

Les chaînes de Markov: fondements, propriétés, calcul

Alain Jean-Marie
LIRM/INRIA
a.jm@lirm.fr

Journée Mathématique et Informatique pour la
Biodiversité
IFR 119
Montpellier, 31 octobre 2003

Plan de l'exposé

0. Généralités
1. Chaînes de Markov en temps discret: calcul Markovien, et algèbre linéaire
 - Probabilités d'état
 - Probabilités stationnaires
 - Temps d'atteinte
2. Chaînes de Markov en temps continu
 - Définition, interprétation, constructions
 - Relations avec le temps discret
 - Calcul de probabilités
 - Réversibilité
3. Composition de chaînes de Markov

Chaînes de Markov

Ce sont des **processus stochastiques** qui «vivent» dans un espace d'état \mathcal{E} .

Deux catégories:

en temps discret	$\{X(n), n \in \mathbb{Z}\}$
en temps continu	$\{X(t), t \in \mathbb{R}\}$

Temps discret: suite de variables aléatoires.

Temps continu: famille de fonctions aléatoires $\omega \mapsto X(t; \omega)$.

Propriété de Markov

Propriété fondamentale: l'absence de « mémoire ».

Étant donné

- un instant t (le « présent »),
- un ensemble de n observations dans le « passé » du processus:
à des dates $t_0 < t_1 < \dots < t_n = t$, le processus a pris successivement les valeurs j_0, j_1, \dots, j_n
- un instant $t_{n+1} > t$ dans le « futur » du processus:

la probabilité que $X(t_{n+1}) = j$ ne dépend que du **dernier événement observé**:

$$\mathbb{P}\{X(t_{n+1}) = j_{n+1} | X(t_n) = j_n, \dots, X(t_0) = j_0\} = \mathbb{P}\{X(t_{n+1}) = j_{n+1} | X(t_n) = j_n\} \cdot$$

Si de plus cette probabilité ne dépend pas du temps, la chaîne est **homogène**.

Problèmes de chaînes de Markov

Analyse Étant donnée une chaîne de Markov, calculer ses **statistiques**:

- probabilités d'état transitoires, à tout instant t
- probabilités stationnaires $t \rightarrow \infty$
- fréquences de visite, nombre de transitions
- temps d'atteinte, temps de retour
- ...

Synthèse Étant données certaines statistiques, trouver une chaîne de Markov.
 A besoin de formules, algorithmes résultant de l'analyse...

Puissance du modèle:

Propriété de Markov \iff problèmes linéaires

Plan de l'exposé

0. Généralités
1. Chaînes de Markov en temps discret: calcul Markovien, et algèbre linéaire
 - Probabilités d'état
 - Probabilités stationnaires
 - Temps d'atteinte
2. Chaînes de Markov en temps continu
 - Définition, interprétation, constructions
 - Relations avec le temps discret
 - Calcul de probabilités
 - Réversibilité
3. Composition de chaînes de Markov

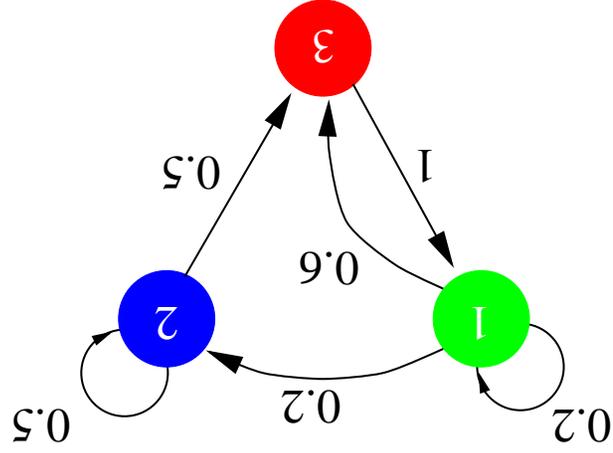
Les chaînes de Markov en temps discret (CMTD)

En temps discret, la propriété de Markov peut se résumer à :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X(t+1) = j | X(t) = i, X(t-1) = j_{t-1}, \dots, X(0) = j_0\} \\ = \mathbb{P}\{X(t+1) = j | X(t) = i\} \\ = P_{i,j} \end{aligned}$$

Les nombres $P_{i,j}$, $(i, j) \in \mathcal{E} \times \mathcal{E}$ sont les **probabilités de transition**, et la matrice P dont les composantes sont les $P_{i,j}$ est la **matrice de transition**.

