Chaînes de Markov : théorie et applications

Pierre-Loïc Méliot

1. Propriété de Markov

Les premiers résultats classiques de la théorie des probabilités (la loi des grands nombres, le théorème central limite, *etc.*) concernent les suites $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de variables aléatoires indépendantes : pour tout $n \in \mathbb{N}$, X_{n+1} est indépendant des variables précédentes $X_0, \dots, X_n$. On peut se demander ce qui se passe si l'on relaxe un peu cette hypothèse, en demandant par exemple que :

X_{n+1} ne dépend du passé (les variables $X_0, \dots, X_n$) qu'au travers de la dernière variable X_n.

L'objectif de ce premier chapitre est de formaliser cette idée, et d'étudier les premières propriétés des suites de variables aléatoires correspondantes, qu'on appellera *chaînes de Markov*.

1. Matrices de transition et chaînes de Markov.

On fixe dans tout ce chapitre un ensemble $\mathfrak{X}$ fini ou dénombrable, donc en bijection avec une partie de l'ensemble des entiers $\mathbb{N}$. On dit que $\mathfrak{X}$ est un *espace d'états*. Nos suites de variables aléatoires prendront leurs valeurs dans $\mathfrak{X}$. Cette restriction interdit par exemple de considérer des chaînes de Markov à valeurs dans l'ensemble non dénombrable des réels $\mathbb{R}$; mais elle peut être levée sans grandes difficultés si l'on approfondit un peu la théorie qui sera développée ici. L'avantage de la restriction aux espaces d'états dénombrables est qu'elle ôte la plupart des subtilités de théorie de la mesure. Une *probabilité* sur $\mathfrak{X}$ est une famille de nombres réels positifs $(p(x))_{x\in\mathfrak{X}}$ telle que

$$\sum_{x\in\mathfrak{X}} p(x) = 1.$$

Étant donnée une telle probabilité p, la probabilité d'une partie $A \subset \mathfrak{X}$ est $p(A) = \sum_{x\in A} p(x)$.

Définition 1.1 (Matrice stochastique). *Une matrice stochastique, ou matrice de transition sur $\mathfrak{X}$ est une famille $(P(x,y))_{x,y\in\mathfrak{X}}$ de nombres réels positifs telle que, pour tout $x \in \mathfrak{X}$,*

$$\sum_{y\in\mathfrak{X}} P(x,y) = 1.$$

Autrement dit, pour tout $x \in \mathfrak{X}$, $P(x,\cdot)$ est une probabilité sur $\mathfrak{X}$.

Exemple 1.2. Sur $\mathfrak{X} = \{1,2,3\}$, la matrice suivante est une matrice stochastique :

$$P = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} \end{pmatrix}.$$

En effet, les entrées de la matrice sont positives (au sens large), et la somme sur chaque ligne vaut 1.

Dans tout ce qui suit, étant fixé un espace d'états $\mathfrak{X}$, une probabilité $(\pi(x))_{x\in\mathfrak{X}}$ sur $\mathfrak{X}$ sera toujours donnée par un vecteur ligne. Par exemple, $\pi = (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ est la probabilité uniforme sur l'espace $\{1,2,3\}$. Si l'espace d'états est infini, il faut s'imaginer un vecteur ligne de longueur infinie. Cette convention d'écriture permet l'observation suivante :

PROPOSITION 1.3. *Soit P une matrice stochastique sur un espace d'états $\mathfrak{X}$.*

(1) Pour toute probabilité $\pi = (\pi(x))_{x\in\mathfrak{X}}$ sur $\mathfrak{X}$, le produit matriciel πP est une nouvelle probabilité sur $\mathfrak{X}$.

(2) Pour toute autre matrice stochastique Q sur $\mathfrak{X}$, le produit matriciel PQ est encore une matrice stochastique.

DÉMONSTRATION. Supposons pour commencer que $\mathfrak{X}$ est un ensemble fini de taille N : une probabilité sur $\mathfrak{X}$ est un vecteur ligne de taille N, et une matrice stochastique sur $\mathfrak{X}$ est une matrice de taille $N \times N$. Si π est une probabilité sur $\mathfrak{X}$ et si P est une matrice stochastique sur $\mathfrak{X}$, alors pour tout $x \in \mathfrak{X}$,

$$(\pi P)(x) = \sum_{w\in\mathfrak{X}} \pi(w)\, P(w,x).$$

Cette quantité est positive en tant que somme de nombres positifs, et on obtient bien une nouvelle probabilité, car

$$\sum_{x\in\mathfrak{X}} (\pi P)(x) = \sum_{(w,x)\in\mathfrak{X}^2} \pi(w)\, P(w,x) = \sum_{w\in\mathfrak{X}} \pi(w) = 1$$

en utilisant la propriété de matrice stochastique pour la seconde identité, et le fait que π est une probabilité pour la dernière identité. Ceci prouve le premier point, et le second point s'en déduit immédiatement, car pour tout $x \in \mathfrak{X}$,

$$\begin{aligned}(PQ)(x,\cdot) &= \underbrace{P(x,\cdot)}_{\text{ligne d'une matrice stochastique}} \times \underbrace{Q}_{\text{matrice stochastique}} \\ &= \text{probabilité} \times \text{matrice stochastique} = \text{probabilité}.\end{aligned}$$

Si $\mathfrak{X}$ est un ensemble infini (dénombrable), ceci ne change rien : la seule différence est que les sommes considérées peuvent maintenant être des séries de nombres positifs. Notons qu'en règle générale, on ne peut pas définir correctement le produit matriciel pour des matrices de taille infinie, à cause de problèmes de sommabilité. Mais il n'y a pas de problème si tous les coefficients des matrices sont positifs, et ce sera toujours le cas dans nos calculs. □

Fixons une matrice de transition P sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. Une chaîne de Markov de matrice P sur $\mathfrak{X}$ est une suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'éléments aléatoires de $\mathfrak{X}$, dont la loi, qui est une probabilité sur l'ensemble $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$, vérifie certaines propriétés qui seront décrites ci-dessous (voir Définition 1.5). L'une des difficultés de la théorie des chaînes de Markov est que l'on doit manipuler des probabilités sur l'ensemble $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$ de toutes les suites à valeurs dans $\mathfrak{X}$; or, dès que $\mathrm{card}(\mathfrak{X}) \geq 2$, cet ensemble est non dénombrable, et manipuler des probabilités sur un tel ensemble pose des problèmes de théorie de la mesure. Le paragraphe suivant donne des définitions et des résultats qui vont nous permettre de surmonter ces obstacles théoriques. Par souci de rigueur, certains énoncés dans ce qui suit utilisent les notions usuelles de théorie de la mesure (tribu, partie mesurable, *etc.*) ; mais c'est à peu près le seul endroit du cours où on en aura besoin, et on peut sans doute comprendre tout le reste indépendamment de ces arguments.

On appelle *trajectoire* une suite $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'états de l'espace $\mathfrak{X}$. Un *cylindre à horizon $N \geq 0$* est un ensemble de trajectoires de la forme

$$C(y_0, y_1, \dots, y_N) = \{\text{trajectoires } (x_n)_{n\in\mathbb{N}} \,|\, x_0 = y_0, x_1 = y_1, \dots, x_N = y_N\};$$

c'est donc une partie de $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$. On note $\mathcal{F}_N$ la plus petite tribu sur l'ensemble $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$ qui contient tous les cylindres à horizon N (on rappelle qu'une tribu est un ensemble de parties qui contient

$\emptyset$ et $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$, qui est stable par union dénombrable, par intersection dénombrable et par complémentaire). Il est facile de voir que les événements de $\mathcal{F}_N$ sont toutes les unions dénombrables de cylindres à horizon N :

$$\mathcal{F}_N = \left\{ \bigsqcup_{(y_0,\dots,y_N)\in A} C(y_0,\dots,y_N),\ \ A \text{ partie de } \mathfrak{X}^{N+1} \right\}.$$

Chaque cylindre à horizon N est une union disjointe de cyclindres à horizon $N+1$:

$$C(y_0,y_1,\dots,y_N) = \bigsqcup_{y_{N+1}\in\mathfrak{X}} C(y_0,y_1,\dots,y_N,y_{N+1}).$$

Ceci implique que les tribus $\mathcal{F}_N$ sont croissantes pour l'inclusion :

$$\mathcal{F}_0 \subset \mathcal{F}_1 \subset \mathcal{F}_2 \subset \cdots \subset \mathcal{F}_N \subset \mathcal{F}_{N+1} \subset \cdots$$

Lorsqu'on observe des trajectoires dans $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$, il faut comprendre $\mathcal{F}_N$ comme l'ensemble des événements qu'on peut mesurer en se fondant uniquement sur ce que l'on peut voir jusqu'au temps N.

THÉORÈME 1.4 (Kolmogorov). *Soit $\mathcal{F}$ la plus petite tribu sur l'ensemble des suites $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$ qui contient toutes les tribus $\mathcal{F}_N$.*

(1) La donnée d'une probabilité p sur $\bigcup_{N\in\mathbb{N}} \mathcal{F}_N$ est équivalente à la donnée de toutes les probabilités de cylindres $p(C(y_0,\dots,y_N))$, avec la règle de compatibilité

$$p(C(y_0,\dots,y_N)) = \sum_{y_{N+1}\in\mathfrak{X}} p(C(y_0,\dots,y_N,y_{N+1}))$$

pour toute famille finie $(y_0,\dots,y_N)$, et avec $\sum_{y_0\in\mathfrak{X}} p(C(y_0)) = 1$.

(2) Supposons donnée une telle fonction p. Alors, il existe un unique prolongement de p à toute la tribu $\mathcal{F}$, qui en fait une mesure de probabilité sur cette tribu.

Le théorème ci-dessus indique que, pour définir correctement une probabilité p sur l'ensemble $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$ de toutes les trajectoires, il suffit de la définir sur les cylindres. Notons que la tribu $\mathcal{F}$ est en général strictement plus grande que l'union $\bigcup_{N\in\mathbb{N}} \mathcal{F}_N$. En effet, si $x \in \mathfrak{X}$, alors l'événement

$$E = \{(x_n)_{n\in\mathbb{N}} \,|\, x_n = x \text{ pour } n \text{ assez grand}\}$$

n'est pas dans $\bigcup_{N\in\mathbb{N}} \mathcal{F}_N$ (on ne peut pas décider si une suite est stationnaire à x à partir d'observations à horizon fini), mais il est bien dans la tribu $\mathcal{F}$, car

$$E = \bigcup_{N\in\mathbb{N}} \left(\bigcap_{M\geq N} \{(x_n)_{n\in\mathbb{N}} \,|\, x_M = x\} \right);$$

c'est donc l'union dénombrable d'intersections dénombrables d'événements dans les tribus $\mathcal{F}_M$. Le Théorème 1.4 est un cas particulier des résultats classiques d'existence de mesures de probabilité sur un espace produit. La première partie est très facile à établir, et la seconde partie peut par exemple être prouvée en utilisant le lemme de classe monotone. Nous ne rentrerons pas dans les détails de la démonstration ; tout ceci n'est pas vraiment important pour la suite, mais rend rigoureux la définition suivante.

DÉFINITION 1.5 (Chaîne de Markov). *Soit $\mathfrak{X}$ un espace d'états (fini ou dénombrable), et P une matrice stochastique sur $\mathfrak{X}$. Une chaîne de Markov de matrice de transition P est une trajectoire aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$, dont la loi est donnée sur les cylindres par la formule suivante :*

$$\mathbb{P}[X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N] = \pi_0(x_0)\, P(x_0,x_1)\, P(x_1,x_2) \cdots P(x_{N-1},x_N),$$

π_0 étant une certaine mesure de probabilité sur $\mathfrak{X}$. On dit alors que π_0 est la loi initiale de la chaîne de Markov ; $\mathbb{P}[X_0 = x_0] = \pi_0(x_0)$ pour tout $x_0 \in \mathfrak{X}$.

Si la loi initiale π_0 est donnée, alors la fonction définie sur les cylindres par

$$p(C(x_0, \dots, x_N)) = \pi_0(x_0)\, P(x_0, x_1) \cdots P(x_{N-1}, x_N)$$

est bien une probabilité, et elle vérifie bien la condition de compatibilité du premier point du Théorème 1.4. En effet, pour voir que p est une probabilité, notons qu'elle prend bien ses valeurs dans $[0, 1]$ pour tout cylindre, et qu'on a bien

$$p(\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}) = p\left(\bigsqcup_{x_0 \in \mathfrak{X}} C(x_0)\right) = \sum_{x_0 \in \mathfrak{X}} \pi_0(x_0) = \pi_0(\mathfrak{X}) = 1.$$

Pour la compatibilité, on utilise le caractère stochastique de la matrice de transition P :

$$\begin{aligned}\sum_{y_{N+1} \in \mathfrak{X}} p(C(y_0, \dots, y_{N+1})) &= \sum_{y_{N+1} \in \mathfrak{X}} \pi_0(y_0)\, P(y_0, y_1)\, P(y_1, y_2) \cdots P(y_N, y_{N+1}) \\ &= \pi_0(y_0)\, P(y_0, y_1) \cdots P(y_{N-1}, y_N) \left(\sum_{y_{N+1} \in \mathfrak{X}} P(y_N, y_{N+1})\right) \\ &= \pi_0(y_0)\, P(y_0, y_1) \cdots P(y_{N-1}, y_N) = p(C(y_0, \dots, y_N)).\end{aligned}$$

Par conséquent, si on se donne π_0 et P, alors par le théorème de Kolmogorov 1.4 il existe une unique probabilité sur les trajectoires dans $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$ qui vérifie la formule de la Définition 1.5. On notera cette probabilité $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$ ou plus simplement $\mathbb{P}_{\pi_0}$, la matrice P étant sous-entendue. La théorie des chaînes de Markov est l'étude des propriétés des suites de variables aléatoires $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ qui suivent une loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$. Pour l'instant, si P est π_0 sont données, alors il n'est pas tout à fait clair qu'il existe bien des suites de variables aléatoires $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ qui sont des chaînes de Markov de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$. Cette question sera résolue dans le prochain paragraphe. Nous donnerons aussi dans la prochaine section des exemples importants de chaînes de Markov. Voyons d'abord quelques conséquences immédiates de la Définition 1.5. Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$ sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. Pour $n \geq 1$, on note π_n la loi de X_n (dite *loi marginale*) : $\pi_n(x) = \mathbb{P}[X_n = x]$. Cette loi se calcule facilement à l'aide de P et π_0 :

Proposition 1.6 (Lois marginales). *Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov de loi initiale π_0 et de matrice de transition P. Pour tout $n \geq 0$, la loi marginale π_n est donnée par le produit matriciel :*

$$\pi_n = \pi_0\, P^n.$$

Démonstration. Pour calculer $\pi_n(x)$, on peut sommer sur toutes les possibilités pour les variables $X_0, X_1, \dots, X_{n-1}$:

$$\begin{aligned}\pi_n(x) &= \sum_{(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) \in \mathfrak{X}^n} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}, X_n = x] \\ &= \sum_{(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) \in \mathfrak{X}^n} \pi_0(x_0)\, P(x_0, x_1)\, P(x_1, x_2) \cdots P(x_{n-1}, x).\end{aligned}$$

On reconnaît la somme sur les indices qui donne le produit matriciel $(\pi_0\, P^n)(x)$. □

Proposition 1.7 (Chaînes de Markov et probabilités de transition). *Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov de loi initiale π_0 et de matrice de transition P. Pour tout $n \geq 0$, la loi conditionnelle de X_{n+1} sachant $(X_0, \dots, X_n)$ est $P(X_n, \cdot)$. Autrement dit, pour tout vecteur $(x_0, x_1, \dots, x_n)$ tel que $\mathbb{P}_{\pi_0}[X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n] \neq 0$, on a*

$$\mathbb{P}_{\pi_0}[X_{n+1} = x \,|\, X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n] = P(x_n, x).$$

Démonstration. Par définition d'une probabilité conditionnelle,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_{\pi_0}[X_{n+1}=x\,|\,X_0=x_0,\dots,X_n=x_n] &= \frac{\mathbb{P}_{\pi_0}[X_0=x_0,\dots,X_n=x_n,X_{n+1}=x]}{\mathbb{P}_{\pi_0}[X_0=x_0,\dots,X_n=x_n]}\\ &= \frac{\pi_0(x_0)\,P(x_0,x_1)\cdots P(x_{n-1},x_n)\,P(x_n,x)}{\pi_0(x_0)\,P(x_0,x_1)\cdots P(x_{n-1},x_n)}\\ &= P(x_n,x).\end{aligned}$$

Notons que réciproquement, si $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une trajectoire aléatoire dans $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$ qui vérifie la conclusion de la proposition et telle que $\mathbb{P}[X_0=x]=\pi_0(x)$ pour tout $x\in\mathfrak{X}$, alors c'est une chaîne de Markov de loi initiale π_0 et de matrice de transition P. En effet, raisonnons par récurrence et supposons établie jusqu'au rang N la formule pour les probabilités des cylindres. Alors, au rang $N+1$,

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}[X_0=x_0,\dots,X_{N+1}=x_{N+1}]\\ &=\mathbb{P}[X_0=x_0,\dots,X_N=x_N]\,\mathbb{P}[X_{N+1}=x_{N+1}\,|\,X_0=x_0,\dots,X_N=x_N]\\ &=(\pi_0(x_0)\,P(x_0,x_1)\cdots P(x_{N-1},x_N))\,P(x_N,x_{N+1}),\end{aligned}$$

d'où la formule au rang N. Ainsi, la Proposition 1.7 est une définition alternative des chaînes de Markov. □

Remarque 1.8. La Proposition 1.7 implique pour une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de matrice P la formule

$$\mathbb{P}[X_{n+1}=x\,|\,X_n=x_n]=P(x_n,x).$$

Remarquons néanmoins que ceci ne suffit pas pour avoir une chaîne de Markov : on veut que la loi de X_{n+1} *conditionnellement à tout le début de la trajectoire* $\{X_0=x_0,\dots,X_n=x_n\}$ ne dépende que de l'état au temps n, et soit la loi de transition $P(x_n,\cdot)$.

La proposition précédente montre que la Définition 1.5 coïncide avec l'objectif de départ : étant donnée une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$, la loi de X_{n+1} conditionnellement à X_n est indépendante du passé $(X_0,\dots,X_{n-1})$, et elle est donnée par la matrice de transition $P(X_n,\cdot)$. Pour conclure cette introduction des chaînes de Markov, expliquons comment calculer l'espérance d'une fonction $f(X_n)$ d'une chaîne de Markov. Dans tout ce qui suit, une fonction f sur l'espace d'états $\mathfrak{X}$ sera toujours représentée par un vecteur colonne, sauf si cette fonction est une mesure de probabilité (dans ce cas, on a convenu précédemment d'utiliser des vecteurs lignes). Par exemple, la fonction $f(x)=2x$ sur $\mathfrak{X}=\{1,2,3\}$ est représentée par le vecteur

$$f=\begin{pmatrix}2\\4\\6\end{pmatrix}.$$

Avec ces conventions d'écriture :

Proposition 1.9 (Espérance d'une fonction d'une chaîne de Markov). *Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov de loi initiale π_0 et de matrice de transition P, et f une fonction positive ou bornée sur $\mathfrak{X}$.*

(1) L'espérance conditionnelle de $f(X_{n+1})$ sachant $X_n=x$ vaut :

$$\mathbb{E}_{\pi_0}[f(X_{n+1})\,|\,X_n=x]=(Pf)(x),$$

où Pf est le produit matriciel de la matrice P par le vecteur f.

(2) L'espérance de $f(X_n)$ est : $\mathbb{E}_{\pi_0}[f(X_n)]=\pi_0\,P^n f$.

