

5. Chaînes de Markov

Soit $\mathfrak{X}$ un ensemble fini, dont on numérote les éléments de 0 à $N - 1$, avec $N = \text{card } \mathfrak{X}$: $\mathfrak{X} = \{x_0, x_1, \dots, x_{N-1}\}$. Une *matrice stochastique* (ou *matrice de transition*) sur $\mathfrak{X}$ est une matrice carrée de taille $N \times N$ à coefficients positifs, dont on note $P(x_i, x_j)$ l'élément sur la i -ième ligne et la j -ième colonne, et telle que :

$$\forall i \in \{0, 1, \dots, N - 1\}, \quad \sum_{j=0}^{N-1} P(x_i, x_j) = 1.$$

Autrement dit, chaque ligne de la matrice P est une mesure de probabilité sur $\mathfrak{X}$. Une *chaîne de Markov* de matrice P est une suite de variables aléatoires $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ avec chaque $X_n \in \mathfrak{X}$, et telle que pour tout $n \geq 0$ et tout $(n + 1)$ -uplet $(a_0, a_1, \dots, a_n) \in \mathfrak{X}^{n+1}$, on a :

$$\mathbb{P}[X_0 = a_0, X_1 = a_1, \dots, X_n = a_n] = \mathbb{P}[X_0 = a_0] P(a_0, a_1) P(a_1, a_2) \cdots P(a_{n-1}, a_n).$$

L'idée est la suivante :

- on tire au hasard X_0 suivant une certaine loi π_0 sur $\mathfrak{X}$ (la *loi initiale* de la chaîne).
- si $X_0, X_1, \dots, X_{n-1}$ sont construits, alors X_n est obtenu en se plaçant en $X_{n-1} = a_{n-1}$, et en effectuant une transition vers $X_n = a_n$ avec a_n choisi suivant la ligne a_{n-1} de la matrice P .

En effet, la formule définissant une chaîne de Markov est équivalente à la formule de probabilité conditionnelle :

$$\mathbb{P}[X_n = a_n \mid X_0 = a_0, \dots, X_{n-1} = a_{n-1}] = P(a_{n-1}, a_n).$$

On peut donc voir une chaîne de Markov de matrice P comme une marche aléatoire sur un graphe dont les sommets sont les éléments de l'espace des états $\mathfrak{X}$, et dont les arêtes orientées sont les $(x \rightarrow y)$ avec $P(x, y) > 0$ (*transitions possibles*).

1. Programmes généraux.

Pour tirer au hasard un élément d'un *array* L avec une distribution discrète de probabilités P , on pourra utiliser la commande `random.choice(L, p=P)`. Si à la place de L on met un entier n , la liste des choix possibles sera $\llbracket 0, n - 1 \rrbracket$.

- (1) Écrire deux programmes `verif_proba(pi)` et `verif_matrix(P)` qui vérifient qu'un vecteur est une probabilité, et qu'une matrice est stochastique. Pour tester l'égalité de nombres réels avec décimales, on pourra utiliser `np.isclose`, qui évite les imprécisions dues à l'écriture décimale. Vérifier ces programmes avec $\pi_0 = (0.2, 0.5, 0.3)$ et

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

- (2) Écrire un programme `trajectoire_markov(pi0, P, n)` qui prend en argument un vecteur de probabilités de taille N , une matrice stochastique de taille $N \times N$, et un entier n , et qui calcule les $n + 1$ premiers pas $(X_0, X_1, \dots, X_n)$ d'une chaîne de

Markov sur $\mathfrak{X} = \llbracket 0, N-1 \rrbracket$, avec loi initiale π_0 et matrice stochastique P . On tirera donc au hasard X_0 suivant π_0 , puis les transitions suivant les lignes de la matrice P . Expérimenter avec les paramètres π_0 et P de la question précédente, et $n = 30$.