Exemple de chaîne de Markov



$$P = \begin{pmatrix} 0.2 & 0.2 & 0 \\ 0.2 & 0.5 & 0 \\ 0.6 & 0.5 & 1 \end{pmatrix} .$$

Matrice de transition

Vecteurs de probabilité:

$$\begin{aligned} \pi_0 &= (1 & 0 & 0) \\ \pi_1 &= (0.2 & 0.2 & 0.6) \\ \pi_2 &= (0.64 & 0.14 & 0.22) \\ \pi_3 &= (0.348 & 0.198 & 0.454) \\ \pi_4 &= (0.5236 & 0.1686 & 0.3078) \\ &\vdots \\ \pi_\infty &= (5/11 & 2/11 & 4/11) \end{aligned}$$

Dynamique des probabilités

Soit $P(n)$ la matrice des probabilités de transition à n pas:

$$P(n)_{i,j} = \mathbb{P}\{X(n) = j \mid X(0) = i\}.$$

Pour tout $n \in \mathbb{N}$:

$$P(n) = P_n.$$

Soient maintenant, les probabilités d'état:

$$\pi_n(j) = \mathbb{P}\{X(n) = j\}.$$

On a alors, sous forme matricielle:

$$\pi_n = \pi_{n-1} P \quad \text{ou bien} \quad \pi_n = \pi_0 P_n.$$

Calculer ces probabilités transitaires revient donc à calculer P_n .

Probabilités stationnaires et équations d'équilibre

Si $\lim_n \pi^n = \pi$ existe, alors on a les **équations d'équilibre**, dont sont solutions les **probabilités stationnaires** (ou mesures invariantes) :

$$\pi = \pi P .$$

Sous forme développée: $\forall i \in \mathcal{E}$,

$$\pi(i) = \sum_{j \in \mathcal{E}} \pi(j) P_{j,i} .$$

⇒ étude de l'existence, unicité et calcul de ces probabilités stationnaires: **stabilité**, **ergodicité**.

⇒ Influence de la **topologie** de la chaîne.

⇒ Classification des états: récurrents, transients, ...

Autre calcul Markovien : les temps d'atteinte

Soit T_{ij} le **nombre de sauts** nécessaires pour atteindre l'état j en partant de l'état i .

En conditionnant sur la première transition de la chaîne :

$$T_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i = j \\ 1 + T_{kj} & \text{avec probabilité } p_{ik}, \text{ si } i \neq j \end{cases} .$$

En moyenne :

$$\overline{T}_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i = j \\ 1 + \sum_{k \in \mathcal{E}} p_{ik} \overline{T}_{kj} & \text{si } i \neq j \end{cases} .$$

⇐ systèmes d'équations linéaires.

Plan de l'exposé

0. Généralités
1. Chaînes de Markov en temps discret: calcul Markovien, et algèbre linéaire
 - Probabilités d'état
 - Probabilités stationnaires
 - Temps d'atteinte
2. Chaînes de Markov en temps continu
 - Définition, interprétation, constructions
 - Relations avec le temps discret
 - Calcul de probabilités
 - Réversibilité
3. Composition de chaînes de Markov

Chaînes de Markov en temps continu (CMTC)

Soient les probabilités de transition:

$$P(t)_{i,j} = \mathbb{P}\{X(t) = j \mid X(0) = i\}.$$

Si le processus $\{X(t)\}$ est suffisamment «régulier», alors la propriété de Markov implique:

$$\frac{dP_{i,j}}{dt}(t) = \sum_{k \in \mathcal{E}} q_{ik} P_{k,j}(t) \quad \text{(Chapman-Kolmogorov)}.$$

Il existe donc une matrice Q telle que

$$\frac{dP}{dt}(t) = Q P(t) = P(t) Q.$$

Cette matrice est le **générateur infinitésimal**.