Démonstration. Notons pour commencer que si $\mathbb{P}_{\pi_0}[X_n = x] \neq 0$, alors pour tout $y \in \mathfrak{X}$, $\mathbb{P}_{\pi_0}[X_{n+1} = y \,|\, X_n = x] = P(x, y)$. En effet,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}_{\pi_0}[X_{n+1} = y \,|\, X_n = x] \\
&= \sum_{(x_0,\dots,x_{n-1})\in\mathfrak{X}^n} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}]\, \mathbb{P}_{\pi_0}[X_{n+1} = y \,|\, X_0 = x_0, \dots, X_n = x] \\
&= \sum_{(x_0,\dots,x_{n-1})\in\mathfrak{X}^n} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}]\, P(x, y) = P(x, y).
\end{aligned}$$

La première partie de la proposition s'en déduit immédiatement :

$$\mathbb{E}[f(X_{n+1}) \,|\, X_n = x] = \sum_{y\in\mathfrak{X}} \mathbb{P}[X_{n+1} = y \,|\, X_n = x]\, f(y) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} P(x, y)\, f(y) = (Pf)(x).$$

La seconde partie de la proposition est une conséquence triviale de la Proposition 1.6 :

$$\mathbb{E}[f(X_n)] = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \mathbb{P}[X_n = x]\, f(x) = \pi_n\, f = \pi_0\, P^n f. \qquad \square$$

Remarque 1.10. Le lecteur peut se demander pourquoi on a choisi d'écrire les probabilités comme des vecteurs lignes, et pourquoi on fait agir les matrices stochastiques à droite de ces lignes. En effet, traditionnellement (du moins dans les cercles mathématiques français), on fait plutôt agir les matrices à gauche de vecteurs écrits en colonne. La raison de notre choix est qu'il est nécessaire dans la théorie des chaînes de Markov de faire agir la matrice P à la fois à gauche et à droite, et que les vecteurs invariants par ces actions sont deux choses différentes :

- les vecteurs invariants à droite, qui vérifient $\pi P = \pi$, donnent les *mesures invariantes* qui seront étudiées dans le Chapitre 3.
- les vecteurs invariants à gauche, qui vérifient $Pf = f$, sont les *fonctions harmoniques* ; ces fonctions apparaissent dans divers exercices.

On a donc deux types très différents d'objets invariants, et il faut que l'un des types soit représenté par des lignes et l'autre par des colonnes. Par cohérence avec des conventions d'écriture d'autres domaines mathématiques ou scientifiques, il est alors naturel de représenter les mesures par des vecteurs lignes sur lesquels on agit à droite.

2. Construction et exemples de chaînes de Markov.

Nous avons défini précédemment les chaînes de Markov en précisant la forme de leurs lois trajectorielles, mais ce n'est sans doute pas très intuitif. Dans cette section, nous allons expliquer comment construire explicitement une chaîne de Markov de loi initiale et matrice de transition données, et présenter des exemples. Une notion utile est celle de *graphe d'une matrice de transition*. Supposons donnés un espace d'états $\mathfrak{X}$ et une matrice de transition P sur $\mathfrak{X}$. Le graphe de P est le graphe dirigé $\mathcal{G}_P$:

- dont l'ensemble des sommets est $\mathfrak{X}$;
- avec une arête dirigée de $x \in \mathfrak{X}$ vers $y \in \mathfrak{X}$ si $P(x, y) > 0$; dans ce cas, on accole une étiquette $P(x, y)$ à cette arête.

Par exemple, le graphe de la matrice stochastique de l'Exemple 1.2 est dessiné sur la Figure 1.1.

Définition intuitive. *Soit P une matrice stochastique sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, et π_0 une mesure de probabilité sur cet espace. Pour construire une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$, on peut procéder comme suit :*

(1) On choisit un premier état aléatoire X_0 suivant la loi π_0.

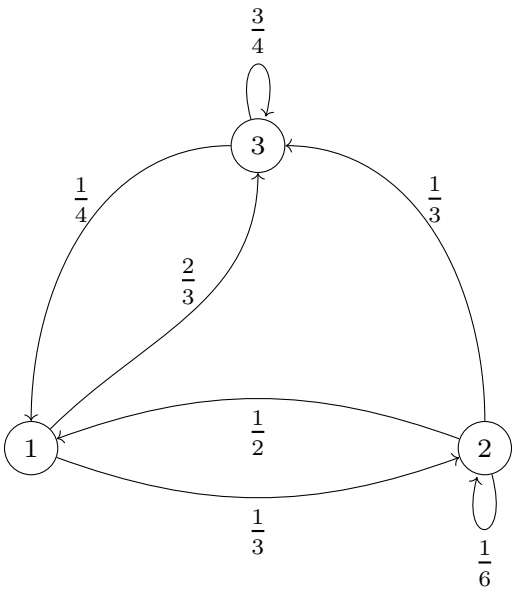


FIG. 1.1. Graphe de la matrice de transition de l'Exemple 1.2.

(2) *Supposons construits les états $X_0, \dots, X_n$. Si $X_n = x$, alors pour obtenir X_{n+1}, on tire au hasard une variable aléatoire de loi $P(x, \cdot)$ et indépendante de tous les choix précédemment effectués.*

Ainsi, la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une marche aléatoire sur le graphe de la matrice P, la probabilité d'un saut $(X_n = x) \to (X_{n+1} = y)$ étant donnée par $P(x, y)$.

Le point délicat de la définition intuitive ci-dessus est l'« indépendance de la transition $X_n \to X_{n+1}$ de tous les choix précédemment effectués ». Le théorème ci-dessous rend rigoureux cette idée, et démontre également l'existence d'une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$ pour n'importe quelle matrice stochastique et n'importe quelle loi initiale sur un espace $\mathfrak{X}$.

THÉORÈME 1.11 (Représentation des chaînes de Markov). *Soit $\mathfrak{X}$ un espace d'états, π_0 une probabilité sur $\mathfrak{X}$.*

(1) *Supposons données :*

- *une variable X_0 de loi π_0 sur $\mathfrak{X}$;*
- *une suite de variables aléatoires $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à valeurs dans un espace mesurable $(E, \mathcal{E})$, ces variables étant identiquement distribuées, indépendantes entre elles et indépendantes de la variable X_0 ;*
- *une fonction mesurable $f : \mathfrak{X} \times E \to \mathfrak{X}$.*

On définit par récurrence la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ en posant pour $n \geq 0$:

$$X_{n+1} = f(X_n, \xi_n).$$

Alors, $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$ de loi initiale π_0 et de matrice $P(x, y) = \mathbb{P}[f(x, \xi_0) = y]$.

(2) *Réciproquement, pour toute matrice stochastique P, on peut effectuer la construction ci-dessus, et on peut même supposer que $E = [0, 1)$ et que $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite de variables indépendantes et de loi uniforme sur $[0, 1)$.*

Démonstration. Pour la première partie de la proposition, il suffit de vérifier que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ a les lois trajectorielles de la Définition 1.5. Soit $(x_0, x_1, \dots, x_N)$ des états dans $\mathfrak{X}$. On calcule :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}[X_0 = x_0, X_1 = x_1, X_2 = x_2 \dots, X_N = x_N] \\
&= \mathbb{P}[X_0 = x_0, f(X_0, \xi_0) = x_1, f(X_1, \xi_1) = x_2, \dots, f(X_{N-1}, \xi_{N-1}) = x_N] \\
&= \mathbb{P}[X_0 = x_0, f(x_0, \xi_0) = x_1, f(x_1, \xi_1) = x_2, \dots, f(x_{N-1}, \xi_{N-1}) = x_N] \\
&= \mathbb{P}[X_0 = x_0]\, \mathbb{P}[f(x_0, \xi_0) = x_1]\, \mathbb{P}[f(x_1, \xi_1) = x_2] \cdots \mathbb{P}[f(x_{N-1}, \xi_{N-1}) = x_N] \\
&= \mathbb{P}[X_0 = x_0]\, \mathbb{P}[f(x_0, \xi_0) = x_1]\, \mathbb{P}[f(x_1, \xi_0) = x_2] \cdots \mathbb{P}[f(x_{N-1}, \xi_0) = x_N] \\
&= \pi_0(x_0)\, P(x_0, x_1)\, P(x_1, x_2) \cdots P(x_{N-1}, x_N)
\end{aligned}$$

en utilisant à la troisième ligne l'indépendance de X_0 et des variables $\xi_{n\geq 0}$, et à la quatrième ligne le fait que toutes les variables ξ_n ont la même loi. Ainsi, $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est bien une chaîne de Markov de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$.

Pour la seconde partie, fixons $\mathfrak{X}$, π_0 et P, ainsi qu'une suite $(\xi_n)_{n\geq -1}$ de variables i.i.d. (indépendantes identiquement distribuées) de loi uniforme sur $[0, 1)$: pour tout n et tout intervalle $[a, b) \subset [0, 1)$,

$$\mathbb{P}[a \leq \xi_n < b] = b - a.$$

Comme $\mathfrak{X}$ est fini ou dénombrable, on peut numéroter ses éléments $x_1, x_2, \dots$ Notons alors que, pour toute probabilité p sur $\mathfrak{X}$, la suite de nombres réels $(\sum_{i=1}^{k} p(x_i))_{k\geq 0}$ est croissante, commence à 0 et se termine par 1 si $\mathfrak{X}$ est fini, ou tend vers 1 si $\mathfrak{X}$ est infini dénombrable. On utilise la variable ξ_{-1} pour choisir au hasard X_0 de loi π_0 :

$$X_0 = x_k, \quad \text{où } k \text{ est l'unique indice tel que } \sum_{i=1}^{k-1} \pi_0(x_i) \leq \xi_{-1} < \sum_{i=1}^{k} \pi_0(x_i).$$

On obtient bien une variable de loi π_0, car

$$\mathbb{P}[X_0 = x_k] = \mathbb{P}\left[\sum_{i=1}^{k-1} \pi_0(x_i) \leq \xi_{-1} < \sum_{i=1}^{k} \pi_0(x_i)\right] = \sum_{i=1}^{k} \pi_0(x_i) - \sum_{i=1}^{k-1} \pi_0(x_i) = \pi_0(x_k).$$

Définissons maintenant la fonction $f : \mathfrak{X} \times [0, 1] \to \mathfrak{X}$ à peu près de la même façon :

$$f(x, \xi) = x_k, \quad \text{où } k \text{ est l'unique indice tel que } \sum_{i=1}^{k-1} P(x, x_i) \leq \xi < \sum_{i=1}^{k} P(x, x_i).$$

Alors, on a bien

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}[f(x, \xi_0) = x_k] &= \mathbb{P}\left[\sum_{i=1}^{k-1} P(x, x_i) \leq \xi_0 < \sum_{i=1}^{k} P(x, x_i)\right] \\
&= \sum_{i=1}^{k} P(x, x_i) - \sum_{i=1}^{k-1} P(x, x_i) = P(x, x_k)
\end{aligned}$$

pour tout $x_k \in \mathfrak{X}$, donc par la première partie de la proposition, la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ définie par la récurrence $X_{n+1} = f(X_n, \xi_n)$ est une chaîne de Markov de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$. □

Remarque 1.12. D'après le théorème précédent, si l'on dispose d'une suite de variables aléatoires $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ i.i.d. uniformes sur $[0, 1)$, alors on peut construire n'importe quelle chaîne de Markov. La plupart des langages de programmation incluent dans leurs librairies des générateurs de nombres pseudo-aléatoires qui engendrent des suites de nombres qui sont déterministes, mais qui ont les mêmes propriétés statistiques que des suites de variables i.i.d. uniformes sur $[0, 1]$ (autrement dit, pour tout échantillon de taille raisonnable, la suite est indistinguable par des tests d'une suite réellement aléatoire et i.i.d.). Par conséquent, on peut très facilement simuler une chaîne de Markov à l'aide d'un ordinateur. Voici un code simple qui, étant donnée une matrice P de taille N stockée dans `Python` sous la forme d'un tableau `numpy` de taille

$N \times N$, et une mesure initiale π_0 stockée sous la forme d'un tableau de taille N, calcule les $n+1$ premiers états $X_0, X_1, \dots, X_n$ d'une chaîne de Markov de matrice P et de mesure initiale π_0 (l'espace des états est dans ce contexte $\mathfrak{X} = [\![0, N-1]\!]$).

```python
import numpy as np
import numpy.random as random

def markov_chain(n: int, P: np.ndarray, pi0: np.ndarray) -> np.ndarray:
    res = np.zeros(n+1, dtype=np.int64)
    N = P.shape[0]
    res[0] = random.choice(N, p=pi0)
    for k in range(n):
        res[k+1] = random.choice(N, p=P[res[k], :])
    return res
```

Exemple 1.13 (Suites de variables i.i.d.). Soit π une mesure de probabilité sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, et $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite de variables i.i.d. à valeurs dans $\mathfrak{X}$, avec $\mathbb{P}[X_n = x] = \pi(x)$ pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout $x \in \mathfrak{X}$. Alors, $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition

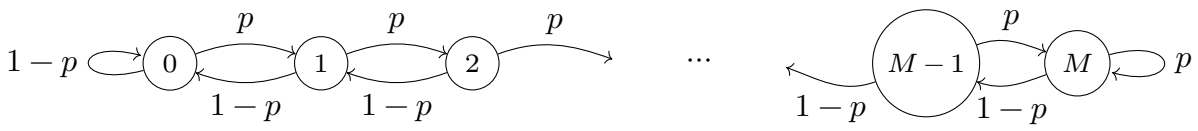
$$P(x, y) = \pi(y).$$

En effet, on peut utiliser le théorème de représentation avec $E = \mathfrak{X}$, $X_{n+1} = \xi_n$ et $f(x, y) = y$. Ce n'est pas un exemple très intéressant, car la probabilité d'une transition $(X_n = x) \to (X_{n+1} = y)$ ne dépend pas de x ; mais ceci montre que la théorie des chaînes de Markov généralise celle des suites de variables indépendantes.

Exemple 1.14 (Ruine du joueur). Soit M un entier plus grand que 1, et $p \in (0, 1)$ un nombre réel. On considère la chaîne de Markov d'espace d'états $\mathfrak{X} = \{0, 1, 2, \dots, M\} = [\![0, M]\!]$, et de probabilités de transition

$$\begin{aligned} &\forall k \le M-1, \;\; P(k, k+1) = p; \\ &\forall k \ge 1, \;\; P(k, k-1) = 1-p; \\ &P(0,0) = 1-p \qquad ; \qquad P(M, M) = p. \end{aligned}$$

Le graphe de cette chaîne de Markov est :



Cette chaîne de Markov modélise la quantité d'argent d'un joueur qui participe à chaque temps n à un jeu où il a une probabilité p de gagner et d'augmenter ses fonds d'une unité, et une probabilité $1-p$ de perdre et de voir ses fonds diminuer d'une unité. Le nombre M est la quantité totale d'argent mise en jeu et que le joueur peut remporter. On parle de la *chaîne de Markov de la ruine du joueur* ; l'un des problèmes importants que nous résoudrons dans ce chapitre est le calcul de la probabilité de ruine

$$\mathbb{P}[\text{la chaîne atteint l'état } 0 \text{ avant l'état } M \,|\, X_0 = k].$$

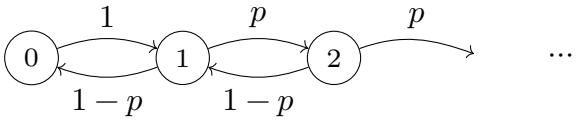
Il existe un certain nombre de variantes de cette chaîne, avec les mêmes probabilités de transition sauf pour $P(0, \cdot)$ et $P(M, \cdot)$. En particulier, une alternative assez fréquemment étudiée est le cas où $P(0, 1) = P(M, M-1) = 0$ et $P(0, 0) = P(M, M) = 1$; si l'on imagine un jeu

au casino, cette modification implique que le jeu s'arrête lorsque le joueur est ruiné et atteint 0, ou lorsqu'il a remporté tout l'argent de la banque en atteignant l'état M.

Exemple 1.15 (File d'attente). Modifions légèrement l'exemple précédent en prenant l'espace d'états $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$, avec essentiellement les mêmes probabilités de transition que précédemment :

$$\begin{aligned} &\forall k \geq 1, \;\; P(k, k+1) = p; \\ &\forall k \geq 1, \;\; P(k, k-1) = 1-p; \\ &P(0,1) = 1. \end{aligned}$$

C'est le cas $M = +\infty$ dans le modèle de la ruine du joueur, avec également une modification de la probabilité de transition $P(0, \cdot)$.



La chaîne de Markov avec ces probabilités de transition modélise le nombre de personnes dans une file d'attente avec un seul guichet. Si la file d'attente est vide à l'étape n ($X_n = 0$), l'étape suivante correspond à l'arrivée d'un nouveau client et on a donc $X_{n+1} = 1$ avec probabilité 1. Si la file d'attente est non vide à l'étape n ($X_n = k \geq 1$), l'étape suivante correspond soit à l'arrivée d'un nouveau client ($X_{n+1} = k+1$), soit au départ du client au guichet dont la demande a été traitée ($X_{n+1} = k-1$). Certaines hypothèses de modélisation mènent aux valeurs de probabilités de transition $P(k, k+1) = p$ et $P(k, k-1) = 1-p$ pour un certain paramètre p mesurant la différence entre la fréquence d'arrivée de nouveaux clients et la fréquence de traitement des demandes. Des questions importantes pour ce modèle sont :

- est-ce qu'on a avec probabilité non nulle $X_n \to +\infty$ (explosion de la chaîne) ?
- quel est le nombre moyen de personnes dans la file au cours d'un long intervalle de temps ?
- partant de $X_0 = k$, combien de temps en moyenne faut-il attendre pour que la file d'attente se vide ?

Exemple 1.16 (Marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$). On peut encore modifier l'exemple de la ruine du joueur en retirant les deux bornes inférieure et supérieure de l'espace d'états : on prend $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}$ et

$$P(k, k+1) = p \qquad ; \qquad P(k, k-1) = 1-p$$

pour tout $k \in \mathbb{Z}$. C'est la *marche aléatoire sur* $\mathbb{Z}$ de paramètre p : à chaque étape, on fait un saut vers le haut avec probabilité p et vers le bas avec probabilité $1-p$. Une construction possible de cette chaîne est à partir de variables de Bernoulli indépendantes $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ avec

$$\mathbb{P}[\xi_n = +1] = p \qquad ; \qquad \mathbb{P}[\xi_n = -1] = 1-p.$$

Alors, $X_n = X_0 + \xi_1 + \cdots + \xi_n$ est une chaîne de Markov sur $\mathbb{Z}$ avec matrice de transition donnée par les formules ci-dessus. On étudie très souvent le cas où $X_0 = 0$ presque sûrement ; autrement dit, $\pi_0 = \delta_0$ est le Dirac en 0, avec

$$\pi_0(k) = \begin{cases} 1 & \text{si } k = 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On notera la loi de chaîne de Markov $\mathbb{P}_0$ au lieu de $\mathbb{P}_{\delta_0}$; plus généralement, étant donnée une chaîne de Markov sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, si la loi initiale est le Dirac en un point δ_x, on notera toujours $\mathbb{P}_x$ au lieu de $\mathbb{P}_{\delta_x}$ la loi associée sur $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$. Pour la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$, le cas

le plus intéressant est sans doute celui où $p = 1 - p = \frac{1}{2}$ (marche aléatoire *symétrique*). Une trajectoire de cette marche aléatoire sous la loi $\mathbb{P}_0$ est dessinée ci-dessous.

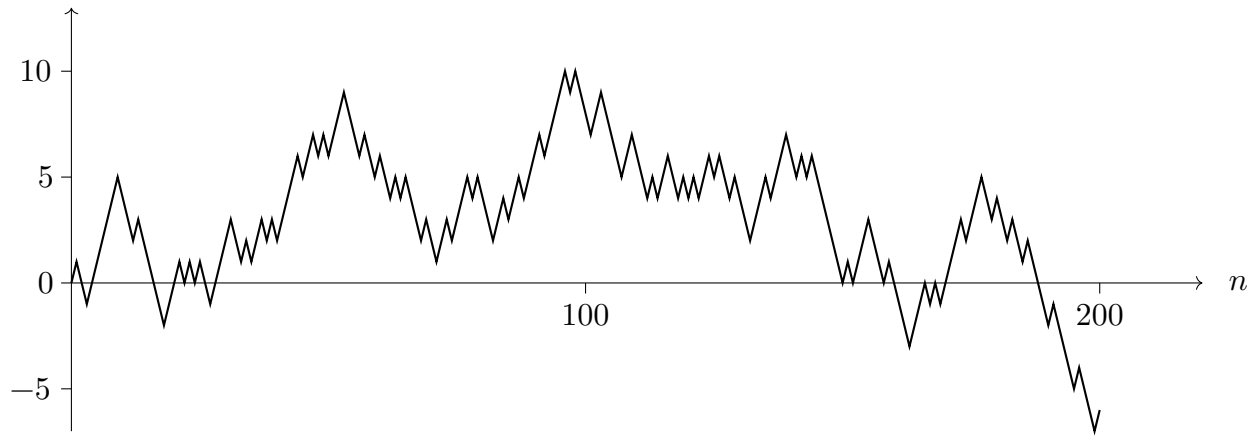


FIG. 1.2. Marche aléatoire symétrique sur $\mathbb{Z}$.

