

TP 1 Modèles Markoviens

B.CALLARD
L.FOSSE

Contents

I	Introduction	2
II	Simulation d'une chaîne de Markov	2
	II.1 Code R2	3
	II.2 Code R1	3
III	Analyse d'une CMH à espace d'état E fini (petit)	6
	III.1 Exercice 1	6
	III.2 Code R3	9
IV	Modèles proposés en cours / travaux dirigés	10
	IV.1 Exercice 2 (Urne d'Ehrenfest)	10
	IV.2 Code R4	12
	IV.3 Code R5	14
V	Conclusion	17

I Introduction

Les chaînes de Markov (ou processus markoviens) entrent dans le cadre des systèmes dynamiques. Ce sont des systèmes dont l'évolution dans le temps dépend de l'état du système dans les instants précédents. Parmi les systèmes dynamiques, on retrouve aussi les équations différentielles que nous avons beaucoup étudiées. En revanche, celles-ci se détachent des modèles markoviens car leur évolution est déterministe. Elles ne font apparaître aucune notion d'aléatoire. En effet, la connaissance de l'état du système dans le passé permet de complètement déterminer l'état du système à l'instant présent. Les chaînes de Markov ont la particularité de mettre en jeu des notions probabilistes, c'est à dire que la connaissance de l'état du système dans les instants précédents permet de déterminer avec une certaine probabilité l'état futur du système. Elles sont utilisées dans de très larges domaines, allant du classement de pages internet par google, aux problématiques de gestion de stocks dans une entreprise. Dans ce projet, nous allons nous intéresser à la simulation d'une chaîne de Markov. Par conséquent nous nous pencherons sur les problématiques liées à la notion de simulation. Nous allons aussi utiliser des notions de théorie des graphes et nous verrons comment elles peuvent nous servir dans le cadre des processus markoviens.

II Simulation d'une chaîne de Markov

Problème d'étude : l'ADN.

L'ADN est une molécule qui peut être vue comme un mot construit à partir d'un alphabet à 4 lettres $E := A, C, G, T$.

L'expérience montre que la progression des nucléotides le long d'une branche d'ADN est bien modélisée par une chaîne de Markov à 4 états : $1 := A$, $2 := C$, $3 := G$, $4 := T$, dont la matrice de transition est donnée par :

$$P = \begin{pmatrix} 0.180 & 0.274 & 0.426 & 0.120 \\ 0.171 & 0.367 & 0.274 & 0.188 \\ 0.161 & 0.339 & 0.375 & 0.125 \\ 0.079 & 0.355 & 0.384 & 0.182 \end{pmatrix}$$

	A	C	G	T
A	0.180	0.274	0.426	0.120
C	0.171	0.367	0.274	0.188
G	0.161	0.339	0.375	0.125
T	0.079	0.355	0.384	0.182

Figure 1: Matrice de transition annotée

Dont le graphe de transition est donné par la figure :

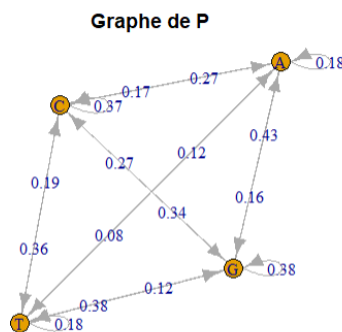


Figure 2: Graphe de transition séquence ADN

Cette chaîne de Markov possède des propriétés intéressantes que nous allons énoncer.

- c'est une chaîne à espace d'états fini
- tous les coefficients de la matrice sont non nuls ainsi la chaîne est irréductible (tous les états communiquent entre eux).
- par conséquent, la chaîne est donc récurrente positive (en effet elle admet une unique probabilité invariante, qui est de plus caractérisée par $\pi(i) > 0 \quad \forall i \in E$)

L'ensemble de ces propriétés nous permettra d'utiliser les résultats de la loi forte des grands nombres (LFGN) afin de vérifier les résultats des simulations que nous allons obtenir par la suite.

II.1 Code R2

Dans ce projet, nous avons décidé de commencer par l'écriture du Code R2. Cette fonction permet de simuler des trajectoires d'une chaîne de Markov dont la matrice de transition est passée en paramètre. Vous trouverez dans le notebook joint à ce TP le code de la fonction **simuMarkov**.

Une problématique qui apparaît naturellement avec l'écriture d'une fonction de simulation est la suivante : "Comment vérifier que nous simulons bien ce que nous voulons ?". Nous allons répondre à cette question dans la section suivante.

II.2 Code R1

On va commencer par tracer des trajectoires de 100 000 états pour cette chaîne de Markov.

1. Nous avons pour cela commencer par créer une fonction générique (cf code R2) qui permet à partir d'une matrice de transition P et d'un état initial, de générer une trajectoire de la CMH de longueur n commençant dans l'état $x_0 \in \{0, 1, 2, 3\}$ (A,B,C,D). Nous avons aussi ajouté un paramètre supplémentaire pour gérer l'affichage de la trajectoire :

- en terme de suite numérique (0,1,2,3)
- en terme de suite d'états A,B,C,D

Ensuite pour le code R1, il suffit simplement de prendre $n=100\,000$ et $x_0="A"$. Notre algorithme de simulation, nous permet de générer des trajectoires du type de la figure ci dessous.

```
1 3 3 2 1 3 4 1 2 3
"A" "G" "G" "C" "A" "G" "T" "A" "C" "G"
```

Figure 3: Affichage aux différents formats pour $n = 10$

Il reste à savoir si les trajectoires que nous générons sont bien des trajectoires dirigées par la matrice de transition P et sont donc bien des simulations de la chaîne de Markov que nous avons présentée.

Comme vérification, nous disposons d'un premier résultat : la LFGN.

En effet, ici nous disposons d'une chaîne irréductible à espace d'états fini. La CMH admet donc une probabilité invariante π qui est unique. Ainsi on peut utiliser un corollaire de la LFGN qui énonce :

$$\forall i \in E \quad \forall X_0 \sim \pi_0 \quad : \quad \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n 1_{\{X_k=i\}} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}_{\pi_0 - ps}} \pi(i)$$

Ainsi sachant que X_0 suit la loi π_0 , la fréquence d'occupation de l'état i converge vers la coordonnée i de la probabilité invariante avec probabilité 1 ($\forall i \in E$ et pour toute loi π_0).