- (3) Pour $n \geq 0$, on note π_n la loi marginale d'une chaîne de Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de matrice P sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. C'est donc le vecteur

$$\pi_n = (\mathbb{P}[X_n = x_1], \mathbb{P}[X_n = x_2], \dots, \mathbb{P}[X_n = x_N])$$

si $\mathfrak{X} = \{x_1, \dots, x_N\}$. Montrer qu'on a pour tout $n \geq 0$:

$$\pi_n = \pi_0 P^n,$$

où le produit à droite est le produit matriciel d'un vecteur ligne de taille N avec une matrice carrée $N \times N$. Écrire un programme `loi_marginale(pi0, P, n)` qui calcule le vecteur π_n . Pour effectuer des produits matriciels, on pourra utiliser les commandes `np.matmul` et `np.linalg.matrix_power`.

- (4) Avec les mêmes paramètres que précédemment, dessiner sur un même graphique l'histogramme empirique de $N = 1000$ tirages de X_{30} , et l'histogramme théorique de π_{30} , que l'on calculera avec le programme `loi_marginale`.
- (5) Toujours avec la même loi initiale et la même matrice de transition, comparer les vecteurs π_{30} et π_{300} . Que peut-on conjecturer pour

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}[X_n = x] ?$$

- (6) En utilisant la méthode `np.linalg.eig` et la transposition $P.T$ de matrices, trouver les valeurs propres $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ de P , et des vecteurs propres à gauche ν_1, ν_2, ν_3 tels que $\nu_i P = \lambda_i \nu_i$. En déduire une preuve de la conjecture de la question précédente, pour les chaînes de Markov de matrice P introduite à la question (1).
- (7) Dessiner sur un même graphique l'histogramme de la loi limite déterminée à la question précédente, et l'histogramme empirique des $N = 1000$ premières valeurs d'une trajectoire de la chaîne de Markov. En déduire une autre conjecture concernant la limite presque sûre de

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1_{(X_i=x)}.$$

2. Marche aléatoire sur le cercle.

Les conjectures des dernières questions de l'exercice précédent sont résolues par les résultats suivants, que l'on admettra. Soit $\mathfrak{X}$ un ensemble fini et P une matrice stochastique sur $\mathfrak{X}$. On dit que P est :

- *irréductible* si, pour tous états $x, y \in \mathfrak{X}$, il existe $n \geq 1$ tel que $P^n(x, y) > 0$. Autrement dit, le graphe orienté associé à la matrice P est connexe.
- à *diagonale non nulle* s'il existe un état $x \in \mathfrak{X}$ tel que $P(x, x) > 0$.

Les trois théorèmes ci-dessous décrivent le comportement en temps long d'une chaîne de Markov finie irréductible :

- (a) Si P est irréductible, alors il existe un unique vecteur de probabilité π tel que $\pi P = \pi$. On dit que π est la *loi invariante* ou *stationnaire* d'une chaîne de Markov de matrice stochastique P . Cette loi charge tout l'espace $\mathfrak{X}$: $\forall x \in \mathfrak{X}, \pi(x) > 0$.
- (b) *Théorème ergodique*. Si P est irréductible et π est sa loi stationnaire, alors pour toute loi initiale π_0 , étant donnée une chaîne de Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de loi initiale π_0 et de

matrice de transition P , la loi empirique

$$\mu_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{X_i}$$

converge presque sûrement vers π lorsque N tend vers l'infini. Autrement dit, pour tout état $x \in \mathfrak{X}$, la fréquence de visites $\mu_N(x)$ tend p.s. vers $\pi(x)$.

- (c) *Convergence des lois marginales.* Si P est irréductible et à diagonale non nulle, alors pour toute loi initiale π_0 , on a aussi convergence des lois marginales :

$$\pi_n = \pi_0 P^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \pi$$

dans l'espace $\mathbb{R}^{\mathfrak{X}}$. Autrement dit, pour tout état $x \in \mathfrak{X}$, $\pi_n(x)$ tend vers $\pi(x)$.

On admettra ces résultats ; l'exercice qui suit illustre ces résultats pour la *marche aléatoire sur un cercle* (discrétisé).

