

Quelques aspects des chaînes de Markov

Djalil CHAFAÏ

Décembre 2006, Biskra, Algérie.

Compilé le 18 janvier 2007



FIG. 1 – Andrei Andreyevich Markov

Table des matières

0.1	Suites ou chaînes?	5
0.2	La propriété de Markov forte	10
0.3	Les chaînes dans tous leurs états	11
0.4	Simulation d'une chaîne de Markov	14
0.5	Atteinte, absorption, harmonicité, martingales	16
0.6	Invariance et récurrence positive	18
0.7	Loi forte des grands nombres	20
0.8	Périodicité	23
0.9	Convergence en loi et couplage	24
0.10	Réversibilité et noyau de Metropolis-Hastings	27
0.11	Estimation du noyau et de la mesure invariante	31
0.12	Cas des espaces d'états finis	32
0.12.1	Récurrence, invariance, apériodicité, ergodicité	32
0.12.2	Convergence géométrique vers l'équilibre et couplage	35
0.12.3	Temps de recouvrement	36
0.13	Coalescences et algorithme de Letac-Propp-Wilson	37
0.13.1	Coalescences de suites récurrentes aléatoires	37
0.13.2	Algorithme de Letac-Propp-Wilson	39
0.14	Quelques exemples classiques	39
0.14.1	Processus de vie ou de mort sur \mathbb{N}	39
0.14.2	Marche aléatoire simple sur \mathbb{Z}^d	41
0.14.3	Urne d'Ehrenfest	44
0.14.4	Modèle de Wright-Fisher	46
0.14.5	Google et Pagerank	52
	Bibliographie	55

Quelques aspects des chaînes de Markov

Ce chapitre est consacré aux chaînes de Markov homogènes à espace d'état au plus dénombrable. Leurs trajectoires peuvent se concevoir comme celles de suites récurrentes aléatoires (X_n) de la forme $X_{n+1} = g(X_n, U_n)$ où les (U_n) sont indépendantes et équidistribuées. Tout comme les martingales, les chaînes de Markov sont des suites de variables aléatoires caractérisées par une forme particulière de dépendance, qui leur confère des propriétés remarquables, et un rôle important en modélisation. Les chaînes de Markov ont été introduites par Andrei Andreyevich Markov vers 1906, à l'âge de cinquante ans, dans son article [23].

Dans toute la suite, un ensemble au plus dénombrable E est toujours muni de la topologie (et tribu) de toutes ses parties, qui rend continue (et mesurable) toute fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$. Une mesure de Borel μ sur E vérifie $\mu(A) = \sum_{x \in A} \mu(x)$ pour tout $A \subset E$, où $\mu(x) := \mu(\{x\}) \in \mathbb{R}_+$. Une fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ est μ -intégrable lorsque la somme au plus dénombrable $\sum_{x \in E} |f(x)|\mu(x)$ converge, et dans ce cas, $\int_E f(x) d\mu(x) = \sum_{x \in E} f(x)\mu(x)$. On dit qu'une mesure μ sur E charge l'état $x \in E$ lorsque $\mu(x) > 0$. Les mesures sont toujours supposées non identiquement nulles : elles chargent donc au moins un état.

La seconde partie du chapitre est consacrée au cas particulier des chaînes de Markov à espace d'état fini. Leur étude bénéficie de la théorie des matrices.

0.1 Suites ou chaînes ?

Soit (X_n) une suite de variables aléatoires à valeurs dans un ensemble au plus dénombrable E . La loi de la suite (X_n) est une loi sur $E^{\mathbb{N}}$ muni de la tribu engendrée par les cylindres. En vertu d'un célèbre théorème de Carathéodory, la loi de la suite (X_n) est caractérisée par ses marges de dimension finie, c'est-à-dire par la loi des vecteurs aléatoires (X_0, \dots, X_n) pour tout $n \in \mathbb{N}$. Or E est au plus dénombrable, et donc la loi de (X_0, \dots, X_n) est caractérisée à son tour par la donnée de $\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0)$ pour tout x_0, \dots, x_n dans E . À ce stade, on peut écrire par conditionnements successifs

$$\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) = \prod_{k=0}^{n-1} \mathbb{P}(X_{k+1} = x_{k+1} \mid X_k = x_k, \dots, X_0 = x_0) \mathbb{P}(X_0 = x_0).$$

Si un événement de la forme $\{X_k = x_k, \dots, X_0 = x_0\}$ est négligeable, il en va de même de l'événement $\{X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0\}$. Aussi, dans toute la suite, ces cas particuliers sont systématiquement omis par souci de concision, malgré le manque de rigueur que cela entraîne.

Définition 0.1.1 (Chaîne de Markov). On dit qu'une suite (X_n) de variables aléatoires à valeurs dans un ensemble au plus dénombrable E est une *chaîne de Markov d'espace d'état E* lorsque pour tout $k \in \mathbb{N}$, tout x_0, \dots, x_{k+1} dans E ,

$$\mathbb{P}(X_{k+1} = x_{k+1} \mid X_k = x_k, \dots, X_0 = x_0) = \mathbb{P}(X_{k+1} = x_{k+1} \mid X_k = x_k).$$

Cela s'écrit également

$$\mathcal{L}(X_{k+1} \mid (X_k, \dots, X_0)) = \mathcal{L}(X_{k+1} \mid X_k) \quad \text{pour tout } k \in \mathbb{N}.$$

On dit que la chaîne est *homogène* lorsque pour tout $k \in \mathbb{N}$ et tout x et y dans E ,

$$\mathbb{P}(X_{k+1} = y \mid X_k = x) = \mathbb{P}(X_1 = y \mid X_0 = x).$$

Cela s'écrit également

$$\mathcal{L}(X_{k+1} \mid X_k = x) = \mathcal{L}(X_1 \mid X_0 = x) \quad \text{pour tout } k \in \mathbb{N} \text{ et tout } x \in E.$$

L'indice n de la suite (X_n) est interprété comme un temps. La variable X_k représente la position spatiale à l'instant k , la tribu $\sigma(X_0, \dots, X_{k-1})$ représente son *passé* tandis que la tribu $\sigma(X_{k+1}, X_{k+2}, \dots)$ représente son *futur*. Les chaînes de Markov sont des suites aléatoires sans mémoire, en quelque sorte.

Exemple 0.1.2 (Suites récurrentes aléatoires). Soit X_0 une variable aléatoire à valeurs dans un ensemble au plus dénombrable E . Soit $(U_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires à valeurs dans un espace mesurable F , indépendantes et de même loi, et indépendantes de X_0 . Soit $g : E \times F \rightarrow E$ une application mesurable. La suite (X_n) définie par la relation de récurrence $X_{n+1} := g(X_n, U_{n+1})$ est une chaîne de Markov homogène sur E . Le théorème 0.4.1 fournit une sorte de réciproque.

Dans toute la suite, les chaînes de Markov considérées sont toutes homogènes et à espace d'état au plus dénombrable.

Noyaux de transition

Soit (X_n) une chaîne de Markov d'espace d'état E . On appelle *noyau de transition* de la chaîne l'application $\mathbf{P} : E \times E \rightarrow [0, 1]$ définie pour tout x et y dans E par

$$\mathbf{P}(x, y) := \mathbb{P}(X_1 = y \mid X_0 = x).$$

On a également $\mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x) = \mathbf{P}(x, y)$ pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout x et y dans E . En notant $\nu := \mathcal{L}(X_0)$, la définition 0.1.1 entraîne que pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout x_0, \dots, x_n dans E ,

$$\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) = \nu(x_0) \prod_{k=0}^{n-1} \mathbf{P}(x_k, x_{k+1}).$$

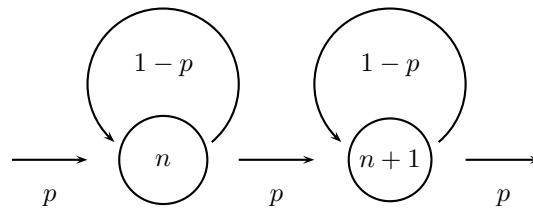


FIG. 2 – Zoom sur le graphe des transitions du processus de Bernoulli de l'exemple 0.1.5.

Ainsi, la loi de la suite (X_n) est entièrement caractérisée par la *loi initiale* $\nu := \mathcal{L}(X_0)$ et le *noyau de transition* \mathbf{P} . Dans toute la suite, la notation $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$ signifie « chaîne de Markov d'espace d'état E , de loi initiale ν , et de noyau de transition \mathbf{P} ». Chaque couple ν, \mathbf{P} définit de manière unique une loi de probabilité sur $E^{\mathbb{N}}$. Si (Y_n) est une suite de variables aléatoires sur E de même loi que (X_n) , alors (Y_n) est également une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$.

Exemple 0.1.3 (Suites récurrentes aléatoires). Le noyau de transition de la chaîne de Markov (X_n) de l'exemple 0.1.2 est donné par $\mathbf{P}(x, y) = \mathbb{P}(g(x, U) = y)$, pour tout x et y dans E , où U est une variable aléatoire sur F , de même loi que les $(U_n)_{n \geq 1}$.

Exemple 0.1.4 (Marche aléatoire simple sur le cercle). Soit $d > 0$ un entier, et $(Y_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires i.i.d. à valeurs dans $E := \mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$, de loi commune $\frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_{+1})$. Soit X_0 une variable aléatoire de loi ν sur E . La suite (X_n) définie par la relation de récurrence $X_{n+1} := X_n + Y_{n+1} = X_0 + Y_1 + \dots + Y_{n+1}$ est une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$ de noyau

$$\mathbf{P}(x, y) := \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } |x - y| = 1 \text{ dans } \mathbb{Z}/d\mathbb{Z} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

Exemple 0.1.5 (Le processus de Bernoulli du jeu de pile ou face). Soit $(Y_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires indépendantes et équidistribuées de loi de Bernoulli $p\delta_1 + (1-p)\delta_0$ où $p \in [0, 1]$. Soit B_0 une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{N} . La suite $(B_n)_{n \geq 0}$ définie pour tout $n \geq 1$ par $B_n := B_0 + Y_1 + \dots + Y_n$ est une chaîne de Markov d'espace d'état $E = \mathbb{N}$, de loi initiale $\mathcal{L}(B_0)$, et de noyau de transition \mathbf{P} donné pour tout x, y dans \mathbb{N} par

$$\mathbf{P}(x, y) = \begin{cases} p & \text{si } y = x + 1 \\ 1 - p & \text{si } y = x \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

Cette chaîne est appelée *processus de Bernoulli*. Elle correspond au graphe des transitions de la figure 2. La variable aléatoire B_n représente le nombre de gains après n lancers à un jeu de pile ou face avec probabilité de gagner p et fortune initiale B_0 . Lorsque $p = 1$ (resp. $p = 0$), la chaîne a une évolution déterministe puisque dans ce cas $B_{n+1} = B_n + 1$ (resp. $B_{n+1} = B_n$).

La notion de noyau peut être isolée du concept de chaîne.

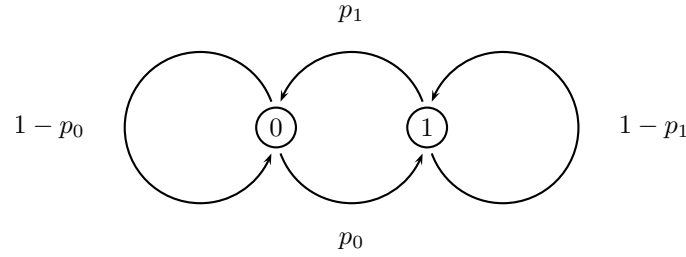


FIG. 3 – Graphe des transitions de la chaîne à deux états de l'exemple 0.1.7.

Définition 0.1.6 (Noyau de transition). Soit E un espace d'état. Une application $\mathbf{P} : E \times E \rightarrow \mathbb{R}$ est un *noyau de transition* sur E si et seulement si pour tout x et y dans E

$$0 \leq \mathbf{P}(x, y) \leq 1 \quad \text{et} \quad \sum_{z \in E} \mathbf{P}(x, z) = 1.$$

Un noyau de transition \mathbf{P} associe à tout $x \in E$ la loi $\sum_{y \in E} \mathbf{P}(x, y) \delta_y$ sur E . La construction effective d'une chaîne de Markov de mesure initiale et de noyau de transition prescrits est donnée par le théorème 0.4.1.

Exemple 0.1.7 (Chaîne à deux états). Soient p_0 et p_1 dans $[0, 1]$. Le noyau de transition \mathbf{P} de la chaîne de Markov à deux états sur $E := \{0, 1\}$ est donné par $\mathbf{P}(0, 1) = 1 - \mathbf{P}(0, 0) = p_0$ et $\mathbf{P}(1, 0) = 1 - \mathbf{P}(1, 1) = p_1$. Vue comme une matrice 2×2 ,

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}(0, 0) & \mathbf{P}(0, 1) \\ \mathbf{P}(1, 0) & \mathbf{P}(1, 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - p_0 & p_0 \\ p_1 & 1 - p_1 \end{pmatrix}.$$

Cette chaîne correspond au graphe des transitions de la figure 3. Pour $p_0 = p_1 = 1$, on retrouve la marche aléatoire simple sur $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ de l'exemple 0.1.4.

Quitte à numéroter les éléments de E , un noyau de transition \mathbf{P} peut être vu comme une matrice carrée, infinie si E est infini, dont chaque ligne est une loi sur E .

$$E = \{x_0, x_1, x_2, \dots\} \quad \text{et} \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}(x_0, x_0) & \mathbf{P}(x_0, x_1) & \mathbf{P}(x_0, x_2) & \cdots \\ \mathbf{P}(x_1, x_0) & \mathbf{P}(x_1, x_1) & \mathbf{P}(x_1, x_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Structure de l'ensemble des noyaux

Si \mathbf{P} et \mathbf{Q} sont deux noyaux de transition sur E , et si α et β sont deux réels positifs tels que $\alpha + \beta = 1$, alors $\alpha\mathbf{P}(x, y) + \beta\mathbf{Q}(x, y)$ définit un noyau de transition sur E noté $\alpha\mathbf{P} + \beta\mathbf{Q}$. D'autre part, $\sum_{z \in E} \mathbf{P}(x, z)\mathbf{Q}(z, y)$ définit également un noyau de transition sur E noté \mathbf{PQ} . Ainsi, l'ensemble des noyaux de transition sur E est convexe, et forme un semi-groupe pour le produit, d'élément neutre \mathbf{I} défini par $\mathbf{I}(x, y) = 1$ si $x = y$ et $\mathbf{I}(x, y) = 0$ sinon.

Noyaux itérés

Soit (X_n) une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$. L'application $\mathbf{P}^n : E \times E \rightarrow [0, 1]$ donnée par

$$\mathbf{P}^n(x, y) := \mathbb{P}(X_n = y \mid X_0 = x)$$

est un noyau de transition sur E , vérifiant $\mathcal{L}(X_n \mid X_0 = x) = \sum_{y \in E} \mathbf{P}^n(x, y) \delta_y$. D'autre part, $\mathbf{P}^1 = \mathbf{P}$, et $\mathbf{P}^0 = \mathbf{I}$. Nous pouvons écrire pour tout entier $n \geq 1$ et tout x_0 et x_n dans E ,

$$\mathbf{P}^n(x_0, x_n) = \mathbf{P}(X_n = x_n \mid X_0 = x_0) = \sum_{x_1, \dots, x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n \mid X_0 = x_0).$$

La suite x_0, \dots, x_n constitue un « chemin » dans E . Par récurrence sur n , on établit que

$$\mathbf{P}^n(x_0, x_n) = \sum_{x_1, \dots, x_{n-1} \in E} \mathbf{P}(x_0, x_1) \cdots \mathbf{P}(x_{n-1}, x_n) = \sum_{x \in E} \mathbf{P}^{n-1}(x_0, x) \mathbf{P}(x, x_n).$$

Ces formules sont exactement celles du produit matriciel. Ainsi, $\mathbf{P}^n = \mathbf{P} \mathbf{P}^{n-1} = \mathbf{P}^{n-1} \mathbf{P}$.

Exemple 0.1.8 (Processus de Bernoulli). Si (B_n) est la $\text{CM}(\mathbb{N}, \nu, \mathbf{P})$ de l'exemple 0.1.5, alors $\mathcal{L}(B_n \mid B_0 = x)$ est la loi binomiale de paramètre p sur $\{x, x+1, \dots, x+n\}$. Par conséquent,

$$\mathbf{P}^n(x, y) = \begin{cases} C_n^{y-x} p^{y-x} (1-p)^{n-(y-x)} & \text{si } 0 \leq y-x \leq n \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

On a également $\mathcal{L}(B_n) = \nu * \mathcal{L}(B_n \mid B_0 = 0) = \nu * \mathcal{B}(n, p) = \nu * \mathcal{B}(1, p)^{*n}$, où $\mathcal{B}(n, p)$ désigne la loi binomiale de paramètre p sur $\{0, 1, \dots, n\}$.

Écritures matricielles

On assimile toute loi ν sur E à un *vecteur ligne*, et toute fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ à un *vecteur colonne*. Ainsi, la moyenne de f pour la mesure ν s'écrit

$$\nu f = \sum_{x \in E} f(x) \nu(x).$$

On assimile également tout noyau de transition à une matrice. Ainsi, si (X_n) est une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$, alors $\mathcal{L}(X_n) = \nu \mathbf{P}^n$ et $\mathbb{E}(f(X_n)) = \nu \mathbf{P}^n f$. En effet,

$$\mathbb{E}(f(X_n)) = \sum_{y \in E} \mathbb{P}(X_n = y) f(y) = \sum_{x, y \in E} \nu(x) \mathbf{P}^n(x, y) f(y) = \nu \mathbf{P}^n f.$$

Calcul récursif des lois instantanées

Si (X_n) est une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$, alors $\nu_n := \mathcal{L}(X_n) = \nu \mathbf{P}^n$ pour tout n . La suite (ν_n) se calcule par la formule de *récurrence linéaire* $\nu_0 := \nu$ et $\nu_{n+1} = \nu_n \mathbf{P}$ pour tout n .

Notation conditionnelle

Si (X_n) est une chaîne de Markov sur E , alors pour tout $x \in E$, tout événement A et toute variable aléatoire Z , on note

$$\mathbb{P}^x(A) := \mathbb{P}(A \mid X_0 = x) \quad \text{et} \quad \mathbb{E}^x(Z) := \mathbb{E}(Z \mid X_0 = x).$$

0.2 La propriété de Markov forte

Soit (X_n) une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$. L'usage direct de la définition 0.1.1 conduit pour tout m et n à

$$\mathcal{L}((X_{m+n}, \dots, X_m) \mid (X_m, \dots, X_0)) = \mathcal{L}((X_{m+n}, \dots, X_m) \mid X_m)$$

et

$$\mathcal{L}((X_{m+n}, \dots, X_m) \mid X_m = x) = \mathcal{L}((X_n, \dots, X_0) \mid X_0 = x).$$

Cela entraîne la *propriété de Markov faible* : pour tout $m \in \mathbb{N}$, et conditionnellement à l'événement $\{X_m = x\}$, la suite $(X_{n+m})_n$ est une $\text{CM}(E, \delta_x, \mathbf{P})$ indépendante de $\sigma(X_0, \dots, X_m)$. Cette propriété s'étend à certains changements de temps aléatoires.

Théorème 0.2.1 (Propriété de Markov forte). *Soit (X_n) une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$ et τ un temps d'arrêt à valeurs dans $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$ pour la filtration $(\sigma(X_0, \dots, X_n))$. Pour tout $x \in E$, et conditionnellement à $\{\tau < \infty$ et $X_\tau = x\}$, la suite $(X_{\tau+n})$ est une $\text{CM}(E, \delta_x, \mathbf{P})$, indépendante de $\sigma(X_0, \dots, X_\tau)$. Lorsque τ est constant et égal à m , on retrouve la propriété de Markov faible.*

Démonstration. Dire que τ est un temps d'arrêt signifie que $\{\tau = m\} \in \sigma(X_0, \dots, X_m)$ pour tout m . Par suite, $A \cap \{\tau = m\} \cap \{X_\tau = x\} \in \sigma(X_0, \dots, X_m)$ pour tout $A \in \sigma(X_0, \dots, X_m)$, tout $x \in E$, et tout m . Il en découle, en vertu de la propriété de Markov faible, que la probabilité

$$\mathbb{P}(\{X_{\tau+n} = x_n, \dots, X_\tau = x_0\} \cap A \cap \{\tau = m\} \cap \{X_\tau = x\})$$

et égale à $\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) \mathbb{P}(A \cap \{\tau = m\} \cap \{X_\tau = x\})$. En sommant sur m , il vient

$$\mathbb{P}(\{X_{\tau+n} = x_n, \dots, X_\tau = x_0\} \cap A \cap \{X_\tau = x\}) = \mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) \mathbb{P}(A \cap \{X_\tau = x\}).$$

La propriété désirée s'obtient alors en divisant par $\mathbb{P}(\tau < \infty$ et $X_\tau = x)$. \square

Temps de premier passage et temps d'atteinte

Soit (X_n) une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$. Pour tout $F \subset E$, le *temps de premier passage* en F et le *temps d'atteinte* de F sont définis par

$$T_F := \inf \{n > 0; X_n \in F\} \quad \text{et} \quad \tau_F := \inf \{n \geq 0; X_n \in F\}.$$

Ces variables aléatoires prennent leurs valeurs dans $\{1, 2, \dots\} \cup \{\infty\}$ et $\{0, 1, 2, \dots\} \cup \{\infty\}$ respectivement. Ce sont des temps d'arrêt pour la filtration naturelle $(\sigma(X_0, \dots, X_n))$. Elles sont égales sur $\{X_0 \notin F\}$. Sur $\{X_0 \in F\}$, la variable T_F est également le *temps de retour* en F .