Nous disposons aussi d'un autre résultat sur convergence en loi de la chaîne. En effet, nous avons une chaîne qui est irréductible et nous avons une boucle sur chacun des états. Ainsi, nous avons $P(i, i) > 0 \quad \forall i \in E$. Nous avons en outre une chaîne périodique, irréductible et qui admet une probabilité invariante. Dans ce cadre, nous pouvons appliquer le résultat de la convergence en loi, qui énonce que:

$$\forall i \in E \quad \forall \pi_0 \quad \text{tq} \quad X_0 \sim \pi_0 : \mathbb{P}_{\pi_0}\{X_n = i\} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \pi(i)$$

Ainsi pour pouvoir utiliser ce résultat, nous allons devoir approcher la quantité $\mathbb{P}_{\pi_0}\{X_n = i\}$. Pour cela il faut par exemple utiliser un résultat de loi forte des grands nombres dans un contexte iid. On va ainsi créer des échantillons iid de taille K (suffisamment grands) de la variable X_n . Et on va utiliser le résultat suivant :

$$\forall i \in E \quad \forall \pi_0 \quad \text{tq} \quad X_0 \sim \pi_0 : \mathbb{P}_{\pi_0}\{X_n = i\} \approx \frac{1}{K} \sum_{l=0}^K 1_{\{X_n^{(l)}=i\}}$$

Et en combinant ce résultat, avec le résultat de convergence en loi, on obtient :

$$\forall i \in E \quad \forall \pi_0 \quad \text{tq} \quad X_0 \sim \pi_0 : \pi(i) \approx \mathbb{P}_{\pi_0}\{X_n = i\} \approx \frac{1}{K} \sum_{l=0}^K 1_{\{X_n^{(l)}=i\}} \quad (1)$$

Ces deux résultats nous donnent des critères puissants pour pouvoir se conforter dans l'idée que notre algorithme de simulation fonctionne, ou au contraire s'il est défaillant. Une fois de plus, nous n'allons pas faire de "preuve" simplement des tests qui permettent de nous convaincre du bon fonctionnement. Il doit sûrement exister des tests plus fins pour vérifier aussi que la simulation est bonne cependant dans l'état actuel de nos connaissances nous ne connaissons que ces deux là.

2. Nous avons ainsi utilisé notre algorithme pour simuler une chaîne de Markov de taille $n=100\,000$ et nous avons tracé l'histogramme des fréquences d'occupation de chaque état.

Voici le résultat :

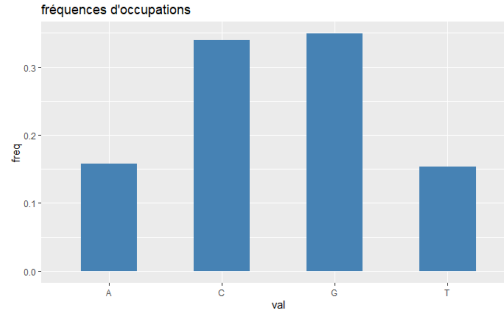


Figure 4: Histogramme des fréquences d'occupation des 4 états ($n=100\,000$)

Ce résultat tout seul n'est pas très intéressant. Pour lui donner de l'intérêt, il faut maintenant que nous trouvions de manière efficace la probabilité invariante de la chaîne. C'est l'objet de la question suivante.

3. Le code suivant permet de trouver une probabilité P-invariante π , dans le cas des CMH à espace d'états fini et irréductible.

```

1 M = diag(nrow(P))-t(P)
2 M[nrow(P),] = 1
3 b = rep(0,nrow(P)) ; b[nrow(P)] = 1
4 pi = solve(M,b)
```

Listing 1: Code proba Invariante dans le cas Irreductible fini

En effet, on sait qu’une probabilité invariante π respecte l’équation de balance globale : $\pi P = \pi$ ou encore $\pi(P - I) = 0$. La première ligne de code permet de construire la matrice $M = P - I$. Ici on ne va pas se contenter de résoudre le système $\pi M = 0$, qui nous donnerait une mesure mais nous ne seront pas sûr d’avoir une probabilité. Un résultat d’algèbre linéaire nous indique que quand la chaîne est irréductible l’espace dans lequel vit l’ensemble des mesures m dites P-invariante (ie les mesures qui respectent l’équation $mM = 0$) est un espace vectoriel de dimension 1. De plus, un résultat sur les CMH nous assure que la probabilité invariante dans le cas d’une CMH à espace d’états fini et irréductible existe et est unique. Ainsi, les lignes de code qui suivent vont venir exploiter ces différents résultats.

Quand on étudie le système $mM = 0$, on a que la dernière équation du système ne sert à rien, c’est simplement une répétition des autres équations, pour s’en rendre compte il suffit de sommer toutes les lignes du système pour la retrouver (ceci se comprends assez bien puisque ce système donne un espace vectoriel de dimension 1 il y a donc forcément une répétition dans les équations). Ainsi, dans le code on supprime cette équation et on la remplace par une autre équation qui est que la somme des coordonnées du vecteur solution doit faire 1. Cette condition ici nous assurera que le vecteur solution est une mesure de probabilité.

Ainsi nous faisons tourner ce code pour trouver la probabilité invariante, et nous la comparons, avec l’histogramme des fréquences d’occupation des différents états (calculés précédemment) et nous obtenons le résultat suivant :

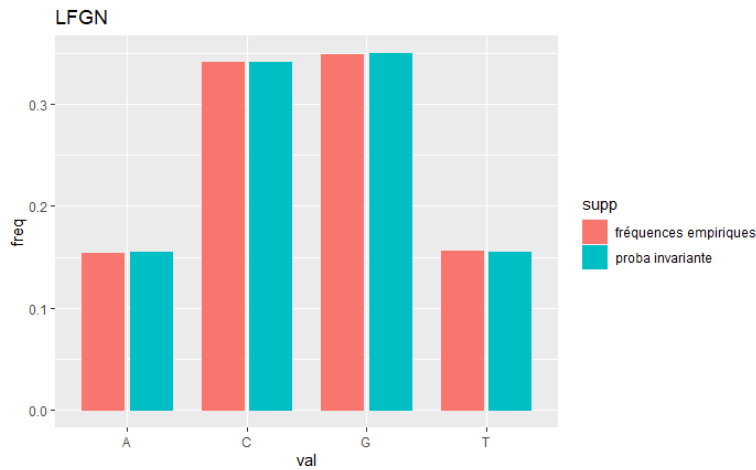


Figure 5: Critère de la LFGN

On obtient ainsi pour un $n = 100000$, un résultat qui semble être en accord, avec la LFGN. En effet, pour ce n les fréquences d’occupations des états collent très bien à la probabilité invariante.