$$P(t) = e^{Qt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} Q^n,$$

Alors:

$$\mathbb{P}\{X(t + \delta t) = j \mid X(t) = i\} \approx q_{ij} \times \delta t.$$

Ses éléments sont les **taux de transition**, ou « vitesses » de transition (en événements/s): pour $i \neq j$,

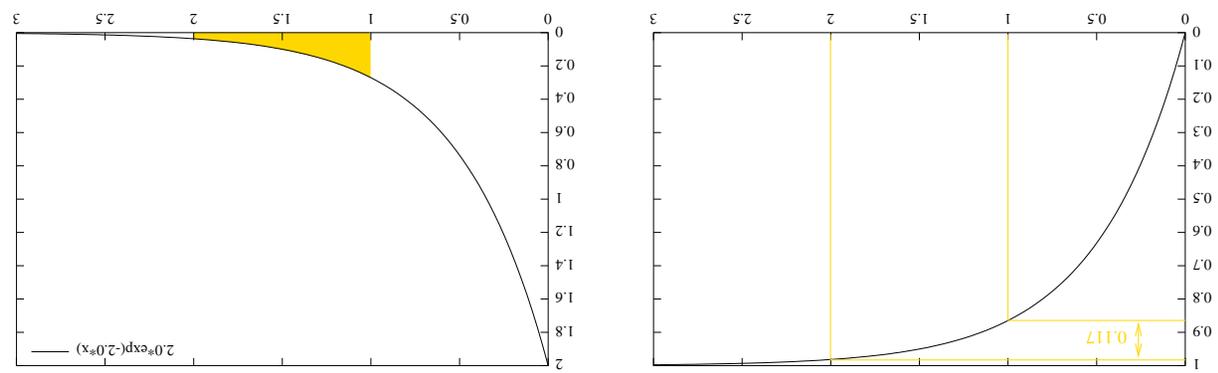
CMTC et distribution exponentielle

En temps continu, et en **espace discret**, la propriété de Markov implique que le processus $\{X(t), t \in \mathbb{R}\}$ séjourne dans chaque état pendant une durée aléatoire de **distribution exponentielle**.

Une variable aléatoire T a une distribution exponentielle de paramètre $\lambda > 0$ si:

$$F_T(x) = \mathbb{P}\{T \leq x\} = 1 - e^{-\lambda x}.$$

Fonction de répartition de la variable exponentielle ($\lambda = 2$)



Interprétation/Construction des générateurs

Construction #1.

Soit un processus stochastique en temps continu, $\{X(t), t \in \mathbb{R}_+\}$, ayant les propriétés suivantes. Quand X entre dans l'état i :

- X reste en i un temps aléatoire, exponentiellement distribué avec paramètre τ_i , indépendamment du passé; puis
- X saute instantanément dans l'état j avec probabilité p_{ij} . On a $p_{ij} \in [0, 1]$, $p_{ii} = 0$ et

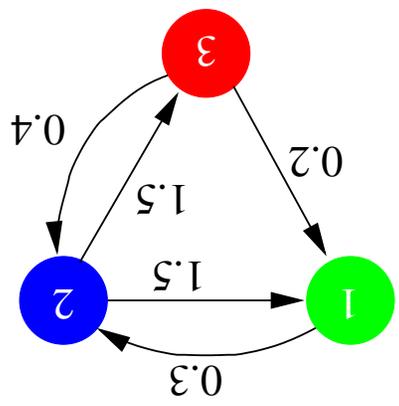
$$\sum_j p_{ij} = 1.$$

Alors $\{X(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ est une CMTC de générateur infinitésimal:

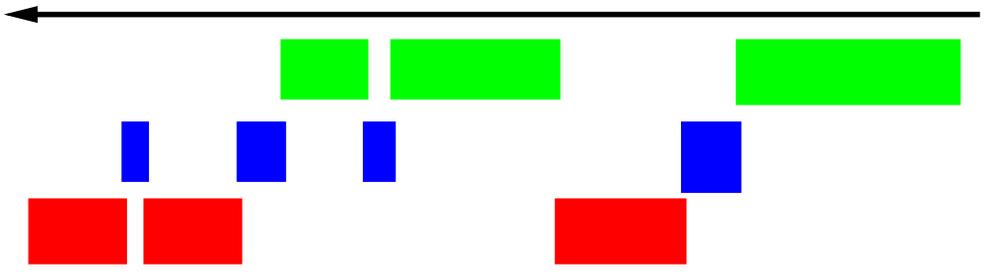
$$\left\{ \begin{array}{l} q_{ij} = \tau_i p_{ij} \\ q_{ii} = -\tau_i \end{array} \right. \quad \text{si } i \neq j$$