La loi des grands nombres et le théorème central limite donnent des informations sur la distribution de la variable aléatoire $X_n = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n$ à n fixé (grand), mais pas sur l'aspect de toute la trajectoire $(X_1, X_2, \ldots, X_n)$. En particulier, voici quelques questions importantes que l'on pourra résoudre avec la théorie des chaînes de Markov (les réponses dépendent de la valeur du paramètre p) :

- combien de fois la trajectoire passe-t-elle par 0 ? quel est la durée moyenne entre deux passages en 0 ? quelle est la loi du temps aléatoire séparant deux passages en 0 ?
- la trajectoire reste-t-elle bornée ? peut-elle tendre vers $+\infty$ ou $-\infty$? combien de temps faut-il attendre pour atteindre un niveau $k \in \mathbb{Z}$, partant de $X_0 = 0$?

EXEMPLE 1.17 (Marche aléatoire sur un graphe). On a expliqué précédemment comment associer à une matrice stochastique P un graphe *dirigé* $\mathcal{G}_P$, de sorte que la chaîne de Markov de matrice P est une marche aléatoire sur ce graphe avec des probabilités de saut données par P. Il y a aussi une façon canonique d'associer à un graphe *non dirigé* $\mathcal{G}$ une matrice stochastique $P_{\mathcal{G}}$ d'espace d'états l'ensemble des sommets de $\mathcal{G}$. Considérons ainsi un graphe $\mathcal{G} = (\mathfrak{X}, \mathfrak{E})$, c'est-à-dire un ensemble dénombrable de sommets $\mathfrak{X}$ et un ensemble d'arêtes

$$\mathfrak{E} \subset \{\text{paires } \{x, y\} \text{ d'éléments distincts de } \mathfrak{X}\}.$$

On supposera que pour tout sommet $x \in \mathfrak{X}$,

$$\deg x = \operatorname{card}(\{y \in \mathfrak{X} \mid \{x, y\} \in \mathfrak{E}\}) \text{ est fini et supérieur à 1.}$$

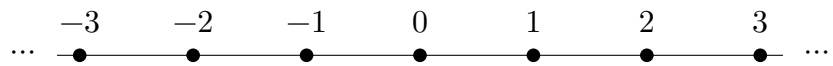
Autrement dit, tout sommet du graphe a au moins un voisin, et n'en a qu'un nombre fini. Attention, ceci n'implique pas que $\mathcal{G}$ soit un graphe connexe. La matrice de transition canoniquement associée au graphe $\mathcal{G}$ est :

$$P_{\mathcal{G}}(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{\deg x} & \text{si } y \text{ est un voisin de } x, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On obtient bien une matrice stochastique, car pour tout $x \in \mathfrak{X}$,

$$\sum_{y \in \mathfrak{X}} P_{\mathcal{G}}(x, y) = \frac{1}{\deg x} \sum_{y \in \mathfrak{X}} 1_{(x \sim y)} = \frac{\deg x}{\deg x} = 1.$$

La chaîne de Markov de matrice $P_{\mathcal{G}}$ est appelée *marche aléatoire sur le graphe* $\mathcal{G}$. Par exemple, la marche aléatoire symétrique sur $\mathbb{Z}$ ($p = \frac{1}{2}$) est la marche aléatoire sur le graphe :



Un exemple intéressant de marche aléatoire sur un graphe est le cas du réseau $\mathbb{Z}^2$: $\mathcal{G} = (\mathfrak{X}, \mathfrak{E})$ avec $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}^2$ et

$$\mathfrak{E} = \{\{(x_1, y_1), (x_2, y_2)\} \,|\, |x_1 - x_2| + |y_1 - y_2| = 1\}.$$

Dans le réseau, chaque sommet est connecté à quatre voisins aux quatre points cardinaux nord, sud, est et ouest, et la probabilité de transition vers chaque direction est égale à $\frac{1}{4}$. Un exemple de trajectoire de la marche aléatoire sur ce graphe apparaît sur la Figure 1.3 (en partant du point $(0, 0)$, on a dessiné les 1000 premiers pas, la couleur passe de bleu à rouge au fil des étapes). On a le même genre de questions que pour la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$:

- combien de fois repasse-t-on par l'origine ?
- la trajectoire reste-t-elle bornée dans le plan ?
- quel est le nombre moyen d'états visités au temps n ?
- si on laisse la trajectoire se poursuivre sur un temps infini, y a-t-il des états dans $\mathbb{Z}^2$ qui sont évités par la marche ?

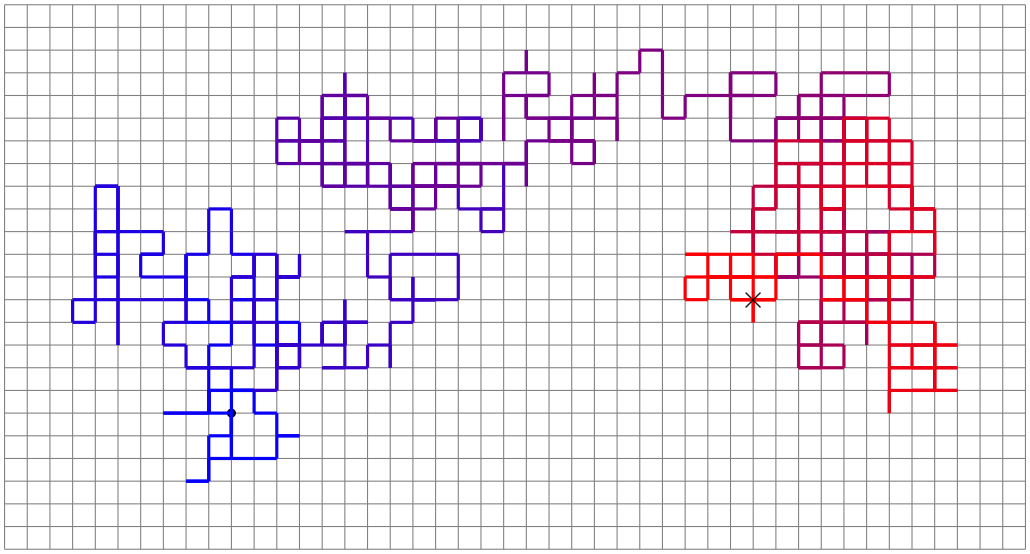


FIG. 1.3. Marche aléatoire sur le réseau $\mathbb{Z}^2$.

3. Propriété de Markov et méthode d'un pas en avant.

De nombreux calculs sur les probabilités des chaînes de Markov peuvent être effectués en utilisant l'observation très simple suivante :

THÉORÈME 1.18 (Propriété de Markov simple). *Soit $\mathfrak{X}$ un espace d'états, $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$ de matrice de transition P et de loi initiale π_0 arbitraire. On fixe un état $x \in \mathfrak{X}$. Conditionnellement à l'événement $\{X_1 = x\}$, la trajectoire décalée en temps $(X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$ est encore une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$, de même matrice de transition P et de loi initiale δ_x. Ainsi, pour tout événement A dans la tribu $\mathcal{F}$ sur $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$ introduite dans le Théorème 1.4,*

$$\mathbb{P}_{\pi_0}[(X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}} \in A \,|\, X_1 = x] = \mathbb{P}_x[(X_n)_{n\in\mathbb{N}} \in A].$$

Démonstration. On va calculer les probabilités trajectorielles de la chaîne décalée d'un pas conditionnellement à l'événement $\{X_1 = x\}$, qu'on suppose donc de probabilité non nulle

$$\pi_1(x) = (\pi_0 P)(x) = \sum_{w\in\mathfrak{X}} \pi_0(w)\, P(w,x) \neq 0.$$

On a :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}_{\pi_0}[X_1 = y_0, X_2 = y_1, \dots, X_{N+1} = y_N \,|\, X_1 = x] \\
&= \frac{\mathbb{P}_{\pi_0}[X_1 = x, X_1 = y_0, X_2 = y_1, \dots, X_{N+1} = y_N]}{\mathbb{P}_{\pi_0}[X_1 = x]} \\
&= \frac{1}{\mathbb{P}_{\pi_0}[X_1 = x]} \sum_{w\in\mathfrak{X}} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_0 = w, X_1 = x, X_1 = y_0, X_2 = y_1, \dots, X_{N+1} = y_N] \\
&= \frac{\delta_x(y_0)}{\mathbb{P}_{\pi_0}[X_1 = x]} \sum_{w\in\mathfrak{X}} \pi_0(w)\, P(w,x)\, P(y_0,y_1) \cdots P(y_{N-1},y_N) \\
&= \delta_x(y_0)\, P(y_0,y_1) \cdots P(y_{N-1},y_N).
\end{aligned}$$

On reconnaît les probabilités des cylindres pour une chaîne de Markov de loi $\mathbb{P}_x$. □

Remarque 1.19. On peut aussi énoncer une version non conditionnelle de la propriété de Markov simple : si $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$ de matrice de transition P et de loi initiale π_0, alors $(X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$ de même matrice de transition et de loi initiale $\pi_1 = \pi_0 P$. Cette version non conditionnelle se démontre à partir de la version conditionnelle en décomposant les probabilités trajectorielles en fonction des valeurs possibles pour X_1.

Le Théorème 1.18 nous dit que la propriété de chaîne de Markov est conservée par décalage par un pas du processus aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$; ceci se traduira par diverses équations de récurrence vérifiées par les probabilités des chaînes de Markov. L'énoncé du Théorème 1.18 est très formel ; examinons plutôt des applications concrètes de ce principe.

Exemple 1.20 (Probabilité de ruine). Fixons un paramètre $p \in (0,1)$, et considérons le modèle de la ruine du joueur, avec pour espace d'états $\mathfrak{X} = [\![0, M]\!]$ et probabilités de transition comme indiquées dans l'Exemple 1.14 (sans modification des probabilités de transition en 0 ou en M). On note comme d'habitude $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la chaîne de Markov associée, avec une loi initiale $\pi_0 = \delta_k$ concentrée en un point de départ $k \in [\![0, M]\!]$. Posons

$$\tau_0 = \inf(\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n = 0\}),$$

qui est le *temps d'atteinte* de l'état 0 par la chaîne de Markov. Étant donnée une trajectoire $(X_0, X_1, X_2, \dots)$, il est possible que l'on n'atteigne jamais 0 ; on pose dans ce cas $\tau_0 = +\infty$. Le temps aléatoire τ_0 est donc une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{N} \sqcup \{+\infty\}$. On définit de même

$$\tau_M = \inf(\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n = M\}),$$

et finalement $\tau = \min(\tau_0, \tau_M)$; c'est le temps au bout duquel le joueur est ruiné ou a ruiné la banque s'il joue au casino. Si $M \geq 1$, alors on ne peut pas atteindre simultanément 0 et M, donc si τ est fini, alors soit $\tau = \tau_0 < \tau_M$ (si on atteint 0 avant M), soit $\tau = \tau_M < \tau_0$ (si on atteint M avant 0). On souhaite calculer la *probabilité de ruine* :

$$f(k) = \mathbb{P}_k[\tau < +\infty \text{ et } \tau = \tau_0].$$

La propriété de Markov simple va nous permettre d'écrire une équation de récurrence satisfaite par la fonction f. Notons pour commencer que $f(0) = \mathbb{P}_0[\tau = \tau_0 < +\infty] = 1$, puisque si l'on part de 0, alors on atteint 0 en un temps $\tau_0 = 0$. De même, $f(M) = 0$, puisque si l'on part de M, alors il n'y a aucune possibilité d'atteindre 0 avant M. Supposons maintenant

$k \notin \{0, M\}$. Pour calculer $f(k)$, on va décomposer suivant les valeurs possibles pour X_1, et utiliser la propriété de Markov. Comme celle-ci implique la chaîne décalée en temps, il faut faire attention aux notations utilisées. Une bonne façon de procéder est de considérer les quantités τ_0, τ_M et τ comme des fonctions des trajectoires $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Notons alors que, si $X_0 \notin \{0, M\}$, on a :

$$\tau_0((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) + 1.$$

En effet, le temps que met la trajectoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ pour atteindre 0 est égal au temps que met la trajectoire $(X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$ pour atteindre 0, plus un pas (le pas $X_0 \to X_1$).

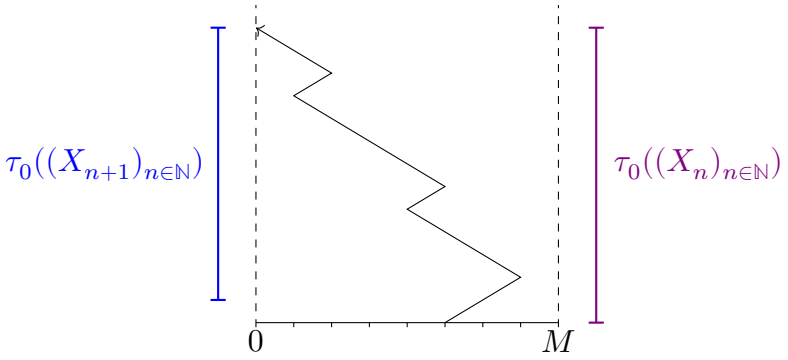


FIG. 1.4. Le temps d'atteinte de l'état 0 par la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ vaut 1 de plus que le temps d'atteinte de l'état 0 par la chaîne décalée $(X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$.

On a la même relation pour les temps τ_M et τ. Ceci implique l'identité d'événements suivants si $X_0 \notin \{0, M\}$:

$$\begin{aligned}(\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty) &\iff (1 + \tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) = 1 + \tau_0((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty)\\ &\iff (\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty).\end{aligned}$$

Alors,

$$\begin{aligned}f(k) &= \mathbb{P}_k[\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty]\\ &= \mathbb{P}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty]\\ &= \mathbb{P}_k[X_1 = k+1]\,\mathbb{P}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty \,|\, X_1 = k+1]\\ &\quad + \mathbb{P}_k[X_1 = k-1]\,\mathbb{P}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty \,|\, X_1 = k-1]\\ &= p\,f(k+1) + (1-p)\,f(k).\end{aligned}$$

À la dernière ligne du calcul, on a remplacé les probabilités $\mathbb{P}_k[X_1 = k+1]$ et $\mathbb{P}_k[X_1 = k-1]$ par leurs valeurs, et on a utilisé la propriété de Markov telle qu'énoncée dans le Théorème 1.18 : ainsi, la loi de $(X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$ sachant $\{X_1 = k+1\}$ est la loi $\mathbb{P}_{k+1}$ d'une chaîne de Markov de même matrice P et de loi initiale δ_{k+1}, donc la probabilité conditionnelle de l'événement

$$\{\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) = \tau_0((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) < +\infty\}$$

est $f(k+1)$ (et de même pour l'autre probabilité conditionnelle).

Résumons : on a deux valeurs $f(0) = 1$ et $f(M) = 0$, et la relation de récurrence $f(k) = p\,f(k+1) + (1-p)\,f(k-1)$ qui est d'ordre 2 ; il y a donc une unique solution que nous allons maintenant déterminer dans le cas $p = \frac{1}{2}$ (le cas $p \neq \frac{1}{2}$ est traité dans les exercices). Si $p = \frac{1}{2}$, l'équation de récurrence se réécrit sous la forme :

$$f(k) = \frac{f(k+1) + f(k-1)}{2} \qquad ; \qquad f(k+1) - f(k) = f(k) - f(k-1).$$

La deuxième équation dit que les pentes $f(k+1)-f(k)$ sont constantes le long de l'intervalle $[\![0,M]\!]$. Notons Δ cette pente constante. Comme

$$f(M)-f(0)=0-1=\sum_{k=0}^{M-1} f(k+1)-f(k)=M\Delta,$$

on obtient $\Delta=-\frac{1}{M}$, et finalement $f(k)=f(0)+\sum_{j=0}^{k-1} f(j+1)-f(j)=1+k\Delta=1-\frac{k}{M}$. Conclusion : dans le cas symétrique $p=\frac{1}{2}$, la probabilité de ruine partant de k est

$$f(k)=1-\frac{k}{M} \quad \text{pour tout } k\in[\![0,M]\!]\,.$$

Exemple 1.21 (Temps de jeu dans le modèle de la ruine du joueur). Considérons de nouveau le modèle de la ruine du joueur avec un paramètre $p\in(0,1)$ arbitraire, et intéressons-nous maintenant à la quantité

$$g(k)=\mathbb{E}_k[\tau],$$

où $\tau=\min(\tau_0,\tau_M)$ comme dans le paragraphe précédent. A priori cette espérance pourrait être infinie ; nous allons voir que ce n'est pas le cas, et en particulier, ceci impliquera que $\tau<+\infty$ avec probabilité 1 : ainsi, avec probabilité 1, une trajectoire de la chaîne de Markov atteint l'un des deux bords 0 ou M au bout d'un temps fini. On a comme précédemment deux valeurs triviales pour g :

$$g(0)=g(M)=0.$$

Si $X_0\notin\{0,M\}$, on utilise la relation $\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}})=\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})+1$ et la propriété de Markov pour établir une formule de récurrence :

$$\begin{aligned}
g(k)&=\mathbb{E}_k[\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}})]=\mathbb{E}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})]+1\\
&=\mathbb{P}_k[X_1=k+1]\,\mathbb{E}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})\,|\,X_1=k+1]\\
&\quad+\mathbb{P}_k[X_1=k-1]\,\mathbb{E}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})\,|\,X_1=k-1]+1\\
&=p\,g(k+1)+(1-p)\,g(k-1)+1.
\end{aligned}$$

À la dernière ligne, on a remplacé les probabilités $\mathbb{P}_k[X_1=k+1]$ et $\mathbb{P}_k[X_1=k-1]$ par leurs valeurs, et on a utilisé la propriété de Markov avec des espérances conditionnelles au lieu de probabilités conditionnelles : cela ne pose pas de problème, car

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})\,|\,X_1=k+1]&=\sum_{t\in\mathbb{N}\sqcup\{\infty\}}\mathbb{P}_k[\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})=t\,|\,X_1=k+1]\,t\\
&=\sum_{t\in\mathbb{N}\sqcup\{\infty\}}\mathbb{P}_{k+1}[\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}})=t]\,t\\
&=\mathbb{E}_{k+1}[\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}})].
\end{aligned}$$

Cet argument montre que de façon générale, on peut utiliser la propriété de Markov avec des espérances conditionnelles de fonctions positives ou bornées de la chaîne décalée $(X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$; le cas des probabilités conditionnelles correspond aux fonctions $f((X_n)_{n\in\mathbb{N}})=1_{(X_n)_{n\in\mathbb{N}}\in A}$ avec A événement de la tribu $\mathcal{F}$.

De nouveau, on a une relation de récurrence d'ordre 2 et deux valeurs pour g, donc il y a une seule solution. Résolvons le système d'équations lorsque $p=\frac{1}{2}$. On peut réécrire la formule de récurrence sous la forme :

$$g(k)=\frac{g(k+1)+g(k-1)}{2}+1 \qquad ; \qquad g(k+1)-g(k)=g(k)-g(k-1)-2.$$

Autrement dit, la pente $\delta(k) = g(k+1) - g(k)$ diminue de deux unités à chaque fois qu'on augmente k d'un pas ; $\delta(k) = \delta(0) - 2k$ pour tout $k \in [\![0, M-1]\!]$. De plus,

$$g(M) - g(0) = 0 = \sum_{k=0}^{M-1} \delta(k) = M\delta(0) - M(M-1),$$

donc $\delta(0) = M-1$ et $\delta(k) = M-1-2k$. Ainsi, $g(k) = g(0) + \sum_{j=0}^{k-1} \delta(j) = k(M-k)$. Conclusion : l'espérance du temps de jeu dans le cas symétrique $p = \frac{1}{2}$ est la fonction quadratique

$$g(k) = k(M-k).$$

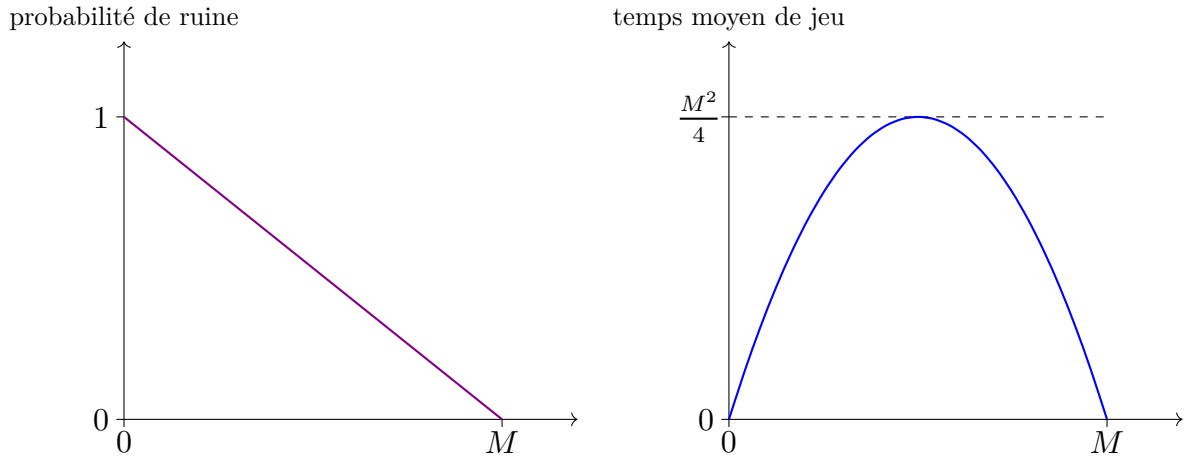


FIG. 1.5. Probabilité de ruine et temps moyen de jeu dans le modèle de la ruine du joueur, avec un paramètre $p = \frac{1}{2}$.