Regardons ainsi maintenant si le critère de la convergence en loi est vérifié. Pour cela nous avons utilisé, la fonction **replicate** de R qui nous a permis de faire K ($K=5000$) répliques indépendantes de trajectoires de taille n ($n=1000$) via notre fonction de simulation, nous avons récupéré sur chaque trajectoire, seulement l’état occupé par X_n ce qui nous donne un K -échantillon de loi de probabilité $\pi_n = P^n \pi_0$ avec ici un π_0 commun à chaque réplique. Nous avons tracé l’histogramme des fréquences d’occupations des états occupés pour le vecteur récupéré et nous l’avons comparé avec le probabilité invariante (cf : (1)) et nous obtenons :

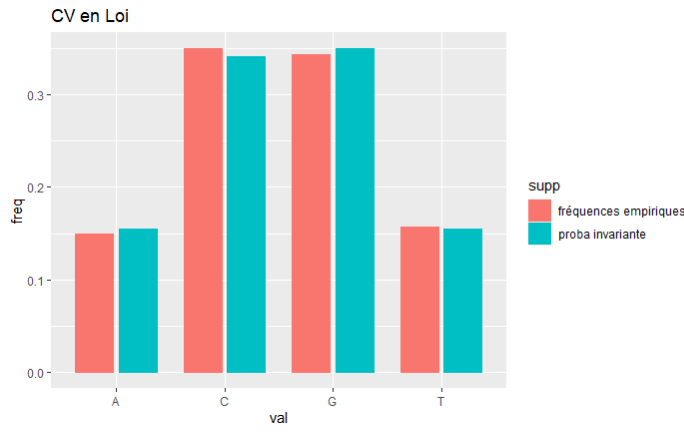


Figure 6: CV en loi

Une fois de plus nous obtenons des résultats très proches de la théorie, mais ici on observe une variation un peu plus grande entre les deux graphiques, mais celle ci peut venir du faite que dans notre (1) nous faisons deux approximation. En effet, nous faisons une approximation de $\mathbb{P}\{X_n = i\}$ via la LFGN dans le cas iid, qui est elle même une approximation de $\pi(i)$ pour n assez grand. Cette double approximation vient se confirmer ainsi sur nos résultats. Une façon d'atténuer ce phénomène serait de faire tendre K et n vers $+\infty$.

Nous avons maintenant cherché à mettre en évidence le $\forall \pi_0$ dans la définition de la convergence en loi, en reprenant la même démarche que précédemment, mais en choisissant un x_0 aléatoirement parmi tous les états de la chaîne, pour chaque réplique indépendante.

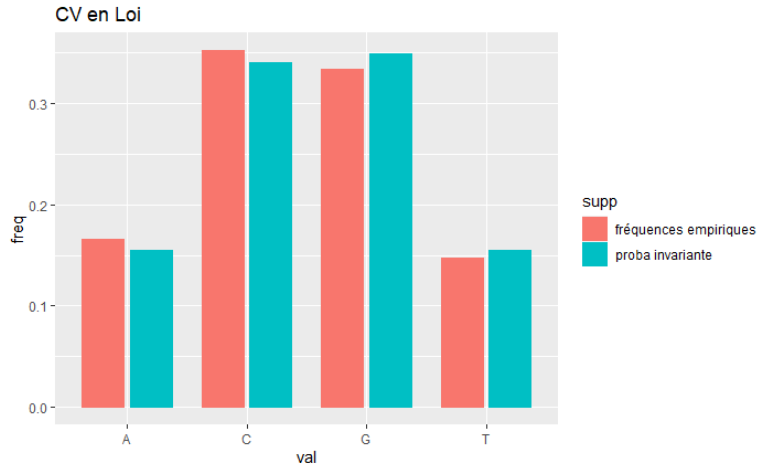


Figure 7: simulation avec un x_0 aléatoire

Ainsi pour conclure, au vu des différents tests, il parait raisonnable d'énoncer que notre algorithme de simulation simule effectivement bien une CMH dont la matrice de transition est placée en paramètre. Il existe sûrement d'autres tests que celui de la LFGN ou de la convergence en loi, pour vérifier le bon fonctionnement de notre algorithme, cependant dans l'état actuel de nos connaissances nous n'en connaissons pas d'autres.

III Analyse d'une CMH à espace d'état E fini (petit)

III.1 Exercice 1

Dans cet exercice nous allons travailler avec une hypothèse, qui est : $\mathbb{P}\{X_0 = i\} > 0$. Les résultats que nous allons démontrer seront donc valables dès qu'on aura un entier m, tel que $\mathbb{P}\{X_m = i\} > 0$, grâce

aux propriétés dites de régénération des chaînes de Markov homogènes.

1. Pour cette question nous allons raisonner par récurrence. Pour $k=1$, on a $A^{\otimes k} = A$, et par définition de la matrice de transition d'une CMH si $P(i, j) \neq 0$, alors il existe un chemin de longueur 1, qui permet d'aller de i vers j , or par définition de la matrice d'adjacence : $A(i, j) = 1 \Leftrightarrow P(i, j) \neq 0$ nous avons ainsi fait l'initialisation de notre récurrence.

Supposons maintenant que pour un $k \geq 1$ on ait :

$$\forall (i, j) \in E \times E \quad A^{\otimes k}(i, j) = 1 \Leftrightarrow \text{il existe un chemin de longueur } k \text{ qui permet d'aller de } i \text{ à } j$$

Regardons maintenant ce qu'il se passe à l'ordre $k+1$.

Ainsi par définition du produit matriciel logique, on a :

$$A^{\otimes k+1}(i, j) = \bigvee_{l \in E} A^{\otimes k}(i, l) A(l, j)$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} \bigvee_{l \in E} A^{\otimes k}(i, l) A(l, j) = 1 &\Leftrightarrow \exists l \in E : A^{\otimes k}(i, l) A(l, j) = 1 \\ &\Leftrightarrow A^{\otimes k}(i, l) = 1 \quad \text{et} \quad A(l, j) = 1 \end{aligned} \tag{2}$$

Or d'après l'hypothèse de récurrence, $A^{\otimes k}(i, l) = 1 \Leftrightarrow$ il existe un chemin de longueur k qui relie i et l .

De plus $A(l, j) = 1 \Leftrightarrow$ il existe un chemin de longueur 1 permettant d'aller de l vers j .

En combinant ces informations, nous avons un chemin de longueur k permettant d'aller de i vers l et un chemin de longueur 1 permettant d'aller de l vers j . on a donc bien un chemin de longueur $k+1$ qui relie i et j .

Nous avons donc :

$$\forall (i, j) \in E \times E, \forall k \geq 1 : A^{\otimes k}(i, j) = 1 \Leftrightarrow \text{il existe un chemin de longueur } k \text{ permettant d'aller de } i \text{ vers } j$$

2. Nous allons ici raisonner via une double implication.

(\Rightarrow) Si $F(i, j) = 1$, alors d'après la définition du **ou logique**, on a que $\exists k \in \{1, \dots, \text{card}(E)-1\}$, tq $A^{\otimes k}(i, j) = 1$. Or ceci d'après le résultat de la question 1, est équivalent au fait qu'il existe un chemin de longueur k reliant i et j . On a donc bien $i \rightarrow j$.

(\Leftarrow) Supposons maintenant que $i \rightarrow j$, ainsi, il existe un entier n_0 tq $P^{n_0}(i, j) > 0$, ainsi il existe au moins un chemin de taille n_0 , qui permet d'aller de i vers j .