Nombre de visites et potentiel

Le nombre de visites en F est comptabilisé par les variables aléatoires suivantes, qui prennent leurs valeurs dans $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$.

$$M_F := \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{I}_{\{X_n \in F\}} \quad \text{et} \quad N_F := \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{I}_{\{X_n \in F\}}.$$

On a $\{T_F = \infty\} = \{M_F = 0\}$ et $\{\tau_F = \infty\} = \{N_F = 0\}$. Lorsque $F = \{x\}$, on note T_x , τ_x , M_x , et N_x les quantités $T_{\{x\}}$, $\tau_{\{x\}}$, $M_{\{x\}}$ et $N_{\{x\}}$ respectivement. Les nombres moyens de visites en y partant de x sont donnés par les quantités déterministes suivantes dans $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$:

$$\mathbf{G}(x, y) := \mathbb{E}^x(M_y) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{P}^n(x, y) \quad \text{et} \quad \mathbf{H}(x, y) := \mathbb{E}^x(N_y) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{P}^n(x, y).$$

L'application $\mathbf{H} : E \times E \rightarrow \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ est appelée *potentiel* du noyau de transition \mathbf{P} , et vérifie $\mathbf{H} = \mathbf{I} + \mathbf{G}$, de sorte que $\mathbf{H}(x, x) = 1 + \mathbf{G}(x, x)$ et $\mathbf{H}(x, y) = \mathbf{G}(x, y)$ pour $x \neq y$. La propriété de Markov forte pour les temps d'arrêt T_x et T_y conduit à

$$\mathbb{P}^x(N_x = \infty) = \mathbb{P}^x(N_x = \infty)\mathbb{P}^x(T_x < \infty) \quad \text{et} \quad \mathbf{G}(x, y) = \mathbf{H}(y, y)\mathbb{P}^x(T_y < \infty).$$

Pour tout $\lambda > 0$, la série $\mathbf{G}_\lambda(x, y) := \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda n} \mathbf{P}^n(x, y)$ converge car $0 \leq \mathbf{P}^n(x, y) \leq 1$. La propriété de Markov forte fournit la formule $(1 + \mathbf{G}_\lambda(y, y))\mathbb{E}^x(e^{-\lambda T_y}) = \mathbf{G}_\lambda(x, y)$. La transformée de Laplace de T_y est donc donnée par

$$\mathbb{E}^x(e^{-\lambda T_y}) = \frac{\mathbf{G}_\lambda(x, y)}{1 + \mathbf{G}_\lambda(y, y)}.$$

À présent, $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \mathbf{G}_\lambda(x, y) = \mathbf{G}(x, y)$ par le théorème de convergence dominée, tandis que $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \mathbb{E}^x(e^{-\lambda T_y}) = \mathbb{P}^x(T_y < \infty)$ par le théorème de convergence monotone. Il en découle que

$$\mathbb{P}^x(T_x < \infty) = 1 \quad \text{si et seulement si} \quad \mathbf{G}(x, x) = \infty.$$

De plus, si $\mathbf{G}(y, y) < \infty$, alors $\mathbf{G}(x, y) < \infty$ pour tout x et

$$\mathbb{P}^x(T_y < \infty) = \frac{\mathbf{G}(x, y)}{1 + \mathbf{G}(y, y)}.$$

0.3 Les chaînes dans tous leurs états

Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}). Définissons la quantité $\rho(x, y) := \mathbb{P}^x(T_y < \infty)$. Un état x est qualifié de *récurrent* lorsque les propriétés équivalentes suivantes sont réalisées : $\rho(x, x) = 1$, $\mathbf{G}(x, x) = \infty$, $\mathbf{H}(x, x) = \infty$. Il est qualifié de *transitoire* sinon. Le tableau 1 regroupe des

État x récurrent	État x transitoire
$\rho(x, x) = 1, \mathbf{H}(x, x) = \infty$	$\rho(x, x) < 1, \mathbf{H}(x, x) < \infty$
$\rho(x, y) > 0 \Rightarrow \mathbb{P}^x(N_y = \infty) = 1$	$\mathbb{P}^x(N_x = \infty) = 0$
$\rho(y, x) = \mathbb{P}^y(N_x = \infty)$	$\mathcal{L}(N_x X_0 = x) = \mathcal{G}(\rho(x, x))$
$\rho(y, x) > 0 \Rightarrow \mathbf{H}(y, x) = \infty$	$\mathbf{H}(y, x) = \rho(y, x)/(1 - \rho(x, x)) < \infty$

TAB. 1 – Propriétés des états récurrents et transitoires, valables pour tout $y \in E$.

propriétés utiles. Pour un état récurrent x , la propriété de Markov forte appliquée récursivement permet de définir une infinité de temps de retours successifs en x , qui délimitent des excursions de même loi enracinées en x (cela correspond à un système de renouvellement sur \mathbb{N}^*).

On note E_R l'ensemble des états récurrents et $E_T = E \setminus E_R$ celui des états transitoires. On dit que $F \subset E$ est *clos* lorsque $\mathbb{P}^x(T_{F^c} < \infty) = 0$ pour tout $x \in F$. La chaîne ne s'échappe jamais d'un ensemble clos. Un état x est dit *absorbant* (ou *point cimetièrre*) lorsque les conditions équivalentes suivantes sont réalisées : $\{x\}$ est clos, $\mathbf{P}(x, x) = 1$.

Exemple 0.3.1 (Processus de Bernoulli). Considérons le processus de Bernoulli de l'exemple 0.1.5. Si $p > 0$, alors tous les états sont transitoires car $\mathbb{P}^x(T_x = \infty) = 1$. Si $p = 0$, tous les états sont absorbants (la chaîne est constante).

Exemple 0.3.2 (Marches aléatoires sur \mathbb{Z}). Une *marche aléatoire* sur \mathbb{Z} est une suite (X_n) qui s'écrit $X_{n+1} = X_n + Y_n = X_0 + Y_1 + \dots + Y_n$ où (Y_n) est une suite i.i.d. de loi η sur \mathbb{Z} . La suite (X_n) est une chaîne de Markov sur \mathbb{Z} de noyau de transition \mathbf{P} donné par $\mathbf{P}(x, y) = \eta(y - x)$. Notons que $\mathbf{P}^n(x, y) = \mathbb{P}(x + Y_1 + \dots + Y_n = y)$. En particulier, $\mathbf{P}^n(x, x) = \mathbb{P}(Y_1 + \dots + Y_n = 0) = \mathbf{P}(0, 0)$. Ainsi, $\mathbf{H}(x, x) = \mathbf{H}(0, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{P}^n(0, 0)$. Les états sont donc soit tous récurrents soit tous transitoires. Lorsque X_0 prend ses valeurs dans \mathbb{N} et $\eta = (1 - p)\delta_0 + p\delta_1$ avec $p \in [0, 1]$, on retrouve le processus de Bernoulli de l'exemple 0.1.5. Considérons le cas où $\eta = \frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_{+1})$. On dit alors que la marche aléatoire est *simple*. Comme $(Y_1 + 1 + \dots + Y_n + 1)/2$ suit la loi binomiale $\mathcal{B}(n, 1/2)$, on a $\mathbf{P}^{2k+1}(0, 0) = 0$ et $\mathbf{P}^{2k}(0, 0) = 2^{-2k}(2k)!/(k!)^2$. La formule de Stirling¹ conduit à $\mathbf{H}(0, 0) = \infty$, et ainsi tous les états sont récurrents.

Pour tout x et y dans E , on note $x \rightarrow y$ lorsqu'il existe $n \in \mathbb{N}$ tel que $\mathbf{P}^n(x, y) > 0$. Cela signifie que x et y sont reliés par un chemin qui suit les flèches dans le graphe des transitions de \mathbf{P} . On note $x \leftrightarrow y$ lorsqu'à la fois $x \rightarrow y$ et $y \rightarrow x$. Avec cette définition, on a toujours $x \leftrightarrow x$, même lorsque $\mathbf{P}(x, x) = 0$. Si $x \neq y$, on dit que x mène à y lorsque $x \rightarrow y$ et que x et y communiquent lorsque $x \leftrightarrow y$. Si $x \neq y$, alors $x \rightarrow y$ si et seulement si $\mathbf{H}(x, y) > 0$. Si $x \rightarrow y$ et $y \not\rightarrow x$ alors x est transitoire.

Théorème 0.3.3 (Décomposition de l'espace d'état). *Pour tout noyau de transition \mathbf{P} sur E , la relation binaire \leftrightarrow est une relation d'équivalence qui partitionne l'espace d'état E en une union disjointe de classes appelées classes irréductibles. La propriété de récurrence est constante sur*

¹Formule de Stirling : $n! \sim n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$.

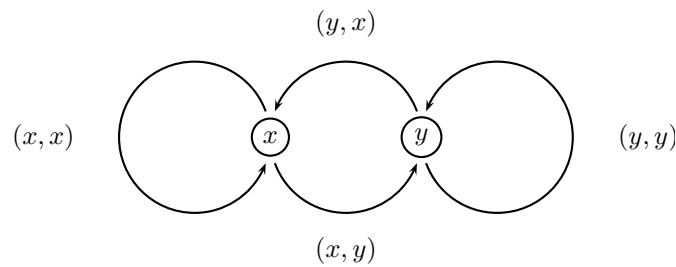


FIG. 4 – Transitions possibles entre x et y pour le noyau \mathbf{P} . On omet en général les flèches qui correspondent à des probabilités de transition nulles.

ces classes. Les classes constituées d'états récurrents sont closes et sont appelées classes de récurrence. Les classes constituées d'état transitoires sont appelées classes transitoires.

En quelque sorte, les ensembles clos, comme par exemple les classes de récurrence, sont absorbants. Presque sûrement, une chaîne partant d'un état récurrent repasse une infinité de fois par son état initial, ne s'échappe jamais de sa classe de récurrence, et visite une infinité de fois tous les états qui constituent cette classe de récurrence. Le cas des états absorbants est singulier puisque leur classe de récurrence est réduite à eux-même. Presque sûrement, une chaîne partant d'un état transitoire ne peut repasser qu'un nombre fini de fois par son état initial, et peut être capturée par une classe de récurrence ou visiter d'autres états transitoires (un nombre fini de fois pour chacun).

L'ensemble des état transitoires peut être infini, et la chaîne peut ne jamais être capturée par une classe de récurrence. C'est toujours le cas lorsqu'il n'y a pas d'états récurrents, comme par exemple pour le processus de Bernoulli avec $p > 0$. Contrairement aux classes de récurrence, les classes transitoires peuvent ne pas être closes. Des passages (à sens unique) peuvent exister entre elles, ainsi que vers les classes de récurrence. Sur le graphe des transitions, les flèches qui pénètrent dans une classe close proviennent toujours d'états transitoires.

On dit que \mathbf{P} est *irréductible* lorsque E est constitué d'une unique classe, c'est-à-dire lorsque tous les états communiquent : pour tout x et y , il existe n tel que $\mathbf{P}^n(x, y) > 0$. On dit que \mathbf{P} est *récurrent* lorsque E_T est vide, et *transitoire* lorsque E_R est vide. Ces termes sont également utilisés, au féminin, pour toute chaîne de Markov de noyau \mathbf{P} .

noyau irréductible $\left\{ \begin{array}{l} (1) \text{ une seule classe de récurrence (noyau récurrent)} \\ (2) \text{ une seule classe transitoire (noyau transitoire)} \end{array} \right.$

noyau réductible $\left\{ \begin{array}{l} (3) \text{ plusieurs classes de récurrence et aucun état transitoire} \\ (4) \text{ au moins une classe de récurrence et des états transitoires} \\ (5) \text{ plusieurs classes transitoires} \end{array} \right.$

L'étude des classes de récurrence des cas (3-4) se ramène au cas (1). L'étude des classes transitoires closes des cas (4-5) se ramène au cas (2).

Exemple 0.3.4. Considérons le noyau de transition \mathbf{P} sur $E = \{a, b, c, d\}$ donné par

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

L'état a est absorbant et donc récurrent. L'état b est transitoire car $b \rightarrow c$ mais aucun état de c mène à b . Les états c, d sont récurrents car le temps d'atteinte de c partant de d et de c partant de d sont tous deux finis presque sûrement (lois géométriques). Ainsi, les classes irréductibles de \mathbf{P} sont $\{a\}$, $\{c, d\}$, $\{b\}$, et seules les deux premières sont closes (et récurrentes).

Remarque 0.3.5 (Le cas i.i.d.). Soit (X_n) une suite de variables aléatoires i.i.d. de loi μ sur E . Quitte à remplacer E par $\{x \in E; \mu(x) > 0\}$, on peut supposer que $\mu(x) > 0$ pour tout $x \in E$. La suite (X_n) est une chaîne de Markov de loi initiale μ et de noyau de transition \mathbf{P} donné par $\mathbf{P}(x, y) := \mu(y)$ pour tout x et y . Ce noyau est irréductible car $\mathbf{P}(x, y) > 0$ pour tout x et y . De plus, $\mathbb{P}^x(T_x = n) = (1 - \mu(x))^{n-1} \mu(x)$ pour tout $n > 0$, et donc T_x suit une loi géométrique sur \mathbb{N}^* . En particulier, $\mathbb{P}^x(T_x < \infty) = 1$ et $\mathbb{E}^x(T_x) = 1/\mu(x)$. Ainsi, \mathbf{P} est récurrent irréductible. Notons que $\mathbf{P}^n(x, y) = \mu(y)$, de sorte que $\mathbf{H}(x, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{P}^n(x, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \mu(x) = \infty$.

Dans le cas i.i.d. de la remarque 0.3.5, la loi initiale se confond avec le noyau. Il est important de comprendre qu'en général, le comportement d'une chaîne de Markov dépend à la fois de la loi initiale et de la classification des états associée au noyau. Cependant, nous allons voir que pour certains noyaux, le comportement asymptotique des chaînes associées ne dépend que du noyau et plus de la loi initiale.

0.4 Simulation d'une chaîne de Markov

Approche récursive

La propriété de Markov faible indique que pour simuler une trajectoire (x_n) d'une chaîne de Markov (X_n) , il suffit de procéder récursivement, en simulant la loi initiale $\nu := \mathcal{L}(X_0)$, ce qui donne x_0 , puis la loi $\mathbf{P}(x_0, \cdot)$, ce qui donne x_1 , etc.

Théorème 0.4.1 (Suite récurrentes aléatoires). *Pour tout noyau de transition \mathbf{P} sur E , et toute loi ν sur E , il existe des fonctions $f : [0, 1] \rightarrow E$ et $g : E \times [0, 1] \rightarrow E$ telles que pour toute suite (U_n) de variables aléatoires i.i.d. de loi uniforme sur $[0, 1]$, la suite (X_n) définie par $X_0 = f(U_0)$ et $X_{n+1} := g(X_n, U_{n+1})$ est une CM(E, ν, \mathbf{P}).*

Démonstration. Après avoir identifié E à \mathbb{N} , on pose $f(u) := \min\{m \in \mathbb{N}; \nu(0) + \dots + \nu(m) \geq u\}$ et $g(n, u) := \min\{m \in \mathbb{N}; \mathbf{P}(n, 0) + \dots + \mathbf{P}(n, m) \geq u\}$ pour tout $n \in \mathbb{N}$ et $u \in [0, 1]$. Ce sont les

fonctions de répartition inverses des lois ν et $\mathbf{P}(n, \cdot)$, conformément à la méthode de simulation par inversion. \square

Pour simuler récursivement une trajectoire (x_n) d'une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$, on simule une réalisation $x_0 = f(u_0)$ de la loi initiale ν , puis le reste de la trajectoire par la formule de récurrence $x_{n+1} = g(x_n, u_{n+1})$. Cela fait envisager les chaînes de Markov comme des *suites récurrentes aléatoires*. Le théorème 0.4.1 réduit également la construction effective des $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$ à celle des suites i.i.d. de loi uniforme sur $[0, 1]$.

Approche par sauts et générateur

Soit (X_n) une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$. La suite (S_n) des *temps de saut* de (X_n) est définie par :

$$S_0 := 0 \quad \text{et} \quad S_{n+1} := \inf\{k > S_n; X_k \neq X_{S_n}\}.$$

On adopte la convention $\inf \emptyset = \infty$, de sorte que ces variables aléatoires sont bien définies et prennent leurs valeurs dans $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$. La suite (X_n) est constante et égale à X_{S_n} sur l'intervalle de temps aléatoire $\{m \in \mathbb{N}; S_n \leq m < S_{n+1}\}$. En vertu de la propriété de Markov forte, la probabilité $\mathbb{P}(S_{n+1} - S_n = m; X_{S_{n+1}} = y \mid X_{S_n} = x)$ vaut $\mathbf{P}(x, x)^{m-1} \mathbf{P}(x, y)$ si $m > 0$ et $y \neq x$, et vaut 0 sinon. Il en découle que pour tout état x et tout temps n ,

- soit $\mathbf{P}(x, x) = 1$, alors $\mathbb{P}(S_{n+1} = \infty \mid X_{S_n} = x) = 1$ et on dit que x est *absorbant*;
- soit $\mathbf{P}(x, x) < 1$, alors $\mathbb{P}(S_{n+1} < \infty \mid X_{S_n} = x) = 1$, les variables aléatoires $S_{n+1} - S_n$ et $X_{S_{n+1}}$ sont indépendantes conditionnellement à $\{X_{S_n} = x\}$, et de plus

$$\forall m > 0, \quad \mathbb{P}(S_{n+1} - S_n = m \mid X_{S_n} = x) = (\mathbf{P}(x, x))^{m-1} (1 - \mathbf{P}(x, x))$$

et

$$\forall y \neq x, \quad \mathbb{P}(X_{S_{n+1}} = y \mid X_{S_n} = x) = \frac{\mathbf{P}(x, y)}{1 - \mathbf{P}(x, x)}.$$

On appelle *générateur* de la chaîne l'application $\mathbf{L} : E \times E \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $\mathbf{L} := \mathbf{P} - \mathbf{I}$. Il vérifie $\mathbf{L}(x, x) = \mathbf{P}(x, x) - 1$ et $\mathbf{L}(x, y) = \mathbf{P}(x, y)$ si $x \neq y$. La décomposition en sauts fournit un nouvel algorithme de simulation des trajectoires, basé sur la simulation des deux lois $\mathcal{G}(-\mathbf{L}(x, x))$ et $\sum_{y \neq x} (-\mathbf{L}(x, y) / \mathbf{L}(x, x)) \delta_y$, qui correspondent aux temps des sauts et aux positions des sauts. Ici, $\mathcal{G}(p) := p \sum_{n=1}^{\infty} (1-p)^{n-1} \delta_n$ désigne la loi géométrique sur \mathbb{N}^* de moyenne $1/p$. Comparé à la méthode de simulation récursive directe, ce nouvel algorithme par sauts est d'autant plus préférable que les coefficients diagonaux de \mathbf{P} sont proches de 1.

Approche matricielle

Dans certains cas, comme par exemple pour le jeu de pile ou face, le noyau itéré \mathbf{P}^n possède une formulation explicite simple. Pour simuler X_n sur l'événement $\{X_0 = x_0\}$ sans passer par la trajectoire x_0, \dots, x_n , il suffit d'utiliser la loi $\mathbf{P}^n(x_0, \cdot)$ sur E . Lorsque E est de cardinal d , le

coût peut être réduit en calculant par récurrence la loi discrète $\mathcal{L}(X_n) = \nu \mathbf{P}^n$ par multiplication du vecteur ligne $\nu \mathbf{P}^k$ par la matrice \mathbf{P} , pour $k = 0, \dots, n$. Cela nécessite de l'ordre de nd^2 opérations élémentaires.

0.5 Atteinte, absorption, harmonie, martingales

Soit (X_n) une chaîne de Markov sur E . Lorsque que $F \subset E$ est clos, le *temps d'atteinte* τ_F de F devient un *temps d'absorption* puisque la chaîne ne peut pas s'échapper de F . C'est le cas lorsque F est une classe de récurrence. Le *vecteur des probabilités d'atteinte* $(u_F(x))_{x \in E}$ et le *vecteur des temps moyens d'atteinte* $(v_F(x))_{x \in E}$ sont définis par

$$a_F(x) := \mathbb{P}^x(\tau_F < \infty) \quad \text{et} \quad m_F(x) := \mathbb{E}^x(\tau_F). \quad (1)$$

Les valeurs prises sont respectivement dans $[0, 1]$ et $\mathbb{R}_+ \cup \{\infty\}$. Notons que $m_F(x) = \mathbb{E}^x(T_F)$ si $x \notin F$. On a toujours $u_F = 0$ et $v_F = \infty$ sur tout ensemble clos G disjoint de F . C'est par exemple le cas avec $G = E_R \setminus F$ lorsque F est une classe de récurrence.

Théorème 0.5.1 (Atteinte et absorption). *Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}), et $F \subset E$.*

1. Le vecteur $(a_F(x))_{x \in E}$ est solution positive ou nulle minimale² du système linéaire

$$a_F(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in F \\ \sum_{y \in E} \mathbf{P}(x, y) a_F(y) & \text{si } x \notin F \end{cases}.$$

Si F est clos, le système s'écrit $\mathbf{P} a_F = a_F$ où a_F est pris comme vecteur colonne.

2. Le vecteur $(m_F(x))_{x \in E}$ est solution positive ou nulle minimale du système linéaire

$$m_F(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in F \\ 1 + \sum_{y \in E} \mathbf{P}(x, y) m_F(y) & \text{si } x \notin F \end{cases}.$$

Démonstration. L'écriture pour F clos est immédiate. Les deux assertions principales s'établissent de la même manière. Il est clair que $a_F = 1$ sur F . Pour tout $x \notin F$, on écrit $a_F(x) = \sum_{y \in E} \mathbb{P}^x(\tau_F < \infty \mid X_1 = y) \mathbf{P}(x, y)$. Or $\tau_F \geq 1$ sur $\{X_0 = x\}$ car $x \notin F$, et donc par la propriété de Markov faible $\mathbb{P}^x(\tau_F < \infty \mid X_1 = y) = \mathbb{P}^y(\tau_F < \infty) = a_F(y)$ pour tout y . Ainsi, a_F est bien solution. Si a est une autre solution positive, alors $a = a_F = 1$ sur F . Si $x \notin F$, alors par substitutions successives dans $a(x) = \sum_{y \in F} \mathbf{P}(x, y) + \sum_{y \notin F} \mathbf{P}(x, y) a(y)$,

$$a(x) = \mathbb{P}^x(X_1 \in F) + \dots + \mathbb{P}^x(X_1 \notin F, \dots, X_{n-1} \notin F, X_n \in F) + \varepsilon_n$$

pour tout n , où $\varepsilon_n := \sum_{x_1, \dots, x_n \notin F} \mathbf{P}(x, x_1) \mathbf{P}(x_1, x_2) \dots \mathbf{P}(x_{n-1}, x_n) a(x_n)$. Il en découle que $a(x) \geq \mathbb{P}^x(\tau_F \leq n)$ puisque $\varepsilon_n \geq 0$. La limite quand $n \rightarrow \infty$ donne enfin $a(x) \geq a_F(x)$. \square

²Signifie que si a est également une solution positive ou nulle, alors $a_F(x) \leq a(x)$ pour tout $x \in E$.

Seule la somme sur F^c intervient dans l'équation vérifiée par v_F car $v_F(x) = 0$ si $x \in F$.

Exemple 0.5.2 (Marche aléatoire sur \mathbb{N} et ruine du joueur). Soit $0 < p < 1$. Considérons un joueur qui, à chaque étape, peut gagner un Euro avec probabilité p ou perdre un Euro avec probabilité $1 - p$. Le joueur commence le jeu avec une fortune initiale X_0 , et cesse de jouer dès que sa fortune est nulle. La suite (X_n) est une chaîne de Markov sur \mathbb{N} de noyau de transition \mathbf{P} vérifiant $\mathbf{P}(0, 0) = 1$, $\mathbf{P}(x, x + 1) = p$ et $\mathbf{P}(x, x - 1) = 1 - p$ pour tout $x > 0$. Une telle chaîne constitue également une marche aléatoire sur \mathbb{N} , tuée en 0. L'ensemble $F := \{0\}$ est clos car l'état 0 est absorbant. En vertu du théorème 0.5.1, le vecteur des probabilités d'absorption $u := u_F$ est solution minimale des équations $u(0) = 1$ et $u(x) = pu(x + 1) + (1 - p)u(x - 1)$ pour tout $x > 0$. Supposons que le jeu est équitable, c'est-à-dire que $p = 1/2$. Les solutions de la récurrence linéaire sont de la forme $u(x) = \alpha + \beta x$. Les conditions $u(0) = 1$ et $0 \leq u \leq 1$ entraînent $\alpha = 1$ et $\beta = 0$. Ainsi, $u(x) = 1$ pour tout x , ce qui signifie que quelque soit sa fortune initiale x , le joueur finira ruiné presque sûrement ! Ce modèle tolère des fortunes arbitrairement grandes au cours du jeu, ce qui n'est pas réaliste.

Théorème 0.5.3 (Martingales). Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}) et $\mathbf{L} := \mathbf{P} - \mathbf{I}$ son générateur. Si $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ est intégrable pour toutes les lois $\nu \mathbf{P}^n$, alors la suite (Y_n) définie par

$$Y_0 := 0 \quad \text{et} \quad Y_n := f(X_n) - f(X_0) - \sum_{k=0}^{n-1} (\mathbf{L}f)(X_k) \quad \text{pour tout } n > 0$$

est une martingale pour la filtration $(\sigma(X_0, \dots, X_n))$ de (X_n) .

