Chaînes de Markov 2

Soit E un espace dénombrable.

1 Probabilité de transition et chaîne de Markov

Les définitions ne diffèrent pas du cas où l'espace d'état est fini. On reprend les notations et les définitions introduites dans le premier cours sur les chaînes de Markov.

Définition 1. Une chaîne de Markov à valeurs dans E de loi initiale μ_0 est une suite de v.a. $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ définie sur un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ à valeurs dans E telle que $\mathcal{L}(X_0) = \mu_0$ et

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n)$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout n-uplet $(x_0, \dots, x_{n+1}) \in E^{n+2}$.

La chaîne est dite homogène si la probabilité de transition $\mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_n = x) = P(x, y)$ ne dépend pas de n. *La probabilité* $P(x, y)$ *est la probabilité de passer du site* x *au site* y. On a $\sum_{y\in E} P(x, y) = 1$. On dit que P est un noyau markovien.

On se limitera dans la suite à des chaînes de Markov homogènes.

Proposition 2. *Soit* (U_n) *une suite de v.a. i.i.d. à valeurs dans* $(F, \mathcal{F})$ *et indépendantes de* X_0, *et* $f : E \times F \to E$ *une fonction mesurable. La suite récurrente aléatoire* $X_{n+1} = f(X_n, U_{n+1})$ *est une chaîne de Markov homogène à valeurs dans* E.

Exemple 3. $E = \mathbb{N}$, $F = \{0, 1\}$ et $f(x, u) = \begin{cases} x + u & \text{si } u = 1, \\ 0 & \text{si } u = 0. \end{cases}$

Démonstration. Vérifions qu'un processus défini par une telle suite récurrente est une chaîne de Markov :

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) &= \mathbb{P}(f(X_n, U_{n+1}) = x_{n+1} | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\
&= \frac{\mathbb{P}(f(x_n, U_{n+1}) = x_{n+1}, X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n)} \quad \text{car } U_{n+1} \text{ est indépendant des } (X_i)_{0\le i\le n}, \\
&= \mathbb{P}(f(x_n, U_{n+1}) = x_{n+1}) = \mathbb{P}(f(x_n, U_1) = x_{n+1}) \quad \text{car les } (U_n) \text{ sont de même loi.}
\end{aligned}$$

(X_n) est bien une chaîne de Markov homogène. □

Exemple 4. *Marche aléatoire simple symétrique du* $\mathbb{Z}^d$

Un marcheur fait un pas de longueur 1 toutes les secondes. Il choisit sa direction au hasard uniformément sur $\{-e_i, e_i : 1 \le i \le d\}$ où (e_i) est une base de $\mathbb{Z}^d$. Il part de l'origine 0 et on note X_n sa position au temps n. La suite (X_n) est une chaîne de Markov de transition

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_n = x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |y - x| \neq 1, \\ 1/2d & \text{si } |y - x| = 1. \end{cases}$$

On définit par récurrence les itérés de P : $P^1 = P$ et pour $n \geq 1$

$$P^{n+1}(x,y) = \sum_{z \in E} P(x,z)P^n(z,y).$$

Pour tout $n \geq 1$, P^n est encore un noyau markovien.

Théorème 5. *Soit (X_n) une chaîne de Markov homogène de probabilité de transition P et de loi initiale μ_0. Alors*

$$P(X_0 = x_0, \ldots, X_n = x_n) = \mu_0(x_0)P(x_0,x_1)\ldots P(x_{n-1},x_n).$$

La loi μ_n de X_n est alors $\mu_n = \mu_0 P^n$.

Remarque 6. La loi d'une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ homogène est entièrement déterminée par la loi initiale μ_0 et les probabilités de transition P.