Si $n_0 \in \{1, \dots, \text{card}(E)-1\}$ alors pas de problème, on aura démontré l'implication, en effet nous aurons ainsi $A^{\otimes n_0}(i, j) = 1$ par la question précédente et nous aurons donc $F(i, j) = 1$, par les propriétés du **ou logique**.

Cependant dans l'état actuel, rien n'impose à n_0 une telle condition. Nous allons dans la suite démontrer que s'il existe un chemin de taille $n_0 \geq \text{card}(E)$ qui permet d'aller de i à j , alors on peut nécessairement trouver un chemin plus court qui va lui aussi de i à j , ainsi en itérant le procédé que on va décrire par la suite, on pourra toujours réduire le chemin qui relie i et j tant que sa taille sera supérieur à $\text{card}(E)$, jusqu'à avoir un chemin de taille $n'_0 < \text{card}(E)$

Ainsi, supposons que $n_0 \geq \text{card}(E)$:

On sait que notre chemin de taille n_0 , qui lie i et j , passe par $n_0 + 1$ sommets (en comptant i et j) de

notre graphe. Or si $n_0 \geq \text{card}(E)$, alors notre chemin passe au moins deux fois par un des sommets du graphe, car il passera par plus de sommets, qu'il n'y a de sommets dans le graphe. Pour formaliser cela :

Nous avons : $P^{n_0}(i, j) > 0$ ainsi il existe au moins une suite de sommets du graphe $\{i, i_1, \dots, i_{n_0-1}, j\}$ tel que :

$$p_{n_0} = \mathbb{P}\{X_{n_0} = j, X_{n_0-1} = i_{n_0-1}, \dots, X_1 = i_1 | X_0 = i\} > 0$$

Or comme $n_0 \geq \text{card}(E)$, nous avons donc forcément qu'il existe deux entiers $k_1 \leq n_0$ et $k_2 \leq n_0$ $k_1 \leq k_2$ et un sommet k de notre graphe, tel que l'on ait :

$$p_{n_0} = \mathbb{P}\{X_{n_0} = j, X_{n_0-1} = i_{n_0-1}, \dots, X_{k_2} = k, \dots, X_{k_1} = k, \dots, X_1 = i_1 | X_0 = i\}$$

le chemin passe nécessairement, par deux sommets identiques de notre graphe. En passant par deux sommets du graphe on crée ce que l'on appelle un circuit. Ici nous avons un circuit qui boucle sur le sommet k .

On peut exprimer cette probabilité p_{n_0} via les formules de bayes et la matrice de transition P de la chaîne de Markov homogène considérée ici et on a :

$$\begin{aligned} p_{n_0} &= P(i, i_1)P(i_1, i_2) \dots P(i_{k_1-1}, k) \boxed{P(k, i_{k_1+1}) \dots P(i_{k_2-1}, k)} P(k, i_{k_2+1}) \dots P(i_{n_0-1}, i_{n_0}) \\ &\leq P(i, i_1)P(i_1, i_2) \dots P(i_{k_1-1}, k)P(k, i_{k_2+1}) \dots P(i_{n_0-1}, j) = p \end{aligned} \quad (3)$$

Cette inégalité se justifie par le fait que les $P(\dots)$ sont des probabilités donc des nombres compris entre 0 et 1. De plus si on note $\mu = k_2 - k_1 - 1$, la longueur du circuit qui bouclait sur k , p peut s'exprimer, comme :

$$p = \mathbb{P}\{X_{n_0-\mu} = j, \dots, X_{k_1+1} = i_{k_2+1}, X_{k_1} = k, \dots, X_1 = i_1 | X_0 = i\}$$

De plus, comme $p_{n_0} > 0$ on a aussi $p > 0$ par l'inégalité (3). On a donc existence d'un chemin de taille $n_0 - \mu$ qui va de i vers j . On a ainsi réussi notre objectif et montrer que si le chemin qui permettait d'aller de i vers j était de taille $n_0 \geq \text{card}(E)$. Alors on pourra toujours réduire ce dernier en itérant autant de fois que nécessaire le processus décrit ci-dessus et trouver un chemin plus court de taille au plus $\text{card}(E)-1$.

Ainsi nous avons donc montré que si $i \rightarrow j$, alors il existe un chemin de longueur $k < \text{card}(E)$ qui permet d'aller de i vers j ce qui est équivalent à $A^{\otimes k}(i, j) = 1$ d'où $F(i, j) = 1$.

Pour la deuxième partie on a que :

$$T(i, j) = 1 \Leftrightarrow \exists k_0 \in \{0, \dots, \text{card}(E) - 1\} \text{ tq } (A^T)^{\otimes k_0}(i, j) = 1$$

Or le produit matriciel logique permet de commuter puissance et transposé, la démonstration est la même que quand on définit le produit matriciel avec une somme. Ainsi nous avons :

$$T(i, j) = 1 \Leftrightarrow \exists k_0 \in \{0, \dots, \text{card}(E) - 1\} \text{ tq } (A^{\otimes k_0})^T(i, j) = 1 \Leftrightarrow \exists k_0 \in \{0, \dots, \text{card}(E) - 1\} \text{ tq } (A^{\otimes k_0})(j, i) = 1$$

or par le calcul fait en début de question, ceci est équivalent à $j \rightarrow i$.

3.a.

$$C(i, j) = 1 \Leftrightarrow F(i, j) = 1 \text{ et } T(i, j) = 1 \Leftrightarrow i \rightarrow j \text{ et } j \rightarrow i \text{ par la question 2 } \Leftrightarrow i \leftrightarrow j$$

3.b.

$$j \in C(i) \Leftrightarrow i \leftrightarrow j \Leftrightarrow C(i, j) = 1 \text{ d'après la question précédente}$$

Ces équivalences nous permettent d'arriver à l'égalité ensembliste :

$$C(i) = \{j \in E \text{ tq } C(i, j) = 1\}$$

3.c. Tout d'abord, on sait qu'une classe d'états de E est dite absorbante ssi les seuls états accessibles depuis cette classe sont les seuls états de cette même classe. Cela traduit que si on est dans une classe absorbante, on ne peut plus en sortir, on est en quelque sorte "piégé" dedans.

Pour revenir à la question.

(\Rightarrow) Supposons que $C(i)$ est absorbante. Dans un premier temps, on sait que $C(i) \subset \{j \in E, F(i, j) = 1\}$ car $C(i) = 1 \Rightarrow F(i, j) = 1$. Considérons ainsi $z \in \{j \in E, F(i, j) = 1\}$ ainsi on a $F(i, z) = 1$. Or d'après la question 1, cela signifie que $i \rightarrow z$, autrement dit z est accessible depuis i . Or $C(i)$ est absorbante et on a bien entendu $i \in C(i)$ donc les seuls états accessibles depuis i sont dans $C(i)$, on a donc $z \in C(i)$ ainsi on a $C(i) = \{j \in E, F(i, j) = 1\}$

(\Leftarrow) Supposons que $C(i) = \{j \in E, F(i, j) = 1\}$ et que $C(i)$ ne soit pas absorbante.