Démonstration. Le résultat découle de l'identité suivante valable pour tout $n > 0$:

$$Y_n = \sum_{k=1}^n [f(X_k) - (\mathbf{P}f)(X_{k-1})] = \sum_{k=1}^n [f(X_k) - \mathbb{E}(f(X_k) | X_{k-1})].$$

□

Une fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ est *harmonique* pour \mathbf{P} lorsque $\mathbf{L}f = 0$, ou de manière équivalente lorsque $\mathbf{P}f = f$. Dans ce cas, la martingale se réduit à $(f(X_n))$. En vertu du théorème 0.5.1, le vecteur a_F des probabilités d'atteinte d'un ensemble clos F est harmonique et bornée.

Corollaire 0.5.4. Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}) avec $E \subset \mathbb{R}$. Si $x = \sum_{y \in E} y \mathbf{P}(x, y)$ pour tout $x \in E$, et si $\sum_{y \in E} |y| \nu(y) < \infty$ alors (X_n) est une martingale.

Exemple 0.5.5 (Marches aléatoires sur \mathbb{Z}). Soit (X_n) comme dans l'exemple 0.3.2. Si $\nu = \delta_0$ et si η admet le réel t comme moyenne, alors la suite $(X_n - tn)$ est une martingale. Cela correspond à la fonction $f(n) = tn$. En particulier, la suite (X_n) est une martingale lorsque η est centrée.

0.6 Invariance et récurrence positive

Mesures et lois invariantes

On dit qu'une mesure μ sur E est *invariante* pour le noyau de transition \mathbf{P} lorsque pour tout y , la série $\sum_{x \in E} \mu(x) \mathbf{P}(x, y)$ converge et vaut $\mu(y)$. Cela s'écrit $\mu \mathbf{P} = \mu$, ou encore $\mu \mathbf{L} = 0$. En particulier, μ est aussi invariante pour \mathbf{P}^n pour tout n . Pour une loi μ , son invariance pour \mathbf{P} revient à dire que si (X_n) est une chaîne de Markov de noyau \mathbf{P} et de loi initiale μ , alors $\mathcal{L}(X_n) = \mu$ pour tout n . Les lois de probabilités invariantes représentent donc des *équilibres* en loi pour la chaîne. Une mesure invariante n'est pas toujours une loi.

Exemple 0.6.1 (Cas i.i.d.). En vertu de la remarque 0.3.5, si (X_n) est une suite i.i.d. de loi μ sur E , alors (X_n) est une chaîne de Markov sur E et μ est invariante.

Exemple 0.6.2 (Chaîne à deux états). Une mesure μ est invariante pour la chaîne à deux états de l'exemple 0.1.7 si et seulement si $p_0 \mu(0) = p_1 \mu(1)$. En particulier, lorsque $p_0 + p_1 > 0$, la mesure μ définie par $\mu(0) = p_1 / (p_0 + p_1)$ et $\mu(1) = p_0 / (p_0 + p_1)$ est l'unique loi invariante. Si $p_0 = p_1 = 0$, toutes les mesures sont invariantes (la chaîne est constante).

Exemple 0.6.3 (Multiplicité des mesures invariantes). Considérons la marche aléatoire sur \mathbb{Z} de l'exemple 0.3.2 avec $\eta = (1 - p)\delta_{-1} + p\delta_{+1}$ et $0 < p < 1$. Une mesure μ est invariante si et seulement si $\mu(x) = \alpha + \beta(p/(1 - p))^x$ pour tout $x \in \mathbb{Z}$, où α et β sont des constantes réelles. Il n'y a donc pas unicité de la mesure invariante à multiplication près par une constante.

Exemple 0.6.4 (Absence de mesure invariante). Pour le processus de Bernoulli de l'exemple 0.1.5, une mesure μ sur \mathbb{N} est invariante si et seulement si $\mu(0) = (1 - p)\mu(0)$ et $\mu(x) = (1 - p)\mu(x) + p\mu(x - 1)$ pour tout $x > 0$. Par conséquent, si $0 < p < 1$, alors il n'y a pas de mesure invariante. Si $p = 0$, toutes les mesures sont invariantes, tandis que si $p = 1$, alors toute mesure invariante μ est constante (c'est-à-dire que $x \in E \mapsto \mu(x)$ est constante).

Structure de l'ensemble des mesures invariantes

La linéarité de l'équation $\mu \mathbf{P} = \mu$ entraîne que l'ensemble des mesures invariantes est un cône convexe : si μ_1 et μ_2 sont invariantes et si α_1 et α_2 sont deux réels positifs avec $\alpha_1 + \alpha_2 > 0$, alors la mesure $\alpha_1 \mu_1 + \alpha_2 \mu_2$ est également invariante. L'ensemble des lois de probabilité invariantes, lorsqu'il est non-vide, est également convexe (prendre $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$). Si μ est une mesure invariante, alors tout multiple de μ est également invariante. En particulier, si μ est invariante et vérifie $\mu(E) < \infty$ (toujours vrai si E est fini), alors $\mu(E)^{-1} \mu$ est une loi invariante.

Récurrence positive et récurrence nulle

Un état x est absorbant si et seulement si la masse de Dirac δ_x est invariante. Plus généralement, pour tout état récurrent x , on introduit le nombre moyen de passages en y avant le

retour en x , noté $\mu_x(y)$ et donné par

$$\mu_x(y) := \mathbb{E}^x \left(\sum_{n=0}^{T_x-1} \mathbf{I}_{\{X_n=y\}} \right).$$

Notons que $\mu_x(y) = \delta_x(y)$ si x est absorbant. De plus, $\mu_x(y) > 0$ si et seulement si $x \rightarrow y$.

Théorème 0.6.5. *Si \mathbf{P} un noyau de transition récurrent irréductible sur E , alors,*

1. $\mu_x(y) = \sum_{z \in E} \mu_x(z) \mathbf{P}(z, x)$ pour tout $x, y \in E$;
2. $0 < \mu_x(y) < \infty$ pour tout $x, y \in E$.

Cela définit pour tout $x \in E$ une mesure μ_x sur E , invariante pour \mathbf{P} , qui vérifie $\mu_x(x) = 1$.

Démonstration. On écrit $\mu_x(y) = \mathbb{E}^x(\sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{I}_{\{X_n=y; T_x \geq n\}}) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}^x(X_n = y; T_x \geq n)$. En partitionnant selon la valeur de X_{n-1} puis en utilisant la propriété de Markov faible, on obtient $\mu_x(y) = \sum_{z \in E} \mu_x(z) \mathbf{P}(z, y)$. Pour la seconde propriété, on écrit $\mu_x(x) \mathbf{P}_{x,y}^{m_2} \leq \mu_x(y)$ et $\mu_x(y) \mathbf{P}^{m_2}(y, x) \leq \mu_x(x)$. Il suffit alors de choisir m_1 et m_2 tels que $\mathbf{P}^{m_1}(x, y) > 0$ et $\mathbf{P}^{m_2}(y, x) > 0$ par irréductibilité de \mathbf{P} , et d'utiliser le fait que $\mu_x(x) = 1$. \square

La formule $T_x = \sum_{y \in F} \sum_{n=0}^{T_x-1} \mathbf{I}_{\{X_n=y\}}$ donne $\mu_x(E) = \mathbb{E}^x(T_x)$. On dit qu'un état récurrent x est *récurrent positif* lorsque $\mu_x(E) < \infty$, et *récurrent nul* lorsque $\mu_x(E) = \infty$. La propriété de Markov forte entraîne que la nature de la récurrence ainsi définie est constante sur les classes de récurrence. Un état absorbant est toujours récurrent positif.

$$\text{classe de récurrence} \begin{cases} (1) \text{ la classe est récurrente positive} \\ (2) \text{ la classe est récurrence nulle} \end{cases}$$

Théorème 0.6.6 (Mesures invariantes des noyaux irréductibles). *Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}) irréductible. Alors toute mesure invariante μ charge tous les états, et vérifie $\mu(y) \geq \mu(x) \mu_x(y)$ pour tout x et y . De plus, il y a trois cas distincts.*

1. \mathbf{P} est transitoire. Dans ce cas, $\mu(E) = \infty$ pour toute mesure invariante μ . En particulier, E est nécessairement infini et il n'y a pas de loi invariante ;
2. \mathbf{P} est récurrent. Dans ce cas, pour tout x , la mesure μ_x est invariante. De plus, les mesures invariantes sont toutes proportionnelles. Si μ en fait partie, alors $\mu(y) = \mu(x) \mu_x(y)$ pour tout x et y . En particulier, $\mu_x(y) \mu_y(x) = 1$ pour tout x et y .
 - (a) \mathbf{P} est récurrent positif. Dans ce cas, il existe une unique loi de probabilité invariante μ donnée par $\mu(x) \mathbb{E}^x(T_x) = 1$ pour tout x ;
 - (b) \mathbf{P} est récurrent nul. Dans ce cas, $\mu(E) = \infty$ pour toute mesure invariante μ . En particulier, E est nécessairement infini, et il n'y a pas de loi invariante.

Démonstration. Soit μ une mesure invariante. Il existe au moins un état z tel que $\mu(z) > 0$. Pour tout y , il existe un entier n tel que $\mathbf{P}^n(z, y) > 0$ car \mathbf{P} est irréductible. Il en découle que $\mu(y) = \sum_x \mu(x) \mathbf{P}^n(x, y) \geq \mu(z) \mathbf{P}^n(z, y) > 0$. Ainsi, μ charge tous les états.

Soit μ invariante avec $\mu(x) = 1$. La formule $\mu(y) = \mu(x) \mathbf{P}(x, x) + \sum_{z \neq x} \mu(z) \mathbf{P}(z, y)$ utilisée récursivement conduit pour $y \neq x$ à $\mu(y) \geq \mathbb{P}^x(X_1 = y; T_x \geq 1) + \dots + \mathbb{P}^x(X_n = y; T_x \geq n)$. Lorsque $n \rightarrow \infty$, cela donne $\mu(y) \geq \mu_x(y)$.

Cas où \mathbf{P} est récurrent. Si μ est invariante avec $\mu(x) = 1$, alors nous savons que $\mu \geq \mu_x$, et donc $\mu - \mu_x$ est une mesure sur E . Or μ_x est invariante en vertu du théorème 0.6.5, et par conséquent, $(\mu - \mu_x) \mathbf{P} = (\mu - \mu_x)$. De plus, $\mu(x) - \mu_x(x) = 0$, ce qui entraîne que $\mu = \mu_x$.

Cas où \mathbf{P} est transitoire. Dans ce cas, on a $\mathbf{H}(x, y) < \infty$ pour tout x et y , et donc $\lim_n \mathbf{P}^n(x, y) = 0$. Supposons que $\mu(E) < \infty$. Le théorème de convergence dominée entraîne que $\mu(y) = \lim_n \sum_x \mu(x) \mathbf{P}^n(x, y) = 0$ pour tout y , ce qui est impossible. Ainsi, $\mu(E) = \infty$. \square

Remarque 0.6.7 (Classes closes des noyaux réductibles). Il découle du théorème 0.6.6 que pour tout noyau de transition, les classes de récurrence positives sont les seules classes irréductibles closes qui peuvent être finies (elles ne le sont pas toujours). Ce sont les seules classes irréductibles closes qui portent une loi invariante.

Le théorème 0.6.6 montre que les mesures invariantes liées aux classes de récurrence s'expriment au moyen des quantités trajectorielles moyennes $\mu_x(y)$ et $1/\mathbb{E}^x(T_x)$. Réciproquement, la résolution du système linéaire $\mu \mathbf{P} = \mu$ fournit les quantités $\mu_x(y)$ et $1/\mathbb{E}^x(T_x)$. La section suivante renforce ce lien entre trajectoires et mesures invariantes. Pour certains noyaux, le calcul de $\mathbb{E}^x(T_x)$ est plus simple que la résolution de l'équation $\mu \mathbf{P} = \mu$.

0.7 Loi forte des grands nombres

Chaque trajectoire d'une chaîne de Markov partant d'un état récurrent x se décompose en une suite infinie d'excursions autour de x . La propriété de Markov forte suggère que ces excursions sont indépendantes et équidistribuées. Cette observation conduit au théorème suivant.

Théorème 0.7.1 (Nombre de passages et temps de retour). *Soit (X_n) une chaîne de Markov sur E , et $N_x^n := \text{card}\{0 \leq k \leq n-1; X_k = x\}$ le nombre de passages en x avant le temps n . Si la chaîne est irréductible, alors pour tout $x \in E$, et quelque soit la loi initiale,*

$$\frac{1}{n} N_x^n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \frac{1}{\mathbb{E}^x(T_x)}.$$

Si la chaîne est récurrente irréductible, alors pour tout $x, y \in E$, et quelque soit la loi initiale,

$$\frac{N_x^n}{N_y^n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \frac{1}{\mathbb{E}^x\left(\sum_{n=0}^{T_x-1} \mathbf{1}_{\{X_n=y\}}\right)}.$$

Démonstration. Fixons x dans E . Si la chaîne est transitoire, alors presque sûrement, le nombre de passages en x est fini, et donc (N_x^n/n) converge vers 0. Si la chaîne est récurrente irréductible, alors le temps d'atteinte de x est fini presque sûrement, et on peut donc supposer que la chaîne part de x pour établir les propriétés. De plus, presque sûrement, la suite strictement croissante (T_x^n) des temps de retour successifs en x est bien définie et converge vers ∞ . On convient que $T_x^0 := 0$ et que $T_x^1 = T_x$. Les définitions de (N_x^n) et (T_x^n) donnent $T_x^{N_x^{n-1}} \leq n-1$ et $n \leq T_x^{N_x^n}$, et par conséquent,

$$\frac{T_x^{N_x^{n-1}}}{N_x^n} \leq \frac{n}{N_x^n} \leq \frac{T_x^{N_x^n}}{N_x^n}.$$

La propriété de Markov forte entraîne que la suite $(T_x^{n+1} - T_x^n)$ est constituée de variables aléatoires indépendantes et de même loi que T_x . En vertu de la loi forte des grands nombres, la suite (T_x^n/n) converge presque sûrement vers $\mathbb{E}^x(T_x)$. D'autre part, la récurrence et l'irréductibilité entraînent que (N_x^n) converge presque sûrement vers ∞ . Ces deux convergences utilisées conjointement dans l'encadrement précédent entraînent que (n/N_x^n) converge presque sûrement vers $\mathbb{E}^x(T_x)$. La seconde propriété s'établit de manière similaire en considérant le nombre de passages en y avant le temps n , partant de x . \square

La loi forte des grands nombres, qui concerne les suites i.i.d., reste valable pour les chaînes de Markov récurrentes irréductibles positives, en dépit de la structure de dépendance liée au mécanisme de transition. La loi invariante de la chaîne remplace la loi commune du cas i.i.d.

Théorème 0.7.2 (Loi forte des grands nombres). *Soit (X_n) une chaîne de Markov sur E récurrente irréductible, de loi initiale quelconque. Alors pour toute mesure invariante μ et pour toutes fonctions $f, g : E \rightarrow \mathbb{R}$ μ -intégrables avec $g > 0$, on a*

$$\frac{f(X_1) + \cdots + f(X_n)}{g(X_1) + \cdots + g(X_n)} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \frac{\sum_{z \in E} f(z)\mu(z)}{\sum_{z \in E} g(z)\mu(z)}.$$

Si la chaîne est récurrente nulle, alors pour toute fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ μ -intégrable,

$$\frac{f(X_1) + \cdots + f(X_n)}{n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} 0.$$

Si la chaîne est récurrente positive, et si μ désigne son unique loi invariante donnée par $\mu(x) := 1/\mathbb{E}^x(T_x)$ pour tout $x \in E$, alors pour toute fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ μ -intégrable,

$$\frac{f(X_1) + \cdots + f(X_n)}{n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \sum_{z \in E} f(z)\mu(z).$$

Démonstration. La dernière propriété découle de la première avec $g \equiv 1$. D'autre part, pour $f = \mathbb{I}_{\{x\}}$ et $g = \mathbb{I}_{\{y\}}$, la première propriété découle des théorèmes 0.6.6 et 0.7.1. Le résultat reste vrai pour des fonctions à support fini par combinaison linéaire. La généralisation aux fonctions intégrables est laissé au lecteur à titre d'exercice. Il est possible de procéder directement en reprenant la preuve du théorème 0.7.1. La seconde propriété s'établit de la même manière que la première. \square

En vertu de la remarque 0.3.5, une suite (X_n) de variables aléatoires i.i.d. de loi μ chargeant tous les états est une chaîne de Markov récurrente irréductible positive, de loi invariante μ . De plus, $\mu(x) = 1/\mathbb{E}^x(T_x)$ pour tout x . Dans ce cas, le théorème 0.7.2 coïncide avec la loi forte des grands nombres pour la suite i.i.d. $(f(X_n))$.

Le théorème 0.7.2 exprime que le fait que qu'une *moyenne en temps* $(f(X_1) + \dots + f(X_n))/n$ converge vers une *moyenne en espace* $\sum_{z \in E} f(z)\mu(z)$. Le long de presque toute trajectoire, la fraction de temps passée sur un état (fréquence de passage), converge vers la masse qu'affecte la loi invariante à cet état, qui est exactement l'inverse du temps de retour moyen à cet état. L'expression $(f(X_1) + \dots + f(X_n))/n$ est la moyenne de f pour la *mesure empirique* \mathbb{P}_n , qui est la loi aléatoire définie par $\mathbb{P}_n := \frac{1}{n}(\delta_{X_1} + \dots + \delta_{X_n})$. Une autre façon d'exprimer le résultat de convergence consiste à dire que presque-sûrement, la suite (\mathbb{P}_n) converge en tant que suite de lois sur E vers la loi invariante μ lorsque $n \rightarrow \infty$.

Le théorème 0.7.2 est une conséquence d'un travail de Chacon et Ornstein publié dans [6], prouvant une conjecture de Hopf en théorie ergodique. Les liens avec la théorie des martingales sont présentés dans [25] par exemple.

Théorème 0.7.3 (Théorème limite central). *Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}) récurrente irréductible positive, μ sa loi invariante, $\mathbf{L} := \mathbf{P} - \mathbf{I}$ son générateur. Si $g : E \rightarrow \mathbb{R}$ est de carré intégrable pour toutes les lois $\nu \mathbf{P}^n$ et si $[\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2]$ est intégrable pour μ , alors*

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n [g(X_k) - (\mathbf{P}g)(X_{k-1})] \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \mu[\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2]).$$

En particulier, si $f := \mathbf{L}g$ est bornée, alors $\mu f = 0$ et

$$\frac{f(X_1) + \dots + f(X_n)}{\sqrt{n}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \mu[\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2]).$$

Démonstration. La seconde propriété découle immédiatement de la première. En vertu du théorème 0.5.3, la suite (Y_n) définie par $Y_0 := 0$ et $Y_n := \sum_{k=1}^n g(X_k) - (\mathbf{P}g)(X_{k-1})$ pour $n > 0$ est une martingale de carré intégrable. Son processus croissant est donné par $\langle Y \rangle_n = \sum_{k=1}^n [\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2](X_{k-1})$. Le théorème 0.7.1 assure que $(\frac{1}{n}\langle Y \rangle_n)$ converge presque sûrement vers $\mu[\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2]$. Le résultat désiré s'obtient en montrant que la condition de Lindeberg du théorème limite central pour les martingales a bien lieu. \square

Le théorème 0.7.3 généralise le théorème de la limite centrale des suites i.i.d. En effet, lorsque (X_n) est une suite i.i.d. de loi μ , alors $\mathbf{P}(x, \cdot) = \mu$ pour tout x , et $(\mathbf{P}g)(x) = \sum_{x \in E} \mu(x)g(x)$ ne dépend pas de x . Il s'agit de la moyenne $m_\mu(g)$ de g pour μ . D'autre part, la fonction $\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2 = \sum_{x \in E} \mu(x)g^2(x) - m_\mu(g)^2$ est également constante. Il s'agit de la variance $\sigma_\mu^2(g)$ de g pour μ , et $\mu[\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2] = \sigma_\mu^2(g)$. Notons de plus que $\mathbf{L}g = m_\mu(g) - g$.

0.8 Périodicité

Soit (X_n) une $\text{CM}(E, \nu, \mathbf{P})$ récurrente irréductible positive et μ son unique loi invariante donnée par $\mu(x) := 1/\mathbb{E}^x(T_x)$. La quantité N_x^n/n du théorème 0.7.1 est une variable aléatoire bornée par 1, dont l'espérance est

$$\frac{1}{n}(\mathbb{E}(\mathbb{I}_{\{X_0=x\}}) + \cdots + \mathbb{E}(\mathbb{I}_{\{X_{n-1}=x\}})) = \frac{1}{n}((\nu\mathbf{P}^0)(x) + \cdots + (\nu\mathbf{P}^{n-1})(x)).$$

En vertu du théorème 0.7.1 et du théorème de convergence dominée, cette espérance converge vers $\mu(x)$ lorsque $n \rightarrow \infty$. Ainsi, la suite de lois de probabilité $(\nu\mathbf{P}^n)$ converge vers μ au sens de Césaro.

Considérons une chaîne de Markov (X_n) sur $\mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$ de noyau de transition \mathbf{P} défini par $\mathbf{P}(x, y) := 1$ si $y = x + 1$ dans $\mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$ et $\mathbf{P}(x, y) = 0$ sinon. Il s'agit du processus de Bernoulli modulo d avec $p = 1$. Le noyau \mathbf{P} est récurrent irréductible positif, et la loi uniforme sur $\mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$ est invariante. Cependant, $\mathcal{L}(X_{dk+i} | X_0) = \delta_{X_0+i}$ pour tout $k \in \mathbb{N}$ et tout $0 \leq i < d$. Cela s'écrit également $\mathbf{P}^{nk+i} = \mathbf{P}^i$. Ainsi, bien que $(\nu\mathbf{P}^n)$ converge au sens de Césaro vers μ , des phénomènes périodiques peuvent empêcher sa convergence au sens usuel.

Théorème 0.8.1 (Période). *Pour tout noyau de transition irréductible \mathbf{P} sur E , il existe un entier $d > 0$ appelé période et une partition $E := C_0 \cup \cdots \cup C_{d-1}$ tels que, avec la convention $C_{nd+i} = C_i$,*

1. si $\mathbf{P}^n(x, y) > 0$ alors $(x, y) \in C_i \times C_{i+n}$ pour un certain i ;
2. pour tout $x, y \in C_i$, et tout i , il existe un entier r tel que $\mathbf{P}^{nd}(x, y) > 0$ pour tout $n \geq r$;
3. pour tout z , l'entier d est le PGCD de l'ensemble $S_z := \{n > 0; \mathbf{P}^n(z, z) > 0\}$.

En particulier, le noyau \mathbf{P}^d possède d classes irréductibles, qui sont C_0, \dots, C_{d-1} .

Démonstration. Nous reprenons la preuve de [26, Théorème 1.8.4]. Fixons z , et considérons $n_2 > n_1$ dans S_z tels que la différence $d := n_2 - n_1$ soit la plus petite possible. On définit alors l'ensemble C_i pour $0 \leq i \leq d - 1$ par

$$C_i := \{x \in E; \mathbf{P}^{nd+i}(z, x) > 0 \text{ pour un entier } n \geq 0\}.$$

L'irréductibilité de \mathbf{P} entraîne que $C_0 \cup \cdots \cup C_{d-1} = E$. Supposons que $x \in C_i \cap C_j$. On a donc $\mathbf{P}^{nd+i}(z, x) > 0$ et $\mathbf{P}^{nd+j}(z, x) > 0$. L'irréductibilité de \mathbf{P} assure que $\mathbf{P}^m(x, z) > 0$ pour un entier m . Il en découle que $\mathbf{P}^{nd+i+m}(z, z) > 0$ et $\mathbf{P}^{nd+j+m}(z, z) > 0$. Ceci n'est possible que si $i = j$, par minimalité de d . Ainsi, les ensembles C_0, \dots, C_{d-1} forment une partition de E .