Proposition 7. *Une chaîne de Markov homogène à valeurs réelles peut être vue (* en loi *) comme une suite récurrente définie comme dans la proposition 2.*

Démonstration. Soit (X_n) une chaîne de Markov homogène de transition P. On cherche f et U_1 tels que $X_1 = f(x, U_1)$ si $X_0 = x$. La loi de X_1 est $P(x,.)$. Soit U_1 de loi uniforme sur $[0,1]$ indépendante de X_0. Soit $f(x,.)$ l'inverse généralisée de la fonction de répartition de X_1 sachant $X_0 = x$: $f(x,y) = \inf\{u : P(x,]-\infty, u]) > y\}$. Alors $f(x,U_1)$ a la même loi que $(X_1|X_0 = x)$. Considérons (U_i) des variables i.i.d. de loi uniforme sur $[0,1]$ et indépendantes de X_0. On définit la chaîne $\tilde{X}_n$ comme $\tilde{X}_{n+1} = f(\tilde{X}_n, U_{n+1})$. Soit $\tilde{P}$ sa matrice de transition. On a

$$\tilde{P}(x,y) = \mathbb{P}(f(x,U_1) = y) = P(x,y).$$

□

2 Récurrence et transience

Soit (X_n) une chaîne de Markov sur un ensemble dénombrable E de probabilité de transition P. On note (X_n^x) la chaîne partant de $X_0 = x$.

Pour $x \in E$, on introduit T_x^n la suite des instants sucessifs de retour en x définie par récurrence pour $n \geq 1$

$$T_x^1 = T_x = \inf\{k > 0 : X_k^x = x\} \quad T_x^{n+1} = \inf\{k > T_x^n : X_k^x = x\}.$$

Avec la convention $\inf\{\emptyset\} = \infty$.

Définition 8. Soit X_n^x une chaîne de Markov partant de $x \in E$. L'état x est dit

1. transient pour P si $\mathbb{P}(T_x < \infty) < 1$,
2. récurrent pour P si $\mathbb{P}(T_x < \infty) = 1$.

Un état récurrent est être

- récurrent nul si $\mathbb{E}[T_x] = \infty$,
- récurrent positif si $\mathbb{E}[T_x] < \infty$.

2.1 Temps de retour et nombre de visites

Le nombre de visites en x avant le temps n et total sont notés respectivement N_x^n et N_x et sont définis par

$$N_x^n = \sum_{k=0}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k^x = x\}} \quad \text{et} \quad N_x = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{1}_{\{X_k^x = x\}}.$$

Ces nombres de visites sont reliés aux temps de passage par les relations suivantes (ne pas oublier que la chaîne est issue de x) :

$$N_x^n \geq p+1 \Longleftrightarrow T_x^p \leq n \quad \text{et} \quad N_x \geq p+1 \Longleftrightarrow T_x^p < \infty.$$

Proposition 9. *Soit $x \in E$, alors*

1. *si $T_x^n < \infty$, les variables $T_x, T_x^2 - T_x^1, \ldots, T_x^{n+1} - T_x^n$ sont i.i.d.,*
2. *p.s.* $\displaystyle\lim_{n\to+\infty} \frac{N_x^n}{n} = \lim_{n\to+\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k^x = x\}} = \frac{1}{\mathbb{E}[T_x]}.$

Démonstration. Même preuve que dans le cas E fini. □

Corollaire 10. 1. *Si x est récurrent, la suite (X_n^x) revient presque surement une infinité de fois à son état initial, i.e. $\mathbb{P}(N_x = \infty) = 1$.*

2. *Si x est transient, presque surement la suite (X_n^x) visite x un nombre fini de fois. Le nombre de visites suit la loi géométrique de paramètre $a = \mathbb{P}(T_x = \infty)$.*

Dans le cas d'une probabilité de transition irréductible les notions de récurrence et de transience sont indépendantes du point choisi.

Proposition 11. *Supposons P irréductible. Alors*

1. *tous les états sont de même nature (récurrents positifs, ou récurrents nuls, ou transients) ;*
2. *dans le cas récurrent, tous les points de E sont visités infiniment souvent : pour $x, y \in E$*

$$\mathbb{P}(X_n^x = y \text{ pour un infinité de } n) = 1,$$

3. *dans le cas transient, les sous-ensembles finis de E ne sont visités (qu'au plus) un nombre fini de fois : pour $A \subset E$ de cardinal fini*

$$\mathbb{P}(X_n \in A \text{ pour une infinité de } n) = 0.$$

Exemple 12. Une chaîne de Markov finie irréductible est récurrente positive.