Dans le prochain chapitre, nous verrons dans un cas particulier une généralisation du Théorème 1.18, où au lieu de décaler d'un pas en avant la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$, on la décale d'un temps aléatoire τ et on considère $(X_{n+\tau})_{n\in\mathbb{N}}$. L'énoncé formel correspondant à cette généralisation est ce qu'on appelle la propriété de Markov *forte* (par opposition à la propriété de Markov *simple*) ; ceci dépasse un peu le cadre de ce cours.

4. Exercices.

Objectifs : manipuler une matrice stochastique et les lois marginales d'une chaîne de Markov ; utiliser la propriété de Markov simple ; utiliser la représentation d'une chaîne de Markov en termes d'aléas indépendants ; décomposer toute probabilité d'un événement en somme de probabilités trajectorielles.

1. Chaîne de Markov à deux états. On considère l'espace $\mathfrak{X} = \{1, 2\}$, et une matrice de transition

$$P = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

(a) À quelles conditions sur a, b, c, d la matrice P est-elle une matrice stochastique ? On supposera dans tout ce qui suit que ces conditions sont réunies. Réécrire dans ce cas P en fonction seulement des paramètres a et d. Dessiner le graphe dirigé $\mathcal{G}_P$ associé à cette matrice (qui peut dépendre des valeurs de a et d).

(b) On suppose pour les questions suivantes $(a,d) \notin \{(0,0),(1,1)\}$. Montrer que les deux vecteurs lignes

$$\pi = \left(\frac{1-d}{2-a-d}, \frac{1-a}{2-a-d}\right) \quad \text{et} \quad \eta = (1,-1)$$

sont des vecteurs propres pour l'action à droite de P : $\pi P = \lambda_\pi \pi$ et $\eta P = \lambda_\eta \eta$, pour des valeurs propres réelles λ_π et λ_η que l'on calculera en fonction de a et d.

(c) Soit π_0 une mesure de probabilité sur $\{1,2\}$, et $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la chaîne de Markov sur l'espace d'états $\{1,2\}$ de matrice P et de mesure initiale π_0. Montrer qu'il existe un coefficient $\beta \in \mathbb{R}$ qu'on calculera en fonction de π_0 et de P tel que, pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$\mathbb{P}[X_n = 1] = \frac{1-d}{2-a-d} + \beta\,(a+d-1)^n;$$
$$\mathbb{P}[X_n = 2] = \frac{1-a}{2-a-d} - \beta\,(a+d-1)^n.$$

On pourra décomposer π_0 sur la base (π, η) de $\mathbb{R}^2$.

(d) Que peut-on dire de $\mathbb{P}[X_n = i]$ $(i \in \{1,2\})$ lorsque n tend vers l'infini ?

(e) On suppose que $d = 1$ et $a < 1$. Montrer que $\mathbb{P}[\lim_{n\to\infty} X_n = 2] = 1$.

2. Modèle de file d'attente, I. On considère la matrice de transition sur l'espace $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$ donnée par

$$P(0,1) = 1 \qquad ; \qquad \forall k \geq 1,\ \ P(k,k+1) = p \qquad ; \qquad \forall k \geq 1,\ \ P(k,k-1) = 1-p,$$

p étant un paramètre réel dans $(0,1)$.

(a) Soit $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite de variables i.i.d. de loi $\mathbb{P}[\xi_n = 1] = 1 - \mathbb{P}[\xi_n = -1] = p$. On considère la suite aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ définie par :

$$X_n = X_0 + \sum_{k=1}^{n} (\xi_k\, 1_{(X_{k-1}>0)} + 1_{(X_{k-1}=0)}),$$

X_0 étant indépendant de $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et de loi notée π. Montrer que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi)}$ sur l'espace $\mathbb{N}$.

(b) On suppose $p > \frac{1}{2}$. Comparer X_n et $\sum_{k=1}^n \xi_k$, et montrer que $\mathbb{P}_\pi[\lim_{n\to\infty} X_n = +\infty] = 1$ quelque soit la loi initiale π.

(c) On suppose $p < \frac{1}{2}$. Montrer que

$$0 \leq X_n \leq X_0 + \sum_{k=1}^{n} \xi_k + 2 \sum_{k=1}^{n} 1_{(X_{k-1}=0)}.$$

En déduire à l'aide de la loi des grands nombres que $\mathrm{card}(\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n = 0\}) = +\infty$ a probabilité 1 sour $\mathbb{P}_\pi$. Que vaut alors $\mathbb{P}_\pi\left[\lim_{n\to\infty} X_n = +\infty\right]$?

3. Le problème du collectionneur. On considère un ensemble fini E de cardinal N, et une suite de variables aléatoires $(C_k)_{k\geq 1}$ indépendantes, avec chaque C_k de loi uniforme sur E :

$$\forall k \geq 1,\ \ \forall e \in E,\ \ \mathbb{P}[C_k = e] = \frac{1}{N}.$$

On note ensuite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la suite définie par :

$$X_n = \mathrm{card}(\{C_1, C_2, \ldots, C_n\}),$$

avec par convention $X_0 = 0$.

(a) Montrer que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X} = [\![0, N]\!]$, dont on explicitera la matrice de transition.

(b) Soit $T = \inf(\{n \in \mathbb{N} \mid X_n = N\})$. Montrer que T est fini presque sûrement.

(c) Montrer que pour tout $t \geq N$, on a :

$$\mathbb{P}[T = t] = \sum_{\substack{t_0,\dots,t_{N-1}\geq 1 \\ t_0+t_1+\cdots+t_{N-1}=t}} (1-p_0)^{t_0-1}p_0\,(1-p_1)^{t_1-1}p_1\cdots(1-p_{N-1})^{t_{N-1}-1}p_{N-1}$$

avec $p_k = 1 - \frac{k}{N}$ pour tout $k \in [\![0, N-1]\!]$. En déduire que la loi de T est celle d'une somme de variables géométriques indépendantes

$$G_0 + G_1 + \cdots + G_{N-1},$$

avec $\mathbb{P}[G_k = l] = (1-p_k)^{l-1}p_k$.

(d) Déduire de la question précédente la valeur de $\mathbb{E}[T]$ en fonction de N. Donner un équivalent simple de cette formule lorsque N tend vers l'infini.

4. Marche aléatoire sur la droite et transformation $M-X$. On considère la marche aléatoire simple symétrique sur $\mathbb{Z}$: c'est la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de matrice de transition $P(x,y) = \frac{1}{2}\,1_{|x-y|=1}$.

(a) On suppose que la mesure initiale est δ_0. Donner une représentation de $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ en termes d'aléas i.i.d. $(\xi_n)_{n\geq 1}$ avec $\mathbb{P}[\xi_n = 1] = \mathbb{P}[\xi_n = -1] = \frac{1}{2}$.

(b) On pose $M_n = \max(\{X_k,\, 0 \leq k \leq n\})$. Montrer que $(M_n)_{n\in\mathbb{N}}$ n'est pas une chaîne de Markov (indication : rendre tangible le fait que l'évolution de M_n dépend du moment où le précédent maximum a été atteint).

(c) On s'intéresse au vecteur $Z_n = (X_n, M_n - X_n) \in \mathbb{Z}\times\mathbb{N}$. Montrer que

$$Z_{n+1} - Z_n = \begin{cases} (\xi_{n+1}, -\xi_{n+1}) & \text{si } M_n - X_n > 0, \\ (1,0) & \text{si } M_n - X_n = 0 \text{ et } \xi_{n+1} = 1, \\ (-1,+1) & \text{si } M_n - X_n = 0 \text{ et } \xi_{n+1} = -1. \end{cases}$$

(d) Montrer que $(X_n, M_n - X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur l'espace $\mathbb{Z}\times\mathbb{N}$.

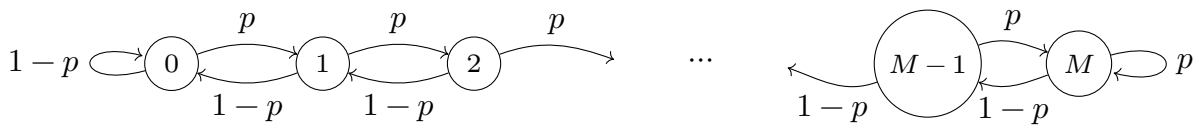
(e) Montrer que $(M_n - X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur l'espace $\mathbb{N}$, et préciser sa matrice de transition.

5. Chaînes de Markov et fonctions harmoniques, I. Soit P une matrice stochastique sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, et $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}$ une fonction. On dit que f est harmonique sur $\mathfrak{X}$ (par rapport à P) si elle vérifie :

$$\forall x \in \mathfrak{X},\ \ f(x) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} P(x,y)\,f(y).$$

On suppose donnée une fonction f harmonique et bornée sur $\mathfrak{X}$. Montrer que si $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$ de matrice de transition P, alors la suite $(\mathbb{E}[f(X_n)])_{n\in\mathbb{N}}$ est constante.

6. Modèle de la ruine du joueur avec $p \neq \frac{1}{2}$. Dans cet exercice, on reprend le modèle de la ruine du joueur : étant fixé un paramètre $p \in (0,1)$ et un entier $M \geq 1$, on considère la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'espace d'états $\mathfrak{X} = [\![0, M]\!]$ et de matrice de transition P dont le graphe $\mathcal{G}_P$ est :



On suppose dans tout ce qui suit $p \neq \frac{1}{2}$, le cas $p = \frac{1}{2}$ ayant été vu dans le cours. On note

$$\tau = \tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = \inf(\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n = 0 \text{ ou } X_n = M\}) \in \mathbb{N} \sqcup \{+\infty\};$$

c'est un temps aléatoire, qu'on peut voir comme une fonction de la trajectoire aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$.

(a) On suppose $X_0 \notin \{0, M\}$. Écrire une équation reliant

$$\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) \quad \text{et} \quad \tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}),$$

et, si les temps $\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}})$ et $\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})$ sont finis, une autre équation reliant

$$X_{\tau((X_n)_{n\in\mathbb{N}})} \quad \text{et} \quad X_{\tau((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}})+1}.$$

(b) Pour $k \in [\![0, M]\!]$, on pose

$$f(k) = \mathbb{P}_k[\tau < +\infty \text{ et } X_\tau = 0];$$
$$g(k) = \mathbb{E}_k[\tau].$$

Calculer $f(0)$, $g(0)$, $f(M)$ et $g(M)$. En utilisant la propriété de Markov, retrouver les relations de récurrence d'ordre 2 vérifiées par f et g :

$$\forall k \in [\![1, M-1]\!], \;\; f(k) = p\, f(k+1) + (1-p)\, f(k-1);$$
$$\forall k \in [\![1, M-1]\!], \;\; g(k) = p\, g(k+1) + (1-p)\, g(k-1) + 1.$$

(c) On pose $\delta_f(k) = f(k+1) - f(k)$, pour $k \in [\![0, M-1]\!]$. Que vaut $\sum_{k=0}^{M-1} \delta_f(k)$? Montrer que $(\delta_f(k))_{k\in[\![0,M-1]\!]}$ est une suite géométrique, et déterminer les valeurs de cette suite. En déduire que

$$f(k) = \frac{\left(\frac{1-p}{p}\right)^k - \left(\frac{1-p}{p}\right)^M}{1 - \left(\frac{1-p}{p}\right)^M} \quad \text{pour tout } k \in [\![0, M]\!].$$

(d) On pose $\delta_g(k) = g(k+1) - g(k) - \frac{1}{1-2p}$, pour $k \in [\![0, M-1]\!]$. Déterminer les valeurs de cette suite, et en déduire que

$$g(k) = \frac{M}{2p-1} \frac{1 - \left(\frac{1-p}{p}\right)^k}{1 - \left(\frac{1-p}{p}\right)^M} - \frac{k}{2p-1} \quad \text{pour tout } k \in [\![0, M]\!].$$

(e) On fait tendre M vers l'infini. Commenter le comportement limite des formules obtenues pour $f(k)$ et $g(k)$, selon que $p < \frac{1}{2}$ ou $p > \frac{1}{2}$.

7. Image d'une chaîne de Markov. Soit $\mathfrak{X}$ et $\mathfrak{Y}$ deux espaces dénombrables, et une matrice stochastique $P = (P(x,y))_{x,y\in\mathfrak{X}}$ sur $\mathfrak{X}$, et $f : \mathfrak{X} \to \mathfrak{Y}$. On fixe une loi initiale π_0 sur $\mathfrak{X}$ et on note $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$ de loi $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$.

(a) Montrer par un contre-exemple simple que $(Y_n = f(X_n))_{n\in\mathbb{N}}$ n'est pas forcément une chaîne de Markov sur $\mathfrak{Y}$ (indication : prendre $\mathfrak{X} = \{1,2,3\}$, $\mathfrak{Y} = \{1,2\}$, P la matrice circulante de taille 3×3, et f une fonction surjective).

(b) Dans la suite de l'exercice, on suppose que la fonction f est surjective, ce qui ne coûte rien quitte à remplacer $\mathfrak{Y}$ par $f(\mathfrak{X})$. On suppose également que la condition suivante est vérifiée : pour tout couple $(y_1, y_2) \in \mathfrak{Y}$, si $f(x) = f(x') = y_1$, alors

$$P(x, f^{-1}(\{y_2\})) = P(x', f^{-1}(\{y_2\})),$$

les deux termes de la formule étant les sommes

$$\sum_{w \,|\, f(w)=y_2} P(x, w) \quad \text{et} \quad \sum_{w \,|\, f(w)=y_2} P(x', w).$$

On note alors cette quantité $Q(y_1, y_2)$. Montrer que, pour toute suite $(y_0, \dots, y_n, y_{n+1})$ d'éléments de $\mathfrak{Y}$, on a

$$\mathbb{P}[Y_0 = y_0, Y_1 = y_1, \cdots, Y_{n+1} = y_{n+1}] = \mathbb{P}[Y_0 = y_0, Y_1 = y_1, \cdots, Y_n = y_n]\, Q(y_n, y_{n+1}).$$

En déduire que $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov de matrice Q sur $\mathfrak{Y}$, et de loi initiale $f_*\pi_0$:

$$(f_*\pi_0)(y) = \pi_0(f^{-1}(\{y\})) = \sum_{w \,|\, f(w)=y} \pi_0(w).$$

(c) Application : on considère la marche aléatoire sur l'hypercube $\mathfrak{X} = \{0,1\}^N$, qui est la chaîne de Markov dont les probabilités de transition $P((x_1, \dots, x_N), (y_1, \dots, y_N)) = P(x, y)$ sont :

$$P(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{N} & \text{si } x \text{ et } y \text{ diffèrent en une seule coordonnée } x_i = 1 - y_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Soit $f : \mathfrak{X} \to [\![0, N]\!]$ la fonction qui à un vecteur $x = (x_1, \dots, x_N)$ associe $f(x) = \sum_{i=1}^N x_i$, qui est le nombre de coordonnées égales à 1 dans x. Si $Y_n = f(X_n)$, montrer que $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $[\![0, N]\!]$, et calculer sa matrice de transition.

La chaîne $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est celle du modèle des urnes d'Ehrenfest ; elle modélise le nombre de particules dans une moitié d'une boîte contenant un gaz avec N particules qui sont libres de s'y déplacer.

8. Transformation $2M-X$. On considère comme dans l'exercice 4. la marche aléatoire simple symétrique $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur $\mathbb{Z}$: $P(x, y) = \frac{1}{2}\, 1_{|x-y|=1}$. On pose $M_n = \max(\{X_k,\ 0 \le k \le n\})$. L'objectif de l'exercice est de montrer que

$$Y_n = 2M_n - X_n$$

est une chaîne de Markov sur $\mathbb{N}$.

(a) Dessiner sur une même figure une trajectoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$, et la trajectoire $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ correspondante. Montrer que $Y_n \ge X_n$ pour tout n, et qu'on a égalité si et seulement si n est un temps où X_n atteint son maximum ($M_n = X_n$).

(b) On réalise $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ comme suite des sommes de pas ξ_n indépendants :

$$X_n = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n$$

avec $\mathbb{P}[\xi_n = 1] = \mathbb{P}[\xi_n = -1] = \frac{1}{2}$. On note $\mathfrak{X} = \{(k, l) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{N} \,|\, k \le l\}$, et $F : \mathfrak{X} \times \{\pm 1\} \to \mathfrak{X}$ la fonction définie comme suit :

$$F(k, l, \xi) = \begin{cases} (k + \xi, l - \xi) & \text{si } k < l, \\ (k + \xi, l + 1) & \text{si } k = l. \end{cases}$$

Montrer que $(X_{n+1}, Y_{n+1}) = F(X_n, Y_n, \xi_{n+1})$ pour tout $n \in \mathbb{N}$. En déduire que la suite de couples $(X_n, Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$, et donner sa matrice de transition $P((k_1, l_1), (k_2, l_2))$.

(c) Si $l \in \mathbb{N}$, on notera $I_l = \{-l, -l+2, -l+4, \dots, l-2, l\}$: c'est l'ensemble des $l+1$ entiers relatifs qui sont plus petits en valeur absolue que l, et qui ont même parité que l. Montrer que pour tout n, X_n appartient à l'ensemble I_{Y_n}. Ainsi, $(X_n, Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur l'espace d'états restreint $\mathfrak{X}^* = \bigcup_{l\in\mathbb{N}} I_l \times \{l\}$.

(d) Considérons la fonction $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{N}$ définie par $f(k,l) = l$. Montrer que le critère de l'exercice précédent sur les images de chaînes de Markov ne s'applique pas (la suite de l'exercice va néanmoins établir que $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov).

(e) Soient l, l' deux entiers positifs avec $|l' - l| = 1$, et $k' \in I_{l'}$. Calculer la somme $\sum_{k\in I_l} P((k,l),(k',l'))$, et montrer que le résultat est indépendant de k', l et l' (à condition que $|l'-l| = 1$ et $k' \in I_{l'}$). On séparera les cas $l' = l+1$ et $l' = l-1$.

(f) On fixe une suite $(l_1, l_2, \dots, l_n, l_{n+1})$ d'entiers positifs, avec $|l_i - l_{i-1}| = 1$ pour tout i (et avec pour convention $l_0 = 0$). En utilisant le fait que $(X_n, Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov, montrer que

$$\mathbb{P}[Y_{n+1} = l_{n+1} \,|\, Y_1 = l_1, \dots, Y_n = l_n] = \sum_{\substack{k_n \in I_{l_n} \\ k_{n+1} \in I_{l_{n+1}}}} p_{l_1,l_2,\dots,l_n}(k_n)\, P((k_n,l_n),(k_{n+1},l_{n+1}))$$

avec $p_{l_1,l_2,\dots,l_n}(k_n) = \mathbb{P}[X_n = k_n \,|\, Y_1 = l_1, \dots, Y_n = l_n]$. On pourra décomposer la probabilité à gauche en fonction des valeurs de $X_1, \dots, X_n, X_{n+1}$.

(g) Montrer par récurrence sur n l'identité suivante : $p_{l_1,l_2,\dots,l_n}(k_n) = \frac{1}{l_n+1}$ pour tout $k_n \in I_{l_n}$. On pourra décomposer une probabilité $p_{l_1,l_2,\dots,l_{n+1}}(k_{n+1})$ en fonction de la valeur $X_n = k_n$. Ainsi, conditionnellement à la trajectoire $(Y_1 = l_1, \dots, Y_n = l_n)$, X_n est distribué uniformément sur l'ensemble d'entiers I_{l_n}.

(h) En combinant les deux questions précédentes, montrer que $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathbb{N}$, et donner sa matrice de transition Q.

Le fait que les transformations $M - X$ et $2M - X$ appliquées à une marche aléatoire symétrique simple donnent des chaînes de Markov est un petit miracle : il n'y a pas d'autre transformation affine $\lambda M - X$ avec cette propriété.

