Une introduction aux chaînes de Markov

1. Définition d'une chaîne de Markov

Définition. — *Une suite $(X_n)_{n\geqslant 0}$ de variables aléatoires à valeurs dans un ensemble discret E est appelée une* chaîne de Markov *lorsque pour tout $n \in \mathbb{N}$, pour tout $x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}$ dans E tel que $P(X_n = n, \dots, X_0 = x_0) > 0$,*

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

Si, de plus, cette quantité ne dépend pas de n, autrement dit lorsque $P(X_{n+1} = y \mid X_n = x) = P(X_1 = y \mid X_0 = x)$ la chaîne de Markov est dite homogène.

Autrement dit, une suite (X_n) de variables aléatoires est une chaîne de Markov lorsque pour tout $n \in \mathbb{N}$, X_{n+1} est indépendant du vecteur aléatoire $(X_0, \dots, X_{n-1})$ conditionnellement à la variable aléatoire X_n. L'évolution du système ne dépend que de l'instant présent et pas du passé : les chaînes de Markov sont des processus sans mémoire.
Par ailleurs, une chaîne de Markov homogène ne dépend pas pour son évolution de la date à laquelle elle se produit, mais uniquement de l'état du système au moment où cette évolution se produit.

Dans la suite de ce document on ne considérera que des chaînes de Markov homogènes à valeurs dans un ensemble fini $E = \{x_1, \dots, x_N\}$.

Définition. — *Lorsque (X_n) est une chaîne de Markov homogène, on appelle* probabilité de transition *pour aller de l'état x_i à l'état x_j la probabilité $p_{i,j} = P(X_{n+1} = x_j \mid X_n = x_i)$, soit encore $p_{i,j} = P(X_1 = x_j \mid X_0 = x_i)$ puisque (X_n) est supposée homogène.*

On appelle *matrice de transition* la matrice $P = (p_{i,j})_{1\leqslant i,j\leqslant N} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$.

Proposition 1.1 — *La matrice de transition P est une matrice* stochastique, *dans le sens où elle vérifie les deux propriétés :*

(i) pour tout $(i,j) \in [\![1,N]\!]^2$, $p_{i,j} \geqslant 0$ (les coefficients sont positifs) ;

(ii) pour tout $i \in [\![1,N]\!]$, $\displaystyle\sum_{j=1}^{N} p_{i,j} = 1$ (la somme des coefficients d'une ligne est égale à 1).

Remarque. La seconde de ces deux propriétés implique de manière évidente que 1 est valeur propre de P, et que le vecteur V ayant toutes ses composantes égales à 1 est un vecteur propre associé à cette valeur propre.

Théorème 1.2 — *On note v_n la loi de X_n, autrement dit $v_n = \big(P(X_n = x_0), \dots, P(X_n = x_N)\big)$. Alors $v_n = v_0 P^n$.*

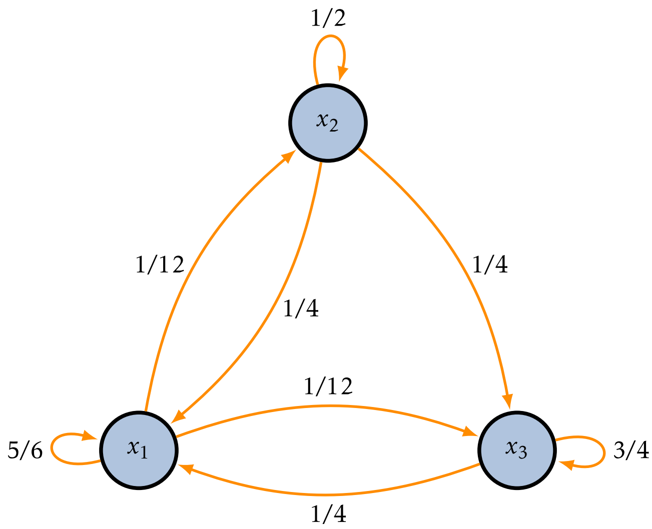
Démonstration. Pour tout $j \in [\![1,N]\!]$, $P(X_{n+1} = x_j) = \displaystyle\sum_{i=1}^{N} P(X_{n+1} = x_j \mid X_n = x_i) P(X_n = x_i) = \sum_{i=1}^{N} p_{i,j} P(X_n = x_i)$, et ces égalités traduisent l'égalité matricielle $v_{n+1} = v_n P$. On en déduit sans peine par récurrence que $v_n = v_0 P^n$. □

Ainsi, l'étude de l'évolution de la loi de X_n se ramène à un problème d'algèbre linéaire. En particulier, on notera que si $vP = v$ et si X_n a pour loi v, alors X_{n+1} aussi : on dit que la loi v est *invariante*.