2.2 Un critère analytique de récurrence

Définissons les fonctions U et G par, pour tous $x \in E$ et $t \in [0,1]$,

$$U(x,t) = \mathbb{E}\left[t^{T_x}\mathbf{1}_{\{T_x<\infty\}}\right] = \sum_{k\geq 1}\mathbb{P}(T_x = k)t^k,$$

$$G(x,t) = \mathbb{E}\left[\sum_{k\geq 1}\mathbf{1}_{\{X_k^x = x\}}t^k\right] = \sum_{k\geq 1}P^k(x,x)t^k.$$

La fonction $U(x,\cdot)$ est la fonction génératrice du temps de retour en x. Par définition, on a

$$U(x,1) = \mathbb{P}(T_x<\infty), \quad U'(x,1) = \mathbb{E}\left[T_x\mathbf{1}_{T_x<\infty}\right] \quad \text{et} \quad G(x,1) = \mathbb{E}[N_x].$$

Ces deux fonctions sont en fait liées l'une à l'autre.

Théorème 13. *Pour tout $x \in E$ et $0 \leq t < 1$, $G(x,t) = \dfrac{1}{1-U(x,t)}$.*

En particulier, l'état x est récurrent si et seulement si $G(x,1) = \sum_{k\geq 1}P^k(x,x) = \infty$.

Démonstration. On a, d'après la proposition 9,

$$\sum_{k\geq 1}\mathbf{1}_{\{X_k^x = x\}}t^k = 1 + \sum_{n\geq 1}t^{T_x^n}\mathbf{1}_{\{T_x^n<\infty\}}$$

et

$$\mathbb{E}\left[t^{T_x^n}\mathbf{1}_{\{T_x^n<\infty\}}\right] = \mathbb{E}\left[\prod_{k=1}^n t^{T_x^k - T_x^{k-1}}\mathbf{1}_{\{T_x^k - T_x^{k-1}<\infty\}}\right] = \mathbb{E}\left[t^{T_x}\mathbf{1}_{\{T_x<\infty\}}\right]^n.$$

D'où $G(x,t) = 1 + \sum_{n\geq 1}U(x,t)^n = 1/(1-U(x,t))$. □

2.3 Exemple des marches aléatoires aux plus proches voisins sur $\mathbb{Z}^d$

Soit (X_n) une marche aléatoire simple sur $\mathbb{Z}^d$ définie par $X_{n+1} = X_n + U_{n+1}$, où (U_i) sont des variables indépendantes de loi uniforme dans $\{-e_i, e_i : 1 \leq i \leq d\}$ avec (e_i) base de $\mathbb{Z}^d$.

Théorème 14 (Polya, 1921)**.** *Pour $d = 1$ ou 2 la marche aléatoire (X_n) est récurrente. Pour $d \geq 3$, elle est transiente.*

Démonstration. 1) Soit $d = 1$. On part de $X_0 = 0$. Pour n impair, on a $P^n(0,0) = 0$. Pour $n = 2k$,

$$P^{2k}(0,0) = P(\text{autant de pas à gauche qu'à droite}) = \binom{2k}{k}\frac{1}{2^{2k}} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi k}}.$$

Donc la série $\sum_{k\geq 1}P^k(0,0)$ diverge. La chaîne est récurrente.

2) Soit $d = 2$. On note $X_n = (X_n^1, X_n^2)$ et $U_n = (U_n^1, U_n^2)$. Les variables $S_n = U_n^1 + U_n^2$ et $D_n = U_n^1 - U_n^2$ sont indépendantes et de même loi $P(S_n = 1) = P(S_n = -1) = 1/2$. On a

$$\begin{aligned} P^{2k}(0,0) &= P(X_{2k}^1 + X_{2k}^2 = X_{2k}^1 - X_{2k}^2 = 0 | X_0 = 0) \\ &= P(S_1 + S_2 + \cdots + S_{2k} = 0)P(D_1 + D_2 + \cdots + D_{2k} = 0) \sim \frac{1}{\pi k}. \end{aligned}$$

D'où la récurrence.

