe.

- On reprend le même schéma de lancer de pièce. Pour $n \geqslant 0$, on définit X_n comme la variable aléatoire valant 1 si on a un nombre impair de Pile sur les n premiers lancers, et 2 si on a un nombre pair de Pile sur les n premiers lancers.
  Construire le graphe et la matrice de transition.

Les propriétés d'un graphe probabiliste montrent que les coefficients de sa matrice de transition sont positifs, et que chaque ligne est de somme 1.

Définition 7. *On dit qu'une matrice* $M \in \mathscr{M}_r(\mathbb{R})$ *est stochastique ssi :*

- $\forall\, i, j,\ m_{i,j} \geqslant 0.$
- $\forall\, i,\ \sum_{j=1}^{r} m_{i,j} = 1$ *(chaque ligne est de somme 1).*

Ainsi : la matrice de transition d'un graphe probabiliste est une matrice de transition ; de même toute matrice stochastique est la matrice d'un graphe probabiliste.

Exemple 2. Soit $M = \begin{pmatrix} 0.1 & 0 & 0.4 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0.2 & 0.2 & 0 & 0.6 \\ 0.3 & 0.3 & 0.3 & 0.1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.
Dessiner le graphe probabiliste dont M est la matrice de transition.

3 Étude d'une chaîne de Markov

3.1 Évolution de l'état probabiliste au cours du temps

Théorème (la relation fondamentale !)
Pour $n \in \mathbb{N}$ fixé, les états $((X_n = i))_{1 \leqslant i \leqslant r}$ forment un système complet d'évènements.
La formule des probabilités totales donne, pour $j \in [\![1, r]\!]$ et $n \in \mathbb{N}$:

$$P(X_{n+1} = j) = \sum_{i=1}^{r} P_{(X_n=i)}(X_{n+1} = j)P(X_n = i) = \sum_{i=1}^{r} m_{i,j}P(X_n = i)$$

où les $m_{i,j}$ sont les coefficients de la matrice de transition.
En reconnaissant un produit matriciel on obtient donc :

$$\forall\, n \in \mathbb{N},\ V_{n+1} = V_n M$$

d'où on tire par une récurrence sans difficulté[2] $V_n = V_0 M^n$.

3.2 États stables et comportements asymptotiques

On a vu qu'en multipliant l'état probabiliste au temps n par la matrice de transition, on obtient l'état probabiliste au temps $n+1$. Dès lors il semble raisonnable d'appeler « état stable » tout état qui est invariant par cette opération.

Définition 8. *Soit une chaîne de Markov de matrice de transition M. On appelle* état probabiliste stable *un état* $V = \begin{pmatrix} v_1 & \dots & v_r \end{pmatrix}$ *tel que* $VM = V$.
C'est un état, donc les v_i sont positifs et de somme 1.

Examinons l'application linéaire $\varphi : \mathbb{R}^r \to \mathbb{R}^r$, $V \mapsto VM$.
En identifiant $\mathbb{R}^r$ et $\mathscr{M}_{1,r}(\mathbb{R})$, c'est celle qui fait passer, pour tout $n \in \mathbb{N}$, du n-ième état probabiliste de la chaîne au $(n+1)$-ème :

$$\forall\, n \in \mathbb{N},\ V_{n+1} = \varphi(V_n)$$

La matrice de cette application dans la base canonique est ${}^tM$.
On remarque (M est stochastique) que $MX = X$ où X est la colonne de $\mathscr{M}_{r,1}(\mathbb{R})$ dont tous les coefficients valent 1. On en déduit que $1 \in \mathrm{Sp}(M)$; ce qui équivaut à $1 \in \mathrm{Sp}({}^tM)$; ce qui équivaut à l'existence d'un vecteur non nul $U \in \mathscr{M}_{1,r}(\mathbb{R})$ tel que ${}^tMU = U$.

En transposant cette relation et en posant $V = {}^tU$, on a montré l'existence d'une ligne $V \in \mathscr{M}_{r,1}(\mathbb{R})$ non nulle telle que $VM = V$. On se rapproche de la construction d'un état stable....

.... MAIS le raisonnement précédent ne suffit pas encore à conclure : il faut que le vecteur V obtenu soit bien un état ; donc notamment que toutes ses composantes soient positives.

Montrons qu'on peut trouver de tels vecteurs V. Ceci passe par la proposition (pas évidente du tout) suivante :

Proposition 1. *Soit M une matrice stochastique.*
Si $U = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_r \end{pmatrix}$ *est vecteur propre de* ${}^tM$ *pour la valeur propre 1, alors* $\begin{pmatrix} |u_1| \\ |u_2| \\ \vdots \\ |u_r| \end{pmatrix}$ *l'est aussi.*

[2] et PAS en invoquant des arguments sur les suites géométriques !!!! (qui sont des suites de réels)

Démonstration. (Hors-programme)

On note N = ^{t}M. M est stochastique donc les colonnes de N sont de somme 1 : $\forall j,\ \sum_{i=1}^{r} n_{i,j} = 1$.

Soit U un vep de N pour λ = 1. NU = U s'écrit, composante par composante : $\forall i,\ \sum_{j=1}^{r} n_{i,j} u_j = u_i$. Avec l'inégalité triangulaire et la positivité des $n_{i,j}$:

$$\sum_{j=1}^{r} n_{i,j}|u_j| = \sum_{j=1}^{r} |n_{i,j}u_j| \geqslant \left|\sum_{j=1}^{r} n_{i,j}u_j\right| = |u_i|$$

ce qui donne $\forall i,\ \left(\sum_{j=1}^{r} n_{i,j}|u_j|\right) - |u_i| \geqslant 0$.