- (1) On se place sur $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ avec $N \geq 3$; pour les simulations, on pourra prendre par exemple $N = 10, 50$. Écrire un programme `marche_aleatoire_cercle(N, n, k=1)` qui dessine k trajectoires indépendantes de la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, dont la matrice de transition est :

$$P(k, l) = \begin{cases} \frac{1}{3} & \text{si } l = k, k-1 \text{ ou } k+1 \bmod N, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ainsi, la marche aléatoire fait à chaque étape un pas négatif avec probabilité $\frac{1}{3}$, un pas positif avec probabilité $\frac{1}{3}$, et reste au même endroit avec probabilité $\frac{1}{3}$. Pour réduire modulo N un entier r , on utilisera la commande `r % N`. Le paramètre `n` du programme est le temps jusqu'auquel on dessinera les trajectoires. Pour la loi initiale, on pourra prendre $X_0 = \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$ presque sûrement. Tester le programme avec $n = 1000$, $k = 3$.

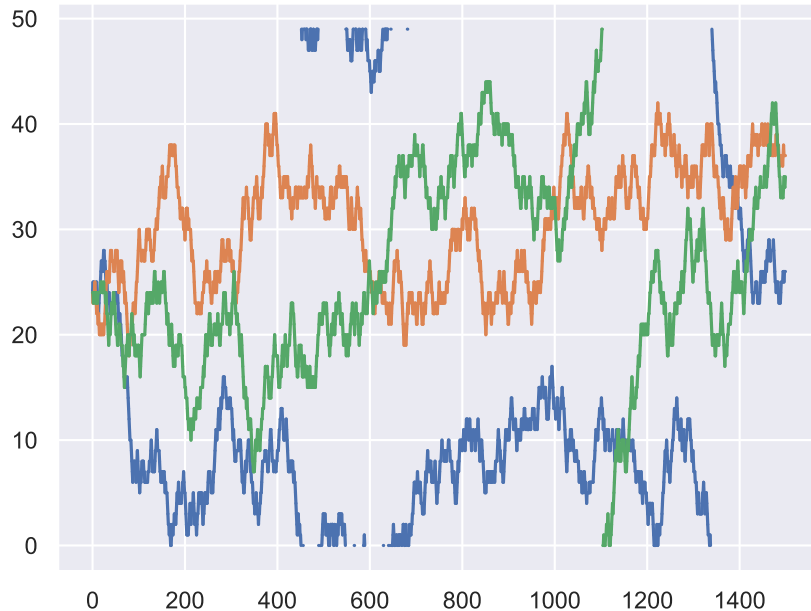


FIG. 5.1. Marches aléatoires sur le cercle.

- (2) Quelle est la loi stationnaire de cette chaîne de Markov ? Dessiner sur un même graphique toutes les fonctions $k \mapsto \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k 1_{(X_k=x)}$, avec $k \in \llbracket 0, 1000 \rrbracket$ et $x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, $N = 10$. Commenter ce dessin.

- (3) Dessiner aussi sur un même graphique l'histogramme de la loi stationnaire, et l'histogramme empirique de 10000 tirages de la variable X_{10000} . Commenter les histogrammes obtenus.
- (4) Soit $T = \inf(\{n \in \mathbb{N} \mid \{X_0, X_1, \dots, X_n\} = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}\})$ le *temps de couverture* de l'espace des états par la marche aléatoire. Écrire un programme qui simule cette variable aléatoire. Dessiner la fonction de répartition empirique d'un échantillon de taille $M = 1000$ de cette variable aléatoire, avec $N = 10, 50$. Commenter.

3. Urnes d'Ehrenfest.

On fixe un entier $N \geq 1$, et on considère une boîte contenant N particules numérotées et tombant dans deux compartiments A et B . À chaque étape :

- on tire au hasard l'une des particules numérotées de 1 à N , chaque particule étant équiprobable.
- avec probabilité $\frac{1}{2}$, on fait passer la particule tirée au hasard de son compartiment vers l'autre compartiment (donc, de A vers B si elle était en A et de B vers A si elle était en B).
- avec probabilité $\frac{1}{2}$, on laisse la boîte invariante.

On note X_n le nombre de particules dans le compartiment A au temps n ; alors, il y a $N - X_n$ particules dans le compartiment B au temps n . On admet que si les choix décrits ci-dessus sont fait indépendamment à chaque étape, alors $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X} = \{0, 1, \dots, N\}$ (attention, par rapport aux questions précédentes, $\mathfrak{X}$ est maintenant de cardinal $N + 1$).