3) Soit $d \geq 3$. Vu les résultats obtenus en dimension 1et 2, on se doute que $P^{2k}(0,0) \sim \frac{cst}{k^{d/2}}$ et donc que la série $\sum_{k\geq 1} P^k(0,0)$ va être convergente pour $d \geq 3$. Voir Norris [3], pour le cas $d = 3$. On trouvera une autre démonstration dans [1]. $\square$

On se place à présent en dimension 1 en supposant que les v.a. $(U_i)_{i\geq 1}$ vérifient $\mathbb{P}(U_i = 1) = 1 - \mathbb{P}(U_i = -1) = p$.

Théorème 15. *La marche aléatoire est transiente si $p \neq 1/2$ et récurrente nulle si $p = 1/2$.*

Démonstration. En utilisant le même raisonnement que dans l'exemple précédent, on motre que la chaîne est récurrente si $p = q = 1/2$ et transiente sinon, car $P(X_{2k} = 0|X_0 = 0) \sim \frac{(4pq)^k}{\sqrt{\pi k}}$.

Autre méthode : en utilisant les fonctions $G(x,t)$ et $U(x,t)$. Elles ne dépendent pas du point de départ x, par invariance par translation de la marche. On montre que (voir [1])

$$U(t) = 1 - \sqrt{1 - 4t^2 p(1-p)}, \quad G(t) = \frac{1}{\sqrt{1 - 4t^2 p(1-p)}}.$$

En particulier, le nombre moyen de visites de (X_n^x) à x est $\mathbb{E}[N_x] = G(1) = \dfrac{1}{|1-2p|}$. La chaîne est donc récurrente pour $p = 1/2$ et transiente sinon. Du fait que

$$\mathbb{E}[T_x | T_x < \infty] = \frac{U'(1)}{U(1)} = \left(1 - \frac{1}{2\max(p, 1-p)}\right)^{-1},$$

la chaîne est récurrente nulle pour $p = 1/2$. $\square$

2.4 Marche aléatoire réfléchie sur $\mathbb{N}$

On suppose que la marche ne franchit pas la barrière 0, elle est réflechie en 0. La probabilité de transition est donnée par

$$\begin{aligned} &P(0,0) = a \in [0,1[, \quad P(0,1) = 1-a \\ &P(x, x+1) = p \in]0,1[, \quad P(x, x-1) = 1-p \quad \text{pour } x \geq 1. \end{aligned}$$

On obtient $U(0,t) = ta + \dfrac{1-a}{2p}(1 - \sqrt{1 - 4t^2 p(1-p)})$, ce qui assure notamment que la chaîne est transiente pour $p > 1/2$, récurrente nulle pour $p = 1/2$ et récurrente positive pour $p < 1/2$.

3 Mesures invariantes et théorème ergodique

Définition 16. Une mesure (non nécessairement de masse finie) π sur E est dite invariante pour P si $\pi P = \pi$. Si π est de plus une mesure de probabilité, on dit que π est une probabilité invariante (ou stationnaire).

Il n'existe pas toujours, contrairement au cas où E est fini, de probabilité invariante.

Exemple 17. Il n'existe pas de probabilité invariante à la marche aléatoire simple sur $\mathbb{Z}$ mais la mesure uniforme sur $\mathbb{Z}$ est invariante.

Proposition 18. *Si P est irréductible, alors P admet au plus une probabilité invariante. Si π est une telle probabilité, $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$.*

Théorème 19. *Soit P irréductible. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

a) il existe une (unique) probabilité invariante π,
b) la mesure π définie, pour $x \in E$ par $\pi(x) = 1/\mathbb{E}[T_x]$ est la probabilité invariante,
c) tous les états sont récurrents positifs,
d) il existe un état récurrent positif.