9. Marche aléatoire sur le cercle et dernier site occupé. Soit N un entier plus grand que 2. On considère la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'espace d'états $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z} = \{0, 1, \dots, N-1\}$ et de matrice de transition

$$P(k, k+1) = P(k, k-1) = \frac{1}{2},$$

étant entendu que $0 = N$ dans $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$. C'est la marche aléatoire sur le graphe qui est un cercle avec N points. Pour tout état $x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, on note $\tau_x = \inf\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n = x\}$ le temps d'atteinte de l'état x par la chaîne. On admettra que tous ces temps sont finis presque sûrement (l'explication de ce fait sera donnée dans le chapitre suivant).

(a) On note Y le dernier état visité par $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$: $\{Y = y\}$ si et seulement si $\tau_y = \max_{1\le x\le N} \tau_x$. Expliquer pourquoi

$$\{Y = y\} = \{\tau_{y+1} < \tau_{y-1} < \tau_y\} \sqcup \{\tau_{y-1} < \tau_{y+1} < \tau_y\}.$$

(b) Fixons $y \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, et notons $f(k) = \mathbb{P}_k[\tau_{y+1} < \tau_y]$. En utilisant la méthode d'un pas en avant (propriété de Markov), écrire une équation de récurrence vérifiée par f. Que

valent $f(y)$ et $f(y+1)$? Montrer que

$$f(y-1) = \mathbb{P}_{y-1}[\tau_{y+1} < \tau_y] = \frac{1}{N-1}.$$

(c) Jusqu'à la fin de l'exercice, on fixe deux états $x \neq y \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$. Pour $t \geq 0$, montrer que

$$\mathbb{P}_x[\tau_{y-1} = t,\, \tau_{y-1} < \tau_{y+1} < \tau_y] = \mathbb{P}_x[\tau_{y-1} = t,\, \tau_{y-1} < \tau_{y+1}]\, \mathbb{P}_{y-1}[\tau_{y+1} < \tau_y].$$

On pourra décomposer l'événement de la probabilité à gauche en l'union des trajectoires

$$\{X_0 = x, X_1 = x_1, \dots, X_t = x_t = y-1, \dots, X_u = x_u = y+1, \dots, X_v = x_v = y\}$$

avec $t < u < v$, $x_i \notin \{y-1, y+1\}$ pour $i \in [\![1, t-1]\!]$, $x_i \notin \{y+1, y\}$ pour $i \in [\![t+1, u-1]\!]$ et $x_i \neq y$ pour $i \in [\![u+1, v-1]\!]$. En déduire que

$$\mathbb{P}_x[\tau_{y-1} < \tau_{y+1} < \tau_y] = \frac{1}{N-1}\, \mathbb{P}_x[\tau_{y-1} < \tau_{y+1}].$$

(d) Montrer que sous $\mathbb{P}_x$, la variable aléatoire Y suit une loi uniforme sur $(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}) \setminus \{x\}$. Commenter ce résultat.

2. Récurrence et transience

Dans ce chapitre, on fixe un espace d'états $\mathfrak{X}$ fini ou dénombrable et une matrice stochastique P sur cet espace. Étant donnée une chaîne de Markov avec cette matrice de transition, on souhaite répondre de façon générale aux questions suivantes :

- Si $x \in \mathfrak{X}$ est un état fixé, combien de fois la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ visite-t-elle l'état x ? En particulier, ce nombre de visites est-il fini ou infini ?
- Quel est l'ensemble des états visités par la chaîne de Markov ? Est-ce un ensemble aléatoire ?

La réponse à ces questions dépend bien sûr du triplet $(\mathfrak{X}, P, \pi_0)$, π_0 étant la loi initiale de la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$. À la fin du chapitre, nous pourrons décrire l'aspect général d'une trajectoire d'une chaîne de Markov vis-à-vis des questions posées ci-dessus : la solution de ce problème implique la classification des états $x \in \mathfrak{X}$ en deux sous-classes constituées respectivement des états *récurrents* et des états *transients* (ou *transitoires*) de la chaîne.

1. Nombre de visites d'un état.

Si $x \in \mathfrak{X}$, on note :

$$\begin{aligned} V_x &= \text{nombre de visites de } x \text{ à partir du temps } n = 1, \\ &= \mathrm{card}(\{n \geq 1 \,|\, X_n = x\}). \end{aligned}$$

C'est un nombre aléatoire, *a priori* à valeurs dans $\mathbb{N} \sqcup \{+\infty\}$. Pour étudier la distribution de V_x, il est utile d'introduire également le *temps de retour* en x :

$$\tau_x^+ = \inf(\{n \geq 1 \,|\, X_n = x\}),$$

avec par convention $\tau_x^+ = +\infty$ si l'ensemble considéré est vide. Notons que si $X_0 \neq x$, alors τ_x^+ est simplement le temps d'atteinte τ_x de l'état x par la chaîne ; en revanche, $\tau_x^+ \neq \tau_x$ si $X_0 = x$.

Théorème 2.1 (Loi du nombre de visites). *Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, et $x \in \mathfrak{X}$ un état fixé.*

(1) Si $\mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty] = 1$, alors sous la loi $\mathbb{P}_x$, $V_x = +\infty$ presque sûrement.

(2) Si $\mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty] = 1 - p < 1$, alors sous la loi $\mathbb{P}_x$, V_x suit une loi géométrique de paramètre p :

$$\forall k \geq 0, \;\; \mathbb{P}_x[V_x = k] = (1-p)^k\, p.$$

Lemme 2.2 (Propriété de Markov forte). *Pour tout $m \geq 1$, conditionnellement à l'événement $\{\tau_x^+ = m\}$, la chaîne décalée en temps $(X_{n+m})_{n\in\mathbb{N}}$ est encore une chaîne de Markov de loi $\mathbb{P}_x$ (quelque soit la loi initiale π_0 de la chaîne de Markov).*

Démonstration. C'est le cas particulier de la propriété de Markov forte que nous évoquions à la fin du précédent chapitre. Il faut montrer que pour tout événement $A \in \mathcal{F}$, on

a

$$\mathbb{P}_{\pi_0}[(X_{n+m})_{n\in\mathbb{N}} \in A \,|\, \tau_x^+ = m] = \mathbb{P}_x[(X_n)_{n\in\mathbb{N}} \in A].$$

Il suffit de le démontrer sur les événements cylindriques $A = \{X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N\}$. Par ailleurs, l'événement $\{\tau_x^+ = m\}$ se décompose comme suit :

$$\{\tau_x^+ = m\} = \bigsqcup_{(y_0,\dots,y_{m-1})\in(\mathfrak{X}\setminus\{x\})^m} \{X_0 = y_0, \dots, X_{m-1} = y_{m-1}, X_m = x\}.$$

C'est maintenant une simple application de la définition des chaînes de Markov :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}_{\pi_0}[X_m = x_0, X_{m+1} = x_1, \dots, X_{m+N} = x_N \,|\, \tau_x^+ = m] \\
&= \frac{\sum_{y_0,\dots,y_{m-1}\neq x} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_0 = y_0, \dots, X_{m-1} = y_{m-1}, X_m = x, X_m = x_0, \dots, X_{m+N} = x_N]}{\sum_{y_0,\dots,y_{m-1}\neq x} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_0 = y_0, \dots, X_{m-1} = y_{m-1}, X_m = x]} \\
&= \delta_x(x_0)\, \frac{\sum_{y_0,\dots,y_{m-1}\neq x} \pi_0(y_0)\, P(y_0, y_1) \cdots P(y_{m-1}, x)\, P(x_0, x_1) \cdots P(x_{N-1}, x_N)}{\sum_{y_0,\dots,y_{m-1}\neq x} \pi_0(y_0)\, P(y_0, y_1) \cdots P(y_{m-1}, x)} \\
&= \delta_x(x_0)\, P(x_0, x_1) \cdots P(x_{N-1}, x_N),
\end{aligned}$$

et on reconnaît la probabilité d'un cylindre à horizon N sous la loi $\mathbb{P}_x$. □

Preuve du Théorème 2.1. Montrons qu'on a la relation :

$$\mathbb{P}_x[V_x \geq k+1] = \mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty]\, \mathbb{P}_x[V_x \geq k].$$

Notons que si $V_x \geq k+1$ avec k entier positif, alors $V_x \geq 1$, donc la chaîne retourne au moins une fois en x après le temps $n \geq 1$, et $\tau_x^+ < +\infty$. Par conséquent,

$$\mathbb{P}_x[V_x \geq k+1] = \mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty \text{ et } V_x \geq k+1] = \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_x^+ = m \text{ et } V_x \geq k+1].$$

Dans ce qui suit, on va manipuler des trajectoires décalées en temps ; pour ôter toute ambiguïté, on considérera le nombre de visites V_x comme une fonction de la trajectoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$, et on notera $V_x((X_n)_{n\in\mathbb{N}})$. Pour calculer chaque terme de la série de probabilités, on écrit :

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_x[\tau_x^+ = m \text{ et } V_x \geq k+1] &= \mathbb{P}_x[\tau_x^+ = m]\, \mathbb{P}_x[V_x((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) \geq k+1 \,|\, \tau_x^+ = m] \\
&= \mathbb{P}_x[\tau_x^+ = m]\, \mathbb{P}_x[V_x((X_{n+m})_{n\in\mathbb{N}}) + 1 \geq k+1 \,|\, \tau_x^+ = m] \\
&= \mathbb{P}_x[\tau_x^+ = m]\, \mathbb{P}_x[V_x((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) \geq k].
\end{aligned}$$

On a utilisé le Lemme 2.2 à la dernière ligne, et à la ligne précédente, l'observation évidente suivante : si $\tau_x^+ = m$, alors le nombre total de visites de x par la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est égal à 1 plus le nombre de visites de x après le temps m, c'est-à-dire $V_x((X_{n+m})_{n\in\mathbb{N}})$. En resommant sur m, on obtient donc bien :

$$\mathbb{P}_x[V_x \geq k+1] = \left(\sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_x^+ = m]\right) \mathbb{P}_x[V_x \geq k] = \mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty]\, \mathbb{P}_x[V_x \geq k].$$

Notons par ailleurs que $V_x \geq 1$ si et seulement si $\tau_x^+ < +\infty$. Par conséquent, la formule ci-dessus implique par récurrence :

$$\forall k \geq 0,\ \ \mathbb{P}_x[V_x \geq k] = \left(\mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty]\right)^k.$$

On peut alors distinguer les deux cas de la proposition. Si la probabilité $1-p = \mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty]$ vaut 1, alors $V_x \geq k$ avec probabilité 1 pour tout entier k, donc

$$\mathbb{P}_x[V_x = +\infty] = \lim_{k\to+\infty} \mathbb{P}_x[V_x \geq k] = 1.$$

Sinon, $\mathbb{P}_x[V_x \geq k] = (1-p)^k$ pour tout $k \geq 0$ avec $p > 0$, donc

$$\mathbb{P}_x[V_x = k] = \mathbb{P}_x[V_x \geq k] - \mathbb{P}_x[V_x \geq k+1] = (1-p)^k - (1-p)^{k+1} = (1-p)^k\, p,$$

et on reconnaît une loi géométrique. □

2. Classification des états.

Le Théorème 2.1 mène à la définition suivante :

Définition 2.3 (États récurrents et états transients). *Si $x \in \mathfrak{X}$ vérifie $\mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty] = 1$, on dit que x est un état récurrent (sous entendu, pour la matrice stochastique P fixée sur l'espace $\mathfrak{X}$). Dans ce cas, sous $\mathbb{P}_x$, $V_x = +\infty$ presque sûrement. Dans le cas contraire $\mathbb{P}_x[\tau_x^+ < +\infty] < 1$, on dit que x est un état transient, et alors $V_x < +\infty$ presque sûrement sous $\mathbb{P}_x$.*

Si on se donne une matrice stochastique P sur un espace d'états, il n'est pas évident de calculer à partir de P la distribution de τ_x^+ (l'un des cas les plus simples est celui de la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$, et même ce cas est difficile, car la loi de τ_x^+ met dans ce cas en jeu les nombres de Catalan). Par contre, il y a un critère numérique très simple pour savoir si un état x est récurrent ou transient.

Proposition 2.4 (Critère de récurrence). *Un état $x \in \mathfrak{X}$ est récurrent si et seulement si*

$$\sum_{n=1}^{\infty} P^n(x,x) = +\infty,$$

les P^n étant les puissances de la matrice de transition P de la chaîne de Markov.

Démonstration. Comme cas particulier de la Proposition 1.6, on voit que $\mathbb{P}_x[X_n = x] = P^n(x,x) = \mathbb{E}_x[1_{(X_n=x)}]$, où $1_{(X_n=x)}$ est la fonction qui vaut 1 si $X_n = x$, et qui vaut 0 sinon. Par ailleurs, le nombre total de visites de x peut s'écrire :

$$V_x = \sum_{n=1}^{\infty} 1_{(X_n=x)}.$$

Donc, en prenant les espérances, on en déduit que $\mathbb{E}_x[V_x] = \sum_{n=1}^{\infty} P^n(x,x)$. Distinguons alors deux cas :

- Si x est récurrent, alors $V_x = +\infty$ presque sûrement, donc $\mathbb{E}_x[V_x] = +\infty$.
- Si x est transient, alors d'après le Théorème 2.1, V_x suit sous $\mathbb{P}_x$ une loi géométrique de paramètre $p = \mathbb{P}[\tau_x^+ = +\infty]$, donc

$$\mathbb{E}_x[V_x] = \sum_{k=0}^{\infty} k\,(1-p)^k\,p = (1-p)\,p\,\left(\left(\sum_{k=0}^{\infty} x^k\right)'\right)_{|x=1-p}$$
$$= (1-p)\,p\,\left(\frac{1}{(1-x)^2}\right)_{|x=1-p} = \frac{1-p}{p}$$

est une quantité finie. □

Exemple 2.5 (Transience de la marche aléatoire de paramètre $p \neq \frac{1}{2}$). Considérons la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$ de paramètre $p \neq \frac{1}{2}$ (le cas symétrique $p = \frac{1}{2}$ sera traité dans les exercices). Tout état $x \in \mathbb{Z}$ est transient pour cette marche. En effet, $P^n(x,x) = 0$ si n est impair, car la marche change de parité à chaque pas : elle ne peut donc revenir en un point de départ x qu'en un nombre pair d'étapes. Par ailleurs, si $x_0 = x_{2n} = x$, alors

$$P^{2n}(x,x) = \sum_{\substack{x_1,\dots,x_{2n-1} \\ \forall i,\ x_i - x_{i-1} \in \{\pm 1\}}} p^{\text{nombre de pas positifs}}\,(1-p)^{\text{nombre de pas négatifs}} \leq 2^{2n} p^n (1-p)^n.$$

En effet, tout chemin admissible a autant de pas $+1$ que de pas -1 ; et le nombre de chemins $x_0 \to x_1 \to \cdots \to x_{2n}$ avec $x_0 = x_{2n} = x$ est plus petit que 2^{2n}. On a donc :

$$\sum_{n=1}^{\infty} P^n(x,x) \leq \sum_{n=1}^{\infty} (4p(1-p))^n < +\infty,$$

car si $p \neq \frac{1}{2}$, alors $4p(1-p) < 1$. Le critère de récurrence numérique permet de conclure.

La discussion précédente a permis de comprendre le comportement d'une trajectoire de chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ vis-à-vis de son point de départ x : soit la chaîne retourne en ce point une infinité de fois presque sûrement, soit elle visite ce point de départ un nombre fini de fois donné par une loi géométrique. Mais qu'en est-il des autres états visités par $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$? La notion d'*états communicants* va permettre de clarifier la situation.

Définition 2.6 (États communicants). *Soit P une matrice stochastique sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. On dit que x communique avec y (notation : $x \rightsquigarrow y$) s'il existe une suite d'états $x = x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n\geq 1} = y$ telle que $P(x_i, x_{i+1}) > 0$ pour tout $i \in [\![0, n-1]\!]$.*

Ainsi, $x \rightsquigarrow y$ si l'on peut suivre une suite d'arêtes dirigées dans le graphe $\mathcal{G}_P$ allant de x à y. Cette interprétation implique le fait évident suivant : si $x \rightsquigarrow y$ et $y \rightsquigarrow z$, alors $x \rightsquigarrow z$ (la relation de communication est transitive). Par ailleurs,

$$x \rightsquigarrow y \iff \exists n \geq 1,\ P^n(x,y) > 0.$$

En effet, $P^n(x,y) = \sum_{x_1,x_2,\dots,x_{n-1}} P(x,x_1)\,P(x_1,x_2)\cdots P(x_{n-1},x_n)$, donc $P^n(x,y) > 0$ si et seulement si l'un des termes de la somme est strictement positif, ce qui correspond à un chemin de longueur n reliant x à y.

Théorème 2.7 (Communication et récurrence). *Soit x un état récurrent, et $y \neq x$. Si $x \rightsquigarrow y$, alors y est récurrent, et $y \rightsquigarrow x$. Ainsi, la restriction de la relation $\rightsquigarrow$ à l'ensemble $\mathfrak{R} \subset \mathfrak{X}$ des états récurrents est une relation d'équivalence.*

Lemme 2.8. *Soit x un état récurrent d'une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Sous la loi $\mathbb{P}_x$, les deux suites aléatoires*

$$(X_0, X_1, \dots, X_{\tau_x^+ - 1}) \quad \text{et} \quad (X_{n+\tau_x^+})_{n\in\mathbb{N}}$$

sont indépendantes, la seconde suite étant une chaîne de Markov de loi $\mathbb{P}_x$.

Démonstration. C'est une variante du Lemme 2.2. Comme x est récurrent, τ_x^+ est fini avec probabilité 1. Par ailleurs, $(X_0, X_1, \dots, X_{\tau_x^+ - 1})$ est un élément aléatoire de $\bigsqcup_{m\geq 1} \mathfrak{X}^m$; c'est l'*excursion* que fait la chaîne de Markov avant son premier retour en x. Notons alors que, pour tout $m \geq 1$ et tous éléments

$$x_1 \neq x, \dots, x_{m-1} \neq x,\ y_0, y_1, \dots, y_N,$$

on a

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}_x[(X_0, X_1, \dots, X_{\tau_x^+ - 1}) = (x, x_1, \dots, x_{m-1}) \text{ et } (X_{\tau_x^+}, X_{\tau_x^+ + 1}, \dots, X_{\tau_x^+ + N}) = (y_0, y_1, \dots, y_N)] \\
&= P(x,x_1)\,P(x_1,x_2)\cdots P(x_{m-1},x)\,\delta_x(y_0)\,P(y_0,y_1)\cdots P(y_{N-1},y_N) \\
&= \mathbb{P}_x[\text{l'excursion avant le retour en } x \text{ est } (x, x_1, \dots, x_{m-1})]\ \mathbb{P}_x[(X_0, \dots, X_N) = (y_0, \dots, y_N)].
\end{aligned}$$

C'est ce que l'on voulait démontrer. □

LEMME 2.9 (Borel–Cantelli). *Soit $(A_k)_{k\geq 1}$ une suite d'événements. On note E l'événement :*

$$E = \bigcap_{n\geq 1}\left(\bigcup_{k\geq n} A_k\right) = (\textit{une infinité d'événements } A_k \textit{ se réalisent}).$$

(1) Si $\sum_{k=1}^{\infty}\mathbb{P}[A_k] < +\infty$, alors $\mathbb{P}[E] = 0$.

(2) Si les événements A_k sont indépendants et si $\sum_{k=1}^{\infty}\mathbb{P}[A_k] = +\infty$, alors $\mathbb{P}[E] = 1$.

(3) En particulier, si les événements A_k sont indépendants et tous de même probabilité $p > 0$, alors $\mathbb{P}[E] = 1$.

