

IFT-3655, Modèles Stochastiques

Chaînes de Markov en temps discret

Prof. Pierre L'Ecuyer

DIRO, Université de Montréal

Ces “diapos” sont surtout un support pour les présentations en classe.

Elles ne contiennent pas toutes les explications détaillées.

Pour cela il est recommandé d'étudier le livre recommandé, de Sheldon Ross.

Chaîne de Markov en temps discret

On considère un processus stochastique en **temps discret** $\{X_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ dont l'**espace d'états** \mathcal{X} (l'ensemble de tous les états possibles) est dénombrable. On va habituellement numéroter les états par des entiers non négatifs, et ainsi supposer que $\mathcal{X} = \{0, 1, \dots, r\}$ (fini) ou $\mathcal{X} = \{0, 1, 2, \dots\}$ (infini).

Ce processus est une **chaîne de Markov homogène** si

$$\mathbb{P}[X_{n+1} = j \mid X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_1 = i_1, X_0 = i_0] = \mathbb{P}[X_{n+1} = j \mid X_n = i] = P_{i,j}.$$

En d'autres mots, la loi de probabilité du prochain état X_{n+1} conditionnellement à l'histoire passée ne dépend que de l'état actuel X_n et ne dépend pas de n .

Les $P_{i,j}$ sont les **probabilités de transition** de la chaîne .

L'adjectif **homogène** veut dire que ces probabilités ne dépendent pas de n .

Les $P_{i,j}$ doivent nécessairement satisfaire:

$$P_{i,j} \geq 0 \text{ for all } i,j; \quad \sum_{j=1}^{\infty} P_{i,j} = 1 \text{ for all } i.$$

Ils sont les éléments de la **matrice de transition**

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_{0,0} & P_{0,1} & P_{0,2} & \cdots \\ P_{1,0} & P_{1,1} & P_{1,2} & \cdots \\ P_{2,0} & P_{2,1} & P_{2,2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Exemple. Deux états possibles: “il pleut” (0) et “il ne pleut pas” (1). Le temps est en jours.
 $\alpha = \mathbb{P}[\text{pluie demain} \mid \text{pluie aujourd'hui}]$, $\beta = \mathbb{P}[\text{pluie demain} \mid \text{pas de pluie aujourd'hui}]$.

On a

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 - \alpha \\ \beta & 1 - \beta \end{pmatrix}$$

Exemple. Marche aléatoire sur les entiers:

$$P_{i,i+1} = p = 1 - P_{i,i-1}, \quad \text{pour } i \in \mathbb{Z}.$$

Modèle de parieur: Comme ci-haut mais $P_{0,0} = P_{N,N} = 1$ pour un $N > 0$.

X_n représente la fortune du joueur à l'étape n .

Quand $X_n = 0$, il est ruiné; quand $X_n = N$, il s'arrête de jouer.

Risque d'assurance d'un client: modèle Bonus-Malus

Dans ce modèle, X_n représente le risque d'un client pour une cie d'assurance, en fonction de son historique d'accidents. L'idée est de définir un nombre fini de **catégories de risque**, et une chaîne de Markov dont les états sont ces catégories.

Un client dans l'état i qui a k accidents durant l'année passera à l'état $s_i(k)$, où les $s_i(k)$ sont spécifiés à l'avance. Par exemple, on pourrait avoir $s_i(k) = i + k - \mathbb{I}[k = 0]$, ou bien $s_i(k) = i + 2k - \mathbb{I}[k = 0]$, ou une fonction plus complexe.

On suppose que le nombre Y d'accidents par un client durant une année est **Poisson**(λ), où le paramètre $\lambda = \lambda_c$ peut dépendre du client et être inconnu. Si le client est dans l'état i , il aura $Y = k$ accidents avec probabilité $e^{-\lambda} \lambda^k / k!$, et sa probabilité de passer à l'état j est

$$P_{i,j} = \sum_{\{k:s_i(k)=j\}} e^{-\lambda} \lambda^k / k!$$

Il y a différentes façons d'utiliser ce modèle. Idéalement, on voudrait pouvoir "apprendre" λ_c et la loi des montants de réclamations, pour chaque client, en fonction de son historique.

Équation de Chapman-Kolmogorov

Soit

$$P_{i,j}^{(n)} = \mathbb{P}[X_n = j \mid X_0 = i],$$

la probabilité de passer de i à j en exactement n étapes. Équation de Chapman-Kolmogorov:

$$P_{i,j}^{(n+m)} = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{P}[X_{n+m} = j \mid X_n = k] \mathbb{P}[X_n = k \mid X_0 = i] = \sum_{k=0}^{\infty} P_{i,k}^{(n)} P_{k,j}^{(m)}$$

En notation matricielle, si $\mathbf{P}^{(n)}$ est la matrice contenant les $P_{i,j}^{(n)}$, cela donne

$$\mathbf{P}^{(n+m)} = \mathbf{P}^{(n)} \cdot \mathbf{P}^{(m)}.$$

En particulier, $\mathbf{P}^{(2)} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{P}$, et par induction sur n , on a $\mathbf{P}^{(n)} = \mathbf{P}^{(n-1)} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P}^n$.

Similaire aux matrices donnant les nombres de chemins de longueur n entre chaque paire de sommets dans un graphe.

Exemple. Dans l'exemple de "pluie" vs "non pluie", supposons que $\alpha = 0.7$ et $\beta = 0.4$, de sorte que

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 - \alpha \\ \beta & 1 - \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.4 & 0.6 \end{pmatrix}.$$

les probabilités de transition en deux jours et en 4 jours sont:

$$\mathbf{P}^2 = \begin{pmatrix} 0.61 & 0.39 \\ 0.52 & 0.48 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}^4 = \begin{pmatrix} 0.5749 & 0.4251 \\ 0.5668 & 0.4332 \end{pmatrix}.$$

Que se passe-t-il avec \mathbf{P}^n quand $n \rightarrow \infty$? On a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n = \begin{pmatrix} 4/7 & 3/7 \\ 4/7 & 3/7 \end{pmatrix}.$$

Les lignes sont identiques et donnent les **probabilités limites** des deux états.

Interprétation.

Exemple. On dispose de balles rouges et de balles bleues, et d'une urne qui contient 2 balles. À chaque étape, on tire une balle de l'urne et on la remplace par une balle de la même couleur avec probabilité 0.8 et de l'autre couleur avec probabilité 0.2. On définit une chaîne où X_n est le **nombre de balles rouges** dans l'urne à l'étape n . L'espace d'états est $\{0, 1, 2\}$ et la matrice des probabilités de transition est

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.2 & 0 \\ 0.1 & 0.8 & 0.1 \\ 0 & 0.2 & 0.8 \end{pmatrix}.$$

Si $X_0 = 2$ (2 balles rouges au départ), alors la **première** balle tirée est certainement rouge. Soit b_n la probabilité que la $(n + 1)$ -ième balle tirée est rouge. On aura

$$b_n = 1 \cdot \mathbb{P}[X_n = 2 \mid X_0 = 2] + (1/2)\mathbb{P}[X_n = 1 \mid X_0 = 2] = P_{2,2}^{(n)} + P_{2,1}^{(n)}/2.$$

Par exemple, en calculant \mathbf{P}^4 et on trouve $P_{2,2}^{(4)} = 0.4872$ et $P_{2,1}^{(4)} = 0.4352$, ce qui donne $b_4 = 0.4872 + 0.4352/2 = 0.7048$.

Que se passe-t-il **quand** $n \rightarrow \infty$? On peut montrer que \mathbf{P}^n converge vers une matrice dont les 3 lignes sont $(1/4, 1/2, 1/4)$, et que $b_n \rightarrow 1/2$, ce qui correspond à l'intuition.

Exemple 4.11 du livre: Encore le problème du collectionneur de capsules.

Il y a k types de capsules. À chaque étape on tire une capsule, avec probabilité $1/k$ pour chaque type. Soit X_n le nombre de types que l'on a après n tirages. Les probabilités de transition sont $P_{0,1} = 1$, $P_{k,k} = 1$,

$$P_{i,j} = i/k = 1 - P_{i,i+1} \quad \text{pour } i < k, \quad \text{et } P_{i,j} = 0 \text{ ailleurs.}$$

On peut facilement construire \mathbf{P} puis calculer ses puissances.

\mathbf{P} est une matrice $(k + 1) \times (k + 1)$.

La probabilité d'avoir exactement j types après n tirages est $P_{0,j}^{(n)}$.

La probabilité d'avoir une collection complète après n tirages est $P_{0,k}^{(n)}$.

Et si les probabilités ne sont pas toutes $1/k$? Le modèle avec $k + 1$ états ne tient plus.

L'état doit indiquer quelles capsules il nous manque! Donc 2^k états possibles.

Et si on veut "apprendre" ces probabilités à partir d'observations?

Chaînes avec états absorbants ou tabous

Parfois, pour une chaîne de Markov, on a un sous-ensemble d'états $\mathcal{A} \subset \mathcal{X}$ et on s'intéresse à un événement qui dépend de $N = \inf\{n \geq 1 : X_n \in \mathcal{A}\}$, l'instant de la première visite à \mathcal{A} , ou du premier retour à \mathcal{A} si on y est déjà. Si X_n n'atteint jamais \mathcal{A} , on a $N = \infty$.

On peut vouloir calculer par exemple

$$\beta = \mathbb{P}[N \leq m \mid X_0 = i].$$

Dans ce genre de situation, on peut réduire la taille de la chaîne en fusionnant tous les états de \mathcal{A} en un seul état absorbant, disons Δ . Quand la chaîne atteint cet état, elle y reste.

La nouvelle chaîne $\{W_n, n \geq 0\}$ est définie par

$$W_n = X_n \text{ pour } n < N; \quad W_n = \Delta \text{ pour } n \geq N.$$

Les probabilités de transition pour cette chaîne sont

$$Q_{i,j} = P_{i,j} \text{ pour } i, j \notin \mathcal{A}; \quad Q_{i,\Delta} = \sum_{j \in \mathcal{A}} P_{i,j} \text{ pour } i \notin \mathcal{A}; \quad Q_{\Delta,\Delta} = 1.$$

On obtient $\beta = \mathbb{P}[N \leq m \mid X_0 = i] = \mathbb{P}[W_m = \Delta \mid W_0 = i] = Q_{i,\Delta}^{(m)}$.

Exemple: On tire à pile ou face et on s'intéresse à la loi de probabilité de N , le nombre de tirages requis pour avoir s faces d'affilée.

Soit X_n le nombre de faces de suite que l'on vient d'obtenir rendu à l'étape n si on a face à cette étape, et $X_n = 0$ si on a pile.

On pose ensuite $\mathcal{A} = \{s\}$, $\Delta = s$, et $N = \inf\{n \geq 1 : X_n \in \mathcal{A}\}$.

Ainsi $W_n = X_n$ avant d'avoir atteint s , et par la suite $W_n = s = \Delta$ (le cimetière).

Par exemple, pour $s = 3$, les $Q_{i,j}$ sont donnés par

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Pour chaque $n > 0$, l'élément $Q_{0,s}^{(n)}$ de la matrice \mathbf{Q}^n donne la valeur de $\mathbb{P}(N \leq n)$.

On peut ainsi calculer toute la distribution de N .

Contraintes sur les trajectoires

Si $i, j \notin \mathcal{A}$, la probabilité que $X_m = j$ et que la chaîne n'ait pas visité l'ensemble \mathcal{A} jusqu'à l'étape m s'écrit

$$\alpha = \mathbb{P}[X_m = j, N > m - 1 \mid X_0 = i].$$

Pour calculer α , il suffit de construire \mathbf{Q} et la chaîne $\{W_n, n \geq 0\}$ comme ci-haut. L'élément $Q_{i,j}^{(m)}$ donne la probabilité α cherchée.

Pour le cas où $j \in \mathcal{A}$, voir Ross (2014), page 193.

Classification des états

On dit qu'un état j est **accessible** de l'état i s'il existe un $n \geq 0$ tel que $p_{ij}^{(n)} > 0$. Cela veut dire que si on est dans l'état i , la probabilité d'atteindre j éventuellement n'est pas nulle. Notez que i est toujours accessible de i .

Deux états i et j **communiquent** si chacun est accessible de l'autre. On note cela $i \leftrightarrow j$.

La communication est une **relation d'équivalence**: c'est réflexif et symétrique (découle directement de la définition), et aussi transitif (découle de l'équation de Chapman-Kolmogorov).

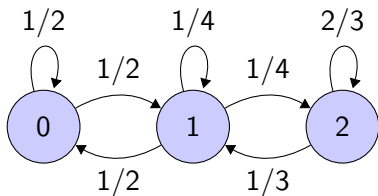
Les classes d'équivalence forment une **partition** de l'espace d'états \mathcal{X} . On les appelle les **classes de communication**.

La chaîne est **irréductible** si tous les états communiquent (une seule classe d'équivalence).

On peut représenter une chaîne de Markov à espace d'états discret par un graphe orienté. Les états sont les **sommets**, les transitions de probabilité positive sont les **arcs**, et on peut aller de i à j en n étapes s'il y a un chemin de i à j de longueur n .

Exemple.

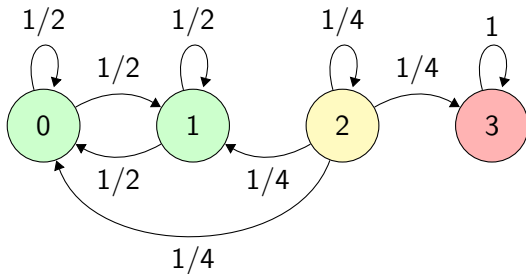
$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix}$$



Ici, tous les états communiquent. La chaîne est irréductible.

Exemple.

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$



Ici, on a trois classes: $\{0, 1\}$, $\{2\}$, et $\{3\}$. L'état 2 est **transitoire** et l'état 3 est **absorbant**.

États récurrents et transitoires

Pour chaque état i , soit f_i la probabilité que si on part de i , on va y revenir ultérieurement. L'état i est dit **récurrent** si $f_i = 1$ (on est certain d'y revenir) et **transitoire** si $f_i < 1$.

Voir les exemples.

Si $f_i = 1$, le processus va revenir à i avec probabilité 1, puis va y revenir encore une fois avec probabilité 1, et ainsi de suite. La chaîne va donc revenir à i une infinité de fois, et le nombre espéré de visites à i est nécessairement infini.

Par contre, si $f_i < 1$, à chaque passage à i , la chaîne va y revenir avec probabilité $f_i < 1$, et n'y reviendra plus jamais avec probabilité $1 - f_i$. Le nombre de retours à i est donc dans ce cas une v.a. géométrique de paramètre $p = 1 - f_i$, dont l'espérance est $(1 - p)/p < \infty$ (ici, chaque retour correspond à un "échec").

Donc si $f_i < 1$, le nombre de visites à l'état i est fini avec probabilité 1, et le nombre espéré de visites à i est fini.

Soit $M_i = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{I}[X_n = i]$ le nombre de retours à l'état i , en supposant que $X_0 = i$.
On a $f_i = 1$ ssi $\mathbb{E}[M_i | X_0 = i] = \infty$. Mais

$$\mathbb{E}[M_i | X_0 = i] = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{E}[\mathbb{I}(X_n = i) | X_0 = i] = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}[X_n = i | X_0 = i] = \sum_{n=1}^{\infty} P_{i,i}^{(n)}.$$

Proposition. Un état i est **récurrent** si $\sum_{n=1}^{\infty} P_{i,i}^{(n)} = \infty$ et **transitoire** sinon.