- (1) Calculer la matrice de transition de la chaîne définie ci-dessus. On remarquera que $P(k, l) = 0$ si $l \notin \{k-1, k, k+1\}$, de sorte qu'il suffit de calculer les valeurs $P(k, k-1)$, $P(k, k)$ et $P(k, k+1)$.
- (2) Trouver l'unique vecteur de probabilité π qui vérifie pour tous $x, y \in \{0, 1, \dots, N\}$ l'équation de réversibilité

$$\pi(x) P(x, y) = \pi(y) P(y, x).$$

Notant $\alpha = \pi(0)$, on pourra essayer de calculer en fonction de α les valeurs $\pi(1)$, $\pi(2)$, etc. pour déterminer π à un coefficient multiplicatif près; puis, utiliser la condition $\sum_{x=0}^N \pi(x) = 1$ pour trouver la valeur de α . Montrer que le vecteur π ainsi obtenu est la loi invariante de la matrice de transition P .

- (3) Écrire un programme `matrice_ehrenfest(N)` qui construit la matrice de transition P de taille $(N + 1) \times (N + 1)$, et un autre programme `loi_invariante_ehrenfest(N)` qui construit le vecteur π déterminé par la question 9. Vérifier l'équation $\pi P = \pi$ pour différentes valeurs de N . En utilisant la commande `np.linalg.eig`, énoncer une conjecture sur la liste des valeurs propres de la matrice P .

Une preuve de la convergence des lois marginales d'une chaîne irréductible à diagonale non nulle repose sur le fait algébrique suivant : sous cette hypothèse, toutes les valeurs propres complexes de P sont comprises dans le disque unité, et l'unique valeur propre de module 1 est $\lambda = 1$; elle est associée à un sous-espace propre de dimension 1 qui est engendré par un vecteur de probabilité (la loi invariante).

- (4) Avec $N = 10$, comparer l'histogramme de la loi π avec l'histogramme empirique de 1000 tirages de la variable X_{100} (on pourra partir de $X_0 = 0$). Commenter.

4. Marche aléatoire sur la droite.

Le concept de chaîne de Markov s'étend sans difficultés aux espaces des états $\mathfrak{X}$ infinis dénombrables : c'est la même définition, avec une fonction de transition $P : \mathfrak{X}^2 \rightarrow [0, 1]$ telle que $\sum_{y \in \mathfrak{X}} P(x, y) = 1$ pour tout $x \in \mathfrak{X}$. Dans cet exercice, on considère l'exemple le plus simple de chaîne infinie : la *marche aléatoire simple symétrique* sur $\mathbb{Z}$.

- (1) Soit $(\xi_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables indépendantes avec, pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\mathbb{P}[\xi_n = 1] = \mathbb{P}[\xi_n = -1] = \frac{1}{2}$. On pose $X_n = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n$, avec par convention $X_0 = 0$. Montrer que $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}$, de matrice de transition :

$$P(k, l) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } l = k - 1 \text{ ou } l = k + 1, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

- (2) Dessiner des trajectoires de cette marche aléatoire sur l'intervalle de temps $[0, N]$, avec $N = 100$, puis avec $N = 100000$. En utilisant la commande `ax.set_aspect()`, faire en sorte que les abscisses et les ordonnées soient représentées avec un rapport abscisse / ordonnée égal à $1/\sqrt{N}$. Commenter les courbes obtenues.
- (3) Pour $N \geq 1$ et $t \geq 0$, on pose $X_t^{(N)} = \frac{1}{\sqrt{N}} X_{\lfloor Nt \rfloor}$. Montrer que pour t fixé, $X_t^{(N)}$ converge en loi vers une variable X_t dont on précisera la loi. Modifier le programme de la question précédente pour dessiner $t \mapsto X_t$ sur un intervalle de temps $[0, T]$ arbitraire, en utilisant un ordre d'approximation N suffisamment élevé (par exemple $N = 100000$). Expérimenter avec $T = 10$.