DÉMONSTRATION. Pour la première partie, fixons $\varepsilon > 0$, et un entier n tel que le reste de la série soit plus petit que ε :

$$\sum_{k\geq n}\mathbb{P}[A_k] \leq \varepsilon.$$

Alors, a fortiori, $\mathbb{P}[E] \leq \mathbb{P}[\bigcup_{k\geq n} A_k] \leq \sum_{k\geq n}\mathbb{P}[A_k] \leq \varepsilon$. Comme c'est vrai pour tout $\varepsilon > 0$, $\mathbb{P}[E] = 0$. Examinons maintenant la deuxième partie. Remarquons que si F est l'événement complémentaire de E, alors

$$\mathbb{P}[F] = \mathbb{P}\left[\bigcup_{n\geq 1}\left(\bigcap_{k\geq n}\overline{A_k}\right)\right] = \lim_{n\to\infty}\left(\prod_{k\geq n} 1-\mathbb{P}[A_k]\right)$$

en utilisant l'indépendance des événements A_k (et donc de leurs complémentaires $\overline{A_k}$). Or, si n est fixé, alors

$$\prod_{k\geq n} 1-\mathbb{P}[A_k] \leq \prod_{k\geq n}\exp(-\mathbb{P}[A_k]) = \exp\left(-\sum_{k\geq n}\mathbb{P}[A_k]\right) = \exp(-\infty) = 0,$$

donc $\mathbb{P}[F] = 0$ et $\mathbb{P}[E] = 1$. Enfin, la troisième partie du lemme est une conséquence immédiate de la seconde, car $\sum_{k=1}^{\infty} p = +\infty$. □

REMARQUE 2.10. Dans le cas d'événements indépendants et tous de même probabilité, le Lemme 2.9 dit que dans une suite d'expériences de Bernoulli indépendantes de probabilité $p > 0$, il y a toujours un premier succès (dont le numéro suit une loi géométrique de paramètre p), puis un second succès, etc. et ainsi une infinité de succès presque sûrement. Ce cas très simple est le plus utile.

PREUVE DU THÉORÈME 2.7. Considérons la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sous la loi $\mathbb{P}_x$. On définit par récurrence les *temps de passage* en x :

$$\begin{aligned}\tau_x^{(0)}\left((X_n)_{n\in\mathbb{N}}\right) &= 0\\ \tau_x^{(k\geq 1)}\left((X_n)_{n\in\mathbb{N}}\right) &= \tau_x^{(k-1)}\left((X_n)_{n\in\mathbb{N}}\right) + \tau_x^{+}\left((X_{n+\tau_x^{(k-1)}})_{n\in\mathbb{N}}\right).\end{aligned}$$

Le temps aléatoire $\tau_x^{(k)}$ est le temps du k-ième retour de la chaîne au point de départ x. Comme x est récurrent, tous les temps $\tau_x^{(k)}$ sont finis avec probabilité 1 sous la loi $\mathbb{P}_x$. En appliquant de façon répétée le Lemme 2.8, on voit que les excursions

$$\varepsilon_{x,k\geq 1} = (X_{\tau_x^{(k-1)}}, X_{\tau_x^{(k-1)}+1}, \dots, X_{\tau_x^{(k)}-1})$$

sont indépendantes les unes des autres. En effet, le Lemme 2.8 dit que la première excursion $\varepsilon_{x,1}$ est indépendante du reste de la chaîne de Markov $(X_{n+\tau_x^{(1)}})_{n\in\mathbb{N}}$, qui n'est rien d'autre que la succession des excursions $\varepsilon_{x,2}, \varepsilon_{x,3}, \dots$ Ainsi, $\varepsilon_{x,1}$ est indépendante des autres excursions, et comme $(X_{n+\tau_x^{(1)}})_{n\in\mathbb{N}}$ suit de nouveau la loi $\mathbb{P}_x$, on peut répéter l'argument pour montrer que

$\varepsilon_{x,2}$ est indépendante de $\varepsilon_{x,3}, \varepsilon_{x,4}, \dots$; par récurrence, on obtient l'indépendance de toutes les excursions. De plus, toutes ces excursions ont la même loi :

$$\mathbb{P}[\varepsilon_{x,k} = (x, x_1, \dots, x_{m-1})] = P(x, x_1)\, P(x_1, x_2) \cdots P(x_{m-1}, x)$$

pour tout $m \geq 1$ et tous $x_1, \dots, x_{m-1} \neq x$.

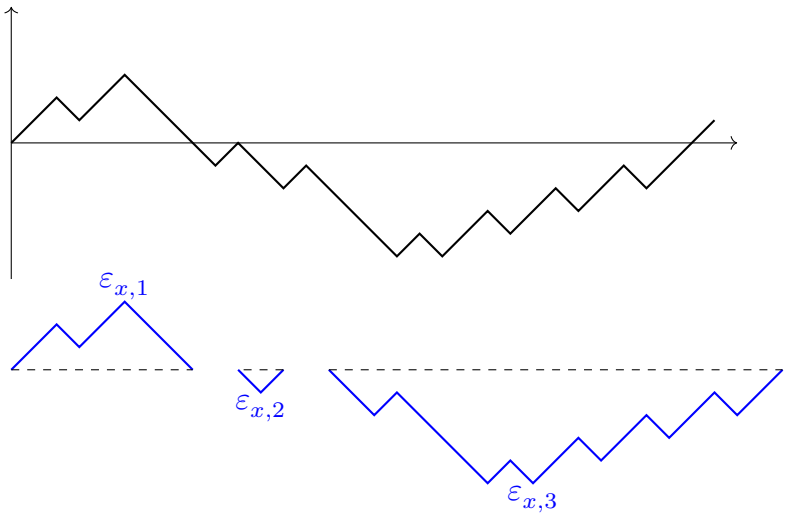


FIG. 2.1. Les excursions $\varepsilon_{x,1}, \varepsilon_{x,2}, \dots$ sont des suites d'éléments de $\mathfrak{X}$ de longueurs aléatoires ; sous la loi $\mathbb{P}_x$, elles sont indépendantes et de même loi (ici, on a représenté des excursions issues de $x = 0$ pour la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$).

Supposons que $x \rightsquigarrow y$. Alors, comme la probabilité que y soit visité par la chaîne partant de x est strictement positive par hypothèse, on a

$$1 > \mathbb{P}_x[y \text{ n'est pas visité par } (X_n)_{n\in\mathbb{N}}] = \mathbb{P}\left[\bigcap_{k\geq 1} \{y \notin \varepsilon_{x,k}\}\right].$$

Ceci implique qu'au moins une des excursions $\varepsilon_{x,k}$ vérifie $\mathbb{P}[y \notin \varepsilon_{x,k}] < 1$, et comme toutes les excursions ont la même loi, on en déduit par passage au complémentaire que

$$\mathbb{P}_x[y \in \varepsilon_{x,k}] = p > 0$$

avec une constante p indépendante de k. Alors, par le lemme de Borel–Cantelli 2.9, avec probabilité égale à 1, une infinité d'excursions $\varepsilon_{x,k}$ contient y, donc

$$(x \text{ récurrent et } x \rightsquigarrow y) \Rightarrow (\mathbb{P}_x[V_y = +\infty] = 1).$$

On peut maintenant facilement conclure. Comme

$$0 < \mathbb{P}_x[y \in \varepsilon_{x,k}] = \sum_{m\geq 1} \sum_{\substack{(x_1,\dots,x_{m-1})\in(\mathfrak{X}\setminus\{x\})^{m-1} \\ \text{au moins l'un des } x_i \text{ est égal à } y}} P(x, x_1)\, P(x_1, x_2) \cdots P(x_{m-1}, x),$$

on voit qu'il existe au moins un chemin $x \to x_1 \to \cdots \to y \to \cdots \to x_{m-1} \to x$ avec des probabilités de transition positives ; par conséquent, $y \rightsquigarrow x$. Par ailleurs, le Lemme 2.2 implique que

$$\mathbb{P}_x[V_y = +\infty] = \mathbb{P}_x[\tau_y^+ < +\infty]\, \mathbb{P}_y[V_y = +\infty].$$

En effet, on applique le Lemme 2.2 avec le temps d'atteinte τ_y^+ et la loi initiale $\pi_0 = \delta_x$. Si $V_y = +\infty$, alors bien sûr le temps d'atteinte de y est fini, donc

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_x[V_y((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = +\infty] &= \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_y^+ = m \text{ et } V_y((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = +\infty] \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_y^+ = m \text{ et } V_y((X_{n+m})_{n\in\mathbb{N}}) = +\infty] \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_y^+ = m]\, \mathbb{P}_x[V_y((X_{n+m})_{n\in\mathbb{N}}) = +\infty \,|\, \tau_y^+ = m] \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_y^+ = m]\, \mathbb{P}_y[V_y((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = +\infty] \\
&= \mathbb{P}_x[\tau_y^+ < \infty]\, \mathbb{P}_y[V_y((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = +\infty].
\end{aligned}$$

On a vu que le terme de gauche de cette identité valait 1 ; par conséquent, les deux probabilités à droite valent aussi 1, et $\mathbb{P}_y[V_y = +\infty] = 1$; y est donc récurrent. □

Notons $\mathfrak{R}$ et $\mathfrak{T}$ les deux parties (éventuellement vides) de $\mathfrak{X}$ constituées respectivement de l'ensemble des états récurrents et de l'ensemble des états transients ; $\mathfrak{X} = \mathfrak{R} \sqcup \mathfrak{T}$. Par le Théorème 2.7, on peut scinder $\mathfrak{R}$ en une union disjointe de classes d'équivalence pour la relation de communication :

$$\mathfrak{R} = \bigsqcup_{i\in I} \mathfrak{R}_i,$$

où les $\mathfrak{R}_i$ sont des parties non vides, et où si x est un état récurrent dans une classe $\mathfrak{R}_i$, alors $\mathfrak{R}_i = \{y \in \mathfrak{X} \,|\, x \rightsquigarrow y\}$. Nous sommes maintenant en mesure de décrire qualitativement une trajectoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de la chaîne de Markov sous une loi $\mathbb{P}_x$, avec x dans une *classe de récurrence* $\mathfrak{R}_i$, ou dans l'ensemble des états transients $\mathfrak{T}$.

Théorème 2.11 (Classification des états). *Soit $\mathfrak{X} = \mathfrak{T} \sqcup \bigsqcup_{i\in I} \mathfrak{R}_i$ un espace d'états scindé en l'ensemble des états transients et les classes de récurrence vis-à-vis d'une certaine matrice stochastique P fixée. On considère la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de matrice de transition P et de loi initiale δ_x, avec $x \in \mathfrak{X}$.*

(1) Supposons x récurrent, tombant dans une certaine classe $\mathfrak{R}_i$. Alors, avec probabilité 1, l'ensemble des états visités par $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est

$$\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\} = \mathfrak{R}_i,$$

et de plus, tous les états de la classe $\mathfrak{R}_i$ sont visités une infinité de fois. La chaîne de Markov parcourt donc la classe de récurrence $\mathfrak{R}_i$ en retournant dans chaque état de cette classe infiniment souvent.

(2) Supposons x transient. Alors :

- *soit $\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\} \subset \mathfrak{T}$, auquel cas les états transients visités par la chaîne le sont chacun un nombre fini de fois (ceci n'est donc possible que si $\mathfrak{T}$ est infini).*
- *soit $\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}$ intersecte une classe de récurrence $\mathfrak{R}_i$ (l'indice i étant lui-même aléatoire). Alors, à partir du temps d'atteinte $\tau_{\mathfrak{R}_i} = \inf(\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n \in \mathfrak{R}_i\})$, la chaîne commence à explorer la classe de récurrence $\mathfrak{R}_i$ comme indiqué dans le premier point.*

Les deux possibilités ci-dessus du cas transient peuvent avoir une probabilité positive ou nulle sous $\mathbb{P}_x$ (cela dépend de la matrice P).

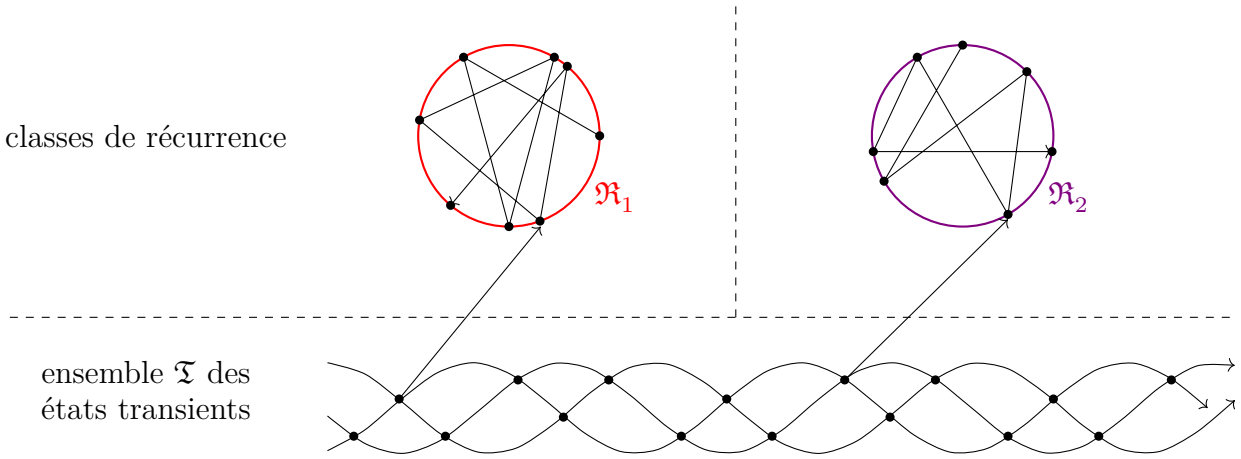


FIG. 2.2. Représentation qualitative des trajectoires d'une chaîne de Markov : la chaîne explore infiniment les classes de récurrence (sans en sortir), et si elle part d'un état transient, elle fuit les états transients, en tombant éventuellement dans une classe de récurrence qu'elle explore alors infiniment.

DÉMONSTRATION. Si x est récurrent dans une classe $\mathfrak{R}_i$, alors on a vu dans la preuve du Théorème 2.7 que $\mathbb{P}_x[V_y = +\infty] = 1$ pour tout $y \in \mathfrak{R}_i$. Comme $\mathfrak{R}_i \subset \mathfrak{X}$ est dénombrable, on a donc par intersection dénombrable

$$\mathbb{P}_x[\forall y \in \mathfrak{R}_i,\ V_y = +\infty] = 1.$$

Par ailleurs, si $y \notin \mathfrak{R}_i$, alors il n'y a pas de chemin possible de x à y, donc $V_y = 0$ presque sûrement sour $\mathbb{P}_x$. L'ensemble des états visités par $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est donc exactement $\mathfrak{R}_i$.

La deuxième partie de la proposition est essentiellement une application du Lemme 2.2 : si l'on part d'un état transient x et si l'on atteint un état récurrent y, alors à partir du moment τ_y^+ où l'on atteint y, la chaîne décalée en temps $(X_{n+\tau_y^+})_{n\in\mathbb{N}}$ se comporte comme une chaîne de loi $\mathbb{P}_y$, et on peut alors utiliser les arguments du cas d'un point de départ récurrent. Par ailleurs, jusqu'à ce qu'on atteigne un état récurrent (ce qui peut ne jamais arriver), on peut visiter des états transients, mais chaque état transient ne peut être visité qu'un nombre fini de fois (avec probabilité 1). En effet, un état y est par définition transient si $\mathbb{P}_y[V_y < +\infty] = 1$, mais dans ce cas on a plus généralement $\mathbb{P}_x[V_y < +\infty] = 1$ pour tout autre état x. En effet, on a vu dans la preuve du Théorème 2.7 la formule

$$\mathbb{P}_x[V_y = +\infty] = \mathbb{P}_x[\tau_y^+ < +\infty]\,\mathbb{P}_y[V_y = +\infty].$$

On en déduit que si y est transient, alors $\mathbb{P}_x[V_y = +\infty] = 0$, donc par passage au complémentaire $\mathbb{P}_x[V_y < +\infty] = 1$. Donc, quelque soit l'état de départ x de la chaîne, tout état transient y est visité un nombre fini de fois. □

Pour conclure ce chapitre, examinons deux cas particuliers dans la classification des états d'une chaîne de Markov.

DÉFINITION 2.12 (Chaîne irréductible). *La matrice de transition d'une chaîne de Markov est dite irréductible si, pour tout couple (x, y), $x \rightsquigarrow y$. De façon équivalente, on demande que le graphe orienté $\mathcal{G}_P$ soit connexe, ou que pour tout couple (x, y), il existe $n \geq 1$ tel que la matrice P^n ait son coefficient $P^n(x, y) > 0$.*

Par commodité, on dira souvent que la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est irréductible si sa matrice de transition l'est. Étant donnée une chaîne irréductible, il y a deux possibilités.

- Tous les états sont transients : $\mathfrak{X} = \mathfrak{T}$. On dit alors qu'on a une *chaîne irréductible transiente*.
- Il existe un état récurrent x ; alors, tous les autres états y vérifient $x \rightsquigarrow y$, donc sont eux aussi récurrents par le Théorème 2.7. Ainsi, $\mathfrak{X} = \mathfrak{R}$ et il y a une seule classe de récurrence. On dit alors qu'on a une *chaîne irréductible récurrente*.

La plupart des chaînes de Markov qu'on étudie sont irréductibles, et la plupart des résultats que nous énoncerons dans le prochain chapitre requièrent cette hypothèse.

Un autre cas particulier de la classification des états est celui ou l'espace des états $\mathfrak{X}$ est de cardinalité finie. En effet :

PROPOSITION 2.13 (Chaîne de Markov finie). *Une chaîne de Markov sur un ensemble $\mathfrak{X}$ fini admet au moins un état récurrent. Par conséquent, si elle est irréductible, alors elle est forcément irréductible récurrente.*

DÉMONSTRATION. Numérotons les états $x_1, \dots, x_C$, avec $C = \mathrm{card}(\mathfrak{X}) < +\infty$. Quelque soit la loi initiale de la chaîne de Markov (par exemple δ_{x_1}), on a

$$\sum_{i=1}^{C} V_{x_i} = \sum_{i=1}^{C} \left(\sum_{n=1}^{\infty} 1_{(X_n = x_i)} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{i=1}^{C} 1_{(X_n = x_i)} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} 1 = +\infty.$$

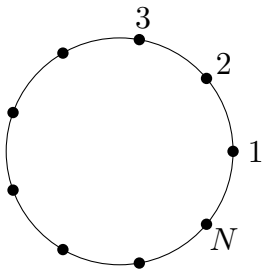
Donc, au moins l'un des nombres de visites V_{x_i} vaut $+\infty$, ce qui implique l'existence d'un indice $i \in [\![1, C]\!]$ tel que $\mathbb{P}_{x_1}[V_{x_i} = +\infty] > 0$.

- Si $i = 1$, alors x_1 est récurrent (une probabilité $\mathbb{P}_x[V_x = +\infty]$ vaut 0 ou 1).
- Sinon, $\mathbb{P}_{x_1}[V_{x_i} = +\infty] = \mathbb{P}_{x_1}[\tau^+_{x_i} < +\infty]\, \mathbb{P}_{x_i}[V_{x_i} = +\infty]$, donc $\mathbb{P}_{x_i}[V_{x_i} = +\infty] > 0$ et vaut forcément 1. Alors, x_i est récurrent. □

EXEMPLE 2.14 (Marche aléatoire sur le cercle). Considérons la marche aléatoire sur le cercle discrétisé $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, avec $N \geq 1$. L'espace des états est $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} = [\![1, N]\!]$, et les probabilités de transition sont

$$P(k, k+1) = P(k, k-1) = \frac{1}{2}$$

pour tout k, étant entendu que $N + 1 = 1$ dans $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$. Autrement dit, on regarde au sens de l'Exemple 1.17 la marche aléatoire sur le graphe suivant :



Cette chaîne est clairement irréductible, et elle est sur un espace fini. C'est donc une chaîne récurrente irréductible, et avec probabilité 1, une trajectoire $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ visite chacune des valeurs $1, 2, \dots, N$ une infinité de fois (ce qui était *a priori* non trivial).

3. Exercices.

Objectifs : savoir classifier les états d'une chaîne finie ; utiliser le critère numérique avec la série $\sum_{n=1}^{\infty} P^n(x,x)$ pour déterminer la récurrence ou transience d'une chaîne irréductible ; déterminer la récurrence ou la transience des états d'une chaîne infinie avec des calculs ad hoc *; utiliser la propriété de Markov simple.*

1. **Classification des états.** On considère la chaîne de Markov sur $\{1,2,3,4,5\}$ de matrice de transition

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.1 & 0.7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0.6 & 0.4 & 0 \end{pmatrix}.$$

Classifier les états de cette chaîne. On demande pour chaque état s'il est transient ou récurrent, et dans ce dernier cas, quelle est sa classe de récurrence. Décrire l'ensemble $\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}$ sous la loi $\mathbb{P}_3$, puis sous la loi $\mathbb{P}_2$.

2. **Récurrence ou transience de la marche aléatoire sur la droite.** Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la marche aléatoire sur la droite $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}$ et de paramètre $p \in (0,1)$; sa matrice de transition est donnée par

$$P(k,k+1) = p \qquad ; \qquad P(k,k-1) = 1-p$$

pour tout $k \in \mathbb{Z}$.

   (a) Montrer que cette chaîne est irréductible.