Corollaire. Le caractère récurrent ou transitoire est une propriété de classe: si i est récurrent [transitoire] et $i \leftrightarrow j$, alors j est récurrent [transitoire].

Preuve: Prenons m et k tels que $P_{j,i}^{(m)} > 0$ et $P_{i,j}^{(k)} > 0$, i.e., $i \leftrightarrow j$. Si i est récurrent,

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_{j,j}^{(n)} \geq \sum_{n=1}^{\infty} P_{j,j}^{(m+n+k)} \geq \sum_{n=1}^{\infty} P_{j,i}^{(m)} P_{i,i}^{(n)} P_{i,j}^{(k)} \geq P_{j,i}^{(m)} P_{i,j}^{(k)} \sum_{n=1}^{\infty} P_{i,i}^{(n)} = \infty.$$

Exemple

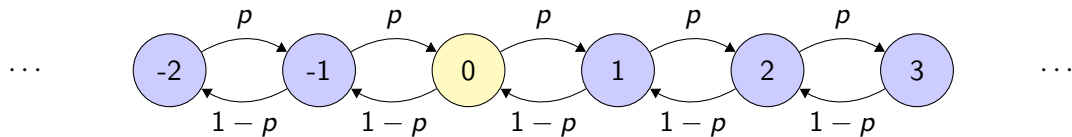
$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Quelles sont les classes de communication, et lesquelles sont récurrentes?

Il y a trois classes: $\{0, 1\}$, $\{2, 3\}$, et $\{4\}$.

Les deux premières sont **récurrentes** et la troisième est **transitoire**.

Une marche aléatoire sur les entiers



Ici, tous les états communiquent (une seule classe), donc ils sont ou bien tous récurrents, ou bien tous transitoires! Pour savoir s'ils sont récurrents ou pas, on va calculer

$$\mathbb{E}[M_0 \mid X_0 = 0] = \sum_{n=1}^{\infty} P_{0,0}^{(n)}.$$

On sait qu'on ne peut revenir à 0 qu'en un nombre pair de coups, donc il suffit de considérer¹⁹ les termes de la forme $P_{0,0}^{(2n)}$, i.e., aller n fois à gauche et n fois à droite:

$$P_{0,0}^{(2n)} = \binom{2n}{n} p^n (1-p)^n = \frac{(2n)!}{n!n!} (p(1-p))^n \sim \frac{\sqrt{4\pi n} (2n/e)^{2n}}{2\pi n (n/e)^{2n}} (p(1-p))^n = \frac{(4p(1-p))^n}{\sqrt{\pi n}}$$

en utilisant l'approximation de Stirling $n! \approx \sqrt{2\pi n} (n/e)^n$. Donc les états sont récurrents ssi

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(4p(1-p))^n}{\sqrt{\pi n}} = \infty.$$

Mais cela est vrai ssi $p = 1/2$, auquel cas le numérateur est $4p(1-p) = 1$ et $\sum_{n=1}^{\infty} 1/n = \infty$. Si $p \neq 1/2$, $4p(1-p) < 1$, et la série est bornée par une série géométrique, qui converge.

On a donc: **La marche aléatoire est récurrente ssi $p = 1/2$ (la marche est symétrique).**

On peut définir aussi une marche aléatoire sur les entiers en 2 dimensions ou plus.

On peut prouver qu'une marche symétrique en 2 dimensions est aussi récurrente, mais **une marche en 3 dimensions ou plus est toujours transitoire!**

Plus la dimension augmente, plus c'est facile de s'évader!

Fréquences de visites et récurrence positive

La probabilité d'atteindre éventuellement j quand on est à i :

$$f_{i,j} = \mathbb{P}[X_n = j \text{ pour un } n > 0 \mid X_0 = i] = \mathbb{P}\left[\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{I}[X_n = j] > 0 \mid X_0 = i\right].$$

Proposition. Si i est récurrent et $i \leftrightarrow j$, alors $f_{i,j} = 1$.

Preuve. Puisque $i \leftrightarrow j$, il existe un $n > 0$ tel que $p = P_{i,j}^{(n)} > 0$. Donc chaque fois qu'on visite i , on visitera j dans n étapes avec probabilité au moins p . Mais on visite i infiniment souvent. On a donc une infinité d'occasions d'aller à j , chaque fois avec probabilité de succès au moins p . Le nombre de ces occasions que l'on va rater avant le premier succès est une v.a. géométrique(p), donc ce nombre est fini avec probabilité 1. \square

Soit j un état récurrent et $X_0 = j$. Le temps de premier retour à j est

$$R_j = \min\{n \geq 1 : X_n = j\},$$

Le temps de récurrence moyen est

$$m_j = \mathbb{E}[R_j \mid X_0 = j].$$

On dit que j est récurrent positif si $m_j < \infty$ et récurrent nul si $m_j = \infty$.

Proposition. Si i est récurrent positif et $i \leftrightarrow j$, alors j est récurrent positif aussi. En d'autres mots, la récurrence positive est une propriété de classe. La récurrence nulle aussi.

Preuve. Par hypothèse, $\pi_i > 0$ et $P_{i,j}^{(n)} > 0$ pour un certain n . Donc $\pi_i P_{i,j}^{(n)} > 0$. Mais cette valeur est la proportion des étapes où on arrive à j et on était à i il y a n étapes, et elle ne peut pas dépasser la proportion π_j des étapes où on arrive à j (de n'importe où). Par conséquent, $\pi_j \geq \pi_i P_{i,j}^{(n)} > 0$, donc j est récurrent positif. \square

Pour un état j **récurrent positif**, on revient donc à j en moyenne à toutes les m_j unités de temps (à long terme). La **proportion des étapes** où on est dans l'état j est donc $\pi_j = 1/m_j$. Plus précisément, si j est récurrent positif et $X_0 \leftrightarrow j$, on a :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{I}[X_k = j] \stackrel{\text{w.p.1}}{=} \pi_j = \frac{1}{m_j}.$$

Quand $m_j = \infty$, on pose $\pi_j = 0$. Ainsi, l'état j est récurrent positif ssi $\pi_j > 0$.

Une chaîne est dite **récurrente positive** si tous les états sont récurrents positifs.

En particulier, une chaîne irréductible dont l'espace d'états est fini est nécessairement récurrente positive.

Dans ce qui suit, on examine les propriétés d'une chaîne **irréductible et récurrente positive**.

Probabilités d'équilibre (ou d'état stationnaire)

Théorème. Pour une chaîne irréductible récurrente positive, les π_j forment la solution unique des **équations d'équilibre** suivantes:

$$\pi_j = \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i P_{i,j} \quad \text{pour tout } j \in \mathcal{X}, \quad \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i = 1.$$

Sous forme matricielle: $\boldsymbol{\pi} \mathbf{P} = \boldsymbol{\pi}$ et $\boldsymbol{\pi} \mathbf{1}^t = 1$, où $\boldsymbol{\pi} = (\pi_0, \pi_1, \dots)$.

Si ce système n'a pas de solution, la chaîne est transitoire ou récurrente nulle.

Justification intuitive. La proportion des transitions où on part de i pour aller à j est égale à la probabilité d'être à i , puis ensuite de transiter vers j , qui est $\pi_i P_{i,j}$. En sommant sur tous les i , on obtient la proportion des transitions qui arrivent à j , qui est π_j . La somme doit égaler π_j , ce qui donne la première équation. La seconde dit que les probabilités somment à 1. \square

Ce vecteur $\boldsymbol{\pi}$ donne la **loi d'équilibre**, ou **loi stationnaire**.

Si X_0 suit la loi $\boldsymbol{\pi}$, alors X_1 et tous les X_n suivent aussi la loi $\boldsymbol{\pi}$ (on y reviendra).

Exemple. Dans l'exemple de "pluie" vs "non pluie", on a

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 - \alpha \\ \beta & 1 - \beta \end{pmatrix}$$

Les équations $\pi\mathbf{P} = \pi$ et $\pi\mathbf{1}^t = 1$ deviennent:

$$\pi_0 = \alpha\pi_0 + \beta\pi_1$$

$$\pi_1 = (1 - \alpha)\pi_0 + (1 - \beta)\pi_1$$

$$1 = \pi_0 + \pi_1$$

Trois équations et deux inconnues: on peut remplacer π_1 par $1 - \pi_0$. Solution:

$$\pi_0 = \frac{\beta}{1 + \beta - \alpha}, \quad \pi_1 = \frac{1 - \alpha}{1 + \beta - \alpha}.$$

Pour $\alpha = 0.7$ et $\beta = 0.4$, cela donne $\pi_0 = \mathbb{P}[\text{pluie}] = 4/7 = .571$ et $\pi_1 = 3/7$.

Mouvement dans les classes sociales

Si le parent est dans la classe sociale i , l'enfant sera dans la classe j avec probabilité P_{ij} .
Supposons qu'on a 3 classes, $\{0, 1, 2\}$, et la matrice des probabilités de transition est

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.45 & 0.48 & 0.07 \\ 0.05 & 0.70 & 0.25 \\ 0.01 & 0.50 & 0.49 \end{pmatrix}$$

Les équations pour les π_i sont:

$$\pi_0 = 0.45\pi_0 + 0.05\pi_1 + 0.01\pi_2$$

$$\pi_1 = 0.48\pi_0 + 0.70\pi_1 + 0.25\pi_2$$

$$\pi_2 = 0.07\pi_0 + 0.25\pi_1 + 0.49\pi_2$$

$$1 = \pi_0 + \pi_1 + \pi_2.$$

La solution est (à interpréter):

$$\pi_0 = 0.07, \quad \pi_1 = 0.62, \quad \pi_2 = 0.31.$$

Modèle d'inventaire

On vend un certain type d'item. La demande à chaque jour est une v.a. D telle que $\mathbb{P}[D = k] = p_k$ pour $k = 0, 1, 2, \dots, k_{\max} < \infty$ (demande bornée). Le **niveau d'inventaire** à la fin du jour n est X_n . Politique de gestion (s, S) , avec $s < S$: Si $X_n \leq s$, on remonte l'inventaire à S pour le lendemain matin, sinon on le laisse à X_n .

On aura ainsi, si on permet les inventaires négatifs.

$$X_{n+1} = \begin{cases} X_n - D & \text{si } X_n > s; \\ S - D & \text{si } X_n \leq s. \end{cases}$$

Avec ceci et les p_k , on peut définir les probabilités de transition de la chaîne .

On a toujours $s + 1 - k_{\max} \leq X_n \leq S$ (espace d'états fini).

On peut facilement calculer les probabilités d'équilibre π_i , qui nous donnent la **loi de probabilité du niveau d'inventaire**, en moyenne sur les jours.

On peut avoir un coût d'inventaire $c(X_n)$ à payer, chaque jour, en fonction du niveau d'inventaire. Le coût moyen par jour à long terme sera $\sum_{i \in \mathbb{Z}} \pi_i c(i)$.

Modèle de diffusion à travers une membrane: Urne de Ehrenfest

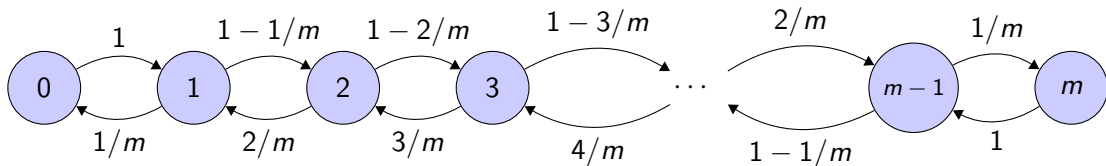
Modélise la diffusion de molécules à travers une membrane.

Deux urnes contiennent m balles (ou molécules), réparties arbitrairement entre les deux.

À chaque étape, on pige au hasard l'une des m balles et on la change d'urne.

Soit $X_n \in \mathcal{X} = \{0, 1, \dots, m\}$ le nombre de balles dans l'urne 1 à l'étape n . On a

$$P_{i,j} = \mathbb{P}[X_{n+1} = j \mid X_n = i] = \begin{cases} i/m & \text{pour } j = i - 1, & \text{(On pige dans l'urne 1)} \\ (m - i)/m & \text{pour } j = i + 1. & \text{(On pige dans l'urne 2)} \end{cases}$$



$$P_{i,j} = \mathbb{P}[X_{n+1} = j \mid X_n = i] = \begin{cases} i/m & \text{pour } j = i - 1, \quad (\text{On pige dans l'urne 1}) \\ (m - i)/m & \text{pour } j = i + 1. \quad (\text{On pige dans l'urne 2}) \end{cases}$$

Cette chaîne est irréductible et récurrente positive.

On peut s'intéresser aux probabilités d'équilibre π_i , qui donnent la loi de probabilité de la concentration de molécules d'un coté, à long terme. Comment les trouver?

Si toutes les balles sont initialement placées au hasard et indépendamment, chaque balle tombe dans l'urne 1 avec probabilité $1/2$, et $X_0 \sim \text{Binomiale}(m, 1/2)$. Puis si on tire une balle au hasard et la déplace, la probabilité est encore $1/2$ pour chaque balle et on aura encore $X_1 \sim \text{Binomiale}(m, 1/2)$. Donc cette loi doit être la **loi stationnaire**:

$$\pi_i = \binom{m}{i} (1/2)^i (1/2)^{m-i} = \binom{m}{i} 2^{-m}.$$

Cette loi est symétrique par rapport à $m/2$. Donc à l'équilibre, $\mathbb{E}[X_i] = m/2$.

Génétique: Loi de Hardy-Weinberg

Chaque individu a une paire de gènes: AA ou aa ou Aa, donc 3 possibilités.

Soient p_0 , q_0 , r_0 la proportion d'individus de chaque type au départ, dans la population.

Si on prend au hasard un gène d'un individu choisi au hasard, ce sera A avec probabilité

$$\mathbb{P}(A) = p_0 + r_0/2$$

et a avec probabilité

$$\mathbb{P}(a) = 1 - \mathbb{P}(A) = q_0 + r_0/2.$$

Si on choisit ainsi deux gènes au hasard pour former un nouvel individu, cet individu sera de type AA ou aa ou Aa, avec les probabilités p , q , et r suivantes:

$$p = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(A) = (p_0 + r_0/2)^2$$

$$q = \mathbb{P}(a)\mathbb{P}(a) = (q_0 + r_0/2)^2$$

$$r = 2\mathbb{P}(A)\mathbb{P}(a) = 2(p_0 + r_0/2)(q_0 + r_0/2).$$

Ces valeurs indiquent les proportions d'individus des trois types, à la seconde génération.

La proportion des gènes qui sont de type A à cette seconde génération sera

$$\mathbb{P}_2(A) = p + r/2 = (p_0 + r_0/2)^2 + (p_0 + r_0/2)(q_0 + r_0/2) = p_0 + r_0/2.$$

C'est la même qu'au départ! Idem pour le type a.

Cela s'appelle la [Loi de Hardy-Weinberg](#).