Comme $C(i)$ n'est pas absorbante, il existe un état accessible de puis $C(i)$ mais qui n'est pas dans $C(i)$.

Ainsi il existe un état j dans E tel que :

- j accessible depuis $C(i) \Leftrightarrow$ il existe $u \in C(i)$ tel que $u \rightarrow j \Leftrightarrow i \rightarrow j$ (car $u \leftrightarrow i$) $\Leftrightarrow F(i, j) = 1$
- $j \notin C(i)$

On voit ici apparaître une contradiction car nous avons supposé que $C(i) = \{j \in E, F(i, j) = 1\}$ ainsi nous avons que $C(i)$ est une classe d'état absorbante.

III.2 Code R3

L'ensemble des équivalences qui ont été démontrées dans l'exercice 2, vont nous permettre de ne travailler que avec les matrices d'adjacence et le produit matriciel logique afin de trouver des propriétés tel que l'accessibilité ou la communication entre des états. On pourrait croire que ce n'est pas très utile puisqu'avec les chaînes de markov nous avons déjà des critères pour ces différents cas. L'intérêt de ces équivalence n'est pas pour la théorie, mais pour la pratique et notamment pour automatiser les recherches de ces différentes propriétés à l'aide d'un algorithme. C'est ce que nous allons faire dans cette section.

Nous avons ainsi écrit un algorithme qui permet, à partir d'une matrice de transition P :

- de calculer les différentes classes de communications de la chaîne de markov dont la matrice de transition est P .
- de savoir si une chaîne de markov est irréductible ou non.
- d'exprimer sous forme de variable booléenne qu'elles sont les classes de communications qui sont absorbante ou non absorbante

Bien entendu, cet algorithme ne fonctionne que pour des chaînes de markov dont les espaces d'états sont finis donc avec des matrices de transitions finis.

Pour vérifier si notre algorithme marchait, nous avons pris une chaîne de markov dont nous connaissions les différents résultats sur ces différentes quantités. Nous avons pris la chaîne de markov qui a servi d'exemple dans le cours (cf slide 28), dont le graphe de transition, est le suivant :

Graphe de P

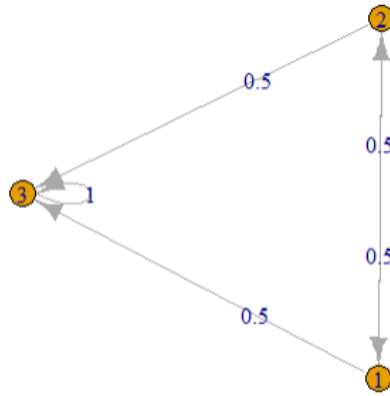


Figure 8: Graphe de transition CMH slide 28

Et nous avons obtenu les résultats suivant :

```
$classe_com
      1    2    3
C(1)   1    2 NaN
C(3) NaN NaN   3

$irr
[1] FALSE

$classe_absorbante
      C(1) C(3)
FALSE  TRUE

[1] "la matrice n'est pas irreductible"
NULL
```

Figure 9: Résultat algorithme CMH slide 28

L'étude de ces résultats nous permet en même temps d'expliquer comment l'algorithme fonctionne. Les résultats que nous obtenons, nous permettent de dire que :

- la classe de communication de l'état 1 ($C(1)$) est : $\{1, 2\}$ et la classe de communication de 3 ($C(3)$) est $\{3\}$.
- cette CMH n'est pas irréductible (irr : FALSE).
- $C(1)$ n'est pas absorbante mais $C(3)$ est absorbante.

L'ensemble de ces résultats correspond parfaitement aux résultats théoriques que nous avons obtenus lors de l'étude de cette CMH. Cependant je suis d'accord avec vous un seul exemple ne suffit pas à valider un algorithme. En effet il se peut que l'on soit tombé sur un cas particulier. Pour ne pas surcharger ce compte rendu, nous n'allons pas présenter d'autres exemples pour vérifier cet algorithme. Cependant, si vous regardez le fichier notebook que nous avons joint avec ce compte rendu, vous trouverez d'autres exemple, qui permettent de valider le bon fonctionnement de cet algorithme, et à chaque fois, nous obtenions des résultats similaires aux résultats théoriques.

IV Modèles proposés en cours / travaux dirigés

IV.1 Exercice 2 (Urne d'Ehrenfest)

1. Le processus que nous étudions ici est un processus bien particulier, il s'agit d'un processus de N/M, avec barrière réfléchissante en 0 et N. De plus ce processus possède la particularité de n'avoir aucune

boucle. Cette absence de boucle va faire que la période de la chaîne (car elle est irréductible) est de 2. Pour s'en convaincre, on peut simplement regarder l'état 1 et tous les circuit partant de 1, seront nécessairement de longueur paire (il faut compter l'aller et le retour) on a donc $d(1) = 2$ et comme la chaîne est irréductible, on a une chaîne de période 2.

Cependant nous voulions regarder un résultat que nous avons évoqué en cours. En effet nous avons vu que les condition d'irréductibilité et d'apériodicité étaient des conditions suffisantes à la convergence en loi. Ici on a une chaîne qui est certes irréductible mais qui a une période de 2. Nous allons ainsi regarder à l'aide de graphiques si on peut observer un semblant de convergence en loi ou non.

La réponse semble être non. En effet quand on reprend les mêmes démarches précédentes pour vérifier la convergence en loi, on obtient des graphiques assez étranges du type :

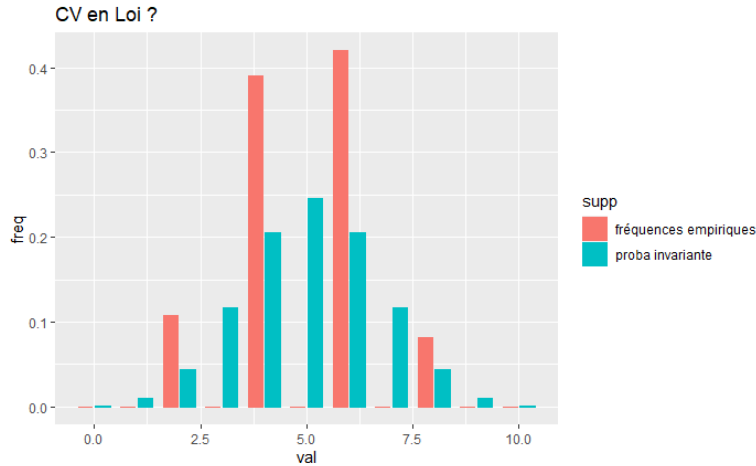


Figure 10: Fréquence en temps long pour $x_0 = 1$, $N=10$

On a observé ce type de graphique pour chaque état de départ x_0 et en effet pour chaque état il semblerait que en temps longs, tous les états ne soient pas visités, en effet à chaque fois en temps long nous n'avions que un état sur deux de visité. Cela ne prouve rien mais il semblerait sur cet exemple que nous n'ayons effectivement pas convergence en loi.