Sommons alors sur i :

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{r}\left(\sum_{j=1}^{r} n_{i,j}|u_j| - |u_i|\right) &= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r} n_{i,j}|u_j| - \sum_{i=1}^{r}|u_i| \\ &= \sum_{j=1}^{r}\underbrace{\left(\sum_{i=1}^{r} n_{i,j}\right)}_{=1}|u_j| - \sum_{i=1}^{r}|u_i| \\ &= \sum_{j=1}^{r}|u_j| - \sum_{i=1}^{r}|u_i| \\ &= 0\end{aligned}$$

On a donc des nombres positifs de somme nulle : ils sont tous nuls. D'où : $\forall i,\ \sum_{j=1}^{r} n_{i,j}|u_j| = |u_i|$. U étant non nul, au moins un des u_i est non nul, donc au moins un des $|u_i|$ est non nul, et $\begin{pmatrix}|u_1|\\|u_2|\\ \vdots \\ |u_r|\end{pmatrix}$ est non nul : c'est bien un vecteur propre de N = ^{t}M pour la valeur propre 1. □

À ce stade, on a donc l'existence d'une colonne V = $\begin{pmatrix}v_1\\v_r\\ \vdots \\ v_r\end{pmatrix}$, non nulle, où tous les v_i sont positifs, et telle que VM = V. Pour obtenir un état on aimerait que la somme des v_i soit égale à 1.

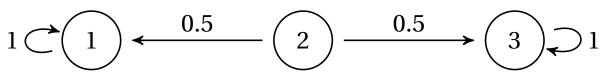
On observe que si VM = V, alors pour tout réel α, (αV)M = αV. On pose alors $\alpha = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} v_i}$ (bien défini car les v_i sont tous positifs et au moins l'un deux est non nul). Il est alors facile de vérifier que αV est bien un état probabiliste stable.

Finalement on a montré :

Théorème 2. *Toute chaîne de Markov admet un état stable.*

Remarque 1. On note E_λ le sous-espace propre de ^{t}M associé à la valeur propre λ. Dans ce qui suit M est stochastique.

- si E_1 est de dimension 1, la chaîne de Markov associée à M admet un unique état stable. En effet E_1(M) = Vect(V) où V a toutes ses composantes de même signe ; tout état stable s'écrit forcément sous la forme αV et on a vu que le choix de α permettant de mettre la somme des coefficients à 1 était unique.
- Si E_1 est de dimension ⩾ 2, il y a une infinité d'états stables. Par exemple, on considère la chaîne suivante :



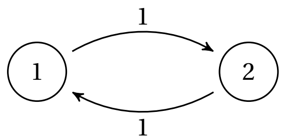
dont la matrice de transition est M = $\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0.5 & 0 & 0.5\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$.

On trouve $E_1({}^tM) = \mathrm{Vect}\left(\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\right)$ et les états stables sont les $\begin{pmatrix}p & 0 & 1-p\end{pmatrix}$, avec $p \in [0,1]$.

Il existe des critères (hors-programme) qui assurent l'unicité de l'état stable. C'est par exemple le cas si la chaîne est *irréductible* : *ie* pour tout $i \neq j$ le trajet $i \to j$ est possible en suivant les flèches.

Remarque 2. Un état stable est une distribution de probabilité stationnaire. En adoptant une interprétation statistique on peut considérer un très grand nombre de « systèmes » qui évoluent sur un graphe avec les probabilités de transition spécifiées. Si la distribution des systèmes est donnée par l'état stable, nos calculs montrent que cette distribution n'évoluera pas ; par contre un système, pris isolément, continue à évoluer !!

Remarque 3 (« Observation »)**.** Dans beaucoup de cas, la suite des états probabilistes (V_n) converge vers un état stable. Mais ce n'est pas toujours le cas. Considérons en effet le graphe suivant :



On montre facilement que si on part d'un état initial quelconque $V_0 = \begin{pmatrix} p & 1-p \end{pmatrix}$ ($p \in [0,1]$), alors

$$\forall\, n \in \mathbb{N},\ V_{2n} = \begin{pmatrix} p & 1-p \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad V_{2n+1} = \begin{pmatrix} 1-p & p \end{pmatrix}$$

Dans ce cas l'unique état stable est obtenu pour $p = 1-p$: c'est $\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$
(on pourra vérifier que $E_1({}^t M) = \mathrm{Vect}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$)

Remarque 4. Dans le cas d'unicité de l'état stable, on peut distinguer deux types de « stabilisation » au temps long :

- la convergence de l'état probabiliste $(V_n)_{n \in \mathbb{N}}$ vers l'état stable : il concerne la répartition, à n fixé (et grand) d'un grand nombre de systèmes qui parcourent le graphe (voir une remarque précédente). On peut parler de convergence « spatiale » .
- une interprétation « temporelle » : on suit la trajectoire d'*un seul système* sur un temps long. Il ne semble pas absurde de penser que sous certaines hypothèses, la fraction du temps passé dans chaque état est donnée par l'état stable. Nous observerons cela en informatique.