Pour un individu quelconque, soit X_n le type de paire de gènes de son descendant de génération n . La matrice de transition pour la chaîne $\{X_n, n \geq 0\}$ est

$$\mathbf{P} = \begin{matrix} & \begin{matrix} AA & aa & Aa \end{matrix} \\ \begin{matrix} AA \\ aa \\ Aa \end{matrix} & \begin{pmatrix} p + r/2 & 0 & q + r/2 \\ 0 & q + r/2 & p + r/2 \\ p/2 + r/4 & q/2 + r/4 & (p + q + r)/2 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

On peut vérifier ici que les probabilités d'équilibre (ou d'état stationnaire) sont $(\pi_0, \pi_1, \pi_2) = (p, q, r)$.

Processus de production: état fonctionnel vs défaillant

L'état d'un processus de production évolue selon une chaîne de Markov avec probabilités de transition $P_{i,j}$ et probabilités d'équilibre π_j .

Soit \mathcal{A} l'ensemble des états où le système est fonctionnel, et $\mathcal{A}^c = \mathcal{X} \setminus \mathcal{A}$ l'ensemble des états où il est défaillant.

La proportion des transitions où le système est fonctionnel est

$$p_f = \sum_{i \in \mathcal{A}} \pi_i$$

et la proportion des transitions où il est défaillant est $1 - p_f = \sum_{i \in \mathcal{A}^c} \pi_i$.

À quelle fréquence en moyenne le système tombe-t-il en panne?

C'est le taux de passage de \mathcal{A} à \mathcal{A}^c , i.e., la proportion des transitions qui se font d'un état $i \in \mathcal{A}$ à un état $j \in \mathcal{A}^c$. Cette proportion est

$$\nu = \sum_{i \in \mathcal{A}} \sum_{j \in \mathcal{A}^c} \pi_i P_{i,j},$$

car la probabilité qu'une transition se fasse de i à j est $\pi_i P_{i,j}$.

La durée moyenne entre les pannes est $1/\nu$.

Quelle est la durée moyenne des pannes?

En moyenne, il y a une panne (ou un cycle défaillant–fonctionnel) chaque $1/\nu$ transitions, et la proportion des transitions où le système est en panne est $1 - p_f$. La durée moyenne des pannes est donc de $(1 - p_f)/\nu$ transitions, et la durée moyenne des périodes de fonctionnement est p_f/ν .

Fréquence de visite d'un patron donné

Pour une chaîne de Markov avec probabilités de transition $P_{i,j}$ et probabilités d'état stationnaire π_i , à quelle fréquence va-t-on visiter la suite de k états successifs (le patron) i_1, i_2, \dots, i_k ?

La probabilité d'avoir ce patron, à l'état stationnaire, est

$$\pi(i_1, \dots, i_k) = \pi_{i_1} P_{i_1, i_2} \cdots P_{i_{k-1}, i_k}.$$

C'est la **fréquence** à long terme. Le nombre moyen d'étapes entre les visites est l'inverse de cette probabilité.

Supposons maintenant qu'on est dans l'état $X_0 = r$ et on pose

$$N(i_1, \dots, i_k) = \min\{n \geq k : X_{n-k+1} = i_1, \dots, X_n = i_k\}.$$

Note: ici, $n \geq k$, donc l'état X_0 ne compte pas dans la suite même si $X_0 = r = i_1$.

On veut calculer

$$\mathbb{E}[N(i_1, \dots, i_k) \mid X_0 = r].$$

Soit $\mu(i, i_1)$ le nombre espéré d'étapes requises pour atteindre i_1 quand on part de i .

Soit $a(i_1)$ le nombre espéré d'étapes requises pour avoir le patron quand on part de l'état i_1 .

Supposons pour simplifier que le patron n'a **pas de chevauchement**; i.e., il n'y a pas de $s > 0$ tel que $(i_1, \dots, i_s) = (i_{k-s+1}, \dots, i_k)$.

Exemple de chevauchement avec $s = 2$: $(8, 7, 3, 7, 0, 1, 8, 7)$.

Si pas de chevauchement, quand $r = i_k$, on a

$$\frac{1}{\pi(i_1, \dots, i_k)} = \mathbb{E}[N(i_1, \dots, i_k) \mid X_0 = i_k] = \mu(i_k, i_1) + a(i_1).$$

d'où on tire

$$\mathbb{E}[N(i_1, \dots, i_k) \mid X_0 = r] = \mu(r, i_1) + a(i_1) = \mu(r, i_1) + \frac{1}{\pi(i_1, \dots, i_k)} - \mu(i_k, i_1).$$

Le cas d'un **patron avec chevauchement** est un brin plus compliqué; voir Ross, page 216.

Occupation d'un hôtel

Les clients arrivent à un hôtel selon un processus de Poisson de taux λ (par jour). Chaque client reste à l'hôtel au moins un jour, plus un nombre additionnel de jours qui suit une loi géométrique de paramètre p . Autrement dit, après chaque jour, le client quitte avec probabilité p et reste (au moins) un autre jour avec probabilité $q = 1 - p$.

Soit X_n le nombre de clients dans l'hôtel le jour n . On veut calculer les $P_{i,j}$ et les π_i pour cette chaîne, ainsi que $\mathbb{E}[X_n | X_0 = i]$.

(a) Pour trouver $P_{i,j}$, supposons qu'on est dans l'état $X_n = i$.

Soient R_i le nombre de clients qui restent un jour de plus et N le nombre de nouveaux clients. On a $R_i \sim \text{Binomiale}(i, q)$ et $N \sim \text{Poisson}(\lambda)$.

$$\begin{aligned} P_{i,j} &= \mathbb{P}(R_i + N = j) = \sum_{k=0}^i \mathbb{P}(N = j - k | R_i = k) \mathbb{P}[R_i = k] \\ &= \sum_{k=0}^{\min(i,j)} e^{-\lambda} \frac{\lambda^{j-k}}{(j-k)!} \binom{i}{k} q^k p^{i-k}. \end{aligned}$$

Cette formule est compliquée; dans ce qui suit, on va trouver $\mathbb{E}[X_n | X_0 = i]$ et les π_i sans l'utiliser.

(b) On peut calculer $\mathbb{E}[X_n | X_0 = i]$ via une récurrence. On a

$$\mathbb{E}[X_n | X_{n-1} = i] = \mathbb{E}[R_i + N] = iq + \lambda.$$

Donc $\mathbb{E}[X_n | X_{n-1}] = X_{n-1}q + \lambda$. En prenant l'espérance: $\mathbb{E}[X_n] = \mathbb{E}[X_{n-1}]q + \lambda$.

On peut itérer ce processus:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X_n] &= \lambda + q\mathbb{E}[X_{n-1}] = \lambda + q(\lambda + q\mathbb{E}[X_{n-2}]) = \dots \\ &= \lambda(1 + q + q^2 + \dots + q^{n-1}) + q^n\mathbb{E}[X_0]. \end{aligned}$$

Ainsi

$$\mathbb{E}[X_n | X_0 = i] = \lambda \frac{(1 - q^n)}{1 - q} + q^n i \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda}{1 - q} = \frac{\lambda}{p}.$$

Interprétation: Il arrive en moyenne λ clients par jour et chaque client reste en moyenne $1/p$ jours. Le produit donne le nombre moyen de nuitées par jour.

(c) Trouvons maintenant les π_i sans utiliser la formule compliquée pour les $P_{i,j}$.

On sait que les π_i forment l'**unique loi stationnaire**. Donc si on trouve (devine) des π_i qui satisfont les équations d'équilibre, ils sont nécessairement les valeurs cherchées.

On va supposer que $X_0 \sim \text{Poisson}(\alpha)$, puis on va montrer qu'en prenant $\alpha = \lambda/p$, on a aussi que $X_1 \sim \text{Poisson}(\alpha)$, et donc par récurrence $X_n \sim \text{Poisson}(\alpha)$ pour tout $n > 0$.

Si $X_0 \sim \text{Poisson}(\alpha)$, le nombre de ces X_0 clients qui restent pour le jour suivant est $R \sim \text{Poisson}(\alpha q)$, et le nombre d'arrivées le jour suivant est $N \sim \text{Poisson}(\lambda)$.

Donc $X_1 = R + N \sim \text{Poisson}(\alpha q + \lambda)$.

En prenant $\alpha = \lambda/p$, on obtient $\alpha q + \lambda = \alpha(q + p) = \alpha$, et donc $X_1 \sim \text{Poisson}(\alpha)$.

Les π_i sont donc donnés par cette loi de Poisson:

$$\pi_i = e^{-\lambda/p} (\lambda/p)^i / i! \quad \text{pour } i \geq 0.$$

En bref, c'est beaucoup plus facile de trouver la loi de X_1 quand on suppose que $X_0 \sim \text{Poisson}(\alpha)$ que quand on suppose que $X_0 = i$.

Généralisation: composition d'une population

Une population est formée d'individus de r types différents. À chaque étape, chaque individu de type i passe au type j avec probabilité $q_{i,j}$, $i, j = 1, \dots, r$, et quitte la population avec probabilité $q_{i,0} = 1 - \sum_{j=1}^r q_{i,j}$, indépendamment les uns des autres. De plus, on a $N_j \sim \text{Poisson}(\lambda_j)$ nouveaux individus de type j (immigrants), pour $j = 1, \dots, r$.

Soit $\mathbf{X}_n = (X_{n,1}, \dots, X_{n,r})$ le nombre d'individus de chaque type à l'étape n .

Supposons que $X_{0,1}, \dots, X_{0,r}$ sont indépendants, $X_{0,i} \sim \text{Poisson}(\alpha_i)$.

Le nombre qui va passer du type i au type j à l'étape 1 est alors $M_{i,j} \sim \text{Poisson}(\alpha_i q_{i,j})$, et $M_{i,1}, \dots, M_{i,r}$ sont indépendants. (Mais pas indépendants conditionnellement aux $X_{0,i}$.)

On aura

$$X_{1,j} = N_j + \sum_{i=1}^r M_{i,j}, \quad j = 1, \dots, r.$$

Notez que la somme inclut $i = j$.

Les $X_{1,j} = N_j + \sum_{i=1}^r M_{i,j}$, $j = 1, \dots, r$, sont Poisson indépendantes, de moyennes

$$\mathbb{E}[X_{1,j}] = \lambda_j + \sum_{i=1}^r \alpha_i q_{i,j}.$$

En prenant pour $\alpha_1, \dots, \alpha_r$ la solution des équations

$$\alpha_j = \lambda_j + \sum_{i=1}^r \alpha_i q_{i,j}, \quad j = 1, \dots, r,$$

on obtient que $X_{1,j} \sim \text{Poisson}(\alpha_j)$ et les $X_{1,j}$ sont indépendants. C'est la loi stationnaire. Elle définit implicitement le vecteur π des probabilités stationnaires pour l'état \mathbf{X}_n :

$$\mathbb{P}[\mathbf{X}_n = \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_r)] = \prod_{j=1}^r \alpha_j^{x_j} e^{-\alpha_j} / x_j!$$

Ceci est vrai ssi chaque individu quitte éventuellement la population avec probabilité 1.

Coût moyen par étape

Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne irréductible avec probabilités stationnaires $\pi_j, j \geq 0$. Supposons qu'à chaque étape, si on est dans l'état $X_n = j$, on paye un "coût" (ou on reçoit un revenu) $r(j)$. Le **coût moyen par étape** satisfait alors

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n r(X_k) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=1}^n \mathbb{I}[X_k = j] r(j) \stackrel{\text{w.p.1}}{=} \sum_{j=0}^{\infty} r(j) \pi_j.$$

Exemple. Assurance Bonus-Malus de la page 5 des diapos: Supposons que pour chaque client dans l'état j on a un coût espéré $r(j)$ pour l'année. On a une formule pour les $P_{i,j}$, on peut calculer les π_j , puis le coût moyen par année.

Voir Exemple 4.27, page 218 du livre.

Exemples. Modèle d'inventaire, page 26. Aussi l'exemple précédent.

États périodiques et apériodiques

Dans l'exemple de la marche aléatoire sur les entiers, on a vu que si on part de l'état 0, on ne peut y revenir qu'après un nombre d'étapes **pair**, i.e., quand n est un multiple de 2. On dit que l'état 0 est **périodique de période 2**. Dans cet exemple, tous les états sont en fait périodiques de période 2.

En général, quand un état i peut être visité seulement quand n est un multiple de $d(i)$, on dit qu'il est **périodique de période $d(i)$** . Quand $d(i) = 1$, l'état i est dit **apériodique**.

La période est une propriété de classe: tous les états d'une même classe de communication ont la même période. S'il y a une seule classe et que les états sont apériodiques, on dit que la chaîne est apériodique.

Théorème. Dans une chaîne irréductible, récurrente, et apériodique, pour tous i, j , on a

$$\pi_j = \lim_{n \rightarrow \infty} P_{i,j}^{(n)}.$$

Ce sont les **probabilités limites**. Si la chaîne est récurrente positive, la somme de ces π_j est 1.

Théorème. Dans une chaîne irréductible aperiodique à espace d'états fini, il existe un entier $N < \infty$ tel que pour tout $n \geq N$, tous les éléments de la matrice \mathbf{P}^n sont strictement positifs. Autrement dit, la probabilité d'aller de i à j en n étapes est positive pour tout i, j , et $n \geq N$.

Exemple. On a 5 états, $\{0, 1, 2, 3, 4\}$. De 0 on peut aller à 1 ou 4. Des autres états i , on peut seulement aller à $i + 1 \pmod{4}$. Trouvez le plus petit N pour lequel le théorème précédent s'applique.

Probabilités limites, fréquences, et probabilités d'état stationnaire

Probabilités limites:

$$\pi_j = \lim_{n \rightarrow \infty} P_{i,j}^{(n)}.$$

Fréquence de visite à long terme:

$$\pi_j = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n P_{i,j}^{(k)}.$$

C'est la limite de Cesàro.

Probabilités d'état stationnaire (ou d'équilibre): c'est un vecteur π de probabilités qui satisfait

$$\pi = \pi \mathbf{P} \text{ et } \pi \mathbf{1} = 1.$$

Les deux premières peuvent dépendre de l'état initial si la chaîne a plusieurs classes.

Il se peut que les fréquences à long terme existent et pas les probabilités limites. Mais pas l'inverse. Quand les probabilités limites existent, elles sont nécessairement égales aux fréquences, et aux probabilités d'état stationnaire dans le cas irréductible.

État initial aléatoire

Jusqu'à date, on a conditionné sur l'état initial, ou fixé cet état à $X_0 = i$, par exemple.

Mais en général, on peut avoir une loi de probabilité sur l'état initial, qui est aléatoire.