Exemple de CMTC

Une illustration de la Construction #1.



$$\tau = \begin{pmatrix} 0.3 & 3 & 0.6 \\ 0.6 & 3 & 0.6 \\ 0.3 & 3 & 0.6 \end{pmatrix} \quad P = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 & \frac{3}{2} \\ 0 & \frac{2}{1} & 0 \end{pmatrix} \quad Q = \begin{pmatrix} -0.3 & 1.5 & 0.2 \\ 0.3 & -3.0 & 0.4 \\ 0 & 1.5 & -0.6 \end{pmatrix} .$$



Interprétation/Construction des générateurs (suite)

Construction #2.

Soit un processus stochastique en temps continu, $\{X(t), t \in \mathbb{R}_+\}$, ayant les propriétés suivantes. Quand X entre dans l'état i :

- Pour chaque état $j \neq i$, on tire au hasard une variable aléatoire Y_{ij} de distribution exponentielle de paramètre μ_{ij} , indépendantes entre elles et du passé. On peut avoir $\mu_{ij} = 0$, auquel cas $Y_{ij} = +\infty$.
- Le minimum des Y_{ij} est l'un d'entre eux: Y_{ik} . A la date Y_{ik} , X saute instantanément dans l'état k .

Alors $\{X(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ est une CMTc de générateur infinitésimal Q:

$$\left\{ \begin{array}{l} q_{ij} = \mu_{ij} \\ q_{ii} = - \sum_{j \neq i} \mu_{ij} \end{array} \right. \text{ si } i \neq j$$

Relations entre continu et discret

Plusieurs relations existent entre CMTc et CMTD:

- les chaînes incluses
- l'uniformisation.

Chaînes incluses

Soit $\{T(n); n \in \mathbb{N}\}$ une suite de **temps d'arrêt** d'une CMTD X . Alors le processus

$$Y(n) = X(T(n))$$

est une CMTD (propriété de Markov forte). C'est une **chaîne incluse** dans X .

Exemples:

- chaîne incluse au moments des sauts
- chaîne incluse aux instants $T(n) = n \times T_0$
- \implies matrice de transition $P = e^{T_0 Q}$.
- échantillonnage selon un processus de Poisson de taux ν
- \implies matrice de transition $P = (I - \frac{\nu}{1} Q)^{-1}$.
- chaîne incluse aux moments où le processus X entre dans un sous-espace $\mathcal{E}' \subset \mathcal{E}$.

Uniformisation des CMTC

Soit $\{X(t), t \in \mathbb{R}\}$ une CMTC de générateur Q , et soit un nombre ν tel que

$$\nu \geq \max_i |Q_{ii}|.$$

Soit ensuite la matrice P :

$$P = I + \frac{1}{\nu} Q.$$

C'est la matrice de transition d'une chaîne de Markov en temps discret $\{Y(n)\}$.

Cette construction est nommée **uniformisation**.

Propriété: **distribution stationnaire de $X =$ distribution stationnaire de Y .**

Calcul des probabilités transitoires

Soit Q : on cherche à calculer e^{tQ} .

Si Q est *diagonalisable* : il existe $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ diagonale et S inversible tels que

$$Q = S D S^{-1}.$$

Alors :

$$e^{tQ} = S \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & & \\ & \dots & \\ & & e^{\lambda_n t} \end{pmatrix} S^{-1}.$$

- si t est petit,

$$e^{tQ} \approx 1 + tQ + \frac{t^2}{2}Q^2 + \dots$$

- si t et/ou $|\lambda_i|$ est grand pour $i > i_0$,

$$e^{tQ} \approx \sum_{i=0}^{i_0} e^{\lambda_i t} A_i \cdot$$

Doit-on diagonaliser entièrement? Approximations asymptotiques:

$$e^{tQ} = \sum_n e^{\lambda_n t} A_n \cdot$$

Les λ_i sont les valeurs propres de Q . Les colonnes/lignes de S/S^{-1} sont ses vecteurs propres: c'est une **décomposition spectrale** :

Autres méthodes:

- Calcul direct par les séries:
Par la définition:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} = e^{it}$$

Par uniformisation, pour tout ν assez grand:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} e^{-\nu t} \left(1 + \frac{\nu}{n}\right) = e^{it}$$

- Intégration numérique des équations différentielles.