2.a. Sur cette matrice on a rajouté des éléments diagonaux. En effet on a rajouté sur la diagonale de la matrice les termes $(1-p)$, et ainsi on a que $\forall i \in E \tilde{P}(i, i) = 1 - p > 0$ ainsi tous les états de cette sont de période 1. La chaîne est donc apériodique. De plus la transformation de la matrice P en \tilde{P} , n'a pas changé son irréductibilité en effet la transformation à simplement rajouté des boucles dans le graphe de transition de P . Le graphe de transition de la chaîne de \tilde{P} sera celui de P avec des boucles en plus sur chaque états. Ainsi nous avons une chaîne irréductible et apériodique dans un espace d'état finis. On a donc :

- la matrice \tilde{P} admet une unique probabilité invariante $\tilde{\pi}$
- on a convergence en loi du processus \tilde{X}_n vers la probabilité $\tilde{\pi}$

Quand est il de la probabilité invariante $\tilde{\pi}$. On a :

$$\pi \tilde{P} = \pi(pP + (1-p)I_N) = p\pi P + (1-p)\pi = p\pi + (1-p)\pi = \pi$$

Ainsi le processus $\{\tilde{X}_n\}$ admet la même probabilité invariante que le processus $\{X_n\}$, qui est π .

Ainsi au vu de ce qui vient d'être énoncé, on peut conclure que le processus \tilde{X}_n converge en loi vers la probabilité π . Dans les questions suivantes nous allons maintenant nous intéresser à cette convergence de façon numérique en regardant la distance de variation totale.

Ainsi via le résultat théorique qui nous été fournis, nous avons tracé l'évolution de la distance de variation totale dans le temps, en fonction de la condition initiale. Nous obtenons le résultat suivant.

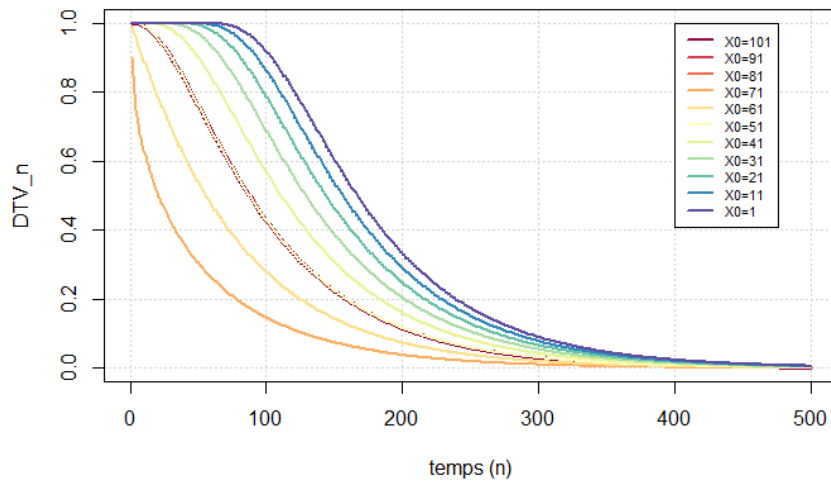


Figure 11: DTV pour différentes CI (N=150)

La distance de variation totale nous permet, dans le cas où on a une convergence en loi, de venir de mesurer la vitesse avec laquelle on converge en loi. Ainsi plus la distance de variation totale, tend vite vers 0, plus la convergence en loi a lieu vite. Il est important d'avoir une idée de cette vitesse de convergence en pratique, car si on cherche à approcher la probabilité invariante de notre chaîne on aura une idée du nombre d'itération à réaliser pour avoir une approximation raisonnable. Ici justement, on observe des comportement très différents suivant l'état initial que nous choisissons. Ici on peut voir que les courbes dans les teintes de **orange** qui correspondent à des états initiaux entre 70 et 80, ont une vitesse de convergence qui est assez rapide. En revanche, si on a des états initiaux qui sont plus faibles, comme avec des valeurs proches de 0, cela correspond aux courbes **violettes**, alors on a une vitesse de convergence plus faible. Et on remarque aussi que la courbe **rouge** qui correspond à $X_0 = 101$ a une vitesse de convergence qui est plus faible comme si quand on augmentait trop l'état initiale on venait à nouveau ralentir la vitesse de convergence.

Ici on peut conjecturer ainsi le comportement suivant, si on a X_0 qui est proche de $\frac{N}{2}$, alors on aura une vitesse de convergence vers π qui sera relativement rapide. En revanche si on démarre vers les extrêmes donc $X_0 = 0$ ou $X_0 = N$, alors on aura une vitesse de convergence assez lente. Cela pourrait s'expliquer physiquement, car ici la probabilité invariante π va traduire comme un état d'équilibre des particules entre les deux urnes. En effet une fois que la probabilité invariante est atteinte, la dynamique du système ne change plus dans le temps. Ici tout se comportait comme si l'état d'équilibre était pour la situation où on a autant de particules dans les deux urnes ainsi quand on part de $X_0 = \frac{N}{2}$ on ne part peut être pas très loin de l'état d'équilibre et ainsi pour peut que la matrice P soit bien conditionnée on va arriver à l'état d'équilibre réelle sans trop d'itérations ce qui traduit la vitesse de convergence qui est assez rapide. En revanche si on part loin de l'état d'équilibre donc vers les extrêmes (0 et N) cette fois ci il nous faudra plus d'itérations d'où la vitesse de convergence assez lente.

Tout ceci n'est qu'une conjecture nous n'avons rien démontré et au vu de nos connaissances en physique la probabilité que cette conjecture soit fausse est non négligeable, mais nous trouvons intéressant de trouver une explication physique à ce phénomène mathématiques et cela permettrait d'illustrer la notion "d'équilibre" quand on a atteint la probabilité invariante.

IV.2 Code R4

1. Dans cette section, on considère, que on travaille sur un processus de naissance et mort, avec barrière réfléchissante en 0.