On peut avoir disons

$$\alpha_i = \mathbb{P}[X_0 = i] \quad \text{pour tout } i \in \mathcal{X}.$$

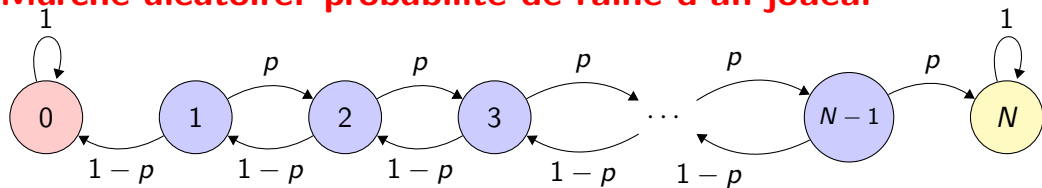
On a alors

$$\mathbb{P}[X_n = j] = \sum_{i \in \mathcal{X}} \alpha_i P_{ij}^{(n)}.$$

Si la chaîne est irréductible et récurrente positive, avec π comme vecteur des probabilités d'état stationnaire, et si $\alpha_i = \pi_i$ pour tout i , puisque $\pi = \pi \mathbf{P} = \dots = \pi \mathbf{P}^n$, on obtient

$\mathbb{P}[X_n = j] = \pi_j$ pour tout j et tout $n > 0$. La loi est effectivement **stationnaire**.

Marche aléatoire: probabilité de ruine d'un joueur



Si on part à i , quelle est la probabilité P_i d'atteindre N avant d'atteindre 0 ?

On a $P_{i,i+1} = p = 1 - P_{i,i-1}$ pour $i = 1, \dots, N-1$.

Trois classes d'états: $\{0\}$, $\{N\}$, et $\{1, 2, \dots, N-1\}$. Les deux premières sont récurrentes (états absorbants) et la troisième est transitoire. On va terminer à 0 ou à N .

Soit $P_i = \mathbb{P}[\text{terminer à } N \mid X_0 = i]$. On a les équations

$$(p + q)P_i = P_i = pP_{i+1} + qP_{i-1}, \quad i = 1, \dots, N-1,$$

ce qui donne

$$P_{i+1} - P_i = \frac{q}{p}(P_i - P_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Sachant que $P_0 = 0$, on obtient

$$\begin{aligned}
 P_2 - P_1 &= \frac{q}{p}(P_1 - P_0) = \frac{q}{p}P_1 \\
 P_3 - P_2 &= \frac{q}{p}(P_2 - P_1) = \left(\frac{q}{p}\right)^2 P_1 \\
 &\vdots \\
 P_i - P_{i-1} &= \frac{q}{p}(P_{i-1} - P_{i-2}) = \left(\frac{q}{p}\right)^{i-1} P_1.
 \end{aligned}$$

En additionnant ces $i - 1$ équations, on obtient

$$P_i = P_1 \left[1 + \left(\frac{q}{p}\right) + \left(\frac{q}{p}\right)^2 + \dots + \left(\frac{q}{p}\right)^{i-1} \right] = \begin{cases} \frac{1-(q/p)^i}{1-q/p} P_1 & \text{si } q/p \neq 1, \\ iP_1 & \text{si } q/p = 1. \end{cases}$$

Comme on sait que $P_N = 1$, on peut trouver P_1 :

$$P_1 = \begin{cases} \frac{1-(q/p)}{1-(q/p)^N} & \text{si } p \neq 1/2, \\ 1/N & \text{si } p = 1/2, \end{cases}$$

et puis

$$P_i = \begin{cases} \frac{1-(q/p)^i}{1-(q/p)^N} & \text{si } p \neq 1/2, \\ i/N & \text{si } p = 1/2. \end{cases}$$

Quand $N \rightarrow \infty$, on obtient

$$P_i \rightarrow \begin{cases} 1 - (q/p)^i & \text{si } p > 1/2, \\ 0 & \text{si } p \leq 1/2. \end{cases}$$

Exemples. Max et Patty jouent l'un contre l'autre jusqu'à ce que l'un des deux soit ruiné. À chaque coup, ils misent 1 dollar et Patty gagne avec probabilité $p = 0.6$.

(a) Si **Patty** démarre avec **5\$** et **Max** avec **10\$**, quelle est la probabilité que Patty l'emporte?

On a $N = 15$, $i = 5$, et $p = 0.6$. La probabilité que Patty l'emporte est

$$P_i = \frac{1 - (q/p)^i}{1 - (q/p)^N} = \frac{1 - (2/3)^5}{1 - (2/3)^{15}} \approx 0.87.$$

(b) Et si **Patty** démarre avec **10\$** et **Max** avec **20\$**?

On a $N = 30$, $i = 10$, et $p = 0.6$. La probabilité que Patty l'emporte est

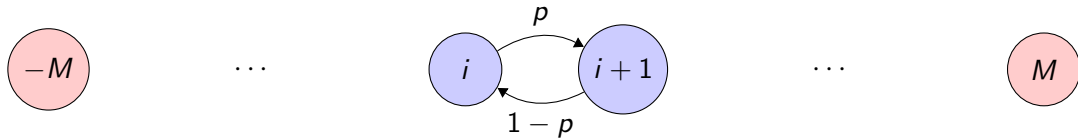
$$P_i = \frac{1 - (q/p)^i}{1 - (q/p)^N} = \frac{1 - (2/3)^{10}}{1 - (2/3)^{30}} \approx 0.98.$$

Même si Max a le double au départ, les chances sont contre lui!

Application: comparaison de médicaments

On veut comparer deux types de traitements pour une maladie. Le traitement i fonctionne (guérit le patient) avec probabilité p_i , pour $i = 1, 2$, mais les p_i sont inconnus.

Pour tester si $p_1 > p_2$ ou l'inverse, on fait ce qui suit: On pige des paires de patients au hasard et pour chaque paire on applique le traitement 1 à l'un et 2 à l'autre. Après chaque paire, on met à jour la différence D entre le nombre total de patients guéris avec le traitement 1 et le nombre avec le traitement 2. On fixe un seuil M . Si $D \geq M$ on déclare le traitement 1 vainqueur, si $D \leq -M$ on déclare le traitement 2 vainqueur, et sinon on poursuit.



La probabilité que 1 soit vainqueur dépend de p_1 et p_2 . La valeur de D suit une marche aléatoire sur les entiers de $-M$ à M . À chaque étape, elle va à droite (vers M) avec probabilité $p_1(1 - p_2)$, à gauche avec probabilité $p_2(1 - p_1)$, et sinon elle ne bouge pas. Lorsqu'il y a un mouvement, il est vers la droite avec probabilité

$$p = \frac{p_1(1 - p_2)}{p_1(1 - p_2) + p_2(1 - p_1)}$$

et vers la gauche avec probabilité $q = 1 - p$.

La probabilité d'atteindre M avant $-M$ (et de déclarer 1 vainqueur) est la même que celle d'atteindre $2M$ avant 0 dans un jeu de ruine où on part de $i = M$; c'est

$$P_i = \frac{1 - (q/p)^M}{1 - (q/p)^{2M}} = \frac{1 - (q/p)^M}{1 - (q/p)^{2M}} = \frac{1}{1 + (q/p)^M}.$$

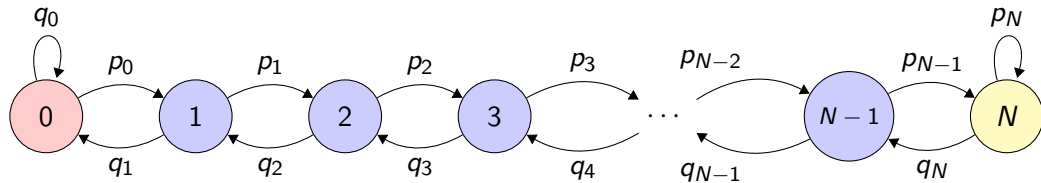
Par exemple, si $p_1 = 0.4$ et $p_2 = 0.6$, la probabilité de prendre la mauvaise décision (choisir 1) est $P_i = 0.017$ pour $M = 5$ et 0.0003 pour $M = 10$.

Généralisation: probabilités qui dépendent de l'état

Supposons que les p_i et $q_i = 1 - p_i$ peuvent dépendre de l'état i où l'on est.

Quand on est à 0, on peut y rester ou aller à 1.

Quand on est à N , on peut y rester ou aller à $N - 1$.



Les états sont $\{0, 1, \dots, N\}$ et les $P_{i,j}$ sont indiqués sur la figure.

Si $p_0 = q_N = 0$ et $0 < p_i < 1$ pour $i = 1, \dots, N - 1$, on a deux états absorbants et les autres sont transitoires. On peut s'intéresser à la probabilité d'atteindre N avant 0, par exemple.

Dans le cas où $0 < p_i < 1$ pour $i = 0, \dots, N$, la chaîne est irréductible et récurrente positive.

Dans ce cas, on peut vouloir calculer les π_j .

Cas où $p_0 = q_N = 0$ et $0 < p_i < 1$ pour $i = 1, \dots, N - 1$.

Soit $P_i = \mathbb{P}[\text{terminer à } N \mid X_0 = i]$, pour $i = 1, \dots, N - 1$.

On peut calculer les P_i comme dans l'exemple précédent de la probabilité de ruine.

On a les équations

$$(p_i + q_i)P_i = P_i = p_i P_{i+1} + q_i P_{i-1}, \quad i = 1, \dots, N - 1,$$

ce qui donne

$$P_{i+1} - P_i = \frac{q_i}{p_i}(P_i - P_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N - 1.$$

Exercice: En utilisant cela, dérivez une formule pour P_1 , puis pour chacun des autres P_i .

Cas où $0 < p_i < 1$ pour $i = 0, \dots, N$.

On a ici une chaîne irréductible récurrente positive et non périodique.

Trouvons les probabilités d'état stationnaire π_i .

À long terme, la fréquence des transitions de i vers $i+1$ doit être la même que de $i+1$ vers i :

$$\pi_i p_i = \pi_{i+1} q_{i+1}, \quad \text{pour } i = 0, \dots, N-1.$$

Ces **équations d'équilibre** permettent d'écrire tous les π_i en fonction de π_0 :

$$\pi_1 = \frac{p_0}{q_1} \pi_0, \quad \pi_i = \frac{p_{i-1}}{q_i} \pi_{i-1} = \frac{p_{i-1} \cdots p_0}{q_i \cdots q_1} \pi_0, \quad i = 1, \dots, N.$$

Par ailleurs,

$$1 = \sum_{i=0}^N \pi_i = \pi_0 \left[1 + \sum_{i=1}^N \frac{p_{i-1} \cdots p_0}{q_i \cdots q_1} \right],$$

ce qui donne

$$\pi_0 = \left[1 + \sum_{i=1}^N \frac{p_{i-1} \cdots p_0}{q_i \cdots q_1} \right]^{-1}$$

et permet de calculer tous les π_i .

Cas particulier: si $p_i = p$ et $q_i = q = 1 - p$ pour tout i et si $\beta = p/q \neq 1$, on a

$$\pi_0 = \left[1 + \sum_{i=1}^N (p/q)^i \right]^{-1} = \left[\frac{1 - \beta^{N+1}}{1 - \beta} \right]^{-1} = \frac{1 - \beta}{1 - \beta^{N+1}}$$

Cela donne

$$\pi_i = \beta^i \pi_0 = \beta^i \frac{1 - \beta}{1 - \beta^{N+1}} = \frac{\beta^i}{1 + \beta + \beta^2 + \dots + \beta^N}.$$

On peut avoir $\beta < 1$ ou $\beta > 1$.

Pour $\beta = 1$ ($p = 1/2$), on a $\pi_i = 1/(N + 1)$.

Application au modèle des deux urnes de Ehrenfest

Pour ce modèle, on a $N = m$, $p_i = (m - i)/m$, et $q_i = i/m$, pour $i = 0, \dots, m$.

En appliquant les formules pour la chaîne irréductible, on obtient

$$\begin{aligned} \pi_0 &= \left[1 + \sum_{i=1}^m \frac{p_{i-1} \cdots p_0}{q_i \cdots q_1} \right]^{-1} = \left[1 + \sum_{i=1}^m \frac{m(m-1) \cdots (m-i+1)}{i(i-1) \cdots 2 \cdot 1} \right]^{-1} \\ &= \left[\sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \right]^{-1} = \left[2^m \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} (1/2)^i (1/2)^{m-i} \right]^{-1} = 2^{-m}. \end{aligned}$$

On obtient ensuite

$$\pi_i = \frac{p_{i-1} \cdots p_0}{q_i \cdots q_1} \pi_0 = \frac{m(m-1) \cdots (m-i+1)}{i(i-1) \cdots 2 \cdot 1} \pi_0 = \binom{m}{i} 2^{-m}.$$

Cela qui correspond à ce qu'on a obtenu précédemment par un argument intuitif.

Temps passé dans les états transitoires

On considère une chaîne à espace d'états \mathcal{X} fini et un sous-ensemble $T = \{1, \dots, t\}$ d'états transitoires. La sous-matrice des probabilités de transition pour ces états transitoires:

$$\mathbf{P}_T = \begin{pmatrix} P_{1,1} & P_{1,2} & \cdots & P_{1,t} \\ P_{2,1} & P_{2,2} & \cdots & P_{2,t} \\ \vdots & & & \\ P_{t,1} & P_{t,2} & \cdots & P_{t,t} \end{pmatrix}.$$

Pour certaines lignes de cette matrice, la somme des éléments est < 1 (sinon l'ensemble T ne serait pas transitoire).

Pour $i, j \in T$, posons $\delta_{i,j} = \mathbb{I}[i = j]$ et $s_{i,j} = \mathbb{E} [\sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{I}[X_n = j] \mid X_0 = i]$, le nombre espéré de visites à j quand on part de i . On a la récurrence

$$s_{i,j} = \delta_{i,j} + \sum_{k \in \mathcal{X}} P_{i,k} s_{k,j} = \delta_{i,j} + \sum_{k=1}^t P_{i,k} s_{k,j}$$

car $s_{k,j} = 0$ si k est récurrent et j est transitoire.

On peut écrire ce système d'équations linéaires sous forme matricielle. Si on pose

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} s_{1,1} & s_{1,2} & \cdots & s_{1,t} \\ s_{2,1} & s_{2,2} & \cdots & s_{2,t} \\ \vdots & & \vdots & \\ s_{t,1} & s_{t,2} & \cdots & s_{t,t} \end{pmatrix},$$

on a

$$\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{P}_T \mathbf{S},$$

qui s'écrit aussi

$$(\mathbf{I} - \mathbf{P}_T) \mathbf{S} = \mathbf{I} \quad \text{ou encore} \quad \mathbf{S} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}_T)^{-1}.$$

On peut calculer les $s_{i,j}$ en résolvant le système linéaire.

Probabilité de visiter j .

Pour $i, j \in T$, soit

$$f_{i,j} = \mathbb{P} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{I}[X_n = j] > 0 \mid X_0 = i \right],$$

la probabilité de visiter j au moins une fois (à partir de l'étape 1) si on part de i . On a la récurrence

$$s_{i,j} = \delta_{i,j} + f_{i,j}s_{j,j}.$$

Le second terme est la probabilité de se rendre à j au moins une fois, multiplié par le nombre espéré de visites à j quand on y est déjà. On peut ainsi calculer les $f_{i,j}$ en fonction des $s_{i,j}$:

$$f_{i,j} = \frac{s_{i,j} - \delta_{i,j}}{s_{j,j}}.$$

Temps espéré pour atteindre un ensemble \mathcal{A}

Soit $\mathcal{A} \subset \mathcal{X}$ un sous-ensemble d'états quelconque (récurrents ou pas).