   (b) Dans ce qui suit, on s'intéresse au caractère récurrent ou transient de la chaîne ; on peut supposer sans perte de généralité que la loi initiale est δ_0. On suppose d'abord $p \neq \frac{1}{2}$. Rappeler la représentation de X_n à l'aide de variables i.i.d. $\xi_{n\geq 1}$ à valeurs dans $\{\pm 1\}$. En utilisant la loi des grands nombres, montrer que la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est transiente.

   (c) On suppose à partir de maintenant $p = \frac{1}{2}$. Montrer que $P^{2n+1}(0,0) = 0$ pour tout n, et que

$$P^{2n}(0,0) = \frac{1}{4^n}\binom{2n}{n} \quad \text{pour tout } n \geq 1.$$

   (d) En remarquant que $\binom{2n}{n} = 4\,\frac{2n-1}{2n}\binom{2(n-1)}{n-1}$, montrer que $P^{2n}(0,0) \geq \frac{1}{2n}$ pour tout $n \geq 1$. En déduire que si $p = \frac{1}{2}$, alors la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est récurrente.

3. **Chaîne de vie et de mort, I.** Soit $(p_k, q_k, r_k)_{k\geq 0}$ une suite de triplets de nombre réels positifs ou nuls, telle que $q_0 = 0$ et $p_k + q_k + r_k = 1$ pour tout $k \in \mathbb{N}$. La chaîne de vie et de mort avec ces paramètres est la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'espace des états $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$, et de probabilités de transition

$$P(k,k+1) = p_k \qquad ; \qquad P(k,k-1) = q_k \qquad ; \qquad P(k,k) = r_k$$

pour tout $k \geq 0$ (on a imposé $q_0 = 0$ pour ne pas avoir de transition possible de 0 vers -1).

   (a) Dessiner le graphe $\mathcal{G}_P$ de la chaîne de vie et de mort. Quels paramètres faut-il choisir pour retrouver le modèle de file d'attente de paramètre $p \in (0,1)$?

(b) Donner une condition nécessaire et suffisante sur la suite de paramètres $(p_k, q_k, r_k)_{k\geq 0}$ pour que la chaîne soit irréductible. Dans tout ce qui suit, on suppose que cette condition est vérifiée.

(c) On définit une fonction $\phi : \mathbb{N} \to \mathbb{R}_+$ par :

$$\phi(k) = \begin{cases} 0 & \text{si } k = 0; \\ \sum_{l=0}^{k-1} \left(\prod_{j=1}^{l} \frac{q_j}{p_j} \right) & \text{si } k \geq 1, \end{cases}$$

le terme $l = 0$ d'une somme étant le produit vide, égal à 1. Soit $k < l$ deux entiers. Montrer que pour tout $x \in [\![k, l]\!]$,

$$\mathbb{P}_x[\tau_k < \tau_l \text{ et } \tau_k < +\infty] = \frac{\phi(l) - \phi(x)}{\phi(l) - \phi(k)}.$$

On pourra utiliser la propriété de Markov simple pour écrire une équation de récurrence vérifiée par la fonction $f(x) = \mathbb{P}_x[\tau_k < \tau_l \text{ et } \tau_k < +\infty]$, puis montrer que la formule ci-dessus est la seule solution. Les calculs pourront être simplifiés par l'introduction de $\delta_f(x) = f(x+1) - f(x)$.

(d) On pose $\phi(\infty) = \lim_{k\to+\infty} \phi(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^{l} \frac{q_j}{p_j} \right)$. Montrer que les conditions suivantes sont équivalentes :

- $\phi(\infty) = +\infty$.
- La chaîne de Markov est irréductible récurrente.

On pourra établir les identités suivantes : $\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = +\infty] = p_0\, \mathbb{P}_1[\tau_0 = +\infty]$, et

$$\mathbb{P}_0[\tau_0^+ < +\infty] \geq \mathbb{P}_1[\tau_0 < +\infty] = \lim_{l\to\infty} \mathbb{P}_1[\tau_0 < \tau_l \text{ et } \tau_0 < +\infty].$$

(e) On suppose que $\phi(\infty) < +\infty$. Montrer que $\lim_{n\to\infty} X_n = +\infty$ avec probabilité 1 sous $\mathbb{P}_k$, pour tout état $k \in \mathbb{N}$.

(f) Application. On suppose que $r_k = 0$ pour tout k, et que $p_k = \frac{1}{2} + \varepsilon_k$, avec $\varepsilon_k \simeq C\, k^{-\alpha}$ lorsque $k \to \infty$, $C > 0$ et $\alpha > 0$ étant deux constantes. Si $\alpha > 1$, montrer que la chaîne est récurrente. Si $\alpha < 1$, montrer que la chaîne est transiente. Enfin, si $\alpha = 1$, discuter de la récurrence ou transience en fonction de la valeur de C.

4. Croissance ou retour en 0, I. On fixe une suite de paramètres $(p_k)_{k\geq 0}$ dans $[0, 1]$, et on considère la chaîne de Markov sur l'espace d'états $\mathbb{N}$, de matrice de transition :

$$P(k, k+1) = p_k \quad ; \quad P(k, 0) = 1 - p_k$$

pour tout $k \geq 0$ (les autres coefficients $P(k, l)$ sont nuls).

(a) Dessiner le graphe de la matrice de transition P. À quelle condition nécessaire et suffisante sur la suite des paramètres $(p_k)_{k\geq 0}$ la chaîne de Markov est-elle irréductible sur $\mathbb{N}$? On fera attention au fait que, en général, on peut redescendre d'un état k à l'état 0 en commençant par monter aux états $k+1, k+2, \ldots, k+l$ puis en descendant à 0 depuis $k+l$. Dans tout ce qui suit, on supposera la condition d'irréductibilité vérifiée.

(b) Pour $k \geq 0$, on note $q_k = \prod_{j=0}^{k-1} p_j = p_0 p_1 \cdots p_{k-1}$, et $r_k = q_k - q_{k+1}$; en particulier, $q_0 = 1$. Que dire de la suite de nombres réels $(q_k)_{k\geq 0}$? Montrer que les conditions suivantes sont équivalentes :

(i) On a $\sum_{k=0}^{\infty} r_k = 1$.

(ii) On a $\lim_{k\to\infty} q_k = 0$

(c) Pour $n \geq 0$, exprimer la probabilité de retour $\mathbb{P}_0[X_n = 0] = P^n(0,0)$ comme une somme de certains produits $r_{n_1} r_{n_2} \cdots r_{n_m}$:

$$P^n(0,0) = \sum_{(n_1,\ldots,n_m)\in I_n} r_{n_1} r_{n_2} \cdots r_{n_m},$$

où I_n est un ensemble de m-uplets d'entiers qu'on demande de déterminer (l'entier m est arbitraire et dans chaque ensemble I_n, il pourra y avoir des 1-uplets, des 2-uplets, des 3-uplets, etc.). On pourra décomposer tout chemin de longueur n reliant 0 à 0 en une concaténation de boucles $0 \to 1 \to 2 \to 3 \to \cdots \to n_i \to 0$.

(d) Relier les deux quantités suivantes :

$$\sum_{n=0}^{\infty} P^n(0,0) \quad \text{et} \quad \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\infty} r_k \right)^m.$$

En déduire que que la chaîne de Markov de matrice P est récurrente si et seulement si $\lim_{k\to+\infty} q_k = 0$.

5. La chaîne de Markov des arbres de Galton–Watson. On considère une famille $(\xi_{n,m})_{n\geq 0,\, m\geq 1}$ de variables indépendantes identiquement distribuées à valeurs dans $\mathbb{N}$, de loi commune μ : pour tout $n \geq 0$, tout $m \geq 1$ et tout $k \in \mathbb{N}$,

$$\mathbb{P}[\xi_{n,m} = k] = \mu(k).$$

Le *modèle de Galton–Watson* associé à la loi de reproduction μ est la suite de variables aléatoires $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ avec X_0 indépendant des variables $\xi_{n,m}$, et

$$X_{n+1} = \sum_{m=1}^{X_n} \xi_{n,m}$$

pour tout $n \geq 0$. On convient que la somme est nulle si $X_n = 0$. Ce modèle correspond à la situation suivante : X_n est le nombre d'individus d'une population au temps n, et chaque individu $m \in [\![1, X_n]\!]$ de la n-ième génération a $\xi_{n,m}$ enfants, ce nombre d'enfants étant aléatoire et indépendant de tout ce qui s'est passé précédemment et de toutes les autres descendances $\xi_{n,m'\neq m}$.

(a) Utiliser un théorème du cours pour montrer que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur l'espace d'états $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$. Montrer que la matrice de transition de cette chaîne est

$$P(k,l) = \sum_{\substack{l_1+l_2+\cdots+l_k=l \\ l_1,l_2,\ldots,l_k\geq 0}} \mu(l_1)\,\mu(l_2)\cdots\mu(l_k) = \mu^{*k}(l),$$

où μ^{*k} désigne la loi de la somme de k variables aléatoires indépendantes de loi μ (convolée k-ième de la loi μ).

(b) Montrer que 0 est un état *absorbant* : $P(0,0) = 1$. La chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est-elle irréductible ?

(c) Dans toute la suite de l'exercice, on suppose que $\mu(0) > 0$, et on se placera sous la loi $\mathbb{P}_1 : X_0 = 1$. Montrer que 0 est le seul état récurrent de la chaîne. En déduire que

$$\mathbb{P}_1\Big[\lim_{n\to\infty} X_n = +\infty\Big] + \mathbb{P}_1\Big[\lim_{n\to\infty} X_n = 0\Big] = 1.$$

(d) On souhaite calculer la *probabilité d'extinction* $p_e = \mathbb{P}_1[\lim_{n\to\infty} X_n = 0]$. Expliquer pourquoi

$$p_e = \lim_{n\to\infty} (\mathbb{P}_1[X_n = 0]) .$$

On pose $G_n(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{P}_1[X_n = k]\, s^k$, qui est une fonction croissante de s définie au moins sur l'intervalle $[0, 1]$. Montrer que $G_1(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \mu(k)\, s^k$, puis, par récurrence sur n :

$$G_n(s) = \underbrace{G_1 \circ G_1 \circ \cdots \circ G_1}_{n \text{ fois}}(s) = (G_1)^{\circ n}(s).$$

Interpréter $G_n(0)$ comme une probabilité. Que vaut p_e par rapport à la suite de fonctions $(G_n)_{n\in\mathbb{N}}$?

(e) On suppose que le nombre moyen de descendants $m = \sum_{k=0}^{\infty} k\, \mu(k)$ est fini. Montrer que $m = (G_1)'(1)$. En déduire qu'il y a dans ce cas équivalence entre :

$$(p_e = 1) \iff (m \leq 1).$$

On conseille de dessiner l'aspect de la fonction $G_1 : [0, 1] \to [0, 1]$ en fonction du paramètre m.

6. Chaînes de Markov et fonctions harmoniques, II. Soit $\mathfrak{X}$ un ensemble fini, et P une matrice de transition irréductible sur cet ensemble. On rappelle qu'une fonction $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}$ est dite harmonique pour P si elle vérifie $Pf = f$. Plus généralement, si $\emptyset \subsetneq A \subsetneq \mathfrak{X}$ est une partie non vide et non pleine et si $g : A \to \mathbb{R}$ est une fonction, le *problème de Dirichlet* est le système d'équations suivant : on cherche $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}$ telle que :

- pour tout $x \in A$, $f(x) = g(x)$.
- en dehors de A, f est harmonique : pour tout $x \notin A$, $f(x) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} P(x, y)\, f(y)$.

(a) On suppose dans cette question que g est la fonction nulle et que f est une solution du problème de Dirichlet. Soit x_0 un point de $\mathfrak{X} \setminus A$ tel que

$$f(x_0) = \max(\{f(x) \,|\, x \in \mathfrak{X} \setminus A\}).$$

Montrer en raisonnant par l'absurde que $f(x_0) \leq 0$. En déduire que $f = 0$.

(b) Montrer que si $A \neq \{\emptyset, \mathfrak{X}\}$, alors il y a au plus une solution au problème de Dirichlet pour la paire (A, g) associée à une fonction $g : A \to \mathbb{R}$.

(c) On considère la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de matrice de transition P sur $\mathfrak{X}$, et on note

$$\tau_A = \inf(\{n \geq 0 \,|\, X_n \in A\}).$$

Montrer que τ_A est fini presque sûrement (quelque soit la mesure initiale π_0).

(d) Montrer que $f(x) = \mathbb{E}_x[g(X_{\tau_A})]$ est bien définie et est l'unique solution du problème de Dirichlet pour la paire (A, g).

7. Matrices sous-stochastiques et critère de transience. Soit $\mathfrak{X}$ un espace d'états fini ou dénombrable. Une matrice *sous-stochastique* sur $\mathfrak{X}$ est une matrice $(Q(x, y))_{x,y\in\mathfrak{X}}$ à coefficients réels positifs telle que $\sum_{y\in\mathfrak{X}} Q(x, y) \leq 1$ pour tout $x \in \mathfrak{X}$.

(a) Montrer que si Q est sous-stochastique, alors ses puissances Q^n le sont également. Plus précisément, montrer que pour tout $x \in \mathfrak{X}$, les sommes sur une ligne

$$\sigma_{Q^n}(x) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} Q^n(x, y)$$

forment une suite $(\sigma_{Q^n}(x))_{n\geq 1}$ qui est décroissante.

(b) On note $h(x) = \lim_{n\to\infty} \sigma_{Q^n}(x)$. Montrer que $h = Qh$. Soit k une solution positive de l'équation $k = Qk$, avec $0 \leq k(x) \leq 1$ pour tout $x \in \mathfrak{X}$. Montrer que $k(x) \leq \sigma_Q(x)$, puis par récurrence que $k(x) \leq \sigma_{Q^n}(x)$ pour tout $n \geq 1$. En déduire que $k(x) \leq h(x)$, et que h est la solution maximale du système d'équations

$$\begin{cases} k(x) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} Q(x,y)\, k(y); \\ 0 \leq k(x) \leq 1. \end{cases}$$

(c) Soit P la matrice de transition d'une chaîne de Markov irréductible sur $\mathfrak{X}$, et $x_0 \in \mathfrak{X}$ un état arbitraire. On pose

$$Q(x,y) = \begin{cases} P(x,y) & \text{si } y \neq x_0, \\ 0 & \text{si } y = x_0. \end{cases}$$

Montrer que Q est une matrice sous-stochastique, et que la fonction

$$k(x) = \mathbb{P}_x[\forall n \geq 1,\ X_n \neq x_0]$$

est solution à valeurs dans $[0,1]$ du système d'équations $k = Qk$.

(d) En déduire qu'une chaîne de Markov irréductible de matrice de transition P est transiente si et seulement si, pour un état $x_0 \in \mathfrak{X}$ fixé, il existe une solution non nulle au système d'équations

$$\begin{cases} k(x) = \sum_{y\neq x_0} P(x,y)\, k(y); \\ 0 \leq k(x) \leq 1. \end{cases}$$

(e) Application. On considère le modèle de file d'attente, qui est la chaîne de Markov sur $\mathbb{N}$ de matrice de transition

$$P(k,k+1) = p \quad \text{et} \quad P(k,k-1) = 1-p \quad \text{pour tout } k \geq 1;$$
$$P(0,1) = 1;$$

p est un paramètre réel dans $(0,1)$. Trouver l'ensemble des solutions du système de la question précédente avec $x_0 = 0$. En déduire en fonction de p la récurrence ou la transience de cette chaîne de Markov irréductible.

3. Théorèmes ergodiques

Dans ce troisième chapitre, nous nous intéressons au comportement *asymptotique* d'une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$, et nous répondons aux deux questions suivantes :

(1) Si n est grand, que peut-on dire de la loi marginale $\pi_n = \pi_0 P^n$? Y-a-t'il une convergence en loi $\pi_n \to \pi$ pour une certaine mesure de probabilité π ?

(2) Par analogie avec la loi des grands nombres, on peut considérer la moyenne

$$M_n(f) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(X_i)$$

d'une fonction $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}$ le long d'une trajectoire de la chaîne de Markov. Si les X_i sont des variables i.i.d., on sait que $M_n(f) \to \mathbb{E}[f(X_1)]$ presque sûrement (par exemple pour une fonction bornée ; c'est la loi des grands nombres classiques). Y-a-t'il le même genre de résultats avec une chaîne de Markov ?

Les solutions de ces deux problèmes mettent en jeu les mêmes objets : les *mesures invariantes (ou stationnaires)* d'une matrice stochastique P. La première section du chapitre est consacrée à l'étude de ces mesures.

1. Mesures invariantes.

Dans tout ce qui suit, $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur un espace d'états $\mathfrak{X}$ avec matrice de transition P fixée.

Définition 3.1 (Mesure invariante). *Une mesure invariante (on dit aussi stationnaire) sur $\mathfrak{X}$ est une mesure positive $\mu : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}_+$ telle que $\mu P = \mu$. Autrement dit, pour tout $x \in \mathfrak{X}$,*

$$\mu(x) = \sum_{w\in\mathfrak{X}} \mu(w)\, P(w, x).$$

On parle de probabilité invariante ou loi stationnaire si de plus μ est une mesure de probabilité : $\sum_{x\in\mathfrak{X}} \mu(x) = 1$.

Notons tout de suite que, si μ est une mesure invariante pour P, alors par récurrence sur n, on a $\mu P^n = \mu$ pour tout $n \geq 1$.

Exemple 3.2 (Mesures invariantes pour la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$). Pour tout paramètre p, la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$ introduite dans l'Exemple 1.16 admet pour mesure invariante la mesure de comptage

$$\mu(k) = 1 \quad \text{pour tout } k \in \mathbb{Z}.$$

En effet, on a bien $(\mu P)(k) = \mu(k-1)\, P(k-1, k) + \mu(k+1)\, P(k+1, k) = p + (1-p) = 1 = \mu(k)$ pour tout $k \in \mathbb{Z}$. Notons que si μ est une mesure invariante vis-à-vis d'une matrice P sur un espace $\mathfrak{X}$, alors il en va de même pour tout multiple $b\mu$ avec $b \geq 0$; par conséquent, les mesures constantes sur $\mathbb{Z}$ sont toutes des mesures invariantes pour la marche aléatoire de paramètre p

sur $\mathbb{Z}$. Si $p \neq \frac{1}{2}$, alors on peut exhiber une mesure invariante qui n'est pas de cette forme :

$$\tilde{\mu}(k) = \left(\frac{p}{1-p}\right)^k \quad \text{pour tout } k \in \mathbb{Z}.$$

C'est de nouveau une mesure invariante, car

$$\begin{aligned}(\tilde{\mu}P)(k) &= \left(\frac{p}{1-p}\right)^{k-1} p + \left(\frac{p}{1-p}\right)^{k+1} (1-p) \\ &= \left(\frac{p}{1-p}\right)^k ((1-p)+p) = \left(\frac{p}{1-p}\right)^k = \tilde{\mu}(k).\end{aligned}$$

Ainsi, pour $p \neq \frac{1}{2}$, l'ensemble des mesures invariantes n'est pas restreint à la demi-droite $D = \{b\mu \,|\, b \geq 0\}$; il contient tout le cône $C = \{b\mu + a\tilde{\mu} \,|\, a, b \geq 0\}$. On peut en fait montrer que :

$$\{\text{mesures invariantes pour la marche sur } \mathbb{Z}\} = \begin{cases} C & \text{si } p = \frac{1}{2}, \\ D & \text{si } p \neq \frac{1}{2}. \end{cases}$$

En effet, l'équation d'invariance $\nu(k) = p\,\nu(k-1) + (1-p)\,\nu(k+1)$ caractérise des suites $(\nu(k))_{k\in\mathbb{Z}}$ récurrentes linéaires d'ordre 2.

- Si $p = \frac{1}{2}$, alors l'équation polynomiale correspondante $X = p + (1-p)X^2$ admet pour solution double $\lambda = 1$, donc toute solution formelle s'écrit sous la forme
$$\nu(k) = ak + b.$$
Mais si $\nu(k) \geq 0$ pour tout entier $k \in \mathbb{Z}$, alors $a = 0$ et $b \geq 0$, donc ν est dans C.
- Si $p \neq \frac{1}{2}$, alors l'équation polynomiale admet pour solutions $\lambda = 1$ et $\lambda = \frac{p}{1-p}$, donc l'ensemble des solutions formelles s'écrit sous la forme
$$\nu(k) = a\left(\frac{p}{1-p}\right)^k + b.$$
Si $\nu(k) \geq 0$ pour tout entier $k \in \mathbb{Z}$, alors $a \geq 0$ et $b \geq 0$, donc ν est dans D.