Le code R qui est fourni, va permettre de simuler le processus de N/M, qui est donné en énoncé. En effet, le processus de naissance et mort qui est présenté dans cette section, peut être modélisé par une récurrence markovienne dite à "bruit blanc" en effet si on considère $\{Z_n\}_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires iid à valeur dans $\{-1, 0, 1\}$ avec pour probabilité respectives $\{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\}$. Et si on considère

$\{X_n\}_{n \geq 0}$ notre CMH, respecte l'équation récurrente suivante :

$$X_{n+1} = |X_n + Z_{n+1}| \quad (4)$$

La valeur absolue se justifie surtout pour le cas où $X_n = 0$, en effet dans ce cas on peut voir que $P(0, 0) = \frac{1}{4} = \mathbb{P}\{Z_{n+1} = 0\}$ et $P(0, 1) = \frac{3}{4} = \mathbb{P}\{Z_{n+1} = -1\} + \mathbb{P}\{Z_{n+1} = 1\} = \mathbb{P}\{|Z_{n+1}| = 1\}$.

Repassons maintenant au code et regardons les différentes étapes.

La variable z , via la fonction `sample`, va contenir les n simulations de la variable Z_n . On initialise $X_0 = 0$, ainsi on part de l'état 0. Ensuite dans la boucle, le calcul effectué, est celui de la récurrence markovienne que respecte X_n on y retrouve ainsi $X_{n+1} = |X_n + Z_{n+1}|$. Et ensuite le graphique qui est fait va venir représenter les fréquences d'occupation de chaque états.

remarque : le code qui est présenté ici permet de faire une simulation d'une chaîne de markov dans le cas où l'espace d'état est infini dénombrable (ici \mathbb{N}). En effet jusqu'ici nous n'avons traité que des cas où l'espace d'états était fini. Grâce à l'équation de récurrence, on arrive à dépasser le fait que les matrices de transitions sont de dimensions infinies. Ces méthodes sont donc très intéressantes dans le cas où on arrive à trouver l'équation de récurrence de la chaîne.

2. Comme on se trouve ici face à un processus N/M. Pour étudier la probabilité invariante, nous pouvons passer par le calcul de la probabilité de réversibilité, et en étudiant la probabilité de réversibilité sur cette chaîne, dont la matrice de transition, est la matrice infinie tridiagonale suivante:

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

l'équation de balance locale, nous donne donc :

Soit π une probabilité de réversibilité. Nous avons :

$$\begin{aligned} \pi(0)P(0, 1) &= \pi(1)P(1, 0) \Leftrightarrow \pi(0) = \frac{2}{3}\pi(1) \\ \forall i \geq 1 \quad \pi(i)P(i, i+1) &= \pi(i+1)P(i+1, i) \Leftrightarrow \pi(i+1) = \frac{1}{2}\pi(i) \end{aligned}$$

Nous avons donc :

$$\pi(i) = \left(\frac{1}{2}\right)^{i-1}\pi(1) \quad \forall i \geq 1$$

Cependant π est une probabilité ainsi on doit avoir :

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{\infty} \pi(i) &= 1 \Leftrightarrow \pi(0) + \sum_{i=1}^{\infty} \pi(i) = 1 \\ &\Leftrightarrow \frac{2}{3}\pi(1) + \pi(1) \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2}\right)^i = 1 \\ &\Leftrightarrow \pi(1) \left(\frac{8}{3}\right) = 1 \\ &\Leftrightarrow \pi(1) = \frac{3}{8} \end{aligned}$$

D'où

$$\pi(0) = \frac{2}{8} = \frac{1}{4} \quad \text{et} \quad \pi(i) = \frac{3}{8} \left(\frac{1}{2}\right)^{i-1} = \frac{3}{4} \left(\frac{1}{2}\right)^i \quad \forall i \geq 1 \quad (5)$$

On obtient bien le résultat souhaité.

Ici on a un processus de N/M donc irréductible, de plus on a trouvé une probabilité invariante. Il nous reste à vérifier le critère d'intégralité. Ici on s'intéresse à la fréquence d'occupation des différents états, on montre alors que :

$$\forall i \in E : \mathbb{E}_\pi[1_{\{X_0=i\}}] = \mathbb{P}_\pi\{X_0 = i\} = \pi(i) < +\infty \text{ par (5)}$$

Les hypothèses de la loi forte des grands nombres étant vérifiées, la convergence est donc assurée. On aura donc :

$$\forall i \in E \quad \forall \pi_0 \quad \text{tq } X_0 \sim \pi_0 : \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n 1_{\{X_k=i\}} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \pi(i)$$

On peut à nouveau venir vérifier ce résultat graphiquement.

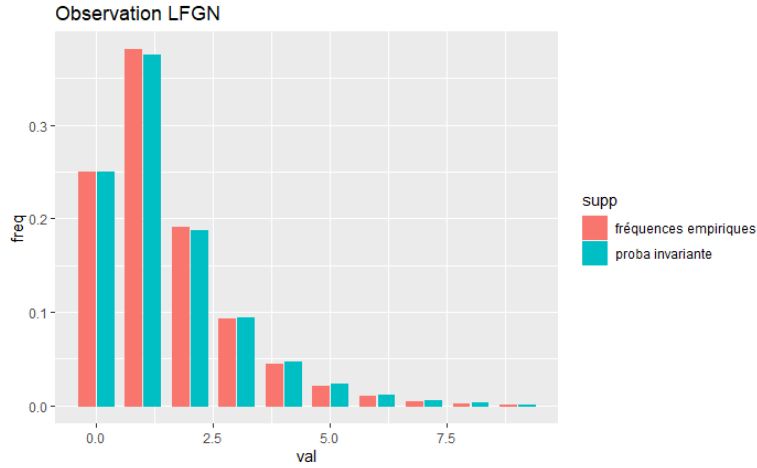


Figure 12: Critère de la LFGN

Finalement, le diagramme en bâton de la fréquence d'occupation des états donne une bonne estimation, après un nombre suffisamment grand d'étape, de la probabilité invariante.

IV.3 Code R5

Ici on étudie une chaîne de Markov Homogène dont la matrice de transition, est donnée

$$P = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 8 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 4 & 4 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 4 & 8 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 16 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 16 \end{pmatrix}$$

et dont le graphe de transition est le suivant :

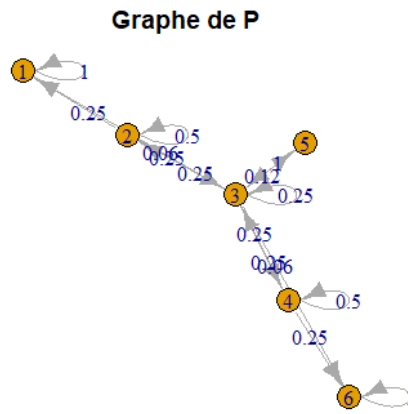


Figure 13: Graphe de transition de la chaîne obtenu avec le package

Ici la chaîne de Markov possède des propriétés qui sont intéressantes. Tout d'abord, la chaîne possède deux états absorbants que l'on regroupe dans l'ensemble $A := \{1, 6\}$. On retrouve ce résultat via la fonction écrite dans la partie CodeR3. En effet si on applique ce code à la matrice de transition qui est donnée, on obtient le résultat suivant :

```
$classe_com
      1  2  3  4  5  6
C(1)  1 NaN NaN NaN NaN NaN
C(2) NaN 2  3  4  5 NaN
C(6) NaN NaN NaN NaN NaN 6

$irr
[1] FALSE

$classe_absorbante
C(1) C(2) C(6)
TRUE FALSE TRUE
```

Figure 14: Résultat de l'algorithme écrit en R3

De plus on peut voir sur le graphe de transition ou encore sur la matrice de transition, on peut voir que peu importe l'état $i \in \{2, 3, 4, 5\}$, on a la propriété suivante : $i \rightarrow 1$ et $i \rightarrow 6$.