Soit $m_i(\mathcal{A})$ le **nombre espéré d'étapes requises pour visiter \mathcal{A} quand on part de $i \notin \mathcal{A}$** . Pour calculer les $m_i(\mathcal{A})$, on peut fusionner tous les états de \mathcal{A} en un seul état absorbant Δ . Autrement dit, dès qu'on atteint un état de \mathcal{A} , on ne bouge plus.

Tous les états i qui ne sont pas dans \mathcal{A} et desquels \mathcal{A} est accessible deviennent transitoires.

On peut utiliser l'approche précédente avec $T = \mathcal{X} \setminus \mathcal{A}$ et calculer les $s_{i,j}$, puis calculer

$$m_i(\mathcal{A}) = \sum_{j \in T} s_{i,j}.$$

Si on est certain d'aller à \mathcal{A} au premier coup (cas dégénéré), alors la somme vaut $s_{i,i} = 1$.

Exemple: application au problème du collectionneur

Il y a k types d'items, chacun ayant la probabilité $1/k$ pour chaque tirage et indépendamment des autres tirages. Soit N le nombre de tirages requis pour avoir au moins un item de chaque type.

On peut représenter ceci par une chaîne de Markov où X_n est le **nombre de types d'items** que l'on a après n tirages. On a $X_0 = 0$. Si $X_n = i$ (on a i des k types), alors $X_{n+1} = i$ (pas de nouveau type) avec probabilité i/k et $X_{n+1} = i + 1$ (nouveau type) avec probabilité $1 - i/k$.

On a $N = \min\{n : X_n = k\}$.

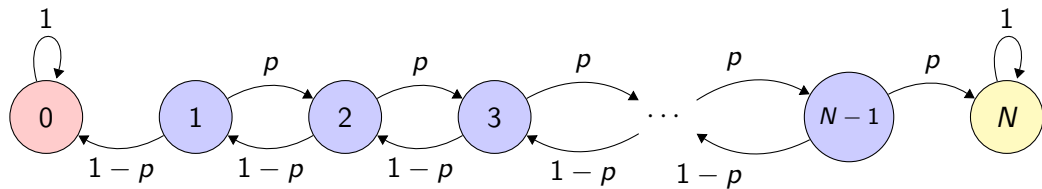
L'état k est récurrent (absorbant) et les états dans $T = \{0, 1, \dots, k - 1\}$ sont transitoires. Pour $0 < i < k$ les étapes passées dans l'état i sont nécessairement successives. On a

$$\mathbb{E}[N] = 1 + s_{1,1} + s_{1,2} + \dots + s_{1,k-1}.$$

On peut obtenir ces valeurs en calculant la matrice \mathbf{S} pour cette chaîne.

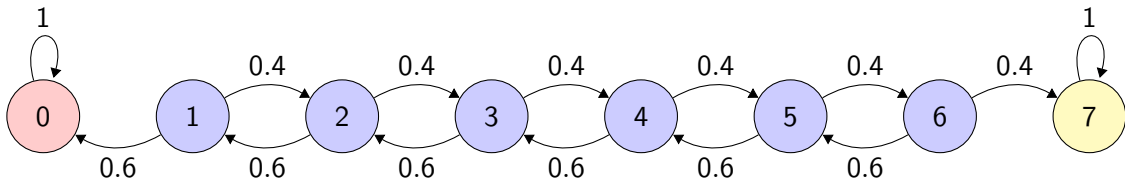
Cela donne le même $\mathbb{E}[N]$ que dans le chapitre précédent (somme de v.a. géométriques).

Exemple: problème de ruine d'un joueur



Les états transitoires sont $T = \{1, 2, \dots, N-1\}$. On a

$$P_T = \begin{pmatrix} 0 & p & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1-p & 0 & p & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 & p & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1-p & 0 \end{pmatrix}.$$



Par exemple, si $p = 0.4$ et $N = 7$, \mathbf{P}_T et \mathbf{S} sont données dans Ross, pages 232–233.

On a par exemple $s_{3,5} = 0.9228$ et $s_{3,2} = 2.3677$. Interpréter.

La probabilité d'atteindre une fortune de 1 avant 7, quand on part de 3 est $f_{3,1} = 0.8797$.
C'est la même probabilité que d'atteindre 0 avant 6 quand on part de 2.

Cela correspond à $1 - P_i$ pour $i = 2$ et $N = 6$:

$$1 - P_i = 1 - \frac{1 - (q/p)^i}{1 - (q/p)^N} = 1 - \frac{1 - (3/2)^2}{1 - (3/2)^6} = 0.8797.$$

Quel est le nombre espéré d'étapes passées dans T avant d'en sortir?

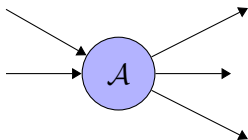
Équations d'équilibre

On considère une chaîne de Markov irréductible récurrente positive, avec probabilités d'état stationnaire $\pi_i > 0$ pour $i \in \mathcal{X}$. Si $\mathcal{A} \subset \mathcal{X}$ est un sous-ensemble d'états non vide quelconque, la proportion des transitions entrant dans \mathcal{A} doit être la même que la proportion des transitions sortant de \mathcal{A} :

$$\sum_{i \in \mathcal{A}^c} \sum_{j \in \mathcal{A}} \pi_i P_{i,j} = \sum_{j \in \mathcal{A}} \sum_{i \in \mathcal{A}^c} \pi_j P_{j,i}.$$

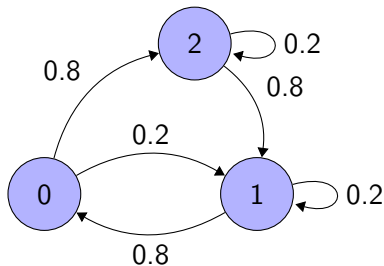
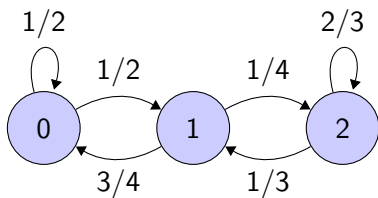
En particulier, si $\mathcal{A} = \{j\}$, on a

$$\sum_{i \neq j} \pi_i P_{i,j} = \sum_{i \neq j} \pi_j P_{j,i}.$$



Par contre, si on considère uniquement les transitions entre deux états i et j , la fréquence n'est pas nécessairement la même dans les deux directions.

Ici, elle est la même dans la figure de gauche pour toute paire (i, j) , mais pas à droite, car par exemple on va souvent de 0 à 2, mais jamais de 2 à 0.



Chaîne réversible

Definition: Si un vecteur $\pi = (\pi_0, \pi_1, \pi_2, \dots) > 0$ satisfait $\sum_i \pi_i = 1$ et $\pi_i P_{i,j} = \pi_j P_{j,i}$ pour toute paire d'états (i, j) , on dit que la chaîne est réversible et que le vecteur π est réversible pour cette chaîne.

Certains appellent ces équations les équations d'équilibre détaillées.

Quand une chaîne est réversible, cela implique que pour toute paire d'états (i, j) , la fréquence des transitions de i à j est la même que de j à i .

Théorème. Si π est réversible pour une chaîne, alors π est nécessairement le vecteur des probabilités d'état stationnaire pour cette chaîne.

Preuve. On a $\pi_i = \pi_i \sum_{j \in \mathcal{X}} P_{i,j} = \sum_{j \in \mathcal{X}} \pi_i P_{i,j} = \sum_{j \in \mathcal{X}} \pi_j P_{j,i}$, donc $\pi = \pi \mathbf{P}$. \square

Évolution à reculons

Pour une chaîne **irréductible récurrente positive**, la **trajectoire inverse** (qui va à reculons dans le temps), disons $X_n, X_{n-1}, X_{n-2}, \dots$, constitue aussi une chaîne de Markov. En effet,

$$\mathbb{P}[X_m = j \mid X_{m+1} = i, X_{m+2}, X_{m+3}, \dots] = \mathbb{P}[X_m = j \mid X_{m+1} = i],$$

car conditionnellement à $X_{m+1} = i$, X_m et $(X_{m+2}, X_{m+3}, \dots)$ sont indépendants.

Les probabilités de transition de la chaîne inverse à l'état stationnaire sont:

$$\begin{aligned} Q_{i,j} &= \mathbb{P}[X_m = j \mid X_{m+1} = i] = \frac{\mathbb{P}[X_m = j, X_{m+1} = i]}{\mathbb{P}[X_{m+1} = i]} \\ &= \frac{\mathbb{P}[X_{m+1} = i \mid X_m = j] \mathbb{P}[X_m = j]}{\mathbb{P}[X_{m+1} = i]} = \frac{\pi_j}{\pi_i} P_{j,i}. \end{aligned}$$

En utilisant ces probabilités $Q_{i,j}$, on peut **faire évoluer la chaîne à reculons dans le temps**.

On voit que la **chaîne est réversible** si et seulement si $Q_{i,j} = P_{i,j}$ pour toute paire (i, j) , i.e., si la chaîne qui va à reculons a les mêmes probabilités de transition que la chaîne qui avance!

Considérons une portion finie de la trajectoire pour la chaîne $\{X_n, n \geq 0\}$, disons $(X_1, \dots, X_k) = (i_1, \dots, i_k)$. À l'état stationnaire, on a $\mathbb{P}[X_n = i] = \pi_i$ pour tout i et tout n , et la probabilité de cette trajectoire est

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[(X_1, \dots, X_k) = (i_1, \dots, i_k)] &= \mathbb{P}(X_1 = i_1) \cdot \mathbb{P}(X_2 = i_2 \mid X_1 = i_1) \cdots \mathbb{P}(X_k = i_k \mid X_{k-1} = i_{k-1}) \\ &= \pi_{i_1} P_{i_1, i_2} \cdots P_{i_{k-1}, i_k}. \end{aligned}$$

La probabilité de la trajectoire inverse pour la chaîne qui évolue à reculons selon les probabilités $Q_{i,j}$ est la même, même si la chaîne n'est pas réversible:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[(X_k, \dots, X_1) = (i_k, \dots, i_1)] &= \pi_{i_k} Q_{i_k, i_{k-1}} \cdots Q_{i_2, i_1} \\ &= \pi_{i_k} P_{i_{k-1}, i_k} \frac{\pi_{i_{k-1}}}{\pi_{i_k}} \cdots P_{i_1, i_2} \frac{\pi_{i_1}}{\pi_{i_2}} \\ &= \pi_{i_1} P_{i_1, i_2} \cdots P_{i_{k-1}, i_k}. \end{aligned}$$

Probabilités d'état stationnaire via la chaîne inverse

Le théorème suivant est parfois utile pour trouver les probabilités d'état stationnaire dans le cas où il est plus facile de travailler avec la chaîne inverse, même dans le cas où la chaîne n'est pas réversible.

Théorème. Si un vecteur $\pi = (\pi_0, \pi_1, \pi_2, \dots) > 0$ satisfait $\sum_i \pi_i = 1$ et $\pi_i P_{i,j} = \pi_j Q_{j,i}$ pour toute paire d'états (i, j) , où les $Q_{i,j}$ satisfont $0 \leq Q_{i,j} \leq 1$ et $\sum_{j \in \mathcal{X}} Q_{i,j} = 1$ pour tout i , alors les $Q_{i,j}$ sont nécessairement les probabilités de transition de la chaîne inverse et les π_i sont les probabilités d'état stationnaire de la chaîne et aussi de sa version inversée.

Preuve. Exercice.

Théorème. Une chaîne pour laquelle $P_{i,j} = 0$ ssi $P_{j,i} = 0$ est réversible si et seulement si pour tout chemin (cycle) qui part d'un état i et revient à i , disons (i, i_1, \dots, i_k, i) , la probabilité du chemin inverse en utilisant les probabilités $P_{i,j}$ est la même:

$$P_{i,i_1} P_{i_1,i_2} \cdots P_{i_k,i} = P_{i,i_k} P_{i_k,i_{k-1}} \cdots P_{i_1,i}.$$

Preuve. Si la chaîne est réversible, on a $P_{j,i} = P_{i,j} \pi_i / \pi_j$ et donc

$$P_{i,i_1} P_{i_1,i_2} \cdots P_{i_k,i} = P_{i_1,i} \frac{\pi_{i_1}}{\pi_i} P_{i_2,i_1} \frac{\pi_{i_2}}{\pi_{i_1}} \cdots P_{i,i_k} \frac{\pi_i}{\pi_{i_k}} = P_{i,i_k} P_{i_k,i_{k-1}} \cdots P_{i_1,i}.$$

Inversement, si cette équation tient, alors pour toute paire (i, j) , on a

$$P_{i,i_1} P_{i_1,i_2} \cdots P_{i_k,j} P_{j,i} = P_{i,j} P_{j,i_k} P_{i_k,i_{k-1}} \cdots P_{i_1,i}.$$

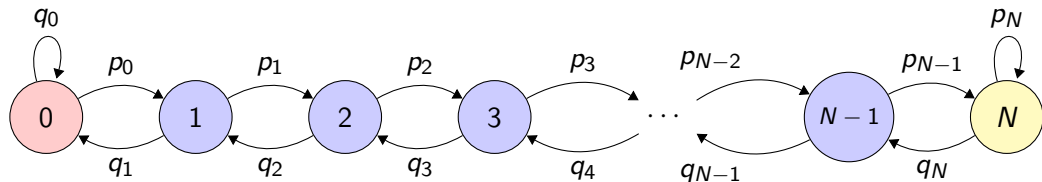
En sommant sur toutes les trajectoires (i_1, \dots, i_k) possibles, on obtient

$$P_{i,j}^{(k+1)} P_{j,i} = P_{i,j} P_{j,i}^{(k+1)}.$$

En prenant $k \rightarrow \infty$ (avec $k+1$ multiple de la période si la chaîne est périodique), on a

$$\pi_j P_{j,i} = \pi_i P_{i,j}. \quad \square$$

Exemple: marche aléatoire sur $\{0, 1, \dots, N\}$



On suppose que $q_0 < 1$, $p_N < 1$, et $0 < p_i < 1$ pour $i = 1, \dots, N - 1$. La chaîne est alors **irréductible**.

Pour chaque paire d'états adjacents $(i, j) = (i, i + 1)$, on a

$$\pi_i P_{i,j} = \pi_i p_i = \pi_{i+1} q_{i+1} = \pi_j P_{j,i},$$

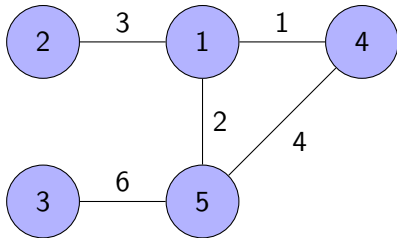
donc la chaîne est **réversible**.

Exemples.

Pour les deux chaînes de la page 64, écrire \mathbf{P} , puis calculer π et la matrice \mathbf{Q} .

Marche aléatoire sur un graphe

On a un graphe $\mathcal{G} = (\mathcal{N}, \mathcal{A})$ dont l'ensemble des sommets est \mathcal{N} et l'ensemble \mathcal{A} des arêtes est choisi de manière à ce que le graphe soit connexe (tous les sommets communiquent). Les sommets sont les états de la chaîne. Chaque arête (i, j) a un poids $w_{i,j} = w_{j,i} > 0$. Si l'arête (i, j) n'existe pas, on pose $w_{i,j} = w_{j,i} = 0$. **Exemple:**



Ici on va trouver $c = 32$ et $(\pi_1, \dots, \pi_5) = (6/32, 3/32, 6/32, 5/32, 12/32)$.