- Simulation «de Monte Carlo» grâce à:
 - Construction #1 ou Uniformisation:
 1. Choisir la durée de séjour,
 2. Choisir la transition

⇐ simulation séquentielle.
 - Construction #2:
 1. Choisir les dates des changements possibles,
 2. Calculer la plus proche,
 3. Transition

⇐ simulation événementielle.
- + statistiques.

Réversibilité des chaînes de Markov

Si $X(t)$ est une chaîne de Markov stationnaire la **chaîne renversée** est $X(-t)$.

C'est aussi une chaîne de Markov stationnaire. Elle a même distribution stationnaire π et a pour générateur infinitésimal :

$$q'_{i,j} = \frac{\pi(j)}{\pi(i)} q_{j,i}$$

La chaîne est **réversible** si $\{X(t)\}$ et $\{X(-t)\}$ ont les mêmes propriétés statistiques, donc même générateur. C'est-à-dire si

$$\pi(i) q_{i,j} = \pi(j) q_{j,i}$$

Propriétés:

Troncature Soit $\mathcal{A} \subset \mathcal{E}$. La chaîne de Markov **tronquée** sur \mathcal{A} est également réversible, et a pour distribution stationnaire: si $i \in \mathcal{A}$

$$\pi(i) / \left(\sum_{j \in \mathcal{A}} \pi(j) \right) .$$

Symétrisation Soit Q le générateur d'une chaîne de Markov réversible. Soit $\Pi = \text{diag}(\pi(1), \dots, \pi(n))$. Alors il existe:

- une matrice symétrique S telle que

$$Q = S \Pi ,$$

- une matrice symétrique R telle que

$$Q = \Pi^{-1/2} R \Pi^{1/2} .$$

Par conséquent, toutes les valeurs propres de Q sont **réelles et négatives**.

Plan de l'exposé

0. Généralités
1. Chaînes de Markov en temps discret: calcul Markovien, et algèbre linéaire
 - Probabilités d'état
 - Probabilités stationnaires
 - Temps d'atteinte
2. Chaînes de Markov en temps continu
 - Définition, interprétation, constructions
 - Relations avec le temps discret
 - Calcul de probabilités
 - Réversibilité
3. Composition de chaînes de Markov
 - Superposition
 - Modulation

Composition de chaînes de Markov

Il est possible de construire des chaînes de Markov composites à partir de chaînes de Markov «élémentaires» :

- par superposition (ou juxtaposition)
- par modulation
- par accumulation

Dans chaque cas, on exprime

- le générateur infinitésimal
- ses éléments spectraux

comme une «combinaison» de ceux des chaînes constitutives.

Superposition de Chaînes de Markov

Si X_1 et X_2 sont deux chaînes de Markov indépendantes, sur deux espaces \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 , alors $Z = (X_1, X_2)$ est une chaîne de Markov sur l'espace $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2$.

Les matrices (générateur et taux) s'obtiennent comme des **sommes de Kronecker** (en temps continu):