Démontrons la première propriété. Soit $x \in C_i$ et supposons que $\mathbf{P}^n(x, y) > 0$. Alors $\mathbf{P}^{md+i}(z, x) > 0$ pour un entier m , et donc $\mathbf{P}^{md+n+i}(z, y) > 0$, ce qui entraîne que $y \in C_{n+i}$. Notons qu'en prenant $x = y = z$, on voit que d divise tout élément de S_z , et donc divise n_1 .

Si $nd \geq n_1^2$, alors $nd = qn_1 + r$ avec $1 \leq r < n_1 \leq q$. Comme d divise n_1 , il divise également r . En écrivant $r = mq$, on obtient $nd = (q - m)n_1 + mn_2$. Ainsi, nous avons $\mathbf{P}^{nd}(z, z) \geq (\mathbf{P}^{n_1}(z, z))^{q-m} (\mathbf{P}^{n_2}(z, z))^m > 0$, et donc $nd \in S_z$.

Démontrons la seconde propriété. Soient $x, y \in C_i$. L'irréductibilité de \mathbf{P} entraîne que $\mathbf{P}^{m_1}(x, z) > 0$ et $\mathbf{P}^{m_2}(y, z) > 0$ pour des entiers m_1 et m_2 . Il en découle que si $nd \geq n_1^2$ alors $\mathbf{P}^{m_1+nd+m_2}(x, y) \geq \mathbf{P}^{m_1}(x, z)\mathbf{P}^{nd}(z, z)\mathbf{P}^{m_2}(z, y) > 0$. Or $m_1 + m_2$ est alors un multiple de d par la première propriété, ce qui fournit le résultat.

Pour la troisième et dernière propriété, nous savons que d divise les éléments de S_z . Si k divise les éléments de S_z , alors il divise n_1 et n_2 et donc d . Par conséquent, $d = \text{PGCD}(S_z)$. \square

Ainsi, une chaîne irréductible de noyau \mathbf{P} traverse les ensembles C_0, \dots, C_{d-1} successivement et de façon cyclique. Si le support de $\mathcal{L}(X_0)$ est inclus dans C_i , alors le support de $\mathcal{L}(X_1)$ est inclus dans C_{i+1} , etc. Ce phénomène rend la convergence en loi de la chaîne impossible si $d > 1$. La période de la chaîne sur $\mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$ considérée précédemment vaut d .

On dit qu'un noyau de transition irréductible est *apériodique* lorsque sa période est égale à 1. Le théorème 0.9.3 exprime, pour les chaînes à noyau apériodique, un phénomène d'oubli de la loi initiale au profit de la loi invariante, qui représente un équilibre, et qui ne dépend que du noyau de transition.

0.9 Convergence en loi et couplage

On dit qu'une suite de mesures (μ_n) sur un espace d'état E converge (étroitement) vers la mesure μ lorsque pour toute fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ continue et bornée, la suite $(\mu_n f)_n$ converge vers μf . Comme E est au plus dénombrable, cela implique que $(\mu_n(x))_n$ converge vers $\mu(x)$ pour tout x (prendre $f = \mathbf{I}_{\{x\}}$), mais la réciproque n'est vraie que lorsque E est fini (dispersion de la masse à l'infini : prendre f constante et $\mu_n = (\delta_0 + \dots + \delta_n)/n$). Si une suite de lois de probabilité (μ_n) converge vers une mesure μ , alors μ est également une loi (prendre f constante). Si (X_n) est une suite de variables aléatoires sur E et μ une loi sur E , alors (X_n) converge en loi vers μ si et seulement si $(\mathcal{L}(X_n))$ converge vers μ .

Il est commode de quantifier l'écart entre deux lois de probabilité μ et ν sur E par leur *distance en variation totale*, définie par

$$\|\mu - \nu\|_{\text{VT}} := \sup_{F \subset E} |\mu(F) - \nu(F)|.$$

Comme E est au plus dénombrable, on dispose de l'expression alternative suivante :

$$\|\mu - \nu\|_{\text{VT}} = \frac{1}{2} \sup_{f: E \rightarrow [-1, +1]} |\mu f - \nu f|.$$

La borne supérieure est atteinte pour la fonction $f(x) := \text{signe}(\mu(x) - \nu(x))$, qui donne

$$\|\mu - \nu\|_{\text{VT}} = \frac{1}{2} \sum_{x \in E} |\mu(x) - \nu(x)|.$$

Si (X_n) est une suite de variables aléatoires sur E vérifiant $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathcal{L}(X_n) - \mu\|_{VT} = 0$ pour une loi μ , alors (X_n) converge en loi vers μ . Autrement dit, la convergence en variation totale entraîne la convergence en loi. La distance en variation totale est reliée aux couples de variables par la formule suivante :

$$\|\mu - \nu\|_{VT} = \inf_{X \sim \mu, Y \sim \nu} \mathbb{P}(X \neq Y).$$

L'infimum porte sur les couples de variables aléatoires (X, Y) de lois marginales μ et ν . Observons que lorsque X et Y sont indépendantes, alors $\mathcal{L}((X, Y)) = \mu \otimes \nu$.

Si \mathbf{P} est un noyau de transition sur E , un *couplage* de \mathbf{P} est une suite $(Z_n) := ((X_n, Y_n))$ sur $E \times E$ telle que ses deux composantes (X_n) et (Y_n) sont toutes deux des chaînes de Markov de noyau \mathbf{P} . Les suites marginales (X_n) et (Y_n) ne sont pas forcément indépendantes, n'ont pas forcément la même loi initiale, et la suite couplée (Z_n) n'est pas forcément une chaîne de Markov sur $E \times E$. On appelle *temps de couplage* de (X_n) et (Y_n) la variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$ définie par

$$T_C := \inf\{n > 0; X_n = Y_n\}.$$

Pour tout n , $\{T_C > n\} \subset \{X_n \neq Y_n\}$, avec égalité si le couplage (Z_n) est *coalescent* (cela signifie que $X_n = Y_n$ pour tout $n \geq T_C$). Le temps de couplage T_C s'interprète également comme le temps d'atteinte $T_C = \inf\{n > 0; Z_n \in C\}$ de la diagonale $C := \{(x, x); x \in E\}$ de $E \times E$. Le théorème suivant montre que le temps de couplage permet de contrôler la variation totale.

Théorème 0.9.1 (Couplage). *Soit \mathbf{P} un noyau de transition sur E et $(Z_n) := ((X_n, Y_n))$ une suite de variables aléatoires à valeurs dans $E \times E$. Soit T_C le temps de couplage des suites marginales (X_n) et (Y_n) . Supposons que*

1. *les suites marginales (X_n) et (Y_n) sont des chaînes de Markov sur E de noyau \mathbf{P} ;*
2. *pour tout $0 \leq k \leq n$, et sur l'événement $\{T_C = k\}$,*

$$\mathcal{L}(X_n | Z_0, \dots, Z_k) = \mathcal{L}(X_n | X_k) \quad \text{et} \quad \mathcal{L}(Y_n | Z_0, \dots, Z_k) = \mathcal{L}(Y_n | Y_k).$$

Alors, pour tout entier n ,

$$\|\mathcal{L}(X_n) - \mathcal{L}(Y_n)\|_{VT} = \|\mathcal{L}(X_0)\mathbf{P}^n - \mathcal{L}(Y_0)\mathbf{P}^n\|_{VT} \leq \mathbb{P}(T_C > n).$$

Démonstration. Soit $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction bornée. Nous avons

$$\nu \mathbf{P}^n f = \mathbb{E}(f(X_n)) = \mathbb{E}(f(X_n) \mathbf{I}_{\{T_C > n\}}) + \sum_{k=0}^n \mathbb{E}(f(X_n) \mathbf{I}_{\{T_C = k\}}).$$

Or $\mathbb{E}(f(X_n) \mathbf{I}_{\{T_C = k\}}) = \mathbb{E}(\mathbf{I}_{\{T_C = k\}} \mathbb{E}(f(X_n) | Z_0, \dots, Z_k))$, et par hypothèse sur (X_n) et (Y_n) ,

$$\mathbb{E}(f(X_n) | Z_0, \dots, Z_k) = (\mathbf{P}^{n-k} f)(X_k).$$

Ainsi, $\mathbb{E}(f(X_n) \mathbf{I}_{\{T_C = k\}}) = \mathbb{E}(f(Y_n) \mathbf{I}_{\{T_C = k\}})$ car $X_k = Y_k$ sur $\{T_C = k\}$. Par conséquent,

$$|\mathcal{L}(X_0)\mathbf{P}^n f - \mathcal{L}(Y_0)\mathbf{P}^n f| \leq \mathbb{E}(|f(X_n) - f(Y_n)|) \leq 2 \left(\sup_{x \in E} |f(x)| \right) \mathbb{P}(T_C > n).$$

Notons que $\mathbb{P}(T_C > n)$ dépend des lois initiales $\mathcal{L}(X_0)$ et $\mathcal{L}(Y_0)$ via la loi de (Z_n) . □

Proposition 0.9.2 (Contraction markovienne). *Pour tout noyau de transition \mathbf{P} sur E et toutes lois ν_1 et ν_2 , sur E , la contraction suivante a lieu :*

$$\|\nu_1\mathbf{P} - \nu_2\mathbf{P}\|_{VT} \leq \|\nu_1 - \nu_2\|_{VT}.$$

Démonstration. Si $f : E \rightarrow [-1, +1]$, alors $\mathbf{P}f : E \rightarrow [-1, +1]$, et donc en posant $g := \mathbf{P}f$:

$$|\nu_1\mathbf{P}f - \nu_2\mathbf{P}f| = |\nu_1\mathbf{P}f - \nu_2\mathbf{P}f| = |\nu_1g - \nu_2g| \leq \|\nu_1 - \nu_2\|_{VT}.$$

□

En particulier, si μ est une loi invariante pour un noyau de transition \mathbf{P} , alors pour toute loi ν et tout entier n , la contraction suivante a lieu :

$$\|\nu\mathbf{P}^n - \mu\|_{VT} \leq \|\nu - \mu\|_{VT}.$$

Ainsi, la loi d'une chaîne de Markov ne peut pas s'éloigner d'une loi invariante en variation totale. Le théorème ci-dessous renforce cette propriété.

Théorème 0.9.3 (Convergence en loi vers l'équilibre). *Soit \mathbf{P} un noyau de transition, récurrent irréductible positif et apériodique sur E . Soit μ son unique loi invariante donnée par $\mu(z) = 1/\mathbb{E}^z(T_z)$ pour tout $z \in E$. Alors pour toute loi de probabilité ν sur E ,*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\nu\mathbf{P}^n - \mu\|_{VT} = 0.$$

En d'autres termes, toute chaîne de Markov (X_n) de noyau \mathbf{P} converge en loi vers μ , quelque soit $\mathcal{L}(X_0)$. Autrement dit, $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n(x, y) = \mu(y)$ pour tout x et y dans E .

Démonstration. Soient (X_n) et (Y_n) deux chaînes indépendantes de même noyau \mathbf{P} sur E , et de lois initiales ν_1 et ν_2 . Alors $(Z_n) := ((X_n, Y_n))$ est une CM($E \times E, \nu_1 \otimes \nu_2, \mathbf{P} \otimes \mathbf{P}$) avec

$$(\nu_1 \otimes \nu_2)(x, y) = \nu_1(x)\nu_2(y) \quad \text{et} \quad (\mathbf{P} \otimes \mathbf{P})((x, y), (x', y')) = \mathbf{P}(x, y)\mathbf{P}(x', y').$$

De plus, les hypothèses du théorème 0.9.1 sont satisfaites. Soit T_C le temps de couplage de (X_n) et (Y_n) . Le noyau \mathbf{P} est irréductible et apériodique, par conséquent, en vertu du théorème 0.8.1, pour tout (x, y) et (x', y') dans $E \times E$, il existe des entiers r_1 et r_2 tels que $\mathbf{P}^n(x, x') > 0$ pour tout $n \geq r_1$ et $\mathbf{P}^n(y, y') > 0$ pour tout $n \geq r_2$. Il en découle que $(\mathbf{P} \otimes \mathbf{P})^n((x, x'), (y, y')) > 0$ pour tout $n \geq \max(r_1, r_2)$. Par conséquent, $\mathbf{P} \otimes \mathbf{P}$ est irréductible. Or $\mu \otimes \mu$ est une loi de probabilité invariante pour $\mathbf{P} \otimes \mathbf{P}$, et par suite, $\mathbf{P} \otimes \mathbf{P}$ est récurrent positif en vertu du théorème 0.6.6. En particulier, $\mathbb{P}(T_C < \infty) = 1$, et donc $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(T_C > n) = \mathbb{P}(T_C = \infty) = 0$. Le théorème 0.9.1 entraîne alors que pour toutes lois ν_1 et ν_2 sur E ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\nu_1\mathbf{P}^n - \nu_2\mathbf{P}^n\|_{VT} = 0.$$

Le résultat voulu s'obtient pour $\nu_1 = \nu$ et $\nu_2 = \mu$. Il est possible de lever l'hypothèse de positivité sur \mathbf{P} , en la remplaçant par l'existence d'un état $x \in E$ tel que $\sum_{n=0}^{\infty} (\mathbf{P}(x, x))^n = \infty$. Dans ce cas, (x, x) est récurrent pour $\mathbf{P} \otimes \mathbf{P}$, et donc $\mathbf{P} \otimes \mathbf{P}$ est récurrent irréductible. Cependant, \mathbf{P} n'admet pas de loi invariante s'il n'est pas positif, et seule la propriété avec ν_1 et ν_2 subsiste. □

Nous avons vu que le théorème 0.7.1 entraîne que $(\nu\mathbf{P}^n)$ converge vers μ au sens de Césaro, dès que \mathbf{P} est récurrent irréductible positif. Le théorème 0.9.3 précise que $(\nu\mathbf{P}^n)$ converge vers μ au sens usuel lorsque \mathbf{P} est de plus *apériodique*. Ainsi, bien que les théorèmes 0.7.1 et 0.9.3 soient de natures différentes, une conséquence du premier est renforcée par le second. Il est important de retenir que le résultat du théorème 0.9.3 énonce une convergence en loi. Cela ne dit rien pour une trajectoire donnée, contrairement au résultat du théorème 0.7.1.

Remarque 0.9.4 (Fonctions de chaînes). Si (X_n) et (Y_n) sont deux chaînes de Markov *indépendantes* sur E et F , de lois initiales ν_1 et ν_2 et de noyaux de transition \mathbf{P}_1 et \mathbf{P}_2 , alors le couple $((X_n, Y_n))$ est une chaîne de Markov sur l'espace produit $E \times F$, de loi initiale $(\nu_1 \otimes \nu_2)(x_1, x_2) := \nu_1(x_1)\nu_2(x_2)$ et de noyau $(\mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{P}_2)((x_1, x_2), (x'_1, x'_2)) := \mathbf{P}_1(x_1, x'_1)\mathbf{P}_2(x_2, x'_2)$. Cela n'a pas lieu en général sans l'hypothèse d'indépendance. De plus, si $((X_n, Y_n))$ est une chaîne de Markov sur $E \times F$, ses composantes (X_n) et (Y_n) ne sont pas forcément des chaînes de Markov sur E et F . Plus généralement, si (Z_n) est une chaîne de Markov sur E et si $f : E \rightarrow F$ est une fonction, alors $(f(Z_n))$ n'est pas toujours une chaîne de Markov sur F .

Remarque 0.9.5 (Apériodicité par perturbation). Soit \mathbf{P} un noyau de transition, et soit $0 < p < 1$. Le graphe des transitions du noyau $\mathbf{P}_p := (1 - p)\mathbf{P} + p\mathbf{I}$ s'obtient à partir de celui de \mathbf{P} en ajoutant une boucle de poids p pour chaque état qui n'en possède pas et en corrigeant les autres poids. Cela autorise la chaîne de noyau \mathbf{P}_p à rester sur place à chaque transition avec probabilité p . La loi $\mathbf{P}_p(x, \cdot)$ est le mélange des lois $\mathbf{P}(x, \cdot)$ et δ_x au moyen de la loi de Bernoulli de paramètre p . Comme $\mathbf{P}_p(x, x) > 0$ pour tout x , il en découle que \mathbf{P}_p est irréductible et apériodique dès que \mathbf{P} est irréductible. Les noyaux \mathbf{P}_p et \mathbf{P} possèdent les mêmes mesures invariantes. Enfin, $\lim_{p \rightarrow 0} \mathbf{P}_p(x, y) = \mathbf{P}_0(x, y) = \mathbf{P}(x, y)$, pour tout x, y .

La technique du *couplage* pour les chaînes de Markov a été introduite par Doeblin en 1938 dans [12]. Le livre [22] contient une reproduction de la preuve originelle.

0.10 Réversibilité et noyau de Metropolis-Hastings

Mesures symétriques et lois réversibles

On dit que la mesure μ sur E est *symétrique* pour le noyau de transition \mathbf{P} lorsque $\mu(x)\mathbf{P}(x, y) = \mu(y)\mathbf{P}(y, x)$ pour tout x et y dans E . De manière équivalente, cela revient à dire que pour tout n et toute suite x_0, \dots, x_n dans E :

$$\mu(x_0)\mathbf{P}(x_0, x_1) \cdots \mathbf{P}(x_{n-1}, x_n) = \mu(x_n)\mathbf{P}(x_n, x_{n-1}) \cdots \mathbf{P}(x_1, x_0).$$

Il en découle qu'une loi μ est symétrique pour \mathbf{P} si et seulement si elle est *réversible* pour \mathbf{P} : pour toute chaîne (X_n) de noyau \mathbf{P} et de loi initiale μ et tout entier r ,

$$\mathcal{L}((X_0, X_1, \dots, X_r)) = \mathcal{L}((X_r, X_{r-1}, \dots, X_0)).$$

Si une mesure μ est symétrique et vérifie $\mu(E) < \infty$, alors la loi de probabilité $\mu(E)^{-1}\mu$ est réversible. D'autre part, si une mesure μ est symétrique, alors elle est invariante car

$$\sum_{x \in E} \mu(x) \mathbf{P}(x, y) = \mu(y) \sum_{x \in E} \mathbf{P}(y, x) = \mu(y).$$

Le noyau \mathbf{P}_p de la remarque 0.9.5 possède les mêmes mesures symétriques que \mathbf{P} .

La mesure de comptage κ_E sur E est définie par $\kappa_E(x) = 1$ pour tout x dans E . Elle vérifie $\kappa_E(F) = \text{card}(F) \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ pour tout $F \subset E$, ce qui explique son nom. Pour une mesure μ sur E , si $x \in E \mapsto \mu(x)$ est constante alors μ est un multiple de κ_E . Enfin, $\kappa(E) < \infty$ si et seulement si E est fini. Dans ce cas, la loi $\kappa(E)^{-1}\kappa_E$ est appelée *loi uniforme* sur E . La loi uniforme n'existe pas si E est infini.

Exemple 0.10.1 (Mesure de comptage et loi uniforme). La loi uniforme sur $\mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$ est réversible pour la marche aléatoire simple sur $\mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$ de l'exemple 0.1.4. La mesure de comptage sur \mathbb{Z} est symétrique pour la marche aléatoire simple sur \mathbb{Z} de l'exemple 0.3.2. De manière générale, l'application $\mathbf{P}^\top : E \times E \rightarrow [0, 1]$ définie par $\mathbf{P}^\top(x, y) := \mathbf{P}(y, x)$ n'est pas forcément un noyau de transition sur E . Cependant, la mesure de comptage est invariante pour \mathbf{P} si et seulement si \mathbf{P}^\top est également un noyau de transition. Elle est symétrique pour \mathbf{P} si et seulement si $\mathbf{P}^\top = \mathbf{P}$. Cela permet de construire des noyaux dont les mesures invariantes ne sont pas symétriques.

Soit μ une mesure invariante pour un noyau de transition \mathbf{P} . Soit x un état repéré sur le graphe des transitions de \mathbf{P} . Multiplions le poids de chaque flèche arrivant en x par le poids $\mu(y)$ où y est l'état de départ de la flèche. La somme totale de ces produits doit être égale à $\mu(x)$. Cependant, il est plus facile de rechercher une mesure symétrique qu'une mesure invariante.

Soit \mathbf{P} un noyau de transition sur E vérifiant $\mathbf{P}(x, y) > 0$ pour tout x et y . Toute mesure μ symétrique pour \mathbf{P} vérifie alors $\mu(x) > 0$ pour tout x et $\mu(x)/\mu(y) = \mathbf{P}(y, x)/\mathbf{P}(x, y)$ pour tout x et y . Ainsi, lorsque \mathbf{P} admet une mesure symétrique, elle est unique à une constante multiplicative près. Il en découle également que \mathbf{P} admet une mesure symétrique si et seulement si la *propriété de cocycle* est vérifiée : pour x, y, z dans E ,

$$\mathbf{P}(x, y)\mathbf{P}(y, z)\mathbf{P}(z, x) = \mathbf{P}(x, z)\mathbf{P}(z, y)\mathbf{P}(y, x).$$

Cela signifie que le poids d'un cycle triangulaire ne dépend pas du sens de son parcours. Réciproquement, partant d'une mesure μ , la construction de Metropolis-Hastings présentée ci-dessous fournit un noyau qui admet μ comme mesure symétrique.

Noyau de Metropolis-Hastings

Soit μ une mesure sur E qui charge tous les états, et \mathbf{Q} un noyau de transition auxiliaire sur E vérifiant $\mathbf{Q}(x, y) = 0$ si et seulement si $\mathbf{Q}(y, x) = 0$. Pour tout $x \neq y$, on pose

$$\alpha(x, y) := \min \left(1, \frac{\mu(y)\mathbf{Q}(y, x)}{\mu(x)\mathbf{Q}(x, y)} \right) \quad \text{si } \mathbf{Q}(x, y) > 0 \quad \text{et} \quad \alpha(x, y) = 0 \quad \text{sinon.}$$

Le noyau de Metropolis-Hastings \mathbf{P} associé à μ et \mathbf{Q} est défini pour tout x, y dans E par

$$\mathbf{P}(x, y) := \begin{cases} \mathbf{Q}(x, y)\alpha(x, y) & \text{si } x \neq y \\ \sum_{z \neq x} \mathbf{P}(x, z) & \text{si } x = y \end{cases}.$$

Il s'agit bien d'un noyau de transition sur E car $0 \leq \mathbf{P}(x, y) \leq \mathbf{Q}(x, y)$ pour tout $x \neq y$. Il s'avère que la mesure μ est symétrique (et donc invariante) pour le noyau \mathbf{P} . En particulier, lorsque $\mu(E) < \infty$, la loi $\mu(E)^{-1}\mu$ est réversible pour \mathbf{P} . Tout l'intérêt du noyau \mathbf{P} réside dans le fait que sa construction dépend des rapports $\mu(x)/\mu(y)$ mais pas de $\mu(E)$.

En général, le choix du noyau \mathbf{Q} dépend de la nature de l'espace E . Lorsque E est muni d'une distance d vérifiant $n_x := \text{card}\{y \in E; d(x, y) = 1\} < \infty$ pour tout x , il est commode de prendre par exemple $\mathbf{Q}(x, y) = 1/n_x$ si $d(x, y) = 1$ et $\mathbf{Q}(x, y) = 0$ sinon.