Quand on est dans l'état i (au sommet i), on va à j avec probabilité

$$P_{i,j} = \frac{w_{i,j}}{\sum_{k \in \mathcal{X}} w_{i,k}}.$$

Cherchons des π_i qui satisfont les équations d'équilibre détaillées $\pi_i P_{i,j} = \pi_j P_{j,i}$. On veut

$$\frac{\pi_i w_{i,j}}{\sum_{k \in \mathcal{X}} w_{i,k}} = \pi_i P_{i,j} = \pi_j P_{j,i} = \frac{\pi_j w_{j,i}}{\sum_{k \in \mathcal{X}} w_{j,k}}.$$

Mais puisque $w_{i,j} = w_{j,i}$, on en déduit que

$$\frac{\pi_i}{\sum_{k \in \mathcal{X}} w_{i,k}} = \frac{\pi_j}{\sum_{k \in \mathcal{X}} w_{j,k}} = c$$

pour tout j , pour une constante $c > 0$. Cela donne

$$\pi_i = c \sum_{k \in \mathcal{X}} w_{i,k} \quad (\text{proportionnel à la somme des poids des arêtes adjacentes})$$

et on trouve c en observant que $1 = \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i = c \sum_{i \in \mathcal{X}} \sum_{k \in \mathcal{X}} w_{i,k}$.

Le vecteur π résultant est réversible pour cette chaîne et donc **la chaîne est réversible**.

Cas particulier: si tous les $w_{i,j}$ valent 1, π_i est proportionnel au degré du sommet i .

Exemple: un processus de renouvellement

Un système (par exemple une ampoule électrique) a une durée de vie aléatoire L (en jours) pour laquelle $p_i = \mathbb{P}[L = i]$ pour $i = 1, 2, 3, \dots$. Si le système meurt au jour $n - 1$, on le remplace par un nouveau, qui aura l'âge 1 au jour n .

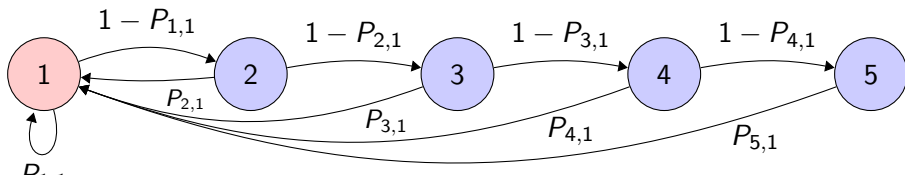
On définit une chaîne dont l'état X_n est l'âge du système au jour n .

Si $X_n = i$, la probabilité $P_{i,1}$ que le système meure ce jour là et soit remplacé par un neuf pour le lendemain est

$$P_{i,1} = \mathbb{P}[X_{n+1} = 1 \mid X_n = i] = \mathbb{P}[L = i \mid L \geq i] = \frac{p_i}{\mathbb{P}[L \geq i]}.$$

On a aussi $P_{i,i+1} = 1 - P_{i,1}$, la probabilité qu'il survive un jour de plus.

La chaîne qui évolue à reculons a les probabilités de transition $Q_{i,i-1} = 1$ pour $i > 1$ et $Q_{1,j} = p_j$ pour tout $j \geq 1$. On va l'utiliser pour trouver les π_i .



Les probabilités d'état stationnaire π_i sont les solutions (uniques) du système d'équations

$$\pi_i P_{i,j} = \pi_j Q_{j,i}.$$

Pour résoudre ce système, écrivons π_i en fonction de π_1 . En prenant $j = 1$ ci-haut, on a

$$\pi_i = \frac{\pi_1 Q_{1,i}}{P_{i,1}} = \pi_1 \frac{p_i}{p_i / \mathbb{P}[L \geq i]} = \pi_1 \mathbb{P}[L \geq i].$$

En sommant sur tous les i ,

$$1 = \sum_{i=1}^{\infty} \pi_i = \pi_1 \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}[L \geq i] = \pi_1 \mathbb{E}[L].$$

On doit donc avoir $\pi_i = \mathbb{P}[L \geq i] / \mathbb{E}[L]$.

On vérifie facilement que ces π_i avec les $Q_{i,j}$ proposés satisfont les équations d'équilibre détaillées: $\pi_i P_{i,j} = \pi_j Q_{j,i} = \pi_j P_{j,i}$.

Markov Chain Monte Carlo (MCMC)

La notion de réversibilité est utile pour savoir comment construire une chaîne artificielle dont la loi d'équilibre est un vecteur π fixé à l'avance, possiblement de dimension infinie, quand on ne connaît pas a priori de chaîne qui a ce π . En fait, il suffit de **connaître π à un facteur multiplicatif près**. L'idée générale est de construire une chaîne réversible pour π .

La méthode s'appelle **méthode Monte Carlo par chaîne de Markov**, ou en anglais "Markov Chain Monte Carlo (MCMC)."

On veut construire une chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$ irréductible et récurrente positive et dont la loi d'équilibre est π . Comment?

Souvent, on ne connaît même pas π , mais on connaît seulement un vecteur $\mathbf{h} = (h_0, h_1, h_2, \dots)$ tel que $\mathbf{h} = K\pi$ pour une **constante de normalisation K** que l'on ne connaît peut-être pas. On verra des exemples où cela se produit.

On sait que $K = \sum_{i \in \mathcal{X}} h_i$, car on doit avoir $\sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i = 1$, mais souvent cette somme est trop difficile à calculer.

Algorithme de Metropolis-Hastings (MH), cas discret

On choisit d'abord une matrice \mathbf{Q} dont les éléments $q_{i,j}$ sont les probabilités des **transitions proposées**. Cette matrice doit donner lieu à une chaîne irréductible. On utilise ces $q_{i,j}$ comme suit, pour construire une chaîne $\{X_n, n \geq 0\}$ réversible par rapport à π .

Quand $X_n = i$, on choisit un prochain **état proposé** Y selon les probabilités $\mathbb{P}[Y = j \mid X_n = i] = q_{i,j}$ pour tout $j \in \mathcal{X}$. Ensuite, on calcule le **quotient de Hasting** pour cette paire (i, j) :

$$r_{i,j} = \frac{h_j q_{j,i}}{h_i q_{i,j}} = \frac{\pi_j q_{j,i}}{\pi_i q_{i,j}},$$

et on accepte la transition proposée avec probabilité $a_{i,j} = \min(1, r_{i,j})$.

Si on accepte la transition, on va à j ($X_{n+1} = j$), sinon on reste à i ($X_{n+1} = i$).

Ces $a_{i,j}$ sont choisis pour rendre la fréquence des transitions $i \rightarrow j$ égale à celle des transitions $j \rightarrow i$, pour que la chaîne soit réversible.

On verra différentes façons de **choisir** \mathbf{Q} : échantillonnage indépendant, de Gibbs, etc.

Le théorème de Metropolis-Hastings, cas discret.

La chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$ construite par l'algorithme de MH est réversible par rapport au vecteur de probabilités π . Par conséquent, elle a π comme loi d'équilibre (probabilités d'état stationnaire).

Preuve. Il suffit de montrer que $\pi_i p_{i,j} = \pi_j p_{j,i}$ pour toute paire (i, j) .

Pour $j = i$, c'est trivial, car cela donne $\pi_i p_{i,i} = \pi_i p_{i,i}$.

On peut donc supposer pour la suite que $j \neq i$. On a $p_{i,j} = q_{i,j} a_{i,j}$.

Si $a_{i,j} = r_{i,j} < 1$, alors $r_{j,i} = 1/r_{i,j} > 1$, donc $a_{j,i} = 1$ et

$$\pi_i p_{i,j} = \pi_i q_{i,j} a_{i,j} = \pi_i q_{i,j} r_{i,j} = \pi_i q_{i,j} \frac{\pi_j q_{j,i}}{\pi_i q_{i,j}} = \pi_j q_{j,i} = \pi_j q_{j,i} a_{j,i} = \pi_j p_{j,i}.$$

Si $r_{i,j} > 1$, il suffit d'échanger i et j dans l'argument. \square

Si $0 < r_{i,j} < 1$ pour au moins une paire d'états (i, j) pour lesquels $\pi_i > 0$ et $\pi_j > 0$, alors la chaîne est apériodique.

D'où vient ce choix des $a_{i,j}$?

Pour des $q_{i,j}$ donnés, on veut avoir

$$\begin{aligned}\pi_i p_{i,j} &= \pi_j p_{j,i} \\ \pi_i q_{i,j} a_{i,j} &= \pi_j q_{j,i} a_{j,i}\end{aligned}$$

Il faut donc que

$$\frac{a_{i,j}}{a_{j,i}} = r_{i,j} := \frac{\pi_j q_{j,i}}{\pi_i q_{i,j}},$$

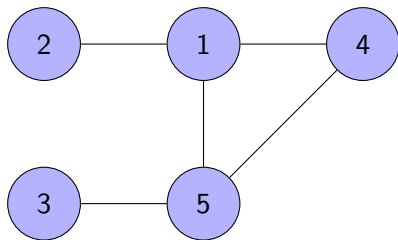
avec $0 \leq a_{i,j} \leq 1$ pour tous i, j .

Idéalement, on veut aussi les $a_{i,j}$ les plus grands possibles, pour que la chaîne bouge plus vite (gaspiller moins de tentatives de transitions).

On va donc prendre le plus grand égal à 1, soit $a_{j,i} = 1$ si $r_{i,j} \leq 1$ et $a_{i,j} = 1$ si $r_{i,j} > 1$.

Cela donne l'algorithme de MH.

Exemple: Loi uniforme sur les sommets d'un graphe



Supposons qu'à chaque sommet i , on a $q_{i,j} = 1/n(i)$ où $n(i)$ est le nombre de voisins: on choisit un sommet adjacent au hasard selon la loi uniforme. Supposons que l'on vise une loi stationnaire π uniforme sur tous les sommets: $h_i = 1/K$ pour tout i . Il suffit de prendre

$$r_{i,j} = \frac{h_j q_{j,i}}{h_i q_{i,j}} = \frac{\pi_j q_{j,i}}{\pi_i q_{i,j}} = \frac{n(i)}{n(j)}; \quad a_{i,j} = 1 \quad \text{si} \quad \frac{n(i)}{n(j)} \geq 1, \quad a_{i,j} = \frac{n(i)}{n(j)} \quad \text{sinon.}$$

On peut aussi choisir les h_i différemment! Les $r_{i,j}$ seront différents.

Exemple: Loi stationnaire uniforme sur un ensemble fini

Supposons que l'on veut construire un chaîne dont la loi stationnaire π est uniforme sur un grand ensemble fini \mathcal{N} . On ne sait pas comment tirer au hasard des éléments de \mathcal{N} selon la loi uniforme, et on ne connaît pas (en général) la cardinalité de \mathcal{N} .

On peut définir un graphe $\mathcal{G} = (\mathcal{N}, \mathcal{A})$ dont l'ensemble des sommets est \mathcal{N} et l'ensemble \mathcal{A} des arêtes est choisi de manière à ce que \mathcal{G} soit connexe (tous les sommets communiquent).

Les sommets sont les états de la chaîne. Pour chaque sommet i , soit $n(i) > 0$ le nombre de sommets adjacents à i . Si on est à i , le prochain sommet proposé est j avec probabilité $q_{i,j} = 1/n(i)$ pour tout j adjacent à i (loi uniforme).

Posons $h_i = 1$ pour tout $i \in \mathcal{X}$, ce qui donne $r_{i,j} = n(i)/n(j)$, et qui fait que les π_i seront tous égaux à $1/|\mathcal{N}|$. Quand la transition proposée est $i \rightarrow j$, si $n(i) \geq n(j)$ on y va toujours, sinon on y va avec probabilité $n(i)/n(j)$. Cela assure la réversibilité.

La loi d'équilibre de la chaîne est alors uniforme sur \mathcal{N} . Si la chaîne est aussi apériodique (facile à obtenir), la loi de X_n converge vers la loi uniforme sur \mathcal{N} quand $n \rightarrow \infty$.

Ceci a de nombreuses d'applications!

Exemple: Une permutation au hasard parmi celles qui satisfont une propriété

On considère l'ensemble \mathcal{P} des $k!$ permutations $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ des entiers $\{1, 2, \dots, k\}$, et un sous-ensemble $\mathcal{X} \subset \mathcal{P}$ de permutations qui satisfont **une certaine condition**.

Par exemple, \mathcal{X} pourrait être l'ensemble des permutations σ pour lesquelles $\sum_{i=1}^k i\sigma_i > c$ pour une certaine constante c . Ce sont les permutations pour lesquelles les plus petits éléments se retrouvent plutôt au début et les plus grands plutôt vers la fin.

On veut construire une chaîne dont la loi stationnaire est **uniforme sur l'ensemble \mathcal{X}** des permutations qui satisfont la condition. L'idée est de construire un **graphe** dont les sommets sont les permutations dans \mathcal{X} et il y a une arête entre deux permutations (elles sont **adjacentes**) ssi on peut passer de l'une à l'autre par une **opération simple**.

Exemple de définition d'opération simple: un **échange de deux éléments arbitraires**.

Dans ce cas, $(1, 2, 3, 4)$ serait adjacent à $(1, 4, 3, 2)$, mais pas à $(2, 3, 1, 4)$, par exemple.

Ou encore, un **échange de deux éléments successifs**. Dans ce cas, $(1, 2, 3, 4)$ serait adjacent à $(1, 3, 2, 4)$, mais pas à $(1, 4, 3, 2)$.

Le choix de la définition d'opération admissible définit l'ensemble des arêtes du graphe. Une fois cette définition choisie, on applique la méthode de la diapo précédente.

Si l'état courant est $i = \sigma$, l'état proposé sera $j = \sigma'$ avec probabilité $q_{i,j} = 1/|n(i)|$ pour chacune des $n(i)$ permutations $j = \sigma' \in \mathcal{X}$ adjacentes à i .

Pour chaque permutation $i = \sigma$, $n(i)$ est le nombre de paires que l'on peut échanger tout en restant dans \mathcal{X} . On utilise ces $n(i)$ pour calculer les $r_{i,j} = n(i)/n(j)$ et les $a_{i,j} = \min(n(i)/n(j), 1)$ dans l'algorithme. La loi stationnaire sera alors uniforme sur \mathcal{X} .

Si on peut échanger des paires arbitraires, il y a en tout $k(k-1)/2$ possibilités.

Si on ne peut échanger que deux éléments successifs, il y a $k-1$ possibilités.

Dans chaque cas, $n(i)$ est le nombre de ces possibilités qui nous font rester dans \mathcal{X} .

Pour tirer au hasard uniformément une permutation $j = \sigma'$ uniformément parmi les $n(i)$ permutations de \mathcal{X} adjacentes à $i = \sigma$, une manière simple est la suivante. On tire au hasard une paire à échanger (parmi celles qui sont admissibles), on échange les deux éléments à ces deux positions, puis on vérifie si la permutation modifiée est dans \mathcal{X} . Si oui, c'est le nouvel état proposé, sinon on recommence en tirant deux nouvelles positions à échanger.