Ainsi nous sommes sous des conditions, qui nous permettent d'utiliser les résultats de l'exercice 8 fait en TD, qui nous permet d'utiliser plusieurs résultats différents.

Le premier est que, si on appelle $A = \{1, 6\}$, l'ensemble des états absorbant et que on considère T_A la variable aléatoire qui est le temps d'atteintes de l'ensemble A . On a que :

$$\forall X_0 \sim \pi_0 : \mathbb{P}_{\pi_0}\{T_A < +\infty\} = 1 \quad (6)$$

Ainsi le temps d'atteinte de l'ensemble A est presque sûrement fini. L'objectif dans la suite est en fait d'essayer de venir vérifier cette propriété. C'est le but de la fonction écrite dans la section code R5.

Cette fonction permet en fait de simuler m trajectoires de la CMH étudiée à partir d'un état initial donnée X_0 . La fonction dispose ainsi d'une boucle for pour chaque itération de la boucle, la fonction va simuler une trajectoire de la chaîne de Markov et s'arrête dès que on tombe dans un état absorbant. Chaque itération est théoriquement presque sûrement finie. Si on trace les histogrammes en fréquence des temps d'absorption T_A en fonction de chaque état initial, on obtient :

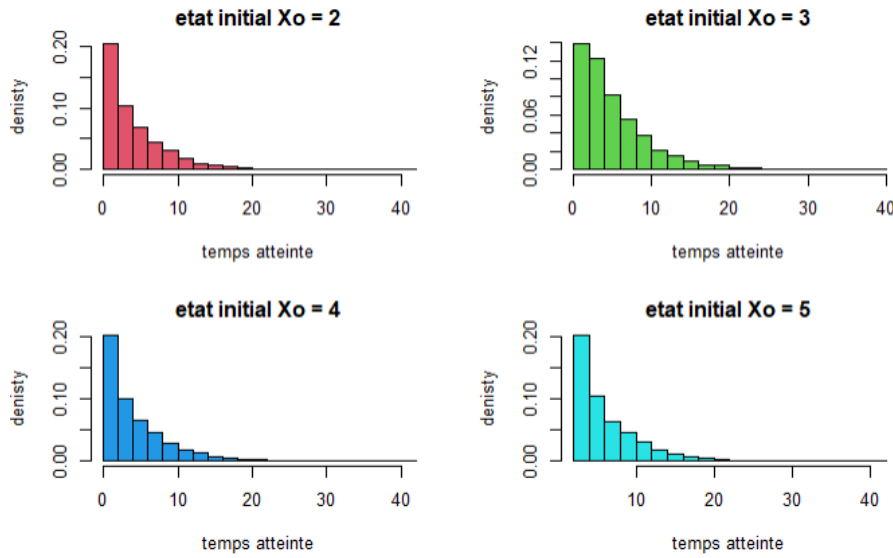


Figure 15: histogramme des densités des temps d'atteintes

On peut voir sur ces histogrammes que on a le résultat suivant :

$$\forall X_0 = i, \quad i \in \{2, 3, 4, 5\} \quad : \quad \widehat{\mathbb{P}_{X_0=i}\{T_A < 30\}} \approx 1$$

Ainsi ceci est en accord avec le résultats théorique de l'exercice 8. Évidemment pour se convaincre vraiment que ceci est en accord avec l'exo 8 il faudrait vraiment vérifier ce résultats pour toutes loi π_0 , mais ceci est impossible, de plus dans beaucoup d'application pratique des modèles Markoviens, on se fixe un état de départ X_0 (comme nous avons fait) dans l'espace d'état, on connaît notre états X_0 et ce que l'on cherche c'est savoir comment le système va se comporter par la suite.

Le second résultat que l'on peut trouver dans l'exercice 8 est que : Si on considère la matrice N comme :

$$N = (I - P_{\bar{A}\bar{A}})^{-1} = (I - \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 8 & 4 & 0 & 0 \\ 4 & 4 & 4 & 2 \\ 0 & 4 & 8 & 0 \\ 0 & 16 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix})^{-1}$$

Alors nous avons :

$$\mathbb{E}[T_A | X_0 = i] = N1$$

Nous avons ainsi un résultat, qui nous permet de trouver le temps moyen d'absorption. Pour venir illustrer ce critère, à partir des simulations déjà faites, nous avons calculé le temps d'absorption empirique et nous avons calculé la matrice N, afin d'avoir la version théorique des temps d'absorption et nous les avons comparés. Nous obtenons le résultat suivant :

Etat_initiale	Temps_moyen_th	Temps_moyen_Emp
x0=2	4.833	4.800
x0=3	5.667	5.678
x0=4	4.833	4.744
x0=5	6.667	6.692

Figure 16: Comparaison des temps d'attentes d'absorption

Les résultats obtenus sont globalement proches des résultats théoriques. C'est cool !

V Conclusion

A travers ce projet nous avons pu illustrer l'ensemble des grands résultats vus en cours avec notamment la convergence en loi et la loi forte des grands nombres, appliquées aux chaînes de Markov.

Nous avons pu aussi illustrer une sorte de dualité "chaînes de Markov/graphes" et ainsi nous rendre compte qu'il est parfois plus simple d'oublier le contexte initiale d'étude (ici les chaînes de Markov) et de passer par des résultats plus abstraits (ici la théorie des graphes) pour pouvoir trouver des solutions numériques plus simples pour nos problèmes. Ceci est un concept qu'il sera intéressant de retenir pour la suite de notre parcours.

Une fois de plus nous nous sommes beaucoup concentré sur la simulation et les problèmes qu'elle engendre. La simulation est aujourd'hui un outil essentiel en entreprise car cela permet d'avoir une idée du comportement d'un phénomène en limitant les dépenses. Elle est aussi utile dans le domaine de l'intelligence artificielle. En effet au cours des différents séminaires d'entreprises nous avons pu voir qu'il est très courant de fabriquer des données artificielles à partir de simulation, car cela est moins coûteux, pour ensuite entraîner un modèle d'apprentissage statistiques à partir de ces données. Il est donc essentiel de savoir simuler et vérifier la qualité de la simulation.