Remarque 0.10.2 (Noyau de Barker). Il s'obtient de la même manière que le noyau de Metropolis-Hasting, avec la fonction d'acceptation α définie ci-dessous. Il jouit des mêmes propriétés.

$$\alpha(x, y) = \frac{\mu(y)\mathbf{Q}(y, x)}{\mu(y)\mathbf{Q}(y, x) + \mu(x)\mathbf{Q}(x, y)} \quad \text{si } \mathbf{Q}(x, y) > 0 \quad \text{et} \quad \alpha(x, y) = 0 \quad \text{sinon.}$$

Simulation des trajectoires

La simulation des trajectoires d'une chaîne de Markov de noyau \mathbf{P} par la méthode récursive revient à simuler la loi $\mathbf{P}(x, \cdot)$. Cela peut être fait très simplement via \mathbf{Q} et α . En effet, soit Y une variable aléatoire qui suit la loi $\mathbf{Q}(x, \cdot)$ sur E , et U une variable aléatoire de loi uniforme sur $[0, 1]$, indépendante de Y . Soit Z la variable aléatoire définie par $Z = Y$ si $U < \alpha(x, Y)$ et $Z = x$ sinon. Alors pour tout $y \neq x$,

$$\mathbb{P}(Z = y) = \mathbb{P}(U < \alpha(x, Y), Y = y) = \alpha(x, y)\mathbf{Q}(x, y) = \mathbf{P}(x, y).$$

Par conséquent, Z suit la loi $\mathbf{P}(x, \cdot)$. Il est remarquable que l'évaluation de $\mathbf{P}(x, x)$ soit inutile dans la simulation. La fonction α est parfois appelée *fonction d'acceptation-rejet* tandis que le noyau \mathbf{Q} est parfois appelé *noyau d'exploration*.

Si $g_Q : E \times [0, 1] \rightarrow E$ est une fonction récursive associée à \mathbf{Q} par le théorème 0.4.1, alors la fonction $g_P : E \times [0, 1]^2 \rightarrow E$ définie ci-dessous est une fonction récursive associée à \mathbf{P} . Elle doit être utilisée sous la forme $x_{n+1} = g_P(x_n, W_{n+1})$ où (W_n) est une suite i.i.d. de variables aléatoires uniformes sur $[0, 1]^2$. Les deux composantes de W_n sont donc indépendantes et de loi uniforme sur $[0, 1]$.

$$g_P(x, (u, v)) := \begin{cases} g_Q(x, v) & \text{si } u < \alpha(x, g_Q(x, v)) \\ x & \text{sinon} \end{cases}.$$

Algorithme de Metropolis-Hastings

Cet algorithme, introduit par Metropolis dans [24] puis généralisé par Hastings dans [17], fait aujourd'hui partie des méthodes MCMC (Monte Carlo Markov Chains), qui consistent à utiliser des chaînes de Markov pour simuler des lois de probabilité.

Soit μ une mesure sur E qui charge tous les états, et qui vérifie $\mu(E) < \infty$. Soit \mathbf{Q} un noyau récurrent irréductible apériodique et positif sur E . Le noyau de Metropolis-Hastings \mathbf{P} associé à la mesure μ et au noyau \mathbf{Q} est irréductible apériodique et admet μ comme mesure symétrique. Comme $\mu(E) < \infty$, le noyau \mathbf{P} est récurrent irréductible positif apériodique. La loi $\mu(E)^{-1}\mu$ est symétrique et donc invariante et réversible pour \mathbf{P} .

En vertu du théorème 0.9.3, si (X_n) est une CM(E, ν, \mathbf{P}), alors (X_n) converge en loi vers $\mu(E)^{-1}\mu$. L'algorithme de Metropolis-Hastings pour la simulation de $\mu(E)^{-1}\mu$ consiste à simuler une longue trajectoire x_0, x_1, \dots, x_n de la chaîne (X_n) , puis à considérer son dernier pas x_n comme une réalisation approchée de la loi de probabilité invariante $\mu(E)^{-1}\mu$. Cet algorithme ne nécessite pas le calcul de $\mu(E)$, mais fait appel aux rapports $\mu(x)/\mu(y)$ et à la simulation des lignes de \mathbf{Q} . Typiquement, μ est une mesure de Boltzmann-Gibbs, ce qui signifie qu'elle s'écrit $\mu(x) = \exp(-H(x))$ où la fonction $H : E \rightarrow \mathbb{R}$ est connue.

Échantillonneur de Gibbs

Soit F un ensemble au plus dénombrable et μ une loi sur $E := F^k$ chargeant tous les états. Pour tout $1 \leq i \leq k$ et tout $v \in E$, on note $v_{-i} := (v_1, \dots, v_{i-1}, v_{i+1}, \dots, v_k)$. On note également $\mu_{i, v_{-i}}$ la loi conditionnelle de V_i sachant $\{V_{-i} = v_{-i}\}$ lorsque V suit la loi μ . Il s'agit d'une loi sur F . Introduisons enfin le noyau de transition \mathbf{Q} sur E défini pour tout x et y par

$$\mathbf{Q}(x, y) = \sum_{i=1}^k q(i) \mu_{i, x_{-i}}(y_i) \mathbf{I}_{\{x_i = y_i\}},$$

où q est une loi sur $\{1, \dots, k\}$ chargeant tous les états (par exemple la loi uniforme sur F). L'algorithme de Metropolis-Hastings associé à la loi de probabilité μ et au noyau \mathbf{Q} ci-dessus est appelé *échantillonneur de Gibbs*. Il permet de simuler approximativement μ . Cela nécessite la simulation de la loi $\mathbf{Q}(x, \cdot)$. Pour cela, on procède de la manière suivante. Soit i une réalisation de la loi q sur $\{1, \dots, k\}$. Soit y_i une réalisation de la loi $\mu_{i, x_{-i}}$ sur F . Alors $(x_1, \dots, x_{i-1}, y_i, x_{i+1}, \dots, x_k)$ est une réalisation de la loi $\mathbf{Q}(x, \cdot)$. L'échantillonneur de Gibbs nécessite donc la simulation des lois conditionnelles $\mu_{i, x_{-i}}$. D'autre part, si α désigne la fonction d'acceptation de l'algorithme de Metropolis-Hastings, alors $\alpha(x, y) = 1$ dès que $\text{card}\{1 \leq i \leq k; x_i \neq y_i\} \leq 1$.

L'exemple le plus célèbre est fourni par le modèle de magnétisme du physicien Ising. Dans ce modèle, μ est une mesure sur $\{-1, +1\}^\Lambda$ où Λ est une partie de \mathbb{Z}^d . L'ensemble Λ représente un morceau de cristal, et chaque élément i de Λ représente un site, qui porte un spin (une orientation magnétique) valant soit -1 soit $+1$. Un élément x de $\{-1, +1\}^\Lambda$ représente une

configuration magnétique du morceau de cristal. La mesure μ est évaluable ponctuellement par une formule du type $\mu(x) = e^{-\beta H(x)}$ où $\beta > 0$ est une constante connue et

$$H(x) := \sum_{\|i-j\|_1=1} \varepsilon x_i x_j + m \sum_i x_i,$$

où ε et m sont également des constantes réelles connues. Dans ce modèle, $1/\beta$ représente une température, ε une constante d'interaction entre sites voisins dans le cristal, m la valeur d'un champ magnétique externe, et $H(x)$ l'énergie de la configuration x . La mesure μ favorise les configurations de basse énergie. En identifiant $\{-1, +1\}^\Lambda$ à $E := \{-1, +1\}^{\text{card}(\Lambda)}$, l'échantillonneur de Gibbs présenté précédemment permet de simuler approximativement la loi de probabilité $\mu(E)^{-1}\mu$ sans avoir à calculer la quantité $\mu(E)$, appelée fonction de partition en physique. Un problème statistique intéressant consiste à estimer les réels β , m et ε à partir de l'observation de réalisations i.i.d. de $\mu(E)^{-1}\mu$, ou d'une trajectoire d'une chaîne de mesure invariante μ .

0.11 Estimation du noyau et de la mesure invariante

Estimation du noyau de transition

Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}) récurrente irréductible positive, et soit μ son unique loi invariante. La suite $((X_n, X_{n+1}))$ est une chaîne de Markov sur $E \times E$ de noyau $\mathbf{Q}((x, x'), (y, y')) = \mathbf{P}(y, y')$ si $x' = y$ et $\mathbf{Q}((x, x'), (y, y')) = 0$ sinon. Ce noyau est récurrent irréductible positif. Sa loi invariante est donnée par $(x, x') \mapsto \mu(x)\mathbf{P}(x, x')$. En vertu du théorème 0.7.1, on obtient tout x et y dans E

$$\frac{\text{card}\{1 \leq k \leq n; (X_{k-1}, X_k) = (x, y)\}}{\text{card}\{1 \leq k \leq n; X_k = x\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\text{p.s.}} \frac{\mu(x)\mathbf{P}(x, y)}{\mu(x)} = \mathbf{P}(x, y).$$

Cela fournit un estimateur de $\mathbf{P}(x, y)$. Il se trouve qu'il s'agit de l'estimateur de maximum de vraisemblance qui maximise la log-vraisemblance

$$\mathbf{P} \mapsto \log \left(\nu(X_0) \prod_{k=1}^n \mathbf{P}(X_{k-1}, X_k) \right) = \log(\nu(X_0)) + \sum_{k=1}^n \log(\mathbf{P}(X_{k-1}, X_k))$$

sur l'ensemble convexe des noyaux de transition sur E . Lorsque le noyau à estimer est défini de manière paramétrique, le maximum de vraisemblance reste un estimateur tout à fait intéressant.

Estimation de la mesure invariante

Soit (X_n) une CM(E, ν, \mathbf{P}), irréductible récurrente positive, et μ son unique loi invariante donnée par $\mu(x) = 1/\mathbb{E}^x(T_x)$. Il est bien sûr possible d'estimer μ via T_x , à partir d'une seule

trajectoire de la chaîne, ou de plusieurs trajectoires de la chaîne. Alternativement, le théorème 0.7.1 fournit un estimateur direct N_x^n/n de $\mu(x)$ à partir d'une trajectoire de la chaîne. Plus généralement, ce théorème montre que l'histogramme des valeurs prises par la chaîne le long d'une trajectoire fournit un estimateur de la mesure μ .

Lorsque \mathbf{P} est récurrent irréductible mais pas positif, la mesure invariante μ n'est définie qu'à une constante multiplicative près. Un estimateur de $\mu(y)/\mu(x) = \mu_x(y)$ s'obtient de la même manière grâce au théorème (0.7.1).

Lorsque \mathbf{P} est apériodique, toutes les lignes de \mathbf{P}^n convergent vers μ , en vertu du théorème 0.9.3. La suite récurrente définie par $\nu_0 = \nu$ et $\nu_{n+1} = \nu_n \mathbf{P}$ converge vers μ . Il est également possible d'estimer μ en utilisant un échantillon de la loi $\mathcal{L}(X_n)$ lorsque cela est plus commode.

0.12 Cas des espaces d'états finis

Lorsque E est fini, de cardinal m , nous assimilons les noyaux de transition sur E à des matrices $m \times m$, les mesures sur E aux vecteurs lignes de \mathbb{R}^m , et les fonctions de E dans \mathbb{R} à des vecteurs colonnes de \mathbb{R}^m . Le terme *noyau de transition* est souvent remplacé par le terme *matrice markovienne* ou *matrice stochastique*. Le noyau spécial \mathbf{I} n'est rien d'autre que la matrice identité. Comme E est fini, toute mesure μ vérifie $\mu(E) < \infty$ et $\mu(E)^{-1}\mu$ est une loi sur E . Toutes les fonctions sont bornées et intégrables pour toutes les mesures.

0.12.1 Récurrence, invariance, apériodicité, ergodicité

Soit \mathbf{P} un noyau de transition sur E fini et de cardinal m . Une mesure μ est invariante si et seulement si le vecteur colonne μ^\top est un vecteur propre de \mathbf{P}^\top associé à la valeur propre 1. De même, une fonction f est harmonique si et seulement si le vecteur colonne f est un vecteur propre de \mathbf{P} associé à la valeur propre 1.

Existence de loi invariante par un argument spectral

Le vecteur $(1, \dots, 1)^\top$ est toujours harmonique pour \mathbf{P} . Autrement dit, le réel 1 est toujours valeur propre de \mathbf{P} , associée au vecteur propre $(1, \dots, 1)^\top$. Il en découle que 1 est également valeur propre de \mathbf{P}^\top , mais les espaces propres ne sont pas ceux de \mathbf{P} en général. Cependant, soit x un vecteur propre (complexe) de \mathbf{P}^\top associé à la valeur propre 1, alors il en est de même du vecteur $(|x_1|, \dots, |x_m|)^\top$ où $m := \text{card}(E)$, et le vecteur ligne $(\sum_{i=1}^m |x_i|)^{-1} x_i$ constitue donc une loi invariante pour \mathbf{P} . En effet, si $y_i := |x_i|$ et $z := \mathbf{P}^\top y - y$, alors $z_i \geq |(\mathbf{P}^\top x)_i| - |x_i| = 0$ pour tout i en vertu de l'inégalité triangulaire car \mathbf{P} est à coefficients réels positifs. Or $z_1 + \dots + z_m = 0$ car \mathbf{P} est un noyau de transition, d'où $z = 0$.

Unicité de la loi invariante par un théorème de Liouville

Soit f une fonction harmonique pour un noyau irréductible \mathbf{P} . Comme E est fini, il existe un $x \in E$ tel que $f(x) = M$ où $M := \max_{z \in E} f(z)$. Supposons qu'il existe y tel que $f(y) < M$. Comme \mathbf{P} est irréductible, $\mathbf{P}^n(x, y) > 0$ pour un entier n . La fonction f est également harmonique pour \mathbf{P}^n , et donc $f(x) = \sum_{z \in E} \mathbf{P}^n(x, z) f(z) = \mathbf{P}^n(x, y) f(y) + \sum_{z \neq y} \mathbf{P}^n(x, z) f(z) < M$, ce qui contredit la définition de x . Ainsi, les fonctions harmoniques d'un noyau irréductible sur E fini sont les fonctions constantes. Par conséquent, l'espace propre de \mathbf{P} associé à la valeur propre 1 est de dimension 1, et il en est donc de même pour \mathbf{P}^\top . Ainsi, un noyau irréductible admet une unique loi invariante (nous savons déjà qu'elle existe).

Existence de loi invariante par un argument de convexité-compacité

En utilisant l'écriture matricielle, l'ensemble Λ_E des lois de probabilité sur E est le sous-ensemble de \mathbb{R}^m formé par les vecteurs ligne (p_1, \dots, p_m) avec $p_1 \geq 0, \dots, p_m \geq 0$ et $p_1 + \dots + p_m = 1$. Soit $\mu_0 \in \Lambda_E$. Comme Λ_E est convexe, $\mu_n := \frac{1}{n+1}(\mu_0 + \mu_0 \mathbf{P} + \dots + \mu_0 \mathbf{P}^n) \in \Lambda_E$ pour tout n . D'autre part, comme Λ_E est compact dans \mathbb{R}^m , le théorème de Bolzano-Weierstrass assure l'existence d'une sous-suite convergente $(\mu_{n_k})_k$ de limite $\mu \in \Lambda_E$. On a alors $\mu \mathbf{P} = \mu$ car

$$\mu_{n_k} \mathbf{P} = \frac{1}{1 + n_k} (\mu_0 \mathbf{P} + \dots + \mu_0 \mathbf{P}^{1+n_k}) = \mu_{n_k} + \frac{1}{1 + n_k} (\mu_0 - \mu_0 \mathbf{P}^{1+n_k}).$$

Toute valeur d'adhérence de (μ_n) est une loi invariante pour \mathbf{P} . La réciproque est vraie car si μ_0 est invariante pour \mathbf{P} , la suite (μ_n) est constante et égale à μ_0 . Lorsque E est infini, l'argument de convexité subsiste, mais celui de compacité ne tient plus.

Caractérisations de l'apériodicité

Lorsque E est fini, la période d d'un noyau est toujours inférieure ou égale au cardinal de E . Pour un noyau \mathbf{P} irréductible sur E fini, il y a équivalence entre

1. \mathbf{P} est apériodique ;
2. 1 est la seule valeur propre (complexe) de \mathbf{P} de module supérieur ou égal à 1 ;
3. il existe un entier r tel que $\mathbf{P}^r(x, y) > 0$ pour tout x et y et tout $n \geq r$.

Une preuve de cette équivalence se trouve par exemple dans [3, théorème 6.6]. Elle fait appel à des arguments simples concernant l'algèbre des entiers et l'algèbre linéaire.

Récurrence et invariance

Le théorème suivant complète l'étude du cas fini.

Théorème 0.12.1 (Récurrence et invariance). *Si (X_n) est une CM(E, ν, \mathbf{P}) sur E fini, alors*

1. E_R est non vide et il n'y a pas d'état récurrents nuls. Toutes les classes de récurrence sont positives. Si \mathbf{P} est irréductible, alors il est récurrent irréductible positif;

2. $\mathbb{P}(T_{E_R} < \infty) = 1$. La chaîne est presque sûrement capturée par une classe de récurrence. Quand tous les états récurrents sont absorbants, la chaîne finit p.s. par être constante;
3. si $(\mathbf{P}^n(x, \cdot))$ converge, sa limite est une loi de probabilité invariante;
4. les mesures invariantes ne chargent pas E_T , et si R_1, \dots, R_r sont les classes de récurrence de \mathbf{P} , alors chaque R_i porte une unique loi invariante μ_i . Les mesures invariantes pour \mathbf{P} sont les combinaisons convexes de la forme $\alpha_1\mu_1 + \dots + \alpha_r\mu_r$ où $\alpha_1, \dots, \alpha_r$ sont des réels positifs ou nuls. Les lois de probabilité invariantes correspondent aux cas où $\alpha_1 + \dots + \alpha_r = 1$;
5. l'espace propre de $(\mathbf{P}_{R_i \times R_i})^\top$ associé à la valeur propre 1 est de dimension 1, et contient un unique vecteur à composantes positives dont la somme vaut 1, qui est précisément μ_i ;
6. \mathbf{P} est irréductible si et seulement si \mathbf{P} admet une unique loi invariante;
7. une classe irréductible est close si et seulement si elle est récurrente. Les classes irréductibles dont aucune flèche ne sort sont récurrentes, tandis que les autres sont transitoires. Un état x est transitoire si et seulement s'il existe un état y tel que $x \rightarrow y$ et $y \not\rightarrow x$. La décomposition de l'espace d'état ne dépend que de la connectivité du graphe des transitions, c'est-à-dire des flèches mais pas de leur poids.

Démonstration. Si $y \in E_T$, alors $\sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{P}^n(x, y) = \mathbf{H}(x, y) < \infty$ donc $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n(x, y) = 0$. L'usage de la somme finie $\sum_{y \in E} \mathbf{P}^n(x, y) = 1$ donne alors $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}^x(X_n \in E_R) = 1$. En particulier, E_R ne peut pas être vide. De plus $\mathbb{P}^x(T_{E_R} = \infty) = \mathbb{P}^x(N_{E_R} = 0) \leq \mathbb{P}^x(X_n \notin E_R)$ pour tout $n \geq 1$. Il en découle que $\mathbb{P}^x(T_{E_R} = \infty) = 0$ pour tout $x \in E$. Enfin, comme les classes de récurrence sont finies, elles sont récurrentes positives en vertu du théorème 0.6.6. La troisième assertion est immédiate en écrivant $\mathbf{P}^{n+1}(x, \cdot) = \mathbf{P}^n(x, \cdot)\mathbf{P}$. Pour montrer que les mesures invariantes ne chargent pas E_T , on constate que $\sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{P}^n(x, y) = \mathbf{H}(x, y) < \infty$ pour tout $y \in E_T$ et tout x . En particulier, $(\mathbf{P}^n(x, y))$ converge vers 0 quand $n \rightarrow \infty$, et si μ est invariante, alors $\mu(y) = \sum_{x \in E} \mu(x)\mathbf{P}^n(x, y)$, qui converge vers 0 quand $n \rightarrow \infty$. Le reste découle des remarques précédentes. \square

Loi forte des grands nombres

Quand E est fini, la loi forte des grands nombres du théorème 0.7.2 peut être obtenue par une méthode de martingales. En effet, on peut supposer que $\text{card}(E) > 1$ et que f est de moyenne nulle pour μ sans difficulté. Le cas où f est identiquement nulle est sans intérêt. Comme E est fini, toutes les fonctions sont bornées et intégrables pour toutes les mesures. Pour toute fonction $g : E \rightarrow \mathbb{R}$, la suite (Y_n) définie par $Y_0 := 0$ et $Y_n := -g(X_n) + g(X_0) + \sum_{k=1}^n (\mathbf{L}g)(X_{k-1})$ est une martingale de carré intégrable (théorème 0.5.3). Son processus croissant vérifie $\langle Y \rangle_n = \sum_{k=1}^n [\mathbf{P}(g^2) - (\mathbf{P}g)^2](X_{k-1}) = O(n)$. En vertu d'un théorème sur les martingales, la suite $(n^{-1}Y_n)$ converge p.s. vers 0. D'autre part, $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1}(-g(X_n) + g(X_0)) = 0$ p.s. car g est bornée. Comme \mathbf{P} est irréductible sur E fini, les fonctions harmoniques sont les fonctions constantes (propriété de Liouville), et par conséquent l'équation de Poisson $\mathbf{L}g = f$ a une solution g si et

seulement si f est de moyenne nulle. Cette solution n'est pas constante car f est non identiquement nulle.

0.12.2 Convergence géométrique vers l'équilibre et couplage

Le théorème 0.12.2 ci-dessous fournit une borne supérieure géométrique pour la vitesse de la convergence vers l'équilibre. Il renforce le théorème 0.9.3. Ce résultat permet par exemple un contrôle de l'erreur dans l'algorithme de Metropolis-Hastings.