Pour décider si on accepte le changement proposé, il faut aussi calculer $n(i)$ et $n(j)$.

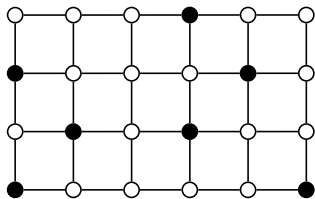
Ceci peut demander une quantité de travail non négligeable.

Exemple: Le modèle "hardcore"

On a un graphe avec sommets et arêtes fixés, pour lequel chaque sommet peut être mis en noir ou blanc (1 ou 0), mais sans que deux sommets adjacents (reliés par une arête) soient tous les deux noirs. Une **configuration** donne une valeur 0 ou 1 à chaque sommet, et elle est **réalisable** si elle satisfait la condition qu'il n'y a pas deux sommets adjacents qui sont noirs.

On veut tirer au hasard une **configuration réalisable, selon la loi uniforme**.

On pourrait par exemple vouloir estimer le nombre espéré de sommets noirs.



Comment peut-on faire cela?

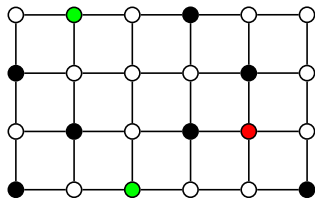
Directement, ce n'est pas facile. En général, on ne sait même pas combien il y a de configurations réalisables, et leur nombre est souvent astronomique!

Ex.: modélise le comportement d'un gaz dont les particules occupent un espace important.

Idée: On peut construire (ou imaginer) un “méta-graphe” dont les sommets sont les configurations réalisables et il y a une arête entre deux configurations ssi on peut passer de l'une à l'autre en changeant l'état d'un seul sommet. On applique ensuite MCMC avec une chaîne dont l'espace d'états est l'ensemble des configurations réalisables, i.e., les sommets de ce méta-graphe, et les transitions admissibles correspondent les arêtes du méta-graphe.

Pour choisir une transition admissible, on peut choisir au hasard un sommet du graphe initial, puis changer sa valeur (0 ou 1) avec probabilité $1/2$ si cela est admissible, sinon on reste dans le même état. À chaque étape, la valeur d'un seul sommet peut changer.

Si la chaîne est irréductible, on est assuré que la loi stationnaire de cette chaîne est la loi uniforme sur l'ensemble des configurations réalisables.



On peut vérifier directement ici que la chaîne obtenue est réversible pour π .

En effet, si i et j sont deux configurations réalisables, on doit avoir $\pi_i = \pi_j = 1/K$ où K est le nombre de configurations réalisables. Si la transition $i \rightarrow j$ est possible, c'est qu'elles ne diffèrent que par un sommet v , et que tous les sommets adjacents à v sont à 0. Dans ce cas, la probabilité $P_{i,j}$ de passer à j quand on est à i est la probabilité de choisir v , puis de changer sa valeur. C'est $(1/2)(1/d)$ où d est le nombre de sommets du graphe de base. La probabilité $P_{j,i}$ est la même. On a donc $\pi_i P_{i,j} = 1/(2dK) = \pi_j P_{j,i}$.

De plus, on a toujours $r_{i,j} = r_{j,i} = 1$.

Une variante: coloration de graphe.

On choisit $q \geq 2$ couleurs et on veut choisir au hasard un q -coloriage du graphe, c'est à dire une façon de donner une couleur à chaque sommet de manière à ce qu'aucune paire de sommets adjacents soient de la même couleur, selon la loi uniforme sur les q -coloriages réalisables.

MCMC: à chaque étape, on choisit un sommet au hasard, puis on choisit au hasard une couleur parmi celles qui ne sont pas prises par les voisins.

Ici, on aura aussi toujours $r_{i,j} = r_{j,i} = 1$.

Échantillonnage indépendant

Une façon simple (dégénérée) de choisir \mathbf{Q} est de prendre une matrice dont toutes les lignes sont identiques, disons $q_{i,j} = g_j$ pour tout i . Les probabilités $q_{i,j}$ des transitions proposées ne dépendent alors pas de i . Le nouvel état proposé suit toujours la même loi de probabilité, peu importe l'état i dans lequel on se trouve. On appelle cela **l'échantillonnage indépendant**. Si $g_j > 0$ pour tous les états j tels que $\pi_j > 0$, alors cette méthode satisfait les conditions du théorème de MH.

Bien sûr, le choix des g_j peut avoir beaucoup d'impact sur la performance de l'algorithme.

Par exemple, si l'objectif est de tirer un échantillon (approximativement) selon π , alors on peut montrer que les g_j optimaux sont les π_j , donc on voudra que les g_j soient à peu près proportionnels aux π_j . Mais si on sait faire cela, pas besoin de MCMC!

Dans le cas où l'objectif est plutôt d'estimer une espérance par rapport aux probabilités π_i , disons $\sum_{i \in \mathcal{X}} c_j \pi_i$, alors on peut prouver via la théorie de l'échantillonnage stratégique ("importance sampling") que les g_j optimaux sont proportionnels à $c_j \pi_j$.

L'échantillonnage de Gibbs

Il s'agit d'une manière très populaire de construire Q pour MCMC dans le cas où l'état de la chaîne est un vecteur à d dimensions: les éléments de \mathcal{X} ont la forme $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$.

L'objectif est de construire une chaîne dont la loi stationnaire est π sur l'espace d'états \mathcal{X} , pour un π qui a les propriétés suivantes.

On ne sait pas comment échantillonner \mathbf{X} directement selon π , mais on suppose que si on fixe $d - 1$ coordonnées de \mathbf{X} , disons toutes les coordonnées sauf X_ℓ , et on définit $\mathbf{X}_{(-\ell)}$ comme le vecteur \mathbf{X} duquel on a effacé la coordonnée ℓ , alors on sait comment (ré-)échantillonner X_ℓ selon la loi π conditionnelle à $\mathbf{X}_{(-\ell)}$.

Quand on est dans l'état \mathbf{X} , le prochain état proposé est obtenu comme suit.

Échantillonnage de Gibbs par balayage systématique.

Pour $\ell = 1, \dots, d$, faire:

effacer et ré-échantillonner X_ℓ selon sa loi conditionnelle à $\mathbf{X}_{(-\ell)}$,
et remplacer l'ancien X_ℓ par le nouveau.

Soit \mathbf{Y} le nouvel état ainsi proposé.

On va voir que ce \mathbf{Y} est toujours accepté!

Variante: échantillonnage par balayage aléatoire.

Au lieu de ré-échantillonner les coordonnées X_ℓ toujours dans le même ordre, de 1 à d , on peut les ré-échantillonner dans un ordre aléatoire. On tire d'abord au hasard une permutation de $\{1, \dots, d\}$, puis on ré-échantillonne les X_ℓ dans l'ordre correspondant.

Variante: une seule coordonnée à la fois.

Selon cette variante, on choisit **une seule coordonnée** ℓ au hasard (uniformément) et on ré-échantillonne seulement cette coordonnée X_ℓ , à chaque étape de l'algorithme de MH. Dans ce cas, \mathbf{Y} est \mathbf{X} avec cette seule coordonnée modifiée.

On va montrer que pour toutes ces variantes, l'état proposé \mathbf{Y} est toujours accepté!

Il est essentiel pour la convergence de l'algorithme vers la bonne loi de probabilité π que toutes les coordonnées soient échantillonnées infiniment souvent, à long terme. En particulier, si l'une des coordonnées n'est jamais ré-échantillonnée, et si plus d'une seule valeur de cette coordonnée a une probabilité positive sous π , alors on ne pourra jamais avoir la bonne loi stationnaire.

Théorème. Dans l'échantillonnage de Gibbs, le nouvel état \mathbf{Y} proposé est toujours accepté.

Preuve. Considérons d'abord le cas (plus simple) où on ré-échantillonne une seule coordonnée X_ℓ conditionnellement à $\mathbf{X}_{(-\ell)} = \mathbf{z}$. Notons $i = (\mathbf{z}, x_\ell)$ la réalisation de $(\mathbf{X}_{(-\ell)}, X_\ell)$, x'_ℓ la nouvelle valeur proposée pour X_ℓ , et $j = (\mathbf{z}, x'_\ell)$ la réalisation de $(\mathbf{X}_{(-\ell)}, X'_\ell)$. (Ici on fait un abus de notation en mettant la coordonnée ℓ à la fin.)

Soit $g_\ell(\cdot)$ la loi marginale (inconnue) de $\mathbf{X}_{(-\ell)}$ sous π , $g_\ell(\mathbf{z}) = \mathbb{P}[\mathbf{X}_{(-\ell)} = \mathbf{z}]$, et $q_\ell(x | \mathbf{z}) = \mathbb{P}[X_\ell = x | \mathbf{X}_{(-\ell)} = \mathbf{z}]$.

On a $\pi_i = g_\ell(\mathbf{z})q_\ell(x_\ell | \mathbf{z})$ et $\pi_j = g_\ell(\mathbf{z})q_\ell(x'_\ell | \mathbf{z})$, puis $q_{i,j} = q_\ell(x'_\ell | \mathbf{z})$ et $q_{j,i} = q_\ell(x_\ell | \mathbf{z})$. Cela donne

$$r_{i,j} = \frac{h_j q_{j,i}}{h_i q_{i,j}} = \frac{\pi_j q_{j,i}}{\pi_i q_{i,j}} = \frac{g_\ell(\mathbf{z})q_\ell(x'_\ell | \mathbf{z})q_\ell(x_\ell | \mathbf{z})}{g_\ell(\mathbf{z})q_\ell(x_\ell | \mathbf{z})q_\ell(x'_\ell | \mathbf{z})} = 1. \quad \square$$

Exemple: Deux binomiales dont la somme dépasse c

On veut une chaîne dont l'état $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ est un vecteur de deux v.a. binomiales indépendantes, $X_\ell \sim \text{Binomiale}(n_\ell, p_\ell)$ pour $\ell = 1, 2$, mais dont la loi stationnaire π est la loi conditionnelle à $X_1 + X_2 \geq c$, pour une constante $c < n_1 + n_2$.

Note: Même si $n_1 < c$, si on génère d'abord $X_1 \sim \text{Binomiale}(n_1, p_1)$, puis ensuite X_2 selon sa loi conditionnelle $X_2 \geq c - X_1$, on n'a pas la loi π pour (X_1, X_2) .

Gibbs: On part d'un état quelconque $\mathbf{X}_0 \in \mathcal{X}$, par exemple $\mathbf{X}_0 = (n_1, n_2)$, ou encore on génère \mathbf{X}_0 comme dans la note précédente.

Puis à chaque étape on ré-échantillonne d'abord $X_1 \sim \text{Binomiale}(n_1, p_1)$ conditionnellement à $X_1 \geq c - X_2$, et ensuite $X_2 \sim \text{Binomiale}(n_2, p_2)$ conditionnellement à $X_2 \geq c - X_1$.

Autrement dit, on pose $\mathbb{P}[X_1 = x_1] = 0$ pour $x_1 < c - X_2$, et sinon

$$\mathbb{P}[X_1 = x_1 \mid X_2] = p_{1,x_1} \left(\sum_{i=c-X_2}^{n_1} p_{1,i} \right)^{-1} \quad \text{où } p_{1,i} = \binom{n_1}{i} p_1^i (1-p_1)^{n_1-i}.$$

C'est le prochain état. Quelle est la loi stationnaire de $\mathbf{X}_n = (X_{1,n}, X_{2,n})$?

Un vecteur de binomiales dont la somme dépasse c

On veut une chaîne dont l'état $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$ est un vecteur de d v.a. binomiales indépendantes, $X_\ell \sim \text{Binomiale}(n_\ell, p_\ell)$, mais dont la loi stationnaire π est la loi conditionnelle à $\mathbf{X} \in \mathcal{X} = \{\mathbf{X} : X_1 + \dots + X_d \geq c\}$, pour une constante $c < n_1 + \dots + n_d$.

Gibbs: On part d'un état quelconque $\mathbf{X}_0 \in \mathcal{X}$, puis à chaque étape on ré-échantillonne une coordonnée X_ℓ de \mathbf{X} selon sa loi binomiale conditionnellement à ce que \mathbf{X} demeure dans \mathcal{X} . Si $m_\ell = \max\left(0, c - \sum_{j=1, j \neq \ell}^d X_j\right)$, alors on doit avoir $X_\ell \geq m_\ell$. Donc on va ré-échantillonner X_ℓ selon la loi Binomiale(n_ℓ, p_ℓ) conditionnelle à $X_\ell \geq m_\ell$.

On verra plus tard comment faire cela efficacement.

Modèle de Ising sur un graphe

On a un graphe $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{A})$, où $\mathcal{V} = \{1, \dots, d\}$. Chaque sommet v a deux états possibles: $x_v = -1$ ou $x_v = 1$. Une **configuration du graphe** est un vecteur $i = \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)$ où chaque $x_v \in \{-1, 1\}$. Pour chaque sommet $v \in \mathcal{V}$, soit $\mathcal{N}(v)$ l'ensemble des sommets adjacents à v . Le **Hamiltonien** d'une configuration \mathbf{x} est

$$H(\mathbf{x}) = - \sum_{v=1}^d \sum_{\ell \in \mathcal{N}(v)} x_v x_\ell.$$

C'est une mesure d'énergie du système. On suppose que \mathbf{X} suit une **loi de Boltzmann**:

$$\mathbb{P}[\mathbf{X} = \mathbf{x}] \propto h(\mathbf{x}) = \exp[-\beta H(\mathbf{x})] \quad \text{pour une constante } \beta > 0.$$

Notez que $-H(\mathbf{x})/2$ est le nombre de paires de sommets adjacents (x_v, x_ℓ) qui ont la même valeur ($x_v x_\ell = 1$) moins le nombre qui ont une valeur différente ($x_v x_\ell = -1$).

Cette loi favorise les configurations qui ont davantage de sommets adjacents identiques: plus il y en a, plus grand est $h(\mathbf{x})$. La chaleur fait que le système n'est pas toujours dans une configuration à énergie minimale; sa configuration est aléatoire.

L'objectif est de construire une chaîne qui a cette loi stationnaire.

Généralisations et applications. Ce modèle se généralise en prenant par exemple:

$$H(\mathbf{x}) = - \sum_{v=1}^d \sum_{\ell \in \mathcal{N}(v)} \gamma_{v,\ell} x_v x_\ell - \sum_{v=1}^d \alpha_v x_v$$

où les $\gamma_{v,\ell}$ et les α_v sont des constantes quelconques. La seconde somme peut représenter un effet extérieur, dont la direction dépend du signe des coefficients α_v .

Ce type de modèle a de très nombreuses applications et beaucoup d'histoire.

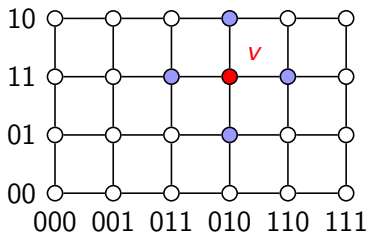
Voir https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model.

Par exemple, le graphe peut représenter un **réseau de neurones**, où chaque neurone est actif (+1) ou inactif (-1). Le probabilité qu'un neurone devienne actif peut dépendre de l'état des neurones avoisinants.

