

CHAÎNES DE MARKOV ET PROBABILITÉS INVARIANTES

- 203, 206, 226, 262, 264 –

Dans ce développement, on va s'intéresser à l'existence et à l'unicité de mesures de probabilités invariantes pour des chaînes de Markov à espace d'états fini en fonction des propriétés de leurs noyaux de transition. C'est un développement qui s'adresse majoritairement aux options A. Tous les outils qui y seront utiles sont au programme de l'option, mais une bonne partie est hors-programme au tronc commun.

Soit $\mathcal{X}$ un ensemble fini de cardinal d . On considère $X = (X_n)$ une chaîne de Markov à valeurs dans $\mathcal{X}$ de noyau de transition $P \in \mathbb{M}_d(\mathbb{R})$ défini par :

$$\forall (x, y) \in \mathcal{X}^2, P(x, y) = \mathbb{P}(X_1 = y \mid X_0 = x) \quad (1)$$

Si π est une mesure de probabilité sur $\mathcal{X}$, représentée par un vecteur ligne, on note (X_n^π) la chaîne de noyau P et de loi initiale π . Dans ce cas, la loi de X_n^π est donnée par $\pi \cdot P^n$. Une telle probabilité est dite P -invariante si pour tout $n \in \mathbb{N}$, la loi de X_n^π est π . En d'autres termes, π est un vecteur propre à gauche de P à composantes positives et tel que $\|\pi\|_1 = 1$.

On va s'intéresser ici à des conditions d'existence et d'unicité d'une telle probabilité invariante, et à une manière algorithmique de les approcher.

Existence d'une probabilité invariante

Lorsque l'espace d'état est fini, il existe toujours une mesure **de probabilité** invariante⁽ⁱ⁾.

Théorème 1 (Existence d'une mesure de probabilité invariante ([1], 2.2.1)). *Toute chaîne de Markov X sur $\mathcal{X}$ admet une probabilité invariante π .*

Démonstration. Comme $\mathcal{X}$ est fini, une mesure de probabilité sur $\mathcal{X}$ est complètement décrite par les probabilités atomiques, aussi l'ensemble $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ des mesures de probabilité sur $\mathcal{X}$ s'identifie à un sous-ensemble de $\mathbb{R}^{\mathcal{X}}$, décrit de la façon suivante :

$$\mathcal{P}(\mathcal{X}) \cong \{p : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}_+ \mid \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) = 1\} \quad (2)$$

Il s'agit d'un sous-ensemble convexe, fermé et borné de $\mathbb{R}^{\mathcal{X}}$. Comme cet espace est de dimension finie, c'est un compact.

(i). Il est important de bien préciser mesure de probabilité, car la mesure nulle est toujours une mesure invariante, même lorsque l'espace d'états n'est pas fini.

Soit $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$. On considère la suite $(\tilde{\mu}_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ définie par :

$$\tilde{\mu}_n := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mu \cdot P^k \quad (3)$$

Comme P est une matrice stochastique, $\mu \cdot P^k \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ pour tout k . De plus, par convexité de $\mathcal{P}(\mathcal{X})$, cette suite est à valeurs dans $\mathcal{P}(\mathcal{X})$. Elle est en particulier bornée, et donc :

$$\tilde{\mu}_n \cdot P - \mu = \frac{1}{n} (\mu \cdot P^{n+1} - \mu) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \quad (\star)$$

De plus, par compacité de $\mathcal{P}(\mathcal{X})$, $(\tilde{\mu}_n)$ admet une valeur d'adhérence notée π . En passant à la limite le long d'une sous-suite adéquate dans $(\star)$, on trouve :

$$\pi \cdot P - \pi = 0 \quad (4)$$

et donc π est une probabilité invariante. $\square$

Remarque : L'hypothèse de finitude de $\mathcal{X}$ est cruciale ici : le raisonnement précédent exploite la description des compacts de $\mathcal{P}(\mathcal{X})$, or cet espace est de dimension infinie si $\mathcal{X}$ est infini. On trouve facilement des contre-exemples lorsque notre chaîne de Markov est à espace d'états infini. Par exemple, la suite (déterministe) $X_{n+1} = X_n + 1$, $X_0 = 0$ est une chaîne de Markov définie sur $\mathbb{N}$, dont la seule mesure invariante est la mesure nulle (qui n'est pas une mesure de probabilité). $\blacklozenge$

Condition suffisante d'unicité ([1], 2.2.2)

On va maintenant s'intéresser à une condition simple permettant d'affirmer l'unicité de la mesure invariante.