Théorème 0.12.2 (Convergence géométrique vers l'équilibre). *Soit \mathbf{P} un noyau de transition sur E fini, irréductible et apériodique, et soit μ son unique loi invariante. Alors $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{P}^n(x, \cdot) - \mu\|_{VT} = 0$ pour tout x dans E . De plus, il existe un réel $0 < \rho < 1$ et un entier $r > 0$ qui dépendent de \mathbf{P} tels que $\max_{x \in E} \|\mathbf{P}^n(x, \cdot) - \mu\|_{VT} \leq \rho^{\lfloor n/r \rfloor}$.*

Démonstration. L'hypothèse sur \mathbf{P} assure l'existence d'un entier r tel que \mathbf{P}^r ait tous ses coefficients non nuls. Par ailleurs, la loi invariante μ charge tous les états. Par conséquent, il existe un réel $0 < \varepsilon < 1$ tel que $\mathbf{P}^r(x, y) \geq \varepsilon \mu(y)$ pour tout x et y . Posons $\rho := 1 - \varepsilon$. Soit \mathbf{M} le noyau de transition sur E dont toutes les lignes sont identiques à μ . Grâce à la définition de ε , la matrice $\mathbf{Q} := \rho^{-1}(\mathbf{P}^r - (1 - \rho)\mathbf{M})$ est un noyau de transition sur E . Notons que $\mathbf{P}^r = (1 - \rho)\mathbf{M} + \rho\mathbf{Q}$. Pour tout entier k , on a

$$\mathbf{P}^{rk} = (1 - \rho^k)\mathbf{M} + \rho^k\mathbf{Q}^k.$$

Pour le voir, on observe que $\mathbf{R}\mathbf{M} = \mathbf{M}$ pour tout noyau de transition \mathbf{R} (car les lignes de \mathbf{M} sont identiques), et que $\mathbf{M}\mathbf{R} = \mathbf{M}$ pour tout noyau de transition \mathbf{R} qui admet μ comme mesure invariante. Il en découle que pour tout entier i ,

$$\mathbf{P}^{rk+i} - \mathbf{M} = \rho^k(\mathbf{Q}^k\mathbf{P}^i - \mathbf{M}).$$

Par conséquent, il vient $\mathbf{P}^{rk+i}(x, y) - \mu(y) = (\mathbf{P}^{rk+i} - \mathbf{M})(x, y) = \rho^k(\mathbf{Q}^k\mathbf{P}^i - \mathbf{M})(x, y)$ pour tout x et y dans E . Comme $\mathbf{Q}^k\mathbf{P}^i$ et \mathbf{M} sont des noyaux de transition,

$$\sum_{y \in E} |\mathbf{P}^{rk+i}(x, y) - \mu(y)| \leq \rho^k \sum_{y \in E} (\mathbf{Q}^k\mathbf{P}^i(x, y) + \mathbf{M}(x, y)) = 2\rho^k.$$

Cela entraîne $\|\mathbf{P}^{rk+i}(x, \cdot) - \mu\|_{VT} \leq \rho^k$. Le résultat final s'obtient en écrivant $n = kr + i$ avec $k = \lfloor n/r \rfloor$ où $\lfloor n/r \rfloor$ désigne la partie entière du réel n/r . La méthode est valide pour tout $\rho > 1 - \min_{x, y \in E} (\mathbf{P}^r(x, y)/\mu(y))$. Elle est tirée de [21, Chapitre 3]. \square

Remarque 0.12.3 (Spectre). L'étude des noyaux de transition sur un espace d'état fini bénéficie de la théorie spectrale des matrices à coefficients réels positifs, élaborée au tout début du vingtième siècle par Perron et Frobenius, et esquissée par exemple dans [16, section 6.8], [18, Chapitre 8], ou encore [2]. D'autre part, il est possible de relier la constante ρ du théorème 0.12.2 à la seconde plus grande valeur propre du noyau $\mathbf{P}\mathbf{P}^*$, où \mathbf{P}^* désigne le noyau défini par $\mathbf{P}^*(x, y) := \mu(x)\mathbf{P}(x, y)/\mu(y)$. Certains aspects sont développés par exemple dans [29], en liaison avec des inégalités fonctionnelles de type Poincaré et Sobolev logarithmique.

Remarque 0.12.4 (Convergence abrupte). Dans bon nombre de modèles, la décroissance en variation totale est bien plus abrupte qu'une simple suite géométrique. Ce phénomène est illustré sur l'exemple de l'urne d'Ehrenfest de la section 0.14.3 page 44.

Il est possible d'établir le théorème 0.12.2 en reprenant la preuve du théorème 0.9.3 basée sur un couplage indépendant. En effet, comme \mathbf{P} est irréductible et apériodique sur E fini, il existe un entier r tel que $\varepsilon := \min_{x,y \in E} \mathbf{P}^r(x,y) > 0$. Soit (X_n) et (Y_n) deux chaînes de Markov indépendantes de noyau \mathbf{P}^r et de lois initiales δ_x et μ , où μ est l'unique loi invariante de \mathbf{P} . La suite (Z_n) est une chaîne de Markov sur $E \times E$ de loi initiale $\delta_x \otimes \mu$ et de noyau $\mathbf{Q}((x,y), (x',y')) := \mathbf{P}^r(x,x')\mathbf{P}^r(y,y')$. En particulier, $\min_{z,z' \in E \times E} \mathbf{Q}(z,z') \geq \varepsilon^2$. Si T_C désigne le temps de couplage de (X_n) et (Y_n) , alors pour tout entier k , en notant $z_* := (x,x)$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(T_C > k) &\leq \mathbb{P}(Z_1 \neq z_*, \dots, Z_k \neq z_*) \\ &= \sum_{y, z_1 \neq z_*, \dots, z_k \neq z_*} \mu(y) \mathbf{Q}((x,y), z_1) \cdots \mathbf{Q}(z_{k-1}, z_k) \\ &\leq (1 - \varepsilon^2)^k. \end{aligned}$$

Comme $\mathcal{L}(Y_k) = \mu \mathbf{P}^{kr} = \mu$ et $\mathcal{L}(X_k) = \delta_x \mathbf{P}^{kr} = \mathbf{P}^{kr}(x, \cdot)$, le théorème 0.9.1 conduit à

$$\|\mathbf{P}^{kr}(x, \cdot) - \mu\|_{\text{VT}} \leq (1 - \varepsilon^2)^k.$$

À présent, tout entier n s'écrit $n = kr + i$ avec $k = \lfloor n/r \rfloor$ et $0 \leq i < r$. On a enfin

$$\|\mathbf{P}^n(x, \cdot) - \mu\|_{\text{VT}} = \|\mathbf{P}^{kr}(x, \cdot) \mathbf{P}^i - \mu\|_{\text{VT}} \leq \|\mathbf{P}^{kr}(x, \cdot) - \mu\|_{\text{VT}} \leq (1 - \varepsilon^2)^{\lfloor n/r \rfloor}.$$

0.12.3 Temps de recouvrement

Soit (X_n) une chaîne de Markov irréductible d'espace d'état fini E . Le *temps de recouvrement* de E par la chaîne est la variable aléatoire $\mathcal{T} := \min\{n \geq 0; E = \{X_0, \dots, X_n\}\}$. Cette variable aléatoire est finie presque sûrement car la chaîne est récurrente irréductible.

Considérons par exemple la marche aléatoire simple sur le tore discret $E := \mathbb{Z}^2/d\mathbb{Z}^2$. Le temps de recouvrement dépend de d , mais ne dépend pas de la loi initiale car le noyau est homogène en espace. Dembo, Perez, Rosen, et Zeitouni ont établi en 2004 dans [8] que

$$\frac{\mathcal{T}}{(d \log(d))^2} \xrightarrow{d \rightarrow +\infty} \frac{4}{\pi},$$

prouvant ainsi une conjecture formulée par Aldous vers 1989. La preuve repose sur un résultat similaire pour le mouvement brownien sur le tore continu. L'étude des temps de recouvrement est délicate. Certaines techniques sont présentées dans le cours [7] par exemple. L'écriture d'un programme illustrant le résultat précédent constitue un excellent exercice.

0.13 Coalescences et algorithme de Letac-Propp-Wilson

Soient (X_n) et (Y_n) deux chaînes de Markov indépendantes de même noyau de transition \mathbf{P} , et T_C leur temps de couplage. La suite $(Z_n) := ((X_n, Y_n))$ est une chaîne de Markov sur $E \times E$, et ses deux composantes (X_n) et (Y_n) sont des chaînes de Markov indépendantes de noyau \mathbf{P} . Cependant, bien que $X_{T_C} = Y_{T_C}$, les suites (X_n) et (Y_n) n'ont aucune raison de rester accolées après le temps T_C . Posons $Z'_n := (X_n, Y_n)$ si $n < T_C$ et $Z'_n := (X_n, X_n)$ si $n \geq T_C$. En vertu de la propriété de Markov forte, les composantes (X_n) et (Y'_n) de (Z'_n) sont des chaînes de Markov sur E de noyau \mathbf{P} . Par construction, elles restent accolées après l'instant de première rencontre (coalescence). Elles ne sont pas indépendantes. De plus, la suite (Z'_n) est une chaîne de Markov sur $E \times E$, de noyau \mathbf{Q} donné par

$$\mathbf{Q}((x, y), (x', y')) = \begin{cases} \mathbf{P}(x, x')\mathbf{P}(y, y') & \text{si } x \neq y \\ 0 & \text{si } x = y \text{ et } x' \neq y' \\ \mathbf{P}(x, x') & \text{si } x = y \text{ et } x' = y' \end{cases}$$

La suite (Z'_n) constitue le *couplage coalescent* de \mathbf{P} , construit à partir du couplage indépendant (Z_n) . Les composantes des suites (Z_n) et (Z'_n) possèdent le même temps de couplage T_C .

Lorsque \mathbf{P} possède une loi invariante μ , rien ne garantit que la variable aléatoire X_{T_C} (qui est égale à Y_{T_C}) suive la loi μ . Il paraît donc vain d'utiliser un couplage coalescent pour accéder à μ en un temps fini. Cette intuition est fautive.

0.13.1 Coalescences de suites récurrentes aléatoires

Nous reprenons ici l'approche récursive utilisée pour construire et simuler les chaînes de Markov. Soit \mathbf{P} un noyau de transition sur E et $g : E \times [0, 1] \rightarrow E$ la fonction associée fournie par le théorème 0.4.1. On note $G : E \rightarrow E$ la fonction aléatoire définie par $G(x) := g(x, U)$, où U suit la loi uniforme sur $[0, 1]$. Soient (G_n) une suite i.i.d. de fonctions aléatoires de E dans E , de même loi que G , construites à la manière de G en utilisant une suite (U_n) de variables aléatoires i.i.d. de loi uniforme sur $[0, 1]$. Pour tout n , on construit les applications aléatoires $A_n : E \rightarrow E$ et $B_n : E \rightarrow E$ en posant

$$A_n := G_n \circ \cdots \circ G_1 \quad \text{et} \quad B_n := G_1 \circ \cdots \circ G_n.$$

On convient que A_0 et B_0 sont égales à l'application identité de E . Pour tout $x \in E$ et tout n , les variables aléatoires $A_n(x)$ et $B_n(x)$ suivent la loi $\mathbf{P}^n(x, \cdot)$. Les suites $(A_n(x))$ et $(B_n(x))$ ont les mêmes lois marginales de dimension 1, mais n'ont pas la même loi en général. La suite $(A_n(x))$ est une chaîne de Markov sur E de noyau \mathbf{P} et de loi initiale δ_x . En revanche, la suite $(B_n(x))$ n'a aucune raison d'être une chaîne de Markov, car le temps est inversé en quelque sorte. Nous définissons à présent les temps de contraction T_A et T_B à valeurs dans $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$ par

$$T_A := \inf\{n \geq 0; \text{card}(A_n(E)) = 1\} \quad \text{et} \quad T_B := \inf\{n \geq 0; \text{card}(B_n(E)) = 1\}.$$

On dit que G est *contractante* lorsque $p := \mathbb{P}(\text{card}(G(E)) = 1) > 0$.

Théorème 0.13.1. *Si G est contractante, alors $\mathbb{P}(T_B < \infty) = 1$ et il existe une variable aléatoire x_B à valeurs dans E telle que $B_n(x) = x_B$ pour tout $x \in E$ et tout $n \geq T_B$. De plus, si μ_B désigne la loi de x_B , alors $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n(x, y) = \mu_B(y)$ pour tout x et y . En particulier, μ_B est l'unique loi invariante de \mathbf{P} .*

Démonstration. Par construction, les événements $C_n := \{\text{card}(G_n(E)) = 1\}$ sont indépendants et de même probabilité $p := \mathbb{P}(\text{card}(G(E)) = 1) > 0$. Le lemme de Borel-Cantelli entraîne que presque sûrement, $\text{card}(G_n(E)) = 1$ pour une infinité de valeurs de n . Cela assure en particulier que $\mathbb{P}(T_B < \infty) = 1$. Le temps aléatoire T_B définit presque sûrement un singleton aléatoire $\{x_B\}$ tel que $B_{T_B}(x) = x_B$ pour tout $x \in E$. Il en découle que $B_n(x) = x_B$ pour tout $x \in E$ et tout $n \geq T_B$. En effet, $B_n(x) = B_{T_B}((G_{T_B+1} \circ \dots \circ G_n)(x)) = x_B$. Cela correspond à une *coalescence* des trajectoires des suites $(B_n(x))$ quelque soit leur état initial x . Si μ_B désigne la loi de x_B , alors le théorème de convergence dominée entraîne que pour tout $x \in E$ et toute fonction bornée $f : E \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(f(B_n(x))) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(f(B_n(x))\mathbf{I}_{\{T_B \geq n\}}) = \mathbb{E}(f(x_B)) = \mu_B f.$$

Comme $\mathbb{E}(f(B_n(x))) = \mathbf{P}^n(x, \cdot)f$, on obtient $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n(x, y) = \mu_B(y)$ pour tout x et y . \square

Lorsque G est contractante, on a également $\mathbb{P}(T_A < \infty) = 1$ et T_A définit presque sûrement un singleton aléatoire $\{x_A\}$, vérifiant $A_{T_A}(x) = x_A$ pour tout $x \in E$. Cependant, la définition de (A_n) n'assure pas que $A_n(x) = x_A$ pour $n > T_A$ et tout $x \in E$, et le raisonnement utilisé pour μ_B ne peut pas être utilisé pour la loi μ_A de x_A . Observons que pour tout x et y dans E , la suite $((X_n, Y_n)) := ((A_n(x), A_n(y)))$ est un couplage coalescent de \mathbf{P} , de loi initiale $\delta_x \otimes \delta_y$. Si T_C désigne le temps de couplage associé, alors $T_C \leq T_A$. La suite $((B_n(x), B_n(y)))$ quant à elle est parfois qualifiée de *couplage par le passé*, ou encore CFTP (Coupling From The Past).

En pratique, il n'est pas commode de déterminer le temps de coalescence T_B car il fait intervenir tous les états initiaux possibles. Le résultat suivant fournit une alternative.

Théorème 0.13.2. *Supposons que E soit ordonné et que $g(x, \cdot) : [0, 1] \rightarrow E$ est constante par morceaux et croissante pour tout $x \in E$. Supposons également que E possède un plus petit élément x_* vérifiant $\varepsilon := \inf_{x \in E} \mathbf{P}(x, x_*) > 0$. Soit σ le temps aléatoire à valeur dans \mathbb{N}^* et de loi géométrique de moyenne $1/\varepsilon$ défini par*

$$\sigma := \inf\{n \geq 1; U_n < \varepsilon\}.$$

Alors $B_n(x) = B_{\sigma-1}(x_)$ pour tout $x \in E$ et tout $n \geq \sigma$. Si μ désigne la loi de $B_{\sigma-1}(x_*)$, alors $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n(x, y) = \mu(y)$ pour tout x et y dans E . En particulier, μ est l'unique loi invariante de \mathbf{P} .*

Démonstration. L'application aléatoire G est contractante car $\mathbb{P}(G(E) = \{x_*\}) \geq \varepsilon > 0$ par définition de ε . La mesure de Lebesgue du premier morceau de la fonction $g(x, \cdot)$ vaut $\mathbf{P}(x, x_*)$. Par conséquent, $g(x, u) = x_*$ pour $u < \varepsilon$ et tout $x \in E$. Notons que $\mathbb{P}(\sigma < \infty) = 1$. La définition

de σ assure alors que $G_\sigma(x) = g(x, U_\sigma) = x_*$ pour tout $x \in E$. Ainsi, $G_\sigma(E) = \{x_*\}$ et par conséquent $B_\sigma(E) = \{B_{\sigma-1}(x_*)\}$ est un singleton. Ainsi, $B_n(x) = B_{\sigma-1}(x_*)$ pour tout $x \in E$ et tout $n \geq \sigma$. Il suffit alors de procéder comme dans la preuve du théorème 0.13.1. \square

0.13.2 Algorithme de Letac-Propp-Wilson

Comme E est au plus dénombrable, il est toujours identifiable à \mathbb{N} , ce qui le muni d'un ordre total et d'un plus petit élément x_* . Il suffit alors de choisir pour $g(x, \cdot) : [0, 1] \rightarrow E$ l'inverse de la fonction de répartition de $\mathbf{P}(x, \cdot)$, qui est bien constante par morceaux et croissante. Lorsque \mathbf{P} est irréductible et apériodique sur E fini, alors $\varepsilon := \min_{x,y} \mathbf{P}^r(x, y) > 0$ pour un entier r . Définissons le temps aléatoire σ avec cette valeur de ε . Le théorème 0.13.2, appliqué au noyau \mathbf{P}^r en lieu et place du noyau \mathbf{P} , assure que la loi μ de $B_{\sigma-1}(x_*)$ constitue l'unique loi invariante de \mathbf{P}^r . Comme la loi invariante de \mathbf{P} est également invariante pour \mathbf{P}^r , il en découle que μ est l'unique loi invariante de \mathbf{P} . Cette méthode permet de simuler de façon exacte la loi invariante μ . La complexité de l'algorithme est géométrique, puisque σ suit une loi géométrique de moyenne $1/\varepsilon$.

Réciproquement, partant d'une loi μ sur E fini, il est toujours possible de construire un noyau \mathbf{P} irréductible et apériodique pour lequel μ est invariante. Un noyau de Metropolis-Hastings peut convenir par exemple. Si la fonction g associée est bien choisie, la loi μ peut alors être simulée en simulant la variable aléatoire $B_{\sigma-1}(x)$ construite à partir d'une puissance \mathbf{P}^r adéquate et d'un état initial x quelconque. Cet algorithme de simulation est attribué en général à Propp et Wilson, suite à leur article [27] publié en 1996. Cependant, le principe de cette méthode remonte en réalité à un travail beaucoup plus ancien de Letac publié en 1986 dans [20], comme le soulignent très justement Diaconis et Freedman dans [10, 11]. Contrairement à l'algorithme de Metropolis-Hastings, l'algorithme de Letac-Propp-Wilson permet de simuler μ de façon exacte. Il nécessite cependant de bien choisir la fonction g .

0.14 Quelques exemples classiques

0.14.1 Processus de vie ou de mort sur \mathbb{N}

Ces processus correspondent aux chaînes de Markov sur \mathbb{N} dont le noyau vérifie $\mathbf{P}(x, y) = 0$ si $|x - y| > 1$. Ils permettent de modéliser des phénomènes discrets qui ne peuvent varier que d'une unité à chaque étape. Soit $p, q, r : \mathbb{N} \rightarrow [0, 1]$ trois fonctions telles $p + q + r = 1$ sur \mathbb{N} et $q(0) = 0$. Le processus de vie ou de mort associé est la chaîne de Markov sur \mathbb{N} de noyau de transition \mathbf{P} donné par $\mathbf{P}(x, \cdot) = q(x)\delta_{x-1} + r(x)\delta_x + p(x)\delta_{x+1}$. En d'autres termes,

$$\mathbf{P}(x, y) = \begin{cases} q(x) & \text{si } y = x - 1 \\ r(x) & \text{si } y = x \\ p(x) & \text{si } y = x + 1 \end{cases}.$$

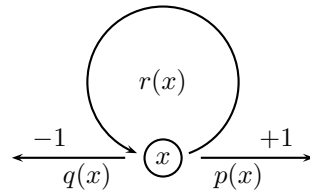


FIG. 5 – Mouvements possibles pour un processus de vie ou de mort.

Cas irréductible général

Supposons que $p > 0$ sur \mathbb{N} , et $q > 0$ sur \mathbb{N}^* , ce qui garantit que \mathbf{P} est irréductible. Considérons le système d'équations associé à la probabilité d'atteinte de 0 fourni par le théorème 0.5.1. Recherchons la solution positive ou nulle minimale $a_{\{0\}}(x) := \mathbb{P}^x(\tau_0 < \infty)$. Si a est solution, alors $(a(x+1) - a(x))p(x) = (a(x) - a(x-1))q(x)$ pour tout $x > 0$, et $a(0) = 1$. En posant $\gamma(0) := 1$ et pour $x > 0$

$$\gamma(x) := \frac{q(1) \cdots q(x)}{p(1) \cdots p(x)},$$

il vient $a(x+1) = 1 + (\gamma(0) + \cdots + \gamma(x))(a(1) - 1)$. Maintenant, si $\sum_{x=0}^{\infty} \gamma(x) = \infty$, alors la condition $0 \leq a(x+1) \leq 1$ entraîne que $a(1) = 1$, et donc que $a_{\{0\}}(x) = 1$ pour tout x . Si en revanche $\sum_{x=0}^{\infty} \gamma(x) < \infty$, alors la solution positive ou nulle minimale est donnée par

$$a_{\{0\}}(x) = \frac{\sum_{y=x}^{\infty} \gamma(y)}{\sum_{y=0}^{\infty} \gamma(y)}.$$

En vertu de la propriété de Markov forte, $\mathbb{P}^0(T_0 < \infty) = \mathbf{P}(0,0) + \mathbf{P}(0,1)\mathbb{P}^1(T_0 < \infty)$. Or $\mathbf{P}(0,0) + \mathbf{P}(0,1) = 1$ avec $\mathbf{P}(0,1) = p(1) > 0$, et $\mathbb{P}^1(T_0 < \infty) = \mathbb{P}^1(\tau_0 < \infty) = a_{\{0\}}(1)$. Par conséquent, \mathbf{P} est récurrent si et seulement si $a_{\{0\}}(1) = 1$, c'est-à-dire si et seulement si

$$\sum_{x=0}^{\infty} \gamma(x) = \infty.$$

Il en découle en particulier que le noyau \mathbf{P} est récurrent si $\limsup_{x \rightarrow \infty} (q(x)/p(x)) > 1$, et transitoire si $\liminf_{x \rightarrow \infty} (q(x)/p(x)) < 1$. Un calcul direct montre qu'une mesure μ sur \mathbb{N} est invariante pour \mathbf{P} si et seulement si pour tout $x > 0$,

$$\mu(x+1)p(0) \cdots p(x) = \mu(0)q(1) \cdots q(x+1).$$

Le théorème 0.6.6 entraîne alors que \mathbf{P} est récurrent positif si et seulement si

$$\sum_{x=0}^{\infty} \frac{1}{\gamma(x)p(x)} < \infty.$$

Marche aléatoire simple sur \mathbb{N} réfléchi en 0

Correspond au cas où r est identiquement nulle et $p(x) = q(x) = 1/2$ pour tout $x > 0$. Dans ce cas, la chaîne est récurrente nulle et les mesures invariantes sont les mesures proportionnelles à la mesure de comptage sur \mathbb{N} . La période vaut 2.

Processus de mort

Correspond au cas où la fonction p est identiquement nulle et où q est strictement positive (sur \mathbb{N}^*). L'état 0 est absorbant, et tous les autres états sont transitoires. Les classes irréductibles sont des singletons. Les trajectoires sont décroissantes, et la chaîne est presque-sûrement absorbée par 0.

Processus de vie

Correspond au cas où la fonction q est identiquement nulle et où p est strictement positive. Les trajectoires sont presque-sûrement croissantes. Tous états sont transitoires, et les classes irréductibles sont des singletons. Lorsque p est constante, on retrouve le processus de Bernoulli de l'exemple 0.1.5.

Files d'attente à temps discret

Dans cette interprétation, X_n représente le nombre de clients dans la file d'attente à l'instant n . Sur l'événement $\{X_n = x\}$, $p(x)$ (resp. $q(x)$) est la probabilité que la file perde (resp. gagne) un client.

0.14.2 Marche aléatoire simple sur \mathbb{Z}^d

Le concept de marche aléatoire est apparu dans les travaux du physicien Rayleigh en acoustique vers 1880 et dans ceux du statisticien Pearson vers 1905 en biométrie. Le nom « Marche aléatoire » est attribué au mathématicien George Pólya vers 1920. On lui doit la classification des états en toute dimension dans [28].