$$Q = Q_1 \oplus Q_2$$

$nm \times nm$ avec

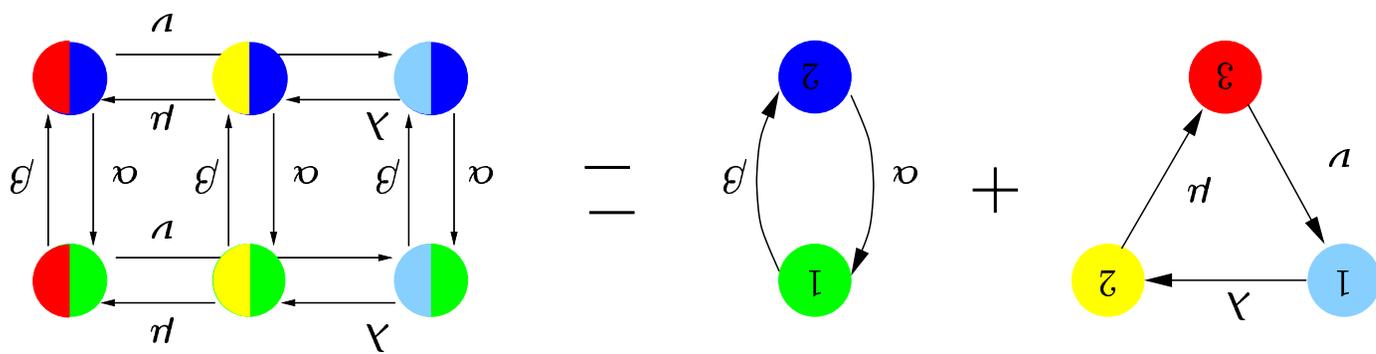
Produit de Kronecker de deux matrices A ($n \times n$) et B ($m \times m$): une matrice

Somme de Kronecker:

$$A \oplus B = A \otimes I(m) + I(n) \otimes B$$

$$= \begin{pmatrix} A_{11}B & & \\ & \dots & \\ & & A_{nn}B \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B_{11}I & & \\ & \dots & \\ & & B_{mm}I \end{pmatrix} .$$

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} - & 0 & \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \eta & - & 0 & 0 & \beta & 0 \\ 0 & \gamma & - & 0 & 0 & \beta \\ \hline \alpha & 0 & 0 & - & 0 & \alpha \\ 0 & \alpha & 0 & \eta & - & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 & \gamma & - \end{array} \right) = \begin{pmatrix} \beta & - \\ \alpha & \beta \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \alpha \\ \eta & \eta & 0 \\ 0 & \gamma & -\gamma \end{pmatrix}$$



Exemple: pour deux chaînes de Markov $\{X_1(t)\}$ et $\{X_2(t)\}$, on a:

Les processus de Markov modélisent des processus dont les taux de transition dépendent de l'état d'un seconde chaîne de Markov, «l'environnement»:

- l'état de l'environnement, X , évolue dans un espace \mathcal{E} selon une CMTC de générateur $G = (g_{ij})$;
- le processus Z évolue dans un espace \mathcal{A} , selon un CMTC de générateur $M(?)$ tant que $X(t)$ vaut i .

Le processus $(X(t), Z(t))$ est une chaîne de Markov dans l'espace $\mathcal{E} \times \mathcal{A}$.

$(i, a) \rightarrow (j, a)$ avec taux g_{ij}
 $(i, a) \rightarrow (i, b)$ avec taux $m_a v_i$

Le générateur du processus $(X(t), Z(t))$ a pour transitions:

$$M(i) = v_i \times M.$$

Par exemple, supposons que quand X est dans l'état i , la vitesse de Z (taux de transition) est multipliée par v_i :

Modulation des vitesses de transition

$$Q = G \otimes I + I \otimes (vM) \cdot$$

C'est une généralisation de la superposition (vitesses constantes):

$$V = \text{diag}(v_1, \dots, v_K) \cdot$$

ou

$$Q = G \otimes I + V \otimes M \cdot$$

Et en utilisant le produit de Kronecker:

$$Q = \begin{pmatrix} v_1 M + g_{11} & \vdots & g_{K1} \\ g_{12} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{1K} & \vdots & v_K M + g_{KK} \end{pmatrix}$$

Sous forme matricielle (par blocs):

$$\begin{aligned}
 & \cdot \eta \eta = \\
 & (x \otimes v) \eta = \\
 & x \otimes (\mathcal{G} + \lambda \mathcal{V}) v = \\
 & \mathcal{M} x \otimes \mathcal{V} v + \mathcal{I} x \otimes \mathcal{G} v = \\
 & (\mathcal{M} \otimes \mathcal{V} + \mathcal{I} \otimes \mathcal{G}) (x \otimes v) = \eta \eta
 \end{aligned}$$