Définition 2 (Chaîne irréductible). Une chaîne de Markov (X_n) est dite irréductible lorsque :

$$\forall (x, y) \in \mathcal{X}^2, \exists k \in \mathbb{N}^* : \mathbb{P}(X_k = y, X_0 = x) > 0 \quad (5)$$

Remarque : De façon équivalente, une chaîne de Markov est irréductible si son graphe est fortement connexe. On peut encore caractériser l'irréductibilité d'une chaîne par son noyau de transition :

$$\forall (x, y) \in \mathcal{X}^2, \exists k \in \mathbb{N}^* : P^k(x, y) > 0 \quad (6)$$

On dit dans ce cas que la matrice P est irréductible. $\blacklozenge$

Théorème 3. Soit (X_n) une chaîne de Markov à valeurs dans $\mathcal{X}$. Si (X_n) est irréductible, elle admet une unique mesure de probabilité invariante π . De plus :

$$\forall x \in \mathcal{X}, \pi(\{x\}) > 0 \quad (7)$$

lorsque cette écriture a du sens.

Avant de passer à la démonstration du théorème, on va introduire la notion de fonction P -invariante.

Définition 4 (Fonction P -invariante). Une fonction $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ est dite P -invariante si :

$$\forall x \in \mathcal{X}, \mathbb{E}[f(X_1) \mid X_0 = x] = f(x) \quad (8)$$

Démonstration. Soit π une mesure de probabilités invariante pour $\mathcal{X}$, fournie par le théorème précédent. On va commencer par montrer que π charge tous les points de $\mathcal{X}$. Soit $x \in \mathcal{X}$. Comme π est une mesure de probabilité, il existe $y \in \mathcal{X}$ tel que $\pi(\{y\}) > 0$. Par irréductibilité de la chaîne de Markov, il existe $k > 0$ tel que $P^k(y, x) > 0$. Ainsi, en exploitant le fait que pour tout $n \in \mathbb{N}$, X_n^π est de loi π , on a :

$$\pi(\{x\}) = \mathbb{P}(X_k^\pi = x) \quad (9)$$

$$= \sum_{z \in \mathcal{X}} \mathbb{P}(X_k^\pi = x \mid X_0^\pi = z) \mathbb{P}(X_0^\pi = z) \quad (10)$$

$$= \sum_{z \in \mathcal{X}} P^k(z, x) \pi(\{z\}) \quad (11)$$

$$\geq P^k(y, x) \pi(\{y\}) \quad (12)$$

$$> 0 \quad (13)$$

Donc π charge tous les points.

On va maintenant travailler sur les fonctions P -invariantes :

Lemme 5. Les fonctions P -invariantes sont constantes.

Démonstration. Soit f une fonction P -invariante. On va montrer que la quantité :

$$\mathcal{E}(f) := \mathbb{E}[(f(X_1^\pi) - f(X_0^\pi))^2] \quad (14)$$

est nulle. Pour cela, on développe directement :

$$\mathcal{E}(f) = \mathbb{E}[f(X_1^\pi)^2] + \mathbb{E}[f(X_0^\pi)^2] - 2\mathbb{E}[f(X_1^\pi)f(X_0^\pi)] \quad (15)$$

Mais X_0^π et X_1^π ont même loi (π). Donc :

$$\mathbb{E}[f(X_1^\pi)^2] = \mathbb{E}[f(X_0^\pi)^2] \quad (16)$$

Pour simplifier le terme croisé, on va utiliser l'espérance conditionnelle ⁽ⁱⁱ⁾ :

$$\mathbb{E}[f(X_1^\pi)f(X_0^\pi)] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[f(X_1^\pi)f(X_0^\pi) \mid X_0^\pi]] \quad (17)$$

$$= \mathbb{E}[\mathbb{E}[f(X_1^\pi) \mid X_0^\pi]f(X_0^\pi)] \quad (18)$$

$$= \mathbb{E}[f(X_0^\pi)^2] \quad (19)$$

(ii). Quitte à faire joujou avec l'artillerie de l'option A, autant y aller à fond...