Exemple. Durant l'hiver Zébulon peut être dans trois états : en bonne santé (état x_1), enrhumé (état x_2), grippé (état x_3). Son état le jour $n+1$ dépend de son état au jour n et pas des jours précédents :

- s'il est en bonne santé, il le reste le lendemain avec une probabilité égale à 5/6, il s'enrhume avec une probabilité égale à 1/12 et attrape la grippe avec une probabilité égale à 1/12 ;
- s'il est enrhumé il le reste avec une probabilité égale à 1/2, guérit avec une probabilité égale à 1/4 et attrape la grippe avec une probabilité égale à 1/4 ;
- s'il est grippé, il le reste avec probabilité égale à 3/4 et guérit avec une probabilité égale à 1/4.

L'évolution de l'état de santé de Zébulon peut être représenté par le graphe suivant :



Une fois un graphe associé à une chaîne de Markov comme le présente l'exemple ci-dessus, on dit que l'état x_j est *accessible* à partir de l'état x_i lorsqu'il existe un chemin dans le graphe menant de x_i à x_j.

Définition. — *Une chaîne de Markov est dite* irréductible *lorsque tous les états communiquent entre eux, c'est-à-dire lorsque pour tout $i \neq j$ l'état x_j est accessible à partir de l'état x_i.*

Définition. — *On appelle* période *d'un état x_k le pgcd des longueurs des chemins allant de x_k à lui-même. Un état x_k est dit* apériodique *lorsque sa période est égale à 1 ; une chaîne de Markov est dite* apériodique *lorsque tous ses états sont apériodiques.*

Remarque. Lorsqu'il existe une boucle d'un état sur lui-même, cet état est apériodique, puisqu'il existe alors un chemin de longueur 1 reliant cet état à lui-même. On admettra en outre qu'un graphe irréductible qui possède un sommet apériodique est apériodique.

Exercice 1

a) Le graphe associé à l'état de santé de Zébulon est-il irréductible ? apériodique ?

b) On suppose qu'au premier janvier Zébulon est en bonne santé. Rédiger une fonction Python qui simule l'état de santé de Zébulon durant n jours et qui renvoie le pourcentage du nombre de jours où ce dernier a été en bonne santé, enrhumé, grippé. Lorsque n grandit vous semble-t-il qu'il y a convergence de ce triplet ?

c) Recommencer en partant d'un autre état (enrhumé ou grippé). Les valeurs limites sont-elles les mêmes ?

d) Écrire la matrice de transition P de la chaîne de Markov modélisant cette situation, et chercher un vecteur propre de P^{T} (on pourra utiliser la fonction `eig` du module `numpy.linalg` – voir le mémo de l'école Centrale). En déduire une loi v invariante (c'est-à-dire telle que $v = v\mathrm{P}$). Qu'observe-t-on ?

e) Calculer P^{100}. Qu'observe-t-on ? Le prouver.

La simulation numérique que vous venez de réaliser illustre un des principaux résultats de l'étude des chaînes de Markov :

Théorème 1.3 — *Soit (X_n) une chaîne de Markov à ensemble d'états fini. Alors elle possède au moins une loi de probabilité invariante v (c'est-à-dire telle que $v = v\mathrm{P}$).*
Si (X_n) est irréductible, cette loi invariante est unique. Enfin, si (X_n) est irréductible et apériodique, alors (P^n) converge vers une matrice dont toutes les lignes sont constantes égales à v. En particulier, quelle que soit la loi de X_0, (X_n) converge en loi vers v.

Exercice 2 Zébulon est en prison et dispose de 3€. Il peut être libéré à condition de payer une caution de 8€. Un gardien accepte de parier avec lui : à chaque tour Zébulon gagne 1€ avec une probabilité égale à 0,4 et perd 1€ avec une probabilité égale à 0,6. Ils jouent jusqu'à ce que Zébulon soit sorti de prison ou ruiné. On peut modéliser ceci à l'aide d'une chaîne de Markov dont les états sont la fortune de Zébulon, comprise dans $[\![0,8]\!]$.

a) Représenter sur un papier le graphe associé à cette chaîne de Markov. Comment doit-on définir les transitions partant des états 0 et 8 ? (de tels états sont dits *absorbants*). Est-elle irréductible ? apériodique ?

b) Définir (avec Python) la matrice de transition P, et à l'aide de cette matrice obtenir numériquement la loi de la fortune de Zébulon au bout de 3 tours, 10 tours, 100 tours.

c) Donner une valeur approchée de la probabilité que Zébulon finisse par sortir de prison, puis réaliser une simulation numérique de ce jeu pour estimer cette même probabilité.

d) À l'aide de Python, diagonaliser la matrice P^T, et en déduire la limite de la suite (X_n) (on donnera la valeur numérique de cette limite). Ce résultat est-il conforme aux résultats des deux questions précédentes ?

e) Donner une valeur approchée de l'espérance du nombre de fois qu'il va parier (jusqu'à sortir de prison ou être ruiné).