Théorème 20 (Théorème ergodique)**.** *Soit P irréductible. Alors, pour toute mesure initiale ν,*

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k=x\}} \xrightarrow[n\to\infty]{\mathbb{P}_\nu \ p.s.} \frac{1}{\mathbb{E}[T_x]}.$$

Si, de plus, la chaîne est récurrente positive, alors, pour toute fonction f bornée sur E,

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(X_k) \xrightarrow[n\to\infty]{\mathbb{P}_\nu \ p.s.} \int_E f\, d\pi = \sum_{x\in E} \pi(x) f(x),$$

où π est l'unique mesure de probabilité invariante.

Exemple 21 (Chaîne de vie et de mort)**.** Soit (X_n) la chaîne à valeurs dans $\mathbb{N}$ de transition P défini par

$$P(x, x-1) = q_x, \quad P(x, x+1) = p_x, \quad P(x, x) = r_x$$
avec $q_x + p_x + r_x = 1$, $p_x > 0$, $q_0 = 0$ et $q_x > 0$ pour $x \geq 1$.

Notons pour $x \geq 1$

$$\lambda_x = \frac{p_0 p_1 \cdots p_{x-1}}{q_1 q_2 \cdots q_x}.$$

Lemme 22. *La chaîne est récurrente positive si et seulement si $\sum_{x\geq 1} \lambda_x < \infty$. Dans ce cas, la probabilité invariante est proportionnelle à la mesure $(\lambda_x)_{x\in\mathbb{N}}$.*

La chaîne est transiente si et seulement si $\sum_{x\geq 1} 1/(p_x\lambda_x) < \infty$.

Démonstration. Pour la première assertion, on remarque que la probabilité invariante vérifie

$$\pi(0) = r_0\pi(0) + q_1\pi(1)$$
$$\pi(x) = q_{x+1}\pi(x+1) + r_x\pi(x) + p_{x-1}\pi(x-1) \quad \text{pour } x \geq 1$$

D'où $\pi(x) = \lambda_x\pi(0)$. Pour le second point, on pourra consulter [1]. □

Exemple 23 (Extinction d'une population)**.** On peut modéliser la taille d'une population par une chaîne (X_n) à valeurs dans $\mathbb{N}$ de transition P définie par

$$P(x, x-1) = q_x, \quad P(x, x+1) = p_x,$$
$$\text{avec } q_x + p_x = 1,\ p_x > 0,\ q_0 = 0 \text{ et } q_x > 0 \text{ pour } x \geq 1.$$

Le point 0 est absorbant. On peut s'intéresser à la probabilité d'extinction partant de x individus : $h(x) = \mathbb{P}_x(\exists n \in \mathbb{N},\ X_n = 0)$.

On a, d'après la propriété de Markov,

$$h(0) = 1 \quad h(x) = p_x h(x+1) + q_x h(x-1) \text{ pour } x \geq 1.$$

On a donc

$$h(x) - h(x+1) = (q_x/p_x)(h(x-1) - h(x)) = \gamma_x(1 - h(1)) \quad \text{avec } \gamma_x = \frac{q_x \cdots q_1}{p_x \cdots p_1}.$$

D'où $h(x) = 1$ si $\sum_{x \geq 0} \gamma_x = \infty$ et $h(x) = \frac{\sum_{y \geq x} \gamma_x}{\sum_{y \geq 0} \gamma_y} < 1$ sinon. Dans le second cas la population survit avec une probabilité positive.

Théorème 24. *Si P est irréductible apériodique et récurrente positive de mesure invariante π, alors, pour toute mesure initiale ν et pour tout $x \in E$*

$$\lim_{n \to \infty} \mathbb{P}_\nu(X_n = x) = \pi(x).$$

Remarque 25. Si P est irréductible, apériodique, mais non nécessairement recurrente positive, on a, pour toute mesure initiale ν

$$\lim_{n \to \infty} \mathbb{P}_\nu(X_n = x) = \frac{1}{\mathbb{E}[T_x]}.$$

4 Chaîne de Markov et Méthode de Monte Carlo : algorithme de Métropolis

Soit E un espace d'états fini et π une probabilité sur E. On souhaite calculer la quantité

$$\mathbb{E}_\pi[f] = \sum_{x \in E} f(x)\pi(x). \qquad (*)$$

Il peut arriver (et c'est souvent le cas) que l'espace d'états soit très gros et que les réels $\pi(x)$ ne soient pas explicitement calculables ou soient trop petits.