Une suite de variables aléatoires (X_n) à valeurs dans \mathbb{Z}^d est une *marche aléatoire simple* lorsque la suite de ses accroissements $(Y_n) := (X_{n+1} - X_n)$ est i.i.d. de loi uniforme sur $\{\pm e_1, \dots, \pm e_d\}$ où $\{e_1, \dots, e_d\}$ désigne la base canonique de \mathbb{R}^d . On a donc

$$X_{n+1} = X_n + Y_n = X_0 + Y_1 + \dots + Y_n.$$

La suite (X_n) est une martingale pour sa filtration naturelle. La suite (X_n) est également une chaîne de Markov sur \mathbb{Z}^d , de noyau de transition \mathbf{P} donné pour tout x et y dans \mathbb{Z}^d par

$$\mathbf{P}(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2d} & \text{si } \|x - y\|_1 := |x_1 - y_1| + \dots + |x_d - y_d| = 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

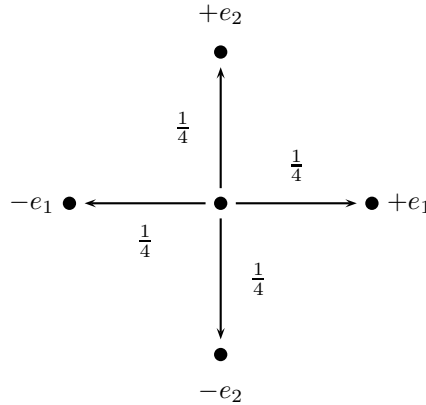


FIG. 6 – Mouvements possibles pour une marche aléatoire simple dans \mathbb{Z}^2 .

La condition $\|x - y\|_1 = 1$ signifie que x et y sont voisins sur le réseau \mathbb{Z}^d . Tous les états communiquent, et la chaîne est irréductible. Les seules mesures invariantes sont les multiples de la mesure de comptage sur \mathbb{Z}^d . Elles sont de plus symétriques. Il n'y a pas de loi invariante. Il en découle que les états sont soit tous transitoires, soit tous récurrents nuls. La période vaut 2. Lorsque $d = 1$, les entiers relatifs $X_n - X_0$ et n sont de même parité, et la suite $(\frac{1}{2}(X_n - X_0 + n))$ est un processus de Bernoulli de paramètre $\frac{1}{2}$. Plus généralement, pour tout $d \geq 1$, la loi $\mathcal{L}(X_n - X_0) = \mathcal{L}(X_n | X_0 = 0) = \mathbf{P}^n(0, \cdot)$ est la loi image par l'application

$$(k_1, \dots, k_{2d}) \in \mathbb{N}^{2d} \mapsto (k_1 - k_2, \dots, k_{2d-1} - k_{2d}) \in \mathbb{Z}^d$$

de la loi multinomiale symétrique sur \mathbb{N}^{2d} suivante :

$$\left(\frac{1}{2d} (\delta_{e_1} + \dots + \delta_{e_{2d}}) \right)^{*n} = (2d)^{-n} \sum_{k_1 + \dots + k_{2d} = n} \frac{n!}{k_1! \dots k_{2d}!} \delta_{(k_1, \dots, k_{2d})}.$$

Il faut penser à n jets indépendants d'un dé à $2d$ faces étiquetées $\{+e_1, -e_1, \dots, +e_d, -e_d\}$. Cette formulation multinomiale fournit immédiatement pour tout d et tout n ,

$$\mathbf{P}^n(0, 0) = \sum_{2r_1 + \dots + 2r_d = n} \frac{n!}{r_1!^2 \dots r_d!^2}.$$

En particulier, $\mathbf{P}^{2n+1}(0, 0) = 0$ pour tout n et d , ce qui n'est pas surprenant car la période vaut 2. Nous avons déjà obtenu dans l'exemple 0.3.2 la récurrence de \mathbf{P} lorsque $d = 1$, en démontrant que $\mathbf{H}(0, 0) := \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{P}^n(0, 0) = \infty$ grâce à la formule de Stirling. Lorsque $d = 2$, nous avons

$$\mathbf{P}^{2n}(0, 0) = 4^{-2n} \sum_{r_1 + r_2 = n} \frac{(2n)!}{r_1!^2 r_2!^2} = \frac{(2n)!}{4^{2n} n!^2} \sum_{r_1 + r_2 = n} \left(\frac{n!}{r_1! r_2!} \right)^2 = \frac{(2n)!}{4^{2n} n!^2} \frac{(2n)!}{n!^2},$$

de sorte que $\mathbf{H}(0,0) := \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{P}^n(0,0) = \infty$ en vertu de la formule de Stirling. Ainsi, \mathbf{P} est récurrent pour $d = 2$. Il est possible de procéder de la sorte pour établir que \mathbf{P} est transitoire pour $d = 3$. Cependant, cette approche combinatoire est difficile à mettre en œuvre pour les dimensions d supérieures. Une méthode basée sur la transformée de Fourier permet plus généralement d'établir que $\mathbf{H}(0,0) = \infty$ pour tout $d \geq 3$. Ainsi, tous les états sont récurrents nuls lorsque $d \leq 2$ tandis qu'ils sont tous transitoires quand $d \geq 3$. On trouve dans [30], [14], et [19] les estimées précises de $\mathbf{H}_n := \sum_{k=0}^n \mathbf{P}^k$ suivantes dérivées d'un TLC local :

$$\mathbf{H}_n(x,x) = \mathbf{H}_n(0,0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2n}{\pi}} + O(1) & \text{si } d = 1 \\ \frac{1}{\pi} \log(n) + O(1) & \text{si } d = 2 \cdot \\ \text{constante} + O(n^{(2-d)/2}) & \text{si } d \geq 3 \end{cases}$$

La suite (Y_n) des accroissements de (X_n) sur \mathbb{Z}^d peut s'écrire $Y_n = V_n D_n$ pour tout $n > 0$ où (D_n) est une suite i.i.d. de loi uniforme sur $\{e_1, \dots, e_d\}$ et (V_n) une suite i.i.d. de loi uniforme sur $\{-1, +1\}$, indépendante de (D_n) . Supposons à présent que $d > 1$. Écrivons X_n sous la forme $X_n = (X_{n,1}, \dots, X_{n,d}) = X_{n,1}e_1 + \dots + X_{n,d}e_d$. Les composantes $(X_{n,1}), \dots, (X_{n,d})$ ne sont pas indépendantes, et ne sont pas des marches aléatoires simples unidimensionnelles. Ce sont en revanche des chaînes de Markov de même loi, de noyau commun \mathbf{Q} sur \mathbb{Z} donné par

$$\mathbf{Q}(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{2d} & \text{si } |x - y| = 1 \\ \frac{d-1}{d} & \text{si } x = y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

Il est irréductible, apériodique, et récurrent nul, et s'écrit $\mathbf{Q} = \frac{1}{d}\mathbf{P}_1 + (1 - \frac{1}{d})\mathbf{I}$ où \mathbf{P}_1 est le noyau de la marche aléatoire simple sur \mathbb{Z} . Réciproquement, soient $(Z_{n,1}), \dots, (Z_{n,d})$ des marches aléatoires simples sur \mathbb{Z} , indépendantes. La suite (Z_n) à composantes indépendantes définie par $Z_n := (Z_{n,1}, \dots, Z_{n,d}) = Z_{n,1}e_1 + \dots + Z_{n,d}e_d$ est une chaîne de Markov sur \mathbb{Z}^d dont le noyau de transition \mathbf{R} est donné par

$$\mathbf{R}(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{2^d} & \text{si } |x_1 - y_1| = \dots = |x_d - y_d| = 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

Le noyau \mathbf{P} impose une évolution parallèle aux axes, tandis que \mathbf{R} impose une évolution « diagonale ». De plus, $z \leftrightarrow z'$ pour \mathbf{R} si et seulement si les d composantes de $z - z'$ sont toutes de même parité. Lorsque $d = 2$, le noyau \mathbf{R} possède deux classes irréductibles (celles de 0 et e_1), tandis que \mathbf{P} n'en possède qu'une seule. Cependant, les projections orthogonales $(X_{n,1} + X_{n,2})/\sqrt{2}$ et $(X_{n,1} - X_{n,2})/\sqrt{2}$ de la marche aléatoire simple bidimensionnelle sur les deux diagonales principales de \mathbb{Z}^2 sont indépendantes et constituent des marches aléatoires simples sur $\mathbb{Z}/\sqrt{2}$. Il est possible d'utiliser cette propriété pour montrer que $(0,0)$ est récurrent pour \mathbf{P} lorsque $d = 2$.

function masunidim(x, r, n)

```

%MASUNIDIM(x,r,n)
% Simule r trajectoires de n pas issues de x pour la MAS simple sur Z.
clf; hold on; xlabel('Temps'); ylabel('Valeur spatiale dans Z');
t=sprintf('%i trajectoires de la marche aléatoire simple',r);
title(t); plot(cumsum([ones(1,r)*x;2*(2*rand(n,r)>1)-1]));

```

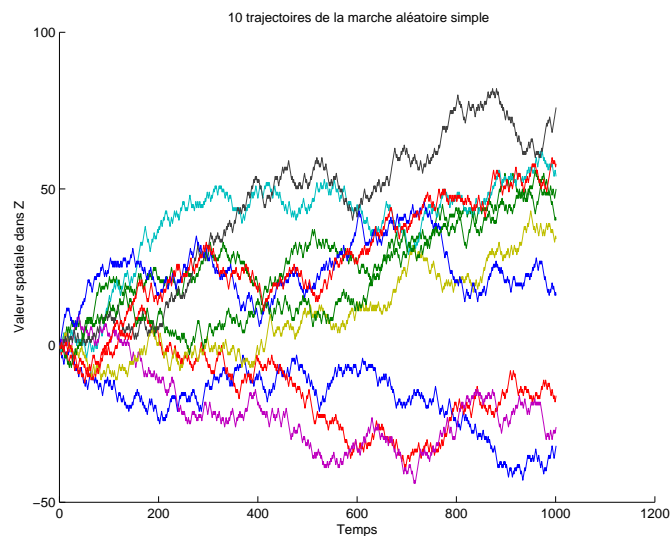
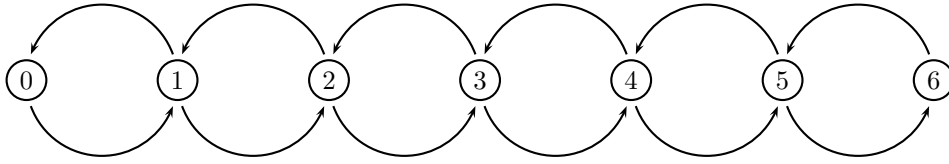


FIG. 7 – Trajectoires d’une marche aléatoire simple sur \mathbb{Z} .

0.14.3 Urne d’Ehrenfest

Le physicien Ehrenfest a proposé un modèle élémentaire de diffusion de molécules d’un gaz dans une enceinte constituée par deux récipients qui communiquent. Assimilons les récipients à des urnes et les molécules à des boules indistinguables. On considère donc deux urnes contenant respectivement k et $d - k$ boules avec $k \leq d$ et $d > 1$. À chaque étape, on choisit de façon équiprobable l’une des d boules et on la change d’urne. Soit X_n le nombre de boules dans la première urne à l’étape n . Conditionnellement à $\{X_n = x\}$, on déplace une boule de la première urne vers la seconde avec probabilité x/d et réciproquement avec la probabilité $1 - x/d$. La

FIG. 8 – Graphe des transitions de la chaîne d'Ehrenfest pour $d = 6$.

suite (X_n) est une chaîne de Markov sur $\{0, \dots, d\}$ de matrice de transition

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & & & & 0 \\ \frac{1}{d} & 0 & \frac{d-1}{d} & & & & \\ 0 & \frac{2}{d} & 0 & \frac{d-2}{d} & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \frac{d-2}{d} & 0 & \frac{2}{d} & 0 \\ & & & & \frac{d-1}{d} & 0 & \frac{1}{d} \\ 0 & & & & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

En d'autres termes, $\mathcal{L}(X_{n+1} | X_n) = \frac{d-X_n}{d} \delta_{X_{n+1}} + \frac{X_n}{d} \delta_{X_{n-1}}$. Tous les états communiquent et la chaîne est donc récurrente irréductible positive puisque l'espace d'état est fini. La loi binomiale $\mu := \mathcal{B}(d, 1/2) := 2^{-d} \sum_{k=0}^d C_d^k \delta_k$ est symétrique donc invariante et réversible. En particulier, $\mathbb{E}^x(T_x) = 1/\mu(x) = 2^d/C_d^x$ pour tout x . Lorsque d est pair, cette espérance est minimale pour $x = d/2$ et maximale pour $x = 0$ et $x = d$. La formule de Stirling donne $\mathbb{E}^{d/2}(T_{d/2}) \sim_d \sqrt{\pi d/2}$. De même, $\mathbb{E}^d(T_d) = \mathbb{E}^0(T_0) \sim_d 2^d$, et cette quantité est considérable lorsque d est de l'ordre du nombre d'Avogadro³. L'expression de $\mathcal{L}(X_{n+1} | X_n)$ fournit $\mathbb{E}(X_{n+1} | X_n) = (1 - \frac{2}{d})X_n + 1$. Par récurrence sur n , on obtient également que

$$\mathbb{E}(X_n | X_0) = \frac{d}{2} + \left(1 - \frac{2}{d}\right)^n \left(X_0 - \frac{d}{2}\right).$$

Par conséquent, $(\mathbb{E}^x(X_n))$ converge vers $d/2$ pour tout x . En moyenne, la chaîne oublie l'état initial. Cependant, la période vaut 2, et la chaîne ne converge pas en loi. En vertu de la remarque 0.9.5, le modèle peut être rendu apériodique en introduisant un mélange : une fois la boule choisie, on tire à pile ou face pour décider de l'urne qui va l'accueillir. Ainsi, la boule ne change d'urne qu'avec probabilité $p \in [0, 1]$. La nouvelle matrice de transition est $p\mathbf{P} + (1-p)\mathbf{I}$.

³Le nombre d'Avogadro a vaut environ 6.02×10^{23} . Par définition, une mole contient a molécules. Une mole d'un gaz parfait occupe un volume d'environ 22.4 litres aux conditions normales de température et de pression.

Par exemple, pour $p = d/(d+1)$, on obtient

$$\frac{d}{d+1}\mathbf{P} + \frac{1}{d+1}\mathbf{I} = \frac{1}{d+1} \begin{pmatrix} 1 & d & 0 & & & & & & 0 \\ 1 & 1 & d-1 & & & & & & \\ 0 & 2 & 1 & d-2 & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & d-2 & 1 & 2 & 0 & & \\ & & & & d-1 & 1 & 1 & & \\ 0 & & & & 0 & d & 1 & & \end{pmatrix}.$$

Cette nouvelle chaîne est apériodique dès que $0 < p < 1$ et sa mesure invariante est toujours la loi binomiale $\mathcal{B}(d, 1/2)$ (qui est également symétrique et donc réversible).

```
function [VT,loinv,P] = ehrenfestcutoff(d,x,n)
%[VT,loinv,P]=EHRENFESTCUTOFF(d,x,n)
% Renvoie l'évolution de l'écart en variation totale à la loi invariante
% d'une chaîne d'Ehrenfest apériodique sur {0,...,d}, d'état initial x.
% Le temps maximum est n.

loinv = bincoef([0:d],d*ones(1,d+1))/2^d;
loini = zeros(1,d+1); loini(x) = 1;
VT=zeros(1,n); VT(1) = sum(abs(loini-loinv))/2;

P = diag(ones(1,d+1))/(d+1);
for i=1:d, P(i,i+1) = (d+1-i)/(d+1); P(i+1,i) = i/(d+1); end

loi = loini;
for i=1:n, loi = loi * P; VT(i) = sum(abs(loini-loinv))/2; end
```

La figure 9 page 47 illustre la convergence en variation totale vers l'équilibre pour $d = 150$, $p = d/(d+1)$ et $X_0 = 1$. Le graphe possède trois phases distinctes : un plateau, puis une chute abrupte, suivie enfin d'une décroissance exponentielle vers 0. Le théorème 0.12.2 ne décrit pas ce phénomène de *convergence abrupte* (cutoff en anglais). Une telle convergence abrupte se produit pour un grand nombre de modèles, et serait due à une multiplicité élevée de certaines valeurs propres. Cependant, l'étude mathématique de ce phénomène n'est pas très avancée, et aucune théorie générale n'a été dégagée à l'heure actuelle, malgré les efforts de plusieurs mathématiciens talentueux. La convergence abrupte de la chaîne d'Ehrenfest a été mathématiquement établie par Aldous et Diaconis. D'autres exemples sont proposés dans [9] et [33].

0.14.4 Modèle de Wright-Fisher

Ce modèle a été étudié par Fisher dans [15], puis par Wright dans [32]. Considérons une population de taille fixe $d > 0$ dans laquelle chaque individu est soit de type A soit de type B .

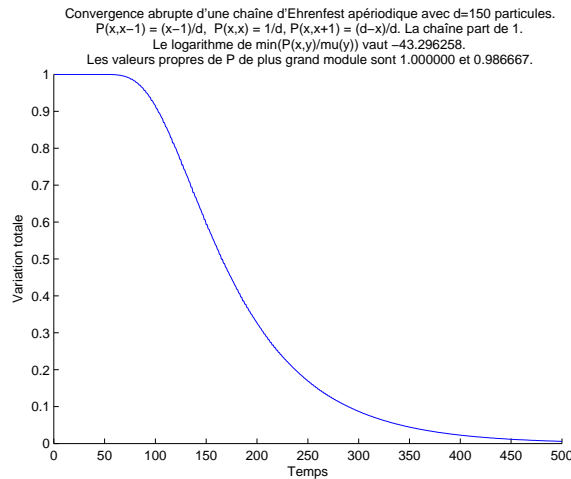


FIG. 9 – Convergence en variation totale pour une chaîne d'Ehrenfest apériodique.

En génétique, ces types sont par exemple les deux allèles possibles d'un gène particulier dans une population à reproduction haploïde.

Soit X_n le nombre d'individus de la $n^{\text{ième}}$ génération qui possèdent l'allèle A. Idéalement, le passage de la génération n à la génération $n + 1$ s'effectue en tirant au sort avec remise les d individus de la génération $n + 1$ parmi ceux de la génération n (qui donc meurent tous). Pour simplifier ce procédé, on ne retient de la génération n que la fréquence X_n/d de l'allèle A. Pour obtenir la génération $n + 1$, on effectue alors d tirages indépendants de loi de Bernoulli $\mathcal{B}(X_n/d)$. Ainsi, le nombre de A obtenus à la génération $n + 1$ suit la loi binomiale $\mathcal{B}(d, X_n/d)$. Cette simplification consiste en quelque sorte, pour définir les d individus de la génération $n + 1$, à effectuer un échantillonnage de taille d dans une population de taille infinie dont la fréquence de l'allèle A est X_n/d . La suite (X_n) est à valeurs dans $\{0, 1, \dots, d\}$ et vérifie

$$\mathcal{L}(X_{n+1} | X_n) = \mathcal{B}\left(d, \frac{X_n}{d}\right),$$

La suite (X_n) est une chaîne de Markov sur $E := \{0, 1, \dots, d\}$ de noyau \mathbf{P} donné par

$$\mathbf{P}(x, y) := C_d^y \left(\frac{x}{d}\right)^y \left(1 - \frac{x}{d}\right)^{d-y}.$$

Les états 0 et d sont absorbants donc récurrents, tandis que les états $1, \dots, d-1$ communiquent et sont tous transitoires. Les lois $\delta_0 = \mathcal{B}(d, 0)$ et $\delta_d = \mathcal{B}(d, 1)$ sont donc les seules mesures invariantes. L'absorption par 0 (respectivement d) correspond à l'extinction de l'allèle A (respectivement B). La suite (X_n/d) est une chaîne de Markov sur $\{0/d, 1/d, \dots, d/d\} \subset [0, 1]$. Cette chaîne décrit l'évolution du paramètre $p_n = X_n/d$ d'une loi binomiale de taille d . Plus

généralement, la version à r allèles de la chaîne de Wright-Fisher décrit l'évolution du paramètre $p_n := (p_{n,1}, \dots, p_{n,r})$ d'une loi multinomiale de taille d (pour $r = 2$, c'est une loi binomiale).

```

function wrightfishertraj(d,n,r,x)
%WRIGHTFISHERTRAJ(d,n,r,x)
% Trace les n premiers pas de r trajectoires d'une chaîne de
% Wright-Fisher issues de x, pour une population de taille d+1.
clf; hold on; xlabel('Temps_n'); ylabel('Valeur_X_n/d');
t1='Trajectoires_d'une_chaine_de_Wright-Fisher';
t2=sprintf('pour_une_population_de_taille_d+1=%i.',d);
title([t1,t2]);
for i=1:r,
                X(i) = x;
                for j=1:n-1, X(j+1) = sum(rand(1,d) < X(j)/d); end
                plot(X/d);
end

```

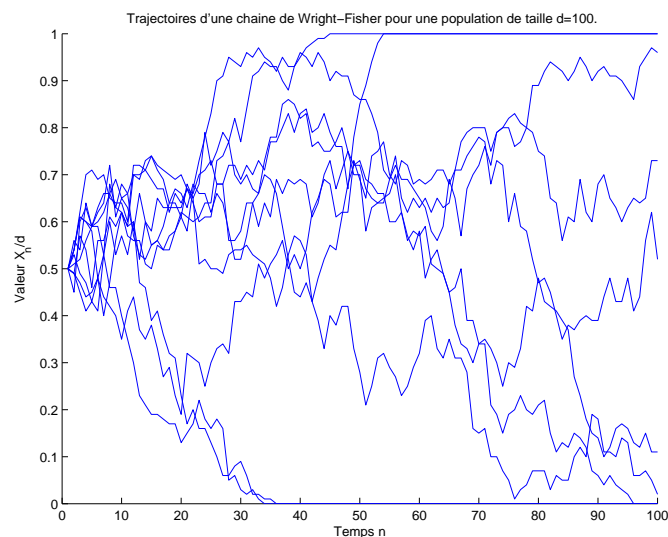


FIG. 10 – Trajectoires d'un modèle de Wright-Fisher.

Probabilité d'extinction

Le théorème 0.12.1 entraîne que le temps d'extinction $\tau := \inf\{n \in \mathbb{N}; X_n \in \{0, d\}\}$ est (un temps d'arrêt) presque sûrement fini. En vertu du théorème 0.5.1, la probabilité $u_A(x)$ que la chaîne partant de x soit absorbée par d (extinction de B) est donnée par $u_A(x) = x/d$. Par

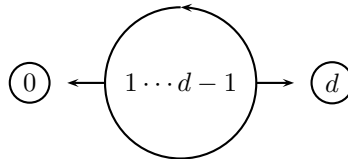


FIG. 11 – Graphe des transitions pour la chaîne de Wright-Fisher sans mutation.

symétrie, la probabilité que la chaîne partant de x soit absorbée par 0 (extinction de A) est $(d - x)/d$.

Martingale

Pour tout $n \in \mathbb{N}$, on a $\mathbb{E}(X_{n+1} | X_n) = dX_n/d = X_n$. La suite (X_n) est donc une martingale bornée. Elle converge alors presque sûrement (et dans tout L^p avec $p \geq 1$) vers une variable aléatoire intégrable X_∞ . On a $\mathcal{L}(X_\infty | X_0 = x) = u_A(x)\delta_d + (1 - u_A(x))\delta_0$, et donc $x = \mathbb{E}^x(X_0) = \mathbb{E}^x(X_\infty) = u_A(x)d$. On retrouve bien $u_A(x) = x/d$.