Le modèle fut introduit initialement par Lenz (1920) et Ising (1924) pour représenter le phénomène de **ferromagnétisme** dans une "grille" d'atomes ayant chacun une orientation de "spin" de +1 ou -1, en mécanique statistique. Second terme: champ magnétique externe.

Un graphe en grille (“**lattice graph**”) peut représenter par exemple une image où chaque pixel (sommet du graphe) est noir ou blanc. Chaque sommet a au plus 4 sommets adjacents.

En général, deux pixels adjacents sur une image sont plus souvent identiques que différents. Ainsi la loi de Boltzmann peut servir de loi a priori dans une analyse Bayésienne pour reconstruire une image un peu bruitée.



On peut construire de telles grilles aussi en 3D (par exemple pour les modèles de ferromagnétisme) ou plus.

Dans cet exemple, Gibbs remet en jeu la valeur d'un sommet à la fois. Si on efface x_v , on doit connaître $p \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{P}[X_v = 1 \mid X_{(-v)}]$, pour ré-échantillonner x_v conditionnellement aux valeurs de tous les autres sommets. Pour cela, décomposons $-\beta H(\mathbf{x}) = k(v) + x_v s(v)$ où

$$k(v) = \beta \sum_{w=1, w \neq v}^d \sum_{\ell \in \mathcal{N}(w) \setminus \{v\}} x_w x_\ell \quad s(v) = 2\beta \sum_{\ell \in \mathcal{N}(v)} x_\ell.$$

Ces deux termes $k(v)$ et $s(v)$ ne dépendent pas de x_v . Le terme $s(v)$ est le facteur qui multiplie x_v dans la définition de $-\beta H(\mathbf{x})$. Le terme $k(v)$ n'interagit pas avec x_v .

On veut avoir

$$\begin{aligned} p &= \mathbb{P}[X_v = 1 \mid X_{(-v)}] \propto \exp[k(v) + 1 \cdot s(v)] = \exp[k(v) + s(v)] && \text{et} \\ 1 - p &= \mathbb{P}[X_v = -1 \mid X_{(-v)}] \propto \exp[k(v) - 1 \cdot s(v)] = \exp[k(v) - s(v)]. \end{aligned}$$

En normalisant, cela donne

$$p = \frac{\exp[k(v) + s(v)]}{\exp[k(v) + s(v)] + \exp[k(v) - s(v)]} = \frac{\exp[s(v)]}{\exp[s(v)] + \exp[-s(v)]}.$$

$$p = \frac{\exp[s(v)]}{\exp[s(v)] + \exp[-s(v)]}.$$

Il suffit donc de calculer $s(v)$ (facile) pour trouver la probabilité de transition p .

De plus, en pratique $s(v)$ ne peut prendre qu'un nombre limité de valeurs, et on peut facilement précalculer et mémoriser le p qui correspond à chacune de ces valeurs.

Par exemple, si chaque $\mathcal{N}(v)$ est un entier de 1 à k (le nombre de noeuds adjacents ne dépasse jamais k), alors toutes les valeurs possibles pour $s(v)/(2\beta)$ sont dans $\{-k, -k + 1, \dots, k\}$, et on peut précalculer p pour ces $2k + 1$ valeurs.

Pour le graphe en grille, les sommets qui ne sont pas à la frontière ont $\mathcal{N}(v) = k = 4$, et $s(v)/(2\beta)$ ne peut prendre que les valeurs suivantes: $-4, -2, 0, 2, 4$. On peut facilement précalculer p pour chacune de ces 5 valeurs possibles.

Chaîne de Markov sur un espace d'états continu

On a supposé jusqu'à maintenant que l'espace d'états \mathcal{X} était dénombrable. Mais dans les applications, il est souvent continu, habituellement dans \mathbb{R}^d . Dans ce cas, les probabilités de transition $P_{i,j}$ sont remplacées par des densités conditionnelles.

On note $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ la densité conditionnelle de $Y = X_{n+1}$ au point $\mathbf{y} \in \mathcal{X}$, sachant que $X_n = \mathbf{x} \in \mathcal{X}$. Pour $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$, on suppose que la densité est par rapport à la mesure de Lebesgue.

La notion d'état récurrent n'a plus de sens ici, car chaque état \mathbf{y} a la probabilité 0. On doit développer une notion plus générale de récurrence (e.g., la récurrence au sens de Harris), qui correspond au retour infiniment souvent dans une région \mathcal{A} de mesure positive (par exemple, le voisinage d'un point \mathbf{x}_0). L'étude de ceci dépasse le niveau de ce cours.

La **loi stationnaire** (ou loi d'équilibre) sera (sous certaines conditions) une loi continue de densité π sur \mathcal{X} , qui satisfait aux équations d'équilibre

$$\pi(\mathbf{y}) = \int_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \pi(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x}.$$

Sous certaines conditions, pour $g : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ mesurable,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_k) = \int_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} g(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

En particulier, pour tout $\mathcal{A} \subset \mathcal{X}$ mesurable, en prenant $g(\mathbf{x}) = \mathbb{I}[\mathbf{x} \in \mathcal{A}]$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{I}[X_k \in \mathcal{A}] = \int_{\mathbf{x} \in \mathcal{A}} \pi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

La chaîne est **reversible** pour une densité de probabilité π si celle-ci satisfait les **équations d'équilibre détaillées**: pour presque toute paire $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{X}^2$, on a

$$\pi(\mathbf{y})p(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \pi(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

Dans ce cas, π est nécessairement la densité de la loi stationnaire.

Dans l'algorithme de Métropolis Hastings, les probabilités $q_{i,j}$ deviennent des densités de transition conditionnelles $q(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, le quotient de Hastings devient

$$r(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{h(\mathbf{y})q(\mathbf{y}, \mathbf{x})}{h(\mathbf{x})q(\mathbf{x}, \mathbf{y})} = \frac{\pi(\mathbf{y})q(\mathbf{y}, \mathbf{x})}{\pi(\mathbf{x})q(\mathbf{x}, \mathbf{y})},$$

et la probabilité d'accepter \mathbf{y} est

$$a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min(1, r(\mathbf{x}, \mathbf{y})).$$

Exemple: Points au hasard sur un cercle, pas trop rapprochés

On veut construire une chaîne dont l'état $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$ représente la position de d points répartis au hasard sur un cercle de rayon 1, en radians (de 0 à 2π). L'espace d'états est continu.

On veut que π soit la loi de d points X_ℓ indépendants qui suivent la loi uniforme sur $(0, 2\pi)$, conditionnellement à ce que la distance minimale entre deux points soit d'au moins δ , pour une constante $\delta > 0$.

Gibbs: à chaque étape, on choisit l'un des d points et on l'enlève, puis on en génère un nouveau selon la loi uniforme sur la portion du cercle où on est à une distance d'au moins δ de tous les autres points. (Au tableau...)

Une façon simple de faire cela est de générer un point uniformément sur $(0, 2\pi)$ et de vérifier s'il satisfait la condition; si oui c'est le nouveau point, sinon on recommence. Une autre façon est de générer directement le point uniformément sur la portion admissible, dont la longueur est $2\pi - 2(d-1)\delta$ (on doit enlever un intervalle de longueur 2δ centré à chaque point).

La première approche peut être ok si $(d-1)\delta/\pi$ est proche de 0 mais pas s'il est proche de 1.

Exemple: Échantillonnage selon une loi multivariée tronquée

Supposons que l'on veut échantillonner $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ selon une loi multivariée Normale(μ, Σ) tronquée à un ensemble convexe $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d$.

Si $\mathbb{P}[\mathbf{X} \in \mathcal{A}]$ n'est pas trop proche de 0, on peut générer des réalisations de $\mathbf{X} \mid \mathbf{X} \in \mathcal{A}$ par une **méthode de rejet**: On génère \mathbf{X} selon sa loi normale non conditionnelle (avec densité positive partout dans \mathbb{R}^d) jusqu'à ce qu'on trouve un \mathbf{X} qui est dans \mathcal{A} , et on conserve ce \mathbf{X} . Mais si $\mathbb{P}[\mathbf{X} \in \mathcal{A}]$ est très petit, cela peut être beaucoup trop long!

Une alternative est de construire une chaîne de Markov dont la loi stationnaire est la loi conditionnelle voulue, via l'échantillonnage de **Gibbs**. On part d'un point arbitraire $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{A}$, et à chaque étape on ré-échantillonne une ou plusieurs coordonnées.

Ici, la **loi de X_j conditionnelle à $\mathbf{X}_{(-j)}$** fixé est une loi normale univariée dont la moyenne et la variance dépendent de j et $\mathbf{X}_{(-j)}$. Et lorsque \mathcal{A} est convexe, la condition $\mathbf{X} \in \mathcal{A}$ se traduit par $X_j \in \mathcal{I}(\mathbf{X}_{(-j)})$ où $\mathcal{I}(\mathbf{X}_{(-j)})$ est un intervalle. Il suffit de générer X_j selon sa loi normale tronquée à cet intervalle.

Par exemple, supposons que $d = 2$, que $X_1 \sim \text{Normale}(\mu_1, \sigma_1^2)$, $X_2 \sim \text{Normale}(\mu_2, \sigma_2^2)$, $\text{Cov}(X_1, X_2) = \sigma_{1,2}$, et que $\mathcal{A} = [a_1, \infty) \times [a_2, \infty)$ pour $a_1 \gg \mu_1 + \sigma_1$ et $a_2 \gg \mu_2 + \sigma_2$. Alors, si on génère $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ selon sa loi binormale non tronquée, $\{\mathbf{X} \in \mathcal{A}\}$ sera un événement rare.

Dans ce cas, on peut démarrer une chaîne de Markov disons au point $\mathbf{x}_0 = (a_1, a_2)$, puis on ré-échantillonne chaque coordonnée, tour à tour, conditionnellement à la valeur de l'autre coordonnée et à ce que le point demeure dans \mathcal{A} .

Sachant que la première coordonnée est $X_1 = x_1 \geq a_1$, la loi conditionnelle de X_2 est normale de moyenne $\mu_2 + (\sigma_{1,2}/\sigma_1^2)(x_1 - \mu_1)$ et variance $\sigma_2^2 - \sigma_{1,2}^2/\sigma_1^2$. On peut donc ré-échantillonner X_2 selon cette loi, conditionnelle aussi à $X_2 \geq a_2$.

Pour ré-échantillonner X_1 conditionnellement à $X_2 = x_2$ et $(X_1, X_2) \in \mathcal{A}$, on fait de même en échangeant les indices 1 et 2. Chaque loi conditionnelle est une loi normale tronquée. La loi stationnaire de cette chaîne sera la loi voulue.

MH via une marche aléatoire dans \mathbb{R}^d

Supposons que l'on veut construire une chaîne dont la loi d'équilibre a la densité π sur $\mathcal{A} \subseteq \mathbb{R}^d$, via MH. On peut générer le déplacement proposé, à chaque étape, en générant une direction aléatoire selon la loi uniforme (un point sur une sphère en d dimensions), puis une distance aléatoire selon une loi qui ne dépend pas de la direction. Cela donne un vecteur aléatoire $\Delta \in \mathbb{R}^d$. Le nouvel état proposé est $\mathbf{y} = \mathbf{x} + \Delta$.

Puisque la densité de $-\Delta$ est la même que celle de Δ par symétrie, on a toujours $q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = q(\mathbf{y}, \mathbf{x})$, et donc $r(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = h(\mathbf{y})/h(\mathbf{x})$.

Si $\mathcal{A} \subseteq \mathbb{R}^d$ est le support de π , i.e., $h(\mathbf{x}) > 0$ ssi $\mathbf{x} \in \mathcal{A}$, alors l'état proposé \mathbf{y} sera rejeté ssi $\mathbf{y} \notin \mathcal{A}$. Ainsi, la chaîne ne va jamais quitter \mathcal{A} . Densité uniforme sur \mathcal{A} : $h(\mathbf{x}) = \mathbb{I}(\mathbf{x} \in \mathcal{A})$.

Choix simple et populaire: $\Delta = \sigma \mathbf{Z}$ où $\mathbf{Z} \sim \text{Normale}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ et $\sigma > 0$ est une constante.

Si on prend $\Delta = \Delta(\mathbf{x}) = (\sigma^2/2)\nabla \ln h(\mathbf{x}) + \sigma \mathbf{Z}$, on obtient l'algorithme **MH de Langevin**. Cette méthode ajoute un terme de dérive (proportionnel au gradient de $\ln h(\mathbf{x})$) qui pousse la chaîne dans la direction où la densité h augmente le plus vite. Dans ce cas-ci, la loi de Δ dépend de l'état courant \mathbf{x} , et on n'a pas $q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = q(\mathbf{y}, \mathbf{x})$.

L'échantillonnage "Hit-and-run"

On veut échantillonner (approximativement) selon une densité π positive sur un ensemble $\mathcal{A} \subseteq \mathbb{R}^d$, et nulle ailleurs. On sait que π est proportionnelle à un h que l'on connaît. On démarre la chaîne d'un point arbitraire $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{A}$.

À chaque étape n de la chaîne, on génère d'abord une **direction aléatoire** \mathbf{D} dans \mathbb{R}^d , par exemple en générant un point au hasard sur une sphère de rayon 1 centrée à 0, en d dimensions. Ensuite on génère une **distance aléatoire proposée** L selon une densité "valide" g_n sur \mathbb{R} (en une dimension). La densité g_n de la distance proposée peut dépendre de n , de $\mathbf{X}_n = \mathbf{x}$, et de D . Le nouveau point proposé est $\mathbf{Y} = \mathbf{x} + L\mathbf{D}$. Mais la densité g_j choisie doit être telle que le quotient de Hasting,

$$r(\mathbf{x}, \mathbf{Y}) = \frac{h(\mathbf{Y})q(\mathbf{Y}, \mathbf{x})}{h(\mathbf{x})q(\mathbf{x}, \mathbf{Y})},$$

est bien défini (pas de division par 0), et que la chaîne ne sorte jamais de \mathcal{A} et soit irréductible sur tout \mathcal{A} .

Hit-and-run

Quand \mathcal{A} est borné, on peut choisir g_j comme la **densité uniforme** sur $\mathcal{L} \cap \mathcal{A}$, où \mathcal{L} est la droite passant par \mathbf{x} en direction \mathbf{D} . Si π est **uniforme** sur \mathbf{A} , avec ce choix de g_j , toutes les transitions proposées sont acceptées. Ce cas particulier correspond à la formulation originale du “hit-and-run.”

Le Hit-and-run est l'une des méthodes les plus efficaces pour échantillonner uniformément dans un ensemble \mathcal{A} compliqué, si on sait comment échantillonner efficacement sur l'intersection d'une droite avec \mathcal{A} . À partir de n'importe quel $\mathbf{X} = \mathbf{x}$, la méthode peut atteindre n'importe quel point de \mathcal{A} en une seule étape. Cela suggère que la dépendance entre les états successifs n'est pas très forte.

Lovász (1999) a montré que le hit-and-run donne une bonne approximation de la loi uniforme sur un ensemble convexe \mathcal{A} (avec erreur inférieure à ϵ) en temps polynomial en $1/\epsilon$. Ce n'est pas le cas pour l'échantillonnage de Gibbs.