Exemple 26. Soit $\Lambda = [0, n]^2 \cap \mathbb{Z}^2$ et $E = \{0, 1\}^\Lambda$. Le cardinal de E est égal à $2^{(n+1)^2}$ (c'est gros). On se donne une fonction H sur E et on définit la mesure π de la façon suivante :

$$\forall x \in E, \quad \pi(x) = \frac{1}{Z} e^{-H(x)} \quad \text{où} \quad Z = \sum_{y \in E} e^{-H(y)}.$$

Même si H est connue, le calcul de $\pi(x)$ demande la connaissance de Z, ce qui n'est pas raisonnable....

Pour calculer $\mathbb{E}_\pi[f]$, on peut alors se dire qu'il faudrait mettre en place une méthode de Monte-Carlo. Mais alors, il faut disposer d'un algorithme générant des variables aléatoires distribuées selon π sans disposer vraiment de π. Ouille...

L'idée géniale est de construire une chaîne de Markov irréductible récurrente et apériodique dont les transitions sont très simples et dont la mesure invariante est π. En faisant tourner la chaîne un certain temps, on devrait obtenir une v.a. de loi proche de π ! ! ! C'est la méthode dite de *Monte Carlo par chaîne de Markov* ou MCMC.

La loi π que l'on cherche à simuler n'est pas donnée à priori comme la mesure invariante d'une chaîne de Markov. C'est l'algorithme de Métropolis qui va produire une chaîne de Markov réversible par rapport à π.

On se donne une matrice de transition Q sur E, appelée matrice de sélection, telle que

$$\forall (x,y) \in E^2, \quad Q(x,y) > 0 \Rightarrow Q(y,x) > 0.$$

Pour $x \neq y$, posons

$$R(x,y) = \begin{cases} \min\left(\left(\frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)}\right), 1\right) & \text{si } Q(x,y) \neq 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On construit alors une matrice de transition P définie par

$$P(x,y) = Q(x,y)R(x,y) \text{ pour } x \neq y \quad P(x,x) = 1 - \sum_{y \neq x} P(x,y).$$

Il faut voir $R(x,y)$ comme la probabilité d'effectuer la sélection de x à y.

Proposition 27. *On suppose que π charge tous les points de E. Alors la matrice P est réversible par rapport à π. De plus elle est apériodique et irréductible si Q est irréductible.*

Démonstration. Soient $x \neq y$ deux états. Supposons que $\pi(y)Q(y,x) < \pi(x)Q(x,y)$. Alors,

$$P(x,y) = Q(x,y)\frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)} = \frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)} \quad \text{et} \quad P(y,x) = Q(y,x).$$

On a $\pi(x)P(x,y) = \pi(y)P(y,x)$. La transition P est bien réversible par rapport à π. □

Algorithme de Métropolis
Etape 0 : initialiser X_0
Etape $n+1$

1- sélection : choisir y avec la loi $Q(X_n, dy)$
2- tirer un nombre U au hasard dans $[0,1]$
3- si $U < R(X_n, y)$ accepter la sélection : $X_{n+1} = y$
sinon, refuser la sélection : $X_{n+1} = X_n$.

Remarque 28. Si on prend Q symétrique, il suffit alors de tester si $\pi(y) < \pi(x)$.

Références

[1] Michel Benaïm, Nicole El Karoui, *Promenade Aléatoire*, Ed. Ecole Polytechnique.

[2] Bernard Ycart, *Modèles et Algorithmes Markoviens*, Ed. Springer.

[3] J. R. Norris, *Markov Chains*, Ed. Cambridge University Press.