Temps moyen d'extinction

En vertu du théorème 0.5.1, le temps d'extinction moyen $v(x) := \mathbb{E}^x(\tau)$ vérifie $v(x) = 1 + \sum_{y \in E} \mathbf{P}(x, y)v(y)$ pour tout $x \notin \{0, d\}$. Il est difficile d'en déduire une expression explicite pour v en fonction de x et d . Cependant, lorsque $x/d \rightarrow p \in]0, 1[$ quand $d \rightarrow \infty$, il est possible de montrer que le vecteur v/d converge vers la fonction $v_* : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}_+$ qui vérifie

$$p(1 - p)v_*''(p) = -2 \quad \text{pour } 0 < p < 1 \quad \text{et} \quad v_*(0) = v_*(1) = 0.$$

La résolution de cette équation différentielle donne $v_*(p) := -2(p \log(p) + (1 - p) \log(1 - p))$. Ainsi, $v(x) \sim_d dv_*(x/d)$. Pour une grande population, $v(x) \approx -2 \log(2)d \approx 1.39d$ lorsque $x \approx d/2$, tandis que $v(x) \approx 2 \log(d)$ lorsque $x \approx 1/d$. Ainsi, lorsque d est de l'ordre de k milliards, le temps moyen d'extinction est de l'ordre de d lorsque l'état initial est équilibré, tandis qu'il est de l'ordre de k lorsque l'état initial est très déséquilibré.

Mutations

Afin de rendre la chaîne de Wright-Fisher plus réaliste, on introduit la possibilité de mutations. Le passage de la génération n à la génération $n + 1$ se fait d'abord en provoquant de façon indépendante pour chacun des d individus de la génération n une mutation de A à B avec probabilité p_{AB} et une mutation de B à A avec probabilité p_{BA} . Ensuite, on procède comme pour le cas sans mutation pour obtenir les d individus de la génération $n + 1$. La nouvelle chaîne (X'_n) est donnée par

$$\mathcal{L}(X'_{n+1} | X'_n) = \mathcal{B}\left(d, q_{AB} \frac{X'_n}{d} + p_{BA} \left(1 - \frac{X'_n}{d}\right)\right) = \mathcal{B}\left(d, p_{BA} + (q_{AB} - p_{BA}) \frac{X'_n}{d}\right),$$

où $q_{AB} := 1 - p_{AB}$ et $q_{BA} := 1 - p_{BA}$. L'état 0 (resp. 1) n'est plus absorbant dès que $p_{BA} > 0$ (resp. $p_{AB} > 0$). Lorsque $q_{AB} = p_{BA}$, la suite (X'_n) est i.i.d. de loi $\mathcal{B}(d, p)$. La chaîne est récurrente irréductible positive apériodique si $0 < p_{AB}p_{BA} < 1$. Dans ce cas, la suite (X'_n) converge en loi vers la loi invariante. Cependant, elle n'est pas une sous-martingale ni une surmartingale puisque $\mathbb{E}(X'_{n+1} | X'_n) = dp_{BA} + (q_{AB} - p_{BA})X'_n$. On peut alternativement effectuer les mutations après coup, ce qui conduit à la chaîne de Markov (X''_n) définie par

$$\mathcal{L}(X''_{n+1} | X''_n) = q_{AB} \mathcal{B}\left(d, \frac{X''_n}{d}\right) + p_{BA} \mathcal{B}\left(d, 1 - \frac{X''_n}{d}\right).$$

```
function wrightfishertinv(d,p,x,n)
%[P,N,loi] = WRIGHTFISHERINV(d,p,x,n)
% Estime la loi invariante d'une chaîne de Wright-Fisher
% pour une population de taille d+1 et proba de mutation p.
% P = noyau de transition de la chaîne
% N = estimation par fréquences de passages (LGN)
%     le long d'une seule trajectoire partant de x
%     et de longueur inférieure à n.
% loi = loi au temps n partant de x (calcul récursif).
clf; hold on;
xlabel('Etats_x'); ylabel('Estimation de la probabilite en x');
t1='Estimation de la loi invariante de Wright-Fisher.';
t2=sprintf('\nPopulation de taille d+1=%i', d+1);
t3=sprintf('probabilite de mutation p=%f', p);
t4=sprintf('etat initial x=%i.', x);
title([t1,t2,t3,t4]);
% Utilisation de la LGN sur une trajectoire de longueur n
N = zeros(n,d+1); N(:,1+x) = 1; m = fix(n/10);
for i = 1:n-1,
    N(i+1,:) = N(i,:);
    x = sum(rand(1,d) < p+(1-2*p)*x/d);
    N(i+1,1+x) = N(i+1,1+x) + 1;
end
plot([0:d],N(n,:)/n, 'r+'); plot([0:d],N(m,:)/m, 'go');
% Calcul récursif de la loi à l'instant n
P = zeros(d+1,d+1); loini = zeros(1,d+1); loini(x) = 1;
for x = 0:d, P(x+1,:) = dbinom([0:d],d,p+(1-2*p)*x/d); end
loi = loini; for i = 1:n-1, loi = loi * P; end
% Tracés
plot([0:d],loi, 'b');
l1 = sprintf('LGN sur une seule traj. de longueur %i', n);
l2 = sprintf('LGN sur une seule traj. de longueur %i', m);
l3 = sprintf('Calcul récursif de la loi au temps %i', n);
```

legend(11 , 12 , 13 , 3) ;

Remarque 0.14.1. Cette étude du modèle de Wright-Fisher illustre une démarche générale. Lorsque tous les états récurrents sont absorbants, l'étude porte en général sur le temps d'absorption. En revanche, lorsque tous les états sont récurrents, l'étude porte tout naturellement sur les lois invariantes.

Construction poissonnienne et processus de Galton-Watson

Soit $d > 0$ un entier et soient $(Z_{n,m})_{n,m}$ des variables aléatoires i.i.d. de loi μ sur \mathbb{N} . La suite (Y_n) définie par $Y_0 := d$ et $Y_{n+1} := Z_{n,1} + \dots + Z_{n,Y_n}$ pour tout $n \geq 0$ est un *processus de Galton-Watson* de taille initiale d et de *loi de reproduction* μ . Dans ce modèle, Y_n représente le nombre d'individus de la génération n , tandis que $Z_{n,1} + \dots + Z_{n,Y_n}$ représente le nombre d'enfants de la génération n . Les individus ne vivent qu'une seule génération. La suite (Y_n) est une chaîne de Markov sur \mathbb{N} de noyau \mathbf{W} donné par $\mathbf{W}(x, \cdot) = \mu^{*x}$, où μ^{*x} désigne la loi de $Z_{n,1} + \dots + Z_{n,x}$.

La chaîne de Wright-Fisher peut être obtenue en considérant la propagation d'un caractère héréditaire dans un processus de Galton-Watson de loi de reproduction poissonnienne, conditionné à rester de taille constante. Plus précisément, soit d' un entier vérifiant $0 \leq d' \leq d$. Soit $\nu := \mathcal{L}(P_1, \dots, P_d \mid P_1 + \dots + P_d = d)$, où P_1, \dots, P_d sont i.i.d. de loi μ . Soient à présent $(Z'_{n,m})_{n,m}$ des variables aléatoires indépendantes, telles que $Z'_{n,1}, \dots, Z'_{n,d}$ sont i.i.d. de loi ν pour tout n . Définissons la suite (Y'_n) par $Y'_0 := d'$ et $Y'_{n+1} := Z'_{n,1} + \dots + Z'_{n,Y'_n}$ pour tout $n \geq 0$. Lorsque μ est une loi de Poisson, alors $\mathcal{L}(Y'_{n+1} \mid Y'_n) = \mathcal{B}(d, Y'_n/d)$, et la suite (Y'_n) est donc une chaîne de Wright-Fisher. Ce résultat découle du lemme 0.14.2 ci-dessous. Cette interprétation poissonnienne est le point de départ d'une étude généalogique du modèle de Wright-Fisher via la notion de processus ancestral, étudiée par exemple dans [31], voir également [13]. Elle joue un rôle important en phylogénie.

Lemme 0.14.2 (Poisson et multinomiale). Soit P_1, \dots, P_d des variables aléatoires indépendantes de loi de Poisson de moyennes respectives $\lambda_1 > 0, \dots, \lambda_d > 0$. Alors, pour tout $n \geq 1$, la loi conditionnelle $\mathcal{L}((P_1, \dots, P_d) \mid P_1 + \dots + P_d = n)$ est la loi multinomiale sur \mathbb{N}^d donnée par

$$(p_1 \delta_{e_1} + \dots + p_d \delta_{e_d})^{*n} = \sum_{n_1 + \dots + n_d = n} \frac{n!}{n_1! \dots n_d!} p_1^{n_1} \dots p_d^{n_d} \delta_{(n_1, \dots, n_d)},$$

où $p_i := \lambda_i / (\lambda_1 + \dots + \lambda_d)$ et où $\{e_1, \dots, e_d\}$ est la base canonique de \mathbb{R}^d .

Démonstration. $\mathbb{P}(P_1 = n_1, \dots, P_d = n_d) = e^{-\lambda_1 - \dots - \lambda_d} \frac{\lambda_1^{n_1} \dots \lambda_d^{n_d}}{n_1! \dots n_d!}$ pour tout d -uplet d'entiers (n_1, \dots, n_d) . D'autre part $\mathbb{P}(P_1 + \dots + P_d = n) = e^{-\lambda_1 - \dots - \lambda_d} (\lambda_1 + \dots + \lambda_d)^n / n!$ car $P_1 + \dots + P_d$ suit la loi de Poisson de moyenne $\lambda_1 + \dots + \lambda_d$ (la somme de variables aléatoires de Poisson indépendantes est encore une variable aléatoire de Poisson). \square

Soit (U_1, \dots, U_d) un vecteur qui suit la loi $\mathcal{L}((P_1, \dots, P_d) \mid P_1 + \dots + P_d = n)$. Considérons le cas où $\lambda_1 = \dots = \lambda_d = \lambda$. Alors (U_1, \dots, U_d) suit la loi multinomiale symétrique, qui ne dépend pas de λ , et la variable aléatoire $U_1 + \dots + U_k$ suit la loi binomiale $\mathcal{B}(d, k/d)$ de taille d et de paramètre k/d , pour tout $1 \leq k \leq d$.

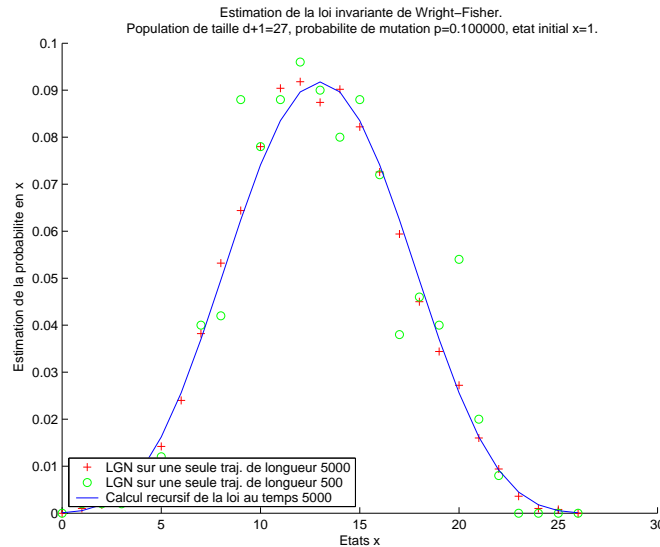


FIG. 12 – Estimation de la loi invariante d'un modèle de Wright-Fisher avec mutations.

0.14.5 Google et Pagerank

Un *graphe* fini est un couple (E, \mathcal{A}) où E est un ensemble fini de cardinal d , et \mathcal{A} est un sous-ensemble de $E \times E$. Les éléments de E sont les *sommets* du graphe tandis que les éléments de \mathcal{A} sont les *arrêtes* du graphe. Considérons par exemple le cas où E représente l'ensemble des pages web disponibles sur le World Wide Web du réseau Internet, avec $(x, y) \in \mathcal{A}$ si et seulement si la page x contient un lien hypertexte pointant vers la page y . Soit \mathbf{A} la matrice $d \times d$ définie pour tout x et y dans E par $\mathbf{A}(x, y) = 1$ si $(x, y) \in \mathcal{A}$ et $\mathbf{A}(x, y) = 0$ sinon. Elle est appelée *matrice d'adjacence* du graphe. Comme \mathbf{A} n'est pas symétrique, le graphe est *orienté*.

Considérons un surfeur qui se déplace sur l'ensemble E des pages web. À chaque étape, il décide avec probabilité p de cliquer sur l'un des liens de la page courante (qu'il choisit de façon équiprobable parmi tous les liens de la page), et avec probabilité $(1 - p)$ de visiter une page quelconque (par exemple en utilisant ses favoris). Le mécanisme précédent se formalise de la manière suivante. Soit X_n la position courante du surfeur dans E , et X_{n+1} sa nouvelle position.

Conditionnellement à l'événement $\{X_n = x\}$, on a

$$X_{n+1} = \begin{cases} L & \text{si } B = 1 \\ M & \text{si } B = 0 \end{cases}$$

où B , L et M sont des variables aléatoires indépendantes qui suivent respectivement la loi de Bernoulli $p\delta_1 + (1-p)\delta_0$ sur $\{0, 1\}$, la loi uniforme sur l'ensemble $\{y \in E; \mathbf{A}(x, y) = 1\}$, et la loi uniforme sur E . Ainsi, (X_n) est une chaîne de Markov sur E , dont le noyau de transition \mathbf{P} s'écrit $\mathbf{P} = p\tilde{\mathbf{A}} + (1-p)\mathbf{C}$, où les noyaux de transition $\tilde{\mathbf{A}}$ et \mathbf{C} sont définis par

$$\tilde{\mathbf{A}}(x, y) := \frac{\mathbf{A}(x, y)}{\sum_{y \in E} \mathbf{A}(x, y)} \quad \text{et} \quad \mathbf{C}(x, y) := \frac{1}{n}$$

pour tout x et y dans E . Lorsque $0 < p < 1$, le noyau de transition \mathbf{P} est irréductible et apériodique car tous ses coefficients sont strictement positifs. Comme l'espace d'état E est fini, le noyau \mathbf{P} possède une unique loi invariante μ . Pour tout $x \in E$, la quantité $\mu(x)$ représente la probabilité que le surfeur se trouve sur la page x à l'équilibre. Il modélise la « popularité » de la page x , en quelque sorte. Le nombre total de pages web $d = \text{card}(E)$ est supérieur à plusieurs milliards depuis les années 2000. Il augmente régulièrement.

Du point de vue de l'utilisateur, le moteur de recherche Google renvoie, à partir de mots clés constituant une requête, une liste totalement ordonnée de pages web constituant la réponse à la requête. Soit $F \subset E$ l'ensemble des pages web correspondant à une requête particulière. Google met à profit un modèle markovien pour opérer le tri de F . Google trie les éléments de F par ordre décroissant sur μ . Ainsi, pour Google, une page web $x \in F$ est d'autant plus « importante » qu'elle possède un poids $\mu(x)$ important. Le tri nécessite seulement la connaissance des rapports $\mu(x)/\mu(y)$. La valeur de p utilisée par Google est voisine de 0,85. Cet algorithme est connu sous le nom de PageRank. Le PageRank d'une page web $x \in E$ n'est rien d'autre que $\mu(x)$. Bien entendu, le PageRank réellement utilisé par Google n'est pas exactement celui décrit ici. Le moteur de recherche Google et son algorithme PageRank ont été mis au point par Page et Brin à la fin des années 1990. Ils en présentent les principes dans [5]. Une étude markovienne de PageRank se trouve dans [1].

Du point de vue de Google, le problème est d'évaluer efficacement \mathbf{A} , p , et μ . Du point de vue des auteurs de pages web, le problème est de trouver des stratégies permettant d'améliorer les PageRank de leurs pages, en créant des liens, c'est-à-dire en modifiant la matrice \mathbf{A} localement. Cela permet à ces pages d'être mieux référencées par Google. Cela revient en quelque sorte à concevoir la loi invariante μ comme une fonction de la matrice d'adjacence \mathbf{A} du graphe.

La détermination de l'ensemble F associé à une requête particulière est possible grâce à d'immenses bases de données. Ces bases de données détenues par Google sont mises à jour régulièrement par une horde de robots surfeurs – les googlebots – qui parcourent de façon automatisée le graphe des pages web et extraient des mots clés. Ce parcours régulier du World Wide Web permet également de mettre à jour la matrice \mathbf{A} qui représente la géométrie du graphe des pages web, ainsi que l'estimation de μ .

La chaîne de Markov (X_n) est un cas très particulier de chaîne de Markov sur un graphe. La marche aléatoire simple sur \mathbb{Z}^d abordée précédemment est une chaîne de Markov sur le graphe infini et non orienté \mathbb{Z}^d , pour lequel la matrice d'adjacence est définie par $\mathbf{A}(x, y) = 1$ si $\|x - y\|_1 = 1$ et $\mathbf{A}(x, y) = 0$ sinon. La géométrie du graphe \mathbb{Z}^d est régulière, contrairement à celle du graphe du World Wide Web.

Le modèle du surfeur que nous avons introduit ne tient pas compte du fait que le graphe lui-même est aléatoire, et fluctue au cours du temps. On peut par exemple considérer que la matrice d'adjacence est aléatoire. La taille de l'espace d'état peut également varier au cours du temps. L'étude mathématique des graphes aléatoires constitue un champ important de recherche à l'heure actuelle. De nombreux modèles issus de la physique, de l'informatique, et de la biologie font intervenir des structures de graphes aléatoires. En physique, le phénomène de la percolation peut être modélisé par des graphes aléatoires. En informatique, les réseaux pair-à-pair (Peer-to-Peer ou P2P) constituent des graphes aléatoires. Le lecteur pourra consulter le livre accessible [\[4\]](#) consacré aux graphes aléatoires.

Bibliographie

- [1] Konstantin Avrachenkov and Nelly Litvak, *Decomposition of the Google PageRank and Optimal Linking Strategies*, Rapport de recherches INRIA 501 - projet Maestro, Janvier 2004. [53](#)
- [2] R. B. Bapat and T. E. S. Raghavan, *Nonnegative matrices and applications*, Encyclopedia of Mathematics and its Applications, vol. 64, Cambridge University Press, Cambridge, 1997. MR MR1449393 (98h:15038) [35](#)
- [3] Philippe Barbe and Michel Ledoux, *Probabilités*, De la licence à l'agrégation, Belin, 1998. [33](#)
- [4] Béla Bollobás, *Random graphs*, second ed., Cambridge Studies in Advanced Mathematics, vol. 73, Cambridge University Press, Cambridge, 2001. MR MR1864966 (2002j:05132) [54](#)
- [5] S. Brin and L. Page, *The Anatomy of a Large-Scale Hypertextual Web Search Engine*, WWW7/Computer Networks **30** (1998), no. 1-7, 107–117, disponible gratuitement : <http://dbpubs.stanford.edu:8090/pub/1998-8>. [53](#)
- [6] R. V. Chacon and D. S. Ornstein, *A general ergodic theorem*, Illinois J. Math. **4** (1960), 153–160. MR MR0110954 (22 #1822) [22](#)
- [7] Amir Dembo, *Favorite points, cover times and fractals*, Lectures on probability theory and statistics, Lecture Notes in Math., vol. 1869, Springer, Berlin, 2005, pp. 1–101. MR MR2228383 [36](#)
- [8] Amir Dembo, Yuval Peres, Jay Rosen, and Ofer Zeitouni, *Cover times for Brownian motion and random walks in two dimensions*, Ann. of Math. (2) **160** (2004), no. 2, 433–464. MR MR2123929 (2005k:60261) [36](#)
- [9] Persi Diaconis, *The cutoff phenomenon in finite Markov chains*, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. **93** (1996), no. 4, 1659–1664. MR MR1374011 (97b:60112) [46](#)
- [10] Persi Diaconis and David Freedman, *Graphical illustration of some examples related to the article: “Iterated random functions” [SIAM Rev. **41** (1999), no. 1, 45–76 (electronic); MR1669737 (2000c:60102)] by P. Diaconis and D. Freedman*, SIAM Rev. **41** (1999), no. 1, 77–82 (electronic). MR MR1669733 (2000c:60103) [39](#)
- [11] ———, *Iterated random functions*, SIAM Rev. **41** (1999), no. 1, 45–76 (electronic). MR MR1669737 (2000c:60102) [39](#)
- [12] W. Doeblin, *Exposé de la théorie des chaînes simples constantes de Markov à un nombre fini d'états*, Rev. Math. Union Interbalkanique **2** (1938), 77–105. [27](#)
- [13] Rick Durrett, *Probability models for DNA sequence evolution*, Probability and its Applications (New York), Springer-Verlag, New York, 2002. MR MR1903526 (2003b:60003) [51](#)

- [14] William Feller, *An introduction to probability theory and its applications. Vol. II.*, John Wiley & Sons Inc., New York, 1971. 43
- [15] R. A. Fisher, *On the dominance ratio*, Proc. Roy. Soc. Edin. (1922), no. 42, 321–431. 46
- [16] Dominique Foata and Aimé Fuchs, *Processus stochastiques - processus de poisson, chaînes de markov et martingales*, Dunod, 2002. 35
- [17] W. K. Hastings, *Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications*, Biometrika (1970), no. 57, 97–109. 30
- [18] R.A Horn and C.R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1990. 35
- [19] Gregory F. Lawler, *Intersections of random walks*, Probability and its Applications, Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1991. MR MR1117680 (92f:60122) 43
- [20] Gérard Letac, *A contraction principle for certain Markov chains and its applications*, Random matrices and their applications (Brunswick, Maine, 1984), Contemp. Math., vol. 50, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1986, pp. 263–273. MR MR841098 (88a:60121) 39
- [21] David Levin, Yuval Peres, and Elisabeth Wilmer, *Markov Chains and Mixing Times*, disponible gratuitement : <http://www.oberlin.edu/markov/book/>, Juin 2006. 35
- [22] Torgny Lindvall, *Lectures on the coupling method*, Dover Publications Inc., Mineola, NY, 2002, Corrected reprint of the 1992 original. MR MR1924231 27
- [23] A.A. Markov, *Extension de la loi des grands nombres à des quantités dépendantes*, Izvestiia Fiz.-Matem. Obsch. Kazan Univ. (seconde série) 15 (1906), 135–156, (en russe). 5
- [24] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller, *Equations of State Calculations by Fast Computing Machines*, Journal of Chemical Physics (1953), no. 21, 1087–1092. 30
- [25] Jacques Neveu, *Relations entre la théorie des martingales et la théorie ergodique*, Ann. Inst. Fourier (Grenoble) 15 (1965), no. fasc. 1, 31–42, disponible gratuitement : <http://www.numdam.org/>. MR MR0219699 (36 #2778) 22
- [26] J. R. Norris, *Markov chains*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998, Reprint of 1997 original. 23
- [27] James David Propp and David Bruce Wilson, *Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics*, Proceedings of the Seventh International Conference on Random Structures and Algorithms (Atlanta, GA, 1995), vol. 9, 1996, pp. 223–252. MR MR1611693 (99k:60176) 39
- [28] Georg Pólya, *Über eine Aufgabe der Wahrscheinlichkeitsrechnung betreffend die Irrfahrt im Straßennetz*, Mathematische Annalen (1921), no. 84, 149–160. 41
- [29] Laurent Saloff-Coste, *Lectures on finite Markov chains*, Lectures on probability theory and statistics (Saint-Flour, 1996), Lecture Notes in Math., vol. 1665, Springer, Berlin, 1997, pp. 301–413. MR MR1490046 (99b:60119) 35
- [30] F. Spitzer, *Principes des cheminement aléatoires*, Dunod, Paris, 1970. 43
- [31] Simon Tavaré, *Ancestral inference in population genetics*, Lectures on probability theory and statistics, Lecture Notes in Math., vol. 1837, Springer, Berlin, 2004, pp. 1–188. MR MR2071630 51

- [32] Sewal Wright, *Evolution in Mendelian populations*, Genetics (1931), no. 16, 97–159. [46](#)
- [33] Bernard Ycart, *Cutoff for Markov chains: some examples and applications*, Complex systems (Santiago, 1998), Nonlinear Phenom. Complex Systems, vol. 6, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 2001, pp. 261–300. MR MR1886358 (2004a:60126) [46](#)