Alors

$$\begin{aligned}
 & \cdot \eta \eta = (\mathcal{G} + \lambda \mathcal{V}) v \cdot \\
 & x \otimes v = (x \mathcal{N} v, \dots, x \mathcal{I} v) = \eta \\
 & x \lambda = \mathcal{M} x
 \end{aligned}$$

Pour calculer $e^{\mathcal{Q}t}$, une méthode est de diagonaliser \mathcal{Q} . On doit trouver ses valeurs propres et vecteur propres. Ayons l'idée de prendre x et η tels que

Brève bibliographie et sources

Chaînes de Markov

W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications*, volumes I et II. J. Wiley & Sons, New York, troisième édition, 1968 et 1971.

J.G. Kemeny and Snell J.L. *Finite Markov Chains*, volume 76. Springer-Verlag, 1976.

S. Ross. *Stochastic Processes*. Wiley & Sons, 1996.

Chaînes de Markov et horloge variable en Phylogénie

W.M. Fitch. Rate of change of concomitantly variable codons. *J. Mol. Evol.*, 1:84-96, 1971.

P.J. Lockhart, M.A. Steel, A.C. Barbrook, D.H. Hudson et C.J. Howe. A covarion model explains apparent phylogenetic structure of oxygenic photosynthetic lineages. *Mol. Biol. Evol.*, 15:1183-1188, 1998.

C. Tuffley and M.A. Steel. Modelling the covarion hypothesis of nucleotide substitution. *J. Mol. Evol.*, 17:496-508, 1998.

Ph. Lopez, P. Forterre et H. Philippe. The root of the tree of life in the light of the covarian model. *J. Mol. Evol.*, 49:496–508, 1999.

Ph. Lopez. *Deux approches de l'évolution moléculaire: Asymétries de composition et recherche des covariations*. Thèse de l'Université de Paris-Sud, décembre 2000.

N. Galtier, Maximum Likelihood phylogenetic analysis under a covarian-like model. *Mol. Biol. Evol.*, 18:866–873, 2001.

Modèles markoviens modules

D. Anick, D. Mitra, and M.M. Sondhi. Stochastic theory of a data-handling system with multiple sources. *Bell Sys. Tech. J.*, 61:1871–1894, October 1982.

D. Mitra. Stochastic theory of a fluid models of producers and consumers coupled by a buffer. *Adv. Appl. Prob.*, 20:646–676, 1988.

T.E. Stern and A.I. Elwalid. Analysis of separable Markov-modulated rate models for information-handling systems. *Adv. Appl. Prob.*, 23:105–139, 1991.

A.I. Elwalid, D. Mitra, and T.E. Stern. A theory of statistical multiplexing of Markov modulated sources: Spectral expansions and algorithms. In W.J. Stewart, editor, *Numerical solution of Markov Chains*, 1991.

- A.I. Elwalid and D. Mitra. Statistical multiplexing with loss priorities in rate-based congestion control of high speed networks. *IEEE Trans. Comm.*, 42(11):2989–3002, November 1994.
- A.I. Elwalid and D. Mitra. Markovian arrival and service communication systems: Spectral expansions, separability and Kronecker-product forms. In W.J. Stewart, editor, *Computations in the Markov Chains*, pages 507–546. Kluwer, 1995.
- Processus de Markov modules en théorie des files d'attente*
- M.F. Neuts. *Matrix-Geometric Solutions in Stochastic Models – An Algorithmic Approach*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1981.
- M.F. Neuts. The fundamental period of a queue with Markov-modulated arrivals. In *Probability, Statistics and Mathematics: papers in honour of Samuel Karlin*. Academic Press, NY, 1989.
- W. Fischer and K. Meier-Hellstern. The Markov-modulated Poisson process (MMP) cookbook. *Performance Evaluation*, 18:149–171, 1992.
- D.M. Lucantoni, G.L. Choudhury, and W. Whitt. The transient *BMAP/G/1* queue. *Commun. Statist.-Stochastic Models*, 10(1):145–182, 1994.
- A. Jean-Marie, Z. Liu, P. Nain and D. Towsley, "Computational Aspects of the Workload Distribution in the MMP/G/1 Queue". *JSAC*, 1999.