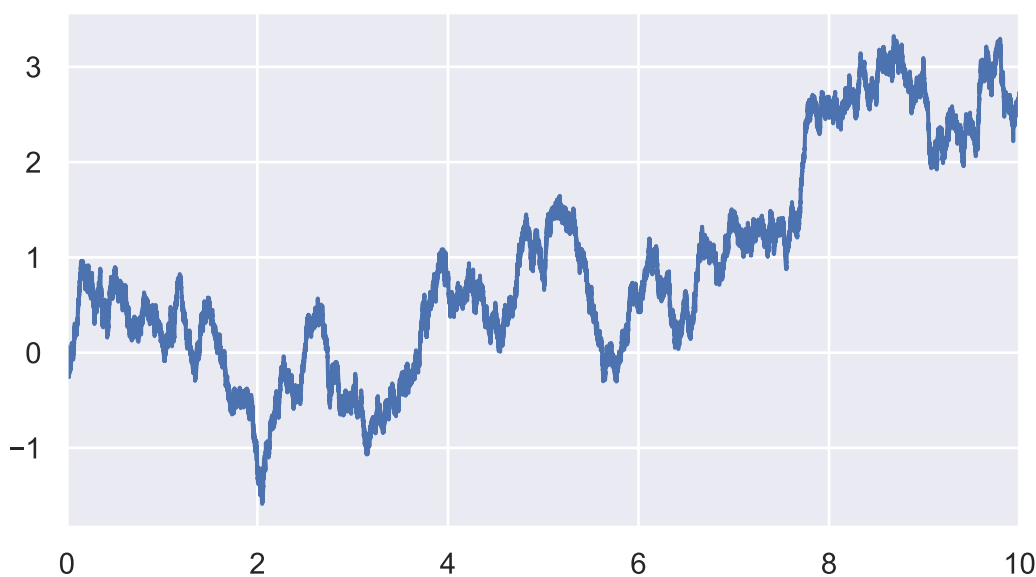


FIG. 5.2. Marche aléatoire symétrique sur $\mathbb{Z}$, renormalisée par un facteur $\frac{1}{\sqrt{N}}$ en abscisse et $\frac{1}{\sqrt{N}}$ en ordonnée.

- (4) Les courbes aléatoires que l'on obtient ont la propriété de *réurrence* :

$$\mathbb{P}[\text{card}(\{n \geq 1 \mid X_n = 0\}) = +\infty] = 1.$$

De façon équivalente, si $R_0 = \inf\{n \geq 1 \mid X_n = 0\}$, alors ce *temps de retour en 0* est presque sûrement fini :

$$\mathbb{P}[R_0 < +\infty] = 1.$$

Écrire un programme qui dresse l'histogramme empirique de la loi de R_0 . Comparer cet histogramme à la loi théorique :

$$\forall m \geq 0, \quad \mathbb{P}[R_0 = 2m + 2] = \frac{1}{2^{2m+1} (m+1)} \binom{2m}{m};$$

cette formule peut être établie par un argument combinatoire.

On peut modifier le modèle en introduisant un paramètre $p \in (0, 1)$, et en changeant les probabilités des pas :

$$\mathbb{P}[\xi_n = 1] = p \quad ; \quad \mathbb{P}[\xi_n = -1] = 1 - p.$$

- (5) Montrer que si $p \neq \frac{1}{2}$, alors $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tend presque sûrement vers $+\infty$ ou vers $-\infty$, en fonction du signe de $p - \frac{1}{2}$.
- (6) On suppose $p < \frac{1}{2}$. Dessiner quelques trajectoires de cette marche non symétrique. Comme $\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = -\infty$ avec probabilité 1, on peut définir sans ambiguïté la variable

$$M = \max(\{X_n, n \in \mathbb{N}\}).$$

Écrire un programme `maximum_marche_aleatoire(p, N=10000)` qui simule cette variable, en l'approchant par la variable $M_N = \max(\{X_n, n \leq N\})$. Dresser l'histogramme empirique de cette variable aléatoire, par exemple avec $p = \frac{1}{3}$ et $p = \frac{1}{4}$. Quelle loi semble suivre la variable aléatoire M ?