en utilisant le fait que $f(X_0^\pi)$ est une variable aléatoire $\sigma(X_0^\pi)$ -mesurable et bornée et que f est P -invariante. En combinant ces égalités, on trouve bien :

$$\mathcal{E}(f) = 0 \quad (20)$$

De cela, on déduit que f est constante, puisqu'on a :

$$\mathbb{E}[(f(X_1^\pi) - f(X_0^\pi))^2] = \sum_{(x,y) \in \mathcal{X}^2} (f(y) - f(x))^2 \mathbb{P}(X_1^\pi = y, X_0^\pi = x) \quad (21)$$

$$= \sum_{(x,y) \in \mathcal{X}^2} (f(y) - f(x))^2 \mathbb{P}(X_1^\pi = y \mid X_0^\pi = x) \mathbb{P}(X_0^\pi = x) \quad (22)$$

$$= \sum_{(x,y) \in \mathcal{X}^2} (f(y) - f(x))^2 P(x, y) \pi(\{x\}) \quad (23)$$

et comme π charge tous les points, on a :

$$\forall (x, y) \in \mathcal{X}^2, (f(x) - f(y))^2 P(x, y) = 0 \quad (24)$$

Or par irréductibilité de P , il existe nécessairement $x_1, \dots, x_k$ un chemin dans $\mathcal{X}$ telle que $P(x_i, x_{i+1}) > 0$ pour tout i ⁽ⁱⁱⁱ⁾. On a alors $f(x_i) = f(x_{i+1})$ pour tout i et donc f est constante sur $\mathcal{X}$. $\square$

Soit ν une autre mesure de probabilité invariante. On considère alors la fonction :

$$\begin{aligned} f : \mathcal{X} &\rightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto \frac{\nu(\{x\})}{\pi(\{x\})} \end{aligned} \quad (25)$$

bien définie puisque ν charge tous les points en tant que mesure de probabilité invariante. On définit la matrice :

$$\forall (x, y) \in \mathcal{X}^2, Q(x, y) := \frac{\pi(\{y\})}{\pi(\{x\})} P(y, x) \quad (26)$$

C'est une matrice stochastique. En effet, à x fixé :

$$\sum_{y \in \mathcal{X}} Q(x, y) = \frac{1}{\pi(\{x\})} \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi(\{y\}) P(y, x) = 1 \quad (27)$$

car π est P -invariante. Elle est de plus irréductible puisque π charge tous les points et P est irréductible. Montrons que f est Q -invariante. Soit (Y_n) une chaîne de Markov de noyau de transition Q et soit $x \in \mathcal{X}$. On a :

$$\mathbb{E}[f(Y_1) \mid Y_0 = x] = \sum_{y \in \mathcal{X}} f(y) \mathbb{P}(Y_1 = y \mid Y_0 = x) \quad (28)$$

$$= \sum_{y \in \mathcal{X}} \frac{\nu(\{y\})}{\pi(\{y\})} Q(x, y) \quad (29)$$

$$= \frac{1}{\pi(\{x\})} \sum_{y \in \mathcal{X}} \nu(\{y\}) P(y, x) \quad (30)$$

$$= f(x) \quad (31)$$

(iii). Cela se voit bien en utilisant le fait que le graphe associé à (X_n) est fortement connexe, et donc il existe un chemin parcourant tous ses sommets, qui sont les éléments de $\mathcal{X}$. Comme deux sommets x et y sont reliés si, et seulement si $P(x, y) > 0$, on peut construire un tel chemin.

car ν est P -invariante. Ainsi, f est une fonction constante, et nécessairement, $\nu = \pi$. $\square$

Remarque : Si on retire l'hypothèse d'irréductibilité, on n'a pas l'unicité de la mesure de probabilité invariante. Par exemple, on peut considérer le modèle de Wright-Fisher : sur $\mathcal{X} = \llbracket 1, d \rrbracket$, on définit une chaîne de Markov (X_n) de sorte à ce que la loi de X_{n+1} sachant X_n soit $\mathcal{B}(d, X_n/d)$ (ou de façon plus formelle, $\mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x) = \binom{d}{y} (x/d)^y (1 - x/d)^{d-y}$). Alors δ_1 et δ_d sont deux probabilités invariantes pour cette chaîne. $\blacklozenge$

Application 6. Si (X_n) est irréductible, alors pour toute mesure de probabilité μ sur $\mathcal{X}$, la suite géométrique $(\mu \cdot P^n)$ converge au sens de Césaro vers la probabilité invariante.

Démonstration. On a vu dans la première partie que la suite :

$$\tilde{\mu}_n := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mu \cdot P^k \quad (32)$$

est à valeur dans le compact $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ et que ses valeurs d'adhérence sont toutes des probabilités invariantes. Puisqu'il n'existe qu'une seule telle probabilité invariante, $(\tilde{\mu}_n)$ n'a qu'une valeur d'adhérence, donc elle converge par compacité. $\square$

Références

- [1] Michel BENAÏM et Nicole EL KAROUI. *Promenade aléatoire*. Les éditions de l'Ecole Polytechnique, 2007. ISBN : 978-2-7302-1168-0.