2. L'algorithme *PageRank* de Google

Lors d'une requête sur le moteur de recherche Google, les pages Web renvoyées sont triées en prenant en compte, entre autres, le score *PageRank* de la page Web. Ce dernier dépend uniquement des liens qui existent entre les pages Web et peut être interprété, pour une page donnée, comme la probabilité qu'un surfeur se déplaçant sur le Web consulte à un moment donné cette page. On peut en effet se représenter le Web comme un graphe où chaque sommet représente une page Web et dans le quel il existe un arc dirigé entre deux pages n_1 et n_2 si la page n_1 contient un lien vers la page n_2. La navigation sur le Web peut alors être représentée par une marche aléatoire sur ce graphe et modélisé par une chaîne de Markov dont chaque état possible correspond à une des pages du Web.
Sous certaines conditions, le score *PageRank* d'une page Web est alors la probabilité qu'un surfeur quelconque se trouve sur cette page à un moment donné, et peut être déterminé par la loi invariante de la chaîne de Markov associée.

Exercice 3 Une portion du Web est représentée par sa *matrice d'adjacence* : une matrice A définie par

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{s'il existe un lien de la page } x_i \text{ vers la page } x_j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Dans le cadre de cet exercice on considère cinq pages Web hypothétiques associées à la matrice d'adjacence suivante :

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

a) Dessiner le graphe associé. Ce dernier est-il irréductible ? apériodique ?

b) Un surfeur se déplace sur ce graphe en choisissant sur chaque page rencontrée un lien au hasard parmi les liens présents sur la page, en effectuant ce choix indépendamment des pages précédemment visitées. Construire la matrice de transition P de la chaîne de Markov modélisant ce surfeur.

c) Déterminer la loi invariante de cette chaîne. D'après le théorème 1.3, cette loi détermine le score *PageRank* des cinq pages Web du graphe A_1. Dans quel ordre sont classées ces cinq pages ?

d) On considère maintenant les deux nouvelles matrices d'adjacence définies ci-dessous :

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Dessiner les deux graphes correspondants. ceux-ci sont-ils irréductibles ? apériodiques ? Compte tenu du théorème 1.3, quel problème cela pose-t-il pour la détermination du score *PageRank* de ces graphes ?

En plus des limitations mises en évidence à la question précédente, le modèle du surfeur présenté jusqu'ici souffre d'un autre défaut : il ne précise pas comment traiter les pages web qui ne contiennent aucun lien (on les appelle des *dangling nodes*).
Le modèle utilisé jusqu'ici pour calculer le score *PageRank* est dès lors modifié de la manière suivante :

- un lien artificiel est ajouté à chaque dangling node vers toutes les autres pages ;
- avec une probabilité α le surfeur a la possibilité de se téléporter vers une page choisie aléatoirement parmi toutes les pages (y compris la page où il se trouve) ; avec une probabilité $1 - \alpha$ il choisit un lien aléatoire sur la page courante.

La téléportation permet de modéliser un utilisateur qui déciderait au bout d'un moment d'entrer une nouvelle URL sur son navigateur plutôt de de suivre un des liens sur la page où il se trouve.
Il n'est dès lors pas difficile de constater que la chaîne de Markov associée à ce nouveau modèle est irréductible et apériodique.

Exercice 4

a) Rédiger une fonction `markov(A, alpha)` qui prend pour argument une matrice d'adjacence et renvoie la matrice de transition associée à la chaîne de Markov définie par la modélisation ci-dessus.

b) En déduire une fonction `pagerank(A, alpha)` qui prend pour argument une matrice d'adjacence et renvoie le score *PageRank* des différentes pages associées à ce graphe.

c) Utiliser cette fonction pour calculer le score *PageRank* des pages associées à chacune des trois matrices A_1, A_2 et A_3 pour la valeur $\alpha = 0,15$, et commenter les résultats.

Les réponses attendues

Exercice 1 La loi invariante est $(0.6, 0.1, 0.3)$: Zébulon est en bonne santé 60% du temps, enrhumé 10% du temps et grippé 30% du temps.

Exercice 2 Zébulon a approximativement $9,6\%$ de chance de sortir de prison ; il réalise en moyenne un peu plus de 11 parties avant de sortir de prison ou d'être ruiné.

Exercice 3 Le *PageRank* de A_1 vaut approximativement $(0.20, 0.37, 0.24, 0.12, 0.06)$.

Exercice 4 Avec téléportation, les *PageRank* respectifs de A_1, A_2 et A_3 sont :

- $(0.21, 0.34, 0.24, 0.13, 0.08)$;
- $(0.33, 0.31, 0.16, 0.10, 0.10)$;
- $(0.24, 0.23, 0.12, 0.19, 0.19, 0.03)$.