Proposition 3.3 (Mesures invariantes d'une chaîne irréductible). *Une mesure invariante d'une chaîne de Markov irréductible qui n'est pas égale à 0 partout est strictement positive partout.*

Démonstration. Soit μ une mesure invariante non nulle, et x un état tel que $\mu(x) > 0$. Alors, si $x \rightsquigarrow y$ et $P^n(x,y) > 0$ pour un certain $n \geq 1$, alors on a

$$\mu(y) = (\mu P^n)(y) = \sum_{t\in\mathfrak{X}} \mu(t) P^n(t,y) \geq \mu(x)\, P^n(x,y) > 0.$$

Or, pour une chaîne irréductible, tous les états communiquent entre eux, donc $\mu(y) > 0$ pour tout état $y \in \mathfrak{X}$. □

Exemple 3.4 (Mesures invariantes pour le modèle de file d'attente). Considérons le modèle de file d'attente de l'Exemple 1.15 avec $p \neq \frac{1}{2}$. Comme ce modèle est une chaîne irréductible, pour trouver les mesures invariantes non nulles, on peut supposer $\mu(0) = c > 0$ et essayer ensuite de résoudre le système d'équations impliqué par l'invariance.

- En $k = 0$, on a $\mu(0) = (1-p)\,\mu(1)$, donc $\mu(1) = \frac{c}{1-p}$.
- En $k = 1$, on a $\mu(1) = \mu(0) + (1-p)\,\mu(2)$, donc $\mu(2) = \frac{pc}{(1-p)^2}$.

- Pour $k \geq 2$, on a $\mu(k) = p\,\mu(k-1) + (1-p)\,\mu(k+1)$, qui est une relation de récurrence d'ordre 2. L'équation caractéristique $(1-p)X^2 - X + p = 0$ admet pour racines 1 et $\frac{p}{1-p}$, donc les solutions sont de la forme

$$\mu(k) = \alpha \left(\frac{p}{1-p}\right)^k + \beta,$$

avec pour conditions initiales $\mu(1) = \frac{c}{1-p}$ et $\mu(2) = \frac{pc}{(1-p)^2}$. On trouve $\alpha = \frac{c}{p}$ et $\beta = 0$.

Les mesures invariantes sont donc de la forme

$$\mu(0) = c \qquad ; \qquad \mu(k \geq 1) = \frac{c}{p}\left(\frac{p}{1-p}\right)^k$$

avec c positif. En particulier, si $p < \frac{1}{2}$, alors elles sont toutes de masse finie, car

$$1 + \frac{1}{p}\sum_{k=1}^{\infty}\left(\frac{p}{1-p}\right)^k = \frac{2(1-p)}{1-2p} < +\infty.$$

Dans ce cas, parmi les mesures invariantes, il existe une unique probabilité invariante correspondant au choix $c = \frac{1-2p}{2(1-p)}$:

$$\pi(0) = \frac{1-2p}{2(1-p)} \qquad ; \qquad \pi(k \geq 1) = \frac{1-2p}{2p(1-p)}\left(\frac{p}{1-p}\right)^k.$$

On verra plus loin les conséquences de ce calcul en termes de récurrence ou de transience de la chaîne, et pour son comportement asymptotique.

Théorème 3.5 (Existence et unicité d'une mesure invariante). *Soit P la matrice stochastique d'une chaîne de Markov irréductible récurrente sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. À un coefficient multiplicatif près, il existe une unique mesure invariante non nulle sur $\mathfrak{X}$.*

Lemme 3.6 (Finitude du nombre moyen de visites le long d'une excursion). *Considérons une chaîne de Markov sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. Étant fixé un état $x \in \mathfrak{X}$, on pose :*

$$\mu_x(y) = \mathbb{E}_x\left[\sum_{n=0}^{\tau_x^+ - 1} 1_{(X_n = y)}\right];$$

c'est la moyenne du nombre V_{xy} de visites de y le long d'une excursion issue de x (cette excursion étant éventuellement infinie si $\tau_x^+ = +\infty$).

(1) Supposons donnée une mesure invariante π sur $\mathfrak{X}$ telle que $\pi(x) = 1$. Alors, $\pi(y) \geq \mu_x(y)$ pour tout $y \in \mathfrak{X}$, ce qui implique que $\mu_x(y) < +\infty$ pour tout $y \in \mathfrak{X}$.

(2) Si la chaîne est récurrente irréductible, alors $\mu_x(y) < +\infty$ pour tout $y \in \mathfrak{X}$.

Démonstration. Commençons par quelques remarques sur la quantité $\mu_x(y)$ définie dans le lemme. On a $\mu_x(x) = 1$, car le nombre de visites de x entre les temps 0 et $\tau_x^+ - 1$ est presque sûrement 1 sous $\mathbb{P}_x$. Par ailleurs, on peut réécrire

$$\mu_x(y) = \mathbb{E}_x\left[\sum_{n=1}^{\tau_x^+} 1_{(X_n = y)}\right];$$

en effet, on n'a pas changé les indicatrices si $y \neq x$, et pour $y = x$ la formule ci-dessus donne encore 1 (on a remplacé la visite de x au temps $n = 0$ par la visite de x au temps $n = \tau_x^+$).

Finalement,

$$\mu_x(y) = \mathbb{E}_x\left[\sum_{n=0}^{\tau_x^+-1} 1_{(X_n=y)}\right] = \mathbb{E}_x\left[\sum_{n=0}^{\infty} 1_{(X_n=y,\,\tau_x^+>n)}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_x[X_n = y,\, \tau_x^+ > n].$$

Démontrons maintenant les deux points du lemme. Pour le premier point, on a $\pi(x) = \mu_x(x) = 1$, donc pour établir l'inégalité $\pi(y) \geq \mu_x(y)$, on peut supposer $y \neq x$. L'idée est d'utiliser l'invariance de π et d'extraire les termes de $\mu_x(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[X_n = y,\, \tau_x^+ > n]$ au fur et à mesure. On a :

$$\begin{aligned}\pi(y) &= \sum_{x_{-1}\in\mathfrak{X}} \pi(x_{-1})\, P(x_{-1}, y) = P(x, y) + \sum_{x_{-1}\neq x} \pi(x_{-1})\, P(x_{-1}, y)\\ &= \mathbb{P}_x[X_1 = y,\, \tau_x^+ > 1] + \sum_{x_{-1}\neq x} \pi(x_{-1})\, P(x_{-1}, y),\end{aligned}$$

puis

$$\begin{aligned}&\pi(y) - \mathbb{P}_x[X_1 = y,\, \tau_x^+ > 1]\\ &= \sum_{\substack{x_{-1}\neq x\\ x_{-2}\in\mathfrak{X}}} \pi(x_{-2})\, P(x_{-2}, x_{-1})\, P(x_{-1}, y)\\ &= \sum_{x_{-1}\neq x} P(x, x_{-1})\, P(x_{-1}, y) + \sum_{x_{-1}, x_{-2}\neq x} \pi(x_{-2})\, P(x_{-2}, x_{-1})\, P(x_{-1}, y)\\ &= \mathbb{P}_x[X_2 = y,\, \tau_x^+ > 2] + \sum_{x_{-1}, x_{-2}\neq x} \pi(x_{-2})\, P(x_{-2}, x_{-1})\, P(x_{-1}, y),\end{aligned}$$

et par récurrence sur m, on établit que

$$\begin{aligned}&\pi(y) - \sum_{n=1}^{m} \mathbb{P}_x[X_n = y,\, \tau_x^+ > n]\\ &= \sum_{x_{-1},\ldots,x_{-m}\neq x} \pi(x_{-m})\, P(x_{-m}, x_{-(m-1)}) \cdots P(x_{-2}, x_{-1})\, P(x_{-1}, x).\end{aligned}$$

Comme le terme de droite est positif, en prenant $m \to +\infty$, on obtient bien $\pi(y) \geq \mu_x(y)$.

Pour le second point, supposons la chaîne récurrente irréductible ; comme $\mu_x(x) = 1$, pour établir la finitude de $\mu_x(y)$, on peut supposer $y \neq x$. Introduisons les probabilités $p_{xy} = \mathbb{P}_x[\tau_y < \tau_x^+]$ et $p_{yx} = \mathbb{P}_y[\tau_x < \tau_y^+]$. Ces deux probabilités sont strictement positives : pour p_{xy} par exemple, par irréducibilité, il existe un chemin reliant x à y dans le graphe $\mathcal{G}_P$, et si on le prend de longueur minimale n, alors ce chemin ne contient pas de retour en x ; alors, il y a une probabilité $P^n(x, y) > 0$ de suivre ce chemin au départ de x, donc une probabilité strictement positive d'atteindre y avant de revenir en x. Maintenant, on peut exprimer $\mu_x(y)$ à partir des deux probabilités p_{xy} et p_{yx} :

- Si $\tau_x^+ < \tau_y$, alors $V_{xy} = 0$ (on retourne en x avant d'avoir visité y une seule fois).
- Supposons maintenant $\tau_y < \tau_x^+$. Alors, la chaîne décalée en temps $(X_{n+\tau_y})_{n\in\mathbb{N}}$ suit une loi $\mathbb{P}_y$, et elle effectue des excursions issues de y. Ces excursions sont indépendantes et de même loi, et chacune de ces excursions a une probabilité p_{yx} de contenir x ; le nombre de visites V_{xy} est donc égal à

  $1 +$ nombre d'excursions issues de y avant que l'une d'entre elles n'atteigne x.

  Donc, conditionnellement à l'événement $\{\tau_y < \tau_x^+\}$, $V_{xy} - 1$ suit une loi géométrique de paramètre p_{yx}, et donc d'espérance $\frac{1}{p_{yx}} - 1$.

On conclut que

$$\mu_x(y) = \mathbb{E}_x[V_{xy}] = \mathbb{P}_x[\tau_y < \tau_x^+]\,\mathbb{E}_x[V_{xy} \,|\, \tau_y < \tau_x^+] = \frac{p_{xy}}{p_{yx}} \in (0, +\infty). \qquad \square$$

Preuve du Théorème 3.5. Pour l'existence, on va montrer que si la chaîne est récurrente irréductible, alors la mesure μ_x (pour un état $x \in \mathfrak{X}$ fixé) est invariante. On peut écrire :

$$\begin{aligned}(\mu_x\, P)(y) = \sum_{w\in\mathfrak{X}} \mu_x(w)\, P(w,y) &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{w\in\mathfrak{X}} \mathbb{P}_x[\tau_x^+ = m,\, X_n = w]\, P(w,y) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{w\in\mathfrak{X}} \mathbb{P}_x[\tau_x^+ > n,\, X_n = w]\, P(w,y).\end{aligned}$$

Or,

$$\mathbb{P}_x[\tau_x^+ > n,\, X_n = w]\, P(w,y) = \mathbb{P}_x[\tau_x^+ > n,\, X_n = w,\, X_{n+1} = y].$$

En effet, dire que $\tau_x^+ > n$ revient à dire que l'on n'est pas encore retourné en x au temps n, donc le terme de gauche vaut

$$\sum_{x_1\neq x,\ldots,x_{n-1}\neq x} P(x,x_1)\, P(x_1,x_2) \cdots P(x_{n-1},w)\, P(w,y)$$

et c'est aussi la valeur de la probabilité à droite. Ainsi,

$$\begin{aligned}(\mu_x\, P)(y) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{w\in\mathfrak{X}} \mathbb{P}_x[\tau_x^+ > n,\, X_n = w,\, X_{n+1} = y] = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_x^+ \geq n+1,\, X_{n+1} = y] \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[\tau_x^+ \geq m,\, X_m = y] = \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{E}_x[1_{(\tau_x^+ \geq m,\, X_m = y)}] \\ &= \mathbb{E}_x\left[\sum_{m=1}^{\tau_x^+} 1_{(X_m = y)}\right] = \mu_x(y).\end{aligned}$$

On a donc établi l'existence d'une mesure invariante, de poids total

$$\mu_x(\mathfrak{X}) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} \mathbb{E}_x\left[\sum_{n=1}^{\tau_x^+} 1_{(X_n = y)}\right] = \mathbb{E}_x\left[\sum_{n=1}^{\tau_x^+} 1\right] = \mathbb{E}_x[\tau_x^+];$$

notons que cette espérance peut être infinie. Établissons maintenant l'unicité à un scalaire près. Soit π une autre mesure stationnaire non nulle sur $\mathfrak{X}$; quitte à multiplier π par une constante, on peut supposer $\pi(x) = 1$ pour l'état x fixé précédemment. Par le Lemme 3.6, $\pi \geq \mu_x$, et $\pi - \mu_x$ est une mesure positive et est invariante par P :

$$(\pi - \mu_x)P = \pi P - \mu_x P = \pi - \mu_x.$$

De plus, $\pi(x) - \mu_x(x) = 0$. Or, par la Proposition 3.3, une mesure invariante non nulle associée à une matrice de transition irréductible est strictement positive partout ; par contraposée, comme $\pi - \mu_x$ s'annule, $\pi - \mu_x = 0$ et $\pi = \mu_x$. $\square$

Corollaire 3.7 (Récurrence positive et récurrence nulle). *Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov irréductible récurrente. On a l'alternative entre les deux situations suivantes :*

- *Pour tout $x \in \mathfrak{X}$, $\mathbb{E}_x[\tau_x^+] = +\infty$; on parle alors de chaîne de Markov récurrente nulle, et toute mesure invariante sur $\mathfrak{X}$ est de masse infinie.*

- *Pour tout $x \in \mathfrak{X}$, $\mathbb{E}_x[\tau_x^+] < +\infty$; on parle alors de chaîne de Markov récurrente positive, et toute mesure invariante sur $\mathfrak{X}$ est de masse finie. De plus, dans ce cas, l'unique probabilité invariante sur $\mathfrak{X}$ est donnée par la formule*

$$\pi(x) = \frac{1}{\mathbb{E}_x[\tau_x^+]}.$$

Démonstration. La chaîne étant récurrente irréductible, toutes les mesures invariantes non nulles sont proportionnelles entre elles, donc soit elles ont toutes une masse finie, soit elles ont toutes une masse infinie. L'alternative s'en déduit, car les mesures μ_x construites dans la preuve du Théorème 3.5 ont pour masse $\mu_x(\mathfrak{X}) = \mathbb{E}_x[\tau_x^+]$. Remarquons que pour $x \neq y$, les deux mesures invariantes μ_x et μ_y sont *a priori* différentes ; néanmoins, elles ne diffèrent que par un scalaire multiplicatif. Dans le cas récurrent positif, étant donné $x \in \mathfrak{X}$, la mesure

$$\pi(y) = \frac{\mu_x(y)}{\mu_x(\mathfrak{X})} = \frac{\mu_x(y)}{\mathbb{E}_x[\tau_x^+]}$$

est proportionnelle à μ_x, donc invariante ; et par construction elle est de masse totale égale à 1, donc c'est une probabilité invariante. L'unicité de cette probabilité invariante π est une conséquence immédiate de l'unicité à un scalaire près des mesures invariantes. Enfin,

$$\pi(x) = \frac{\mu_x(x)}{\mathbb{E}_x[\tau_x^+]} = \frac{1}{\mathbb{E}_x[\tau_x^+]},$$

ce qui établit un lien entre la probabilité invariante et les moyennes des temps de retour : plus le temps de retour en x est grand (en moyenne), et plus la probabilité invariante $\pi(x)$ est petite. Les théorèmes ergodiques des prochaines sections donneront une explication plus claire de ce phénomène. □

Remarque 3.8 (Récurrence positive des chaînes finies). Une chaîne de Markov irréductible sur un espace d'états fini est toujours récurrente positive. En effet, on sait déjà par la Proposition 2.13 qu'elle est forcément récurrente irréductible, et de plus, une mesure sur un ensemble fini est bien sûr de masse finie ; la récurrence positive s'en déduit.

Avant de passer à l'étude du comportement asymptotique des chaînes de Markov, énonçons une réciproque partielle du Théorème 3.5 :

Proposition 3.9 (Critère de récurrence positive). *Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov irréductible sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. On suppose qu'il existe une mesure stationnaire π sur $\mathfrak{X}$ non nulle et de masse finie. Alors, la chaîne de Markov est récurrente (positive).*

Démonstration. Fixons un état $x \in \mathfrak{X}$; comme la chaîne est irréductible, on a $\pi(x) > 0$, et quitte à multiplier π par un scalaire, on peut supposer que $\pi(x) = 1$. Le premier point du Lemme 3.6 montre que $\pi \geq \mu_x$, donc

$$+\infty > \pi(\mathfrak{X}) \geq \mu_x(\mathfrak{X}) = \mathbb{E}_x[\tau_x^+].$$

Ainsi, τ_x^+ est fini presque sûrement, et même d'espérance finie. Ceci montre que tous les états $x \in \mathfrak{X}$ sont récurrents. □

Exemple 3.10. La marche aléatoire non symétrique ($p \neq \frac{1}{2}$) sur $\mathbb{Z}$ est irréductible transiente. En effet, on a exhibé précédemment deux mesures invariantes non proportionnelles sur $\mathbb{Z}$; or, si la chaîne était irréductible récurrente, on aurait l'unicité à un scalaire près de la mesure invariante. On retrouve ainsi le résultat de l'Exemple 2.5.

Exemple 3.11. Le modèle de file d'attente avec $p < \frac{1}{2}$ est irréductible récurrent positif. En effet, on a exhibé précédemment une mesure de probabilité (donc de masse finie) invariante.

2. Convergence vers la loi stationnaire.

Soit P une matrice de transition irréductible sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. S'il existe une probabilité invariante π, alors pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\pi P^n = \pi$, donc une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de matrice P et de loi initiale π vérifie :

$$\forall n \in \mathbb{N},\ \forall x \in \mathfrak{X},\ \ \mathbb{P}_\pi[X_n = x] = \pi(x).$$

Nous allons maintenant montrer que, sous une hypothèse additionnelle d'*apériodicité*, pour toute loi initiale π_0, on a

$$\forall x \in \mathfrak{X},\ \ \lim_{n\to\infty} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_n = x] = \pi(x).$$

Ainsi, la mesure de probabilité invariante est la limite des lois marginales de la chaîne, quelque soit la loi initiale.

Définition 3.12 (Période d'un état). *Soit P une matrice stochastique et $x \in \mathfrak{X}$ un état. La période de x est l'entier positif*

$$h(x) = \mathrm{pgcd}(\{n \geq 0 \,|\, P^n(x,x) > 0\}).$$

C'est donc le plus grand commun diviseur des temps possibles de retour en x de la chaîne de Markov associée à P.

Exemple 3.13 (Période de la marche aléatoire sur le cercle). Considérons la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ introduite dans l'Exemple 2.14. Si $N \geq 2$ est un entier pair, alors toute boucle $x = x_0 \to x_1 \to \cdots \to x_\ell = x$ dans le graphe $\mathcal{G}_P$ associée à la matrice de transition P de la chaîne de Markov est de longueur paire. En effet, l'application $[k]_{\mathrm{mod}\ N} \mapsto [k]_{\mathrm{mod}\ 2}$ est bien définie (la parité de k avec k choisie dans une classe modulo N ne dépend pas de k), donc on a une notion de parité pour les éléments de $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$; et on change de parité à chaque pas de la chaîne. Réciproquement, pour tout nombre pair $\ell = 2m$, il existe une boucle de longueur $2m$ reliant x à x, à savoir

$$x \to x+1 \to x \to \cdots \to x \to x+1 \to x \quad (m \text{ répétitions de la boucle } x \to x+1 \to x).$$

Par conséquent, si N est un nombre pair, alors pour tout $x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, la période de x vaut

$$h(x) = \mathrm{pgcd}(\{0, 2, 4, 6, 8, ...\}) = 2.$$

Supposons maintenant N impair. Alors, l'ensemble des temps de retour possibles en un point x contient N et $N+1$:

$$x \to x+1 \to x+2 \to \cdots \to x+N-1 \to x+N = x \quad (\text{avec les entiers pris modulo } N),$$

$$\text{et } x \to x+1 \to x \to \cdots \to x \to x+1 \to x \quad \left(\frac{N+1}{2} \text{ boucles } x \to x+1 \to x\right)$$

sont deux boucles avec ces longueurs. Par conséquent, $h(x) = 1$ pour tout $x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$.

Proposition 3.14 (Période d'une chaîne irréductible). *Soit P une matrice stochastique irréductible. La période d'un état $x \in \mathfrak{X}$ ne dépend pas de x ; on dit alors que c'est la période de la chaîne de Markov, notée $h(P)$ ou simplement h.*

Lemme 3.15. *Si x a pour période $h(x)$, alors il existe $k(x) \geq 0$ tel que l'ensemble des longueurs de boucles $R(x) = \{n \geq 0 \,|\, P^n(x,x) > 0\}$ contient tous les multiples $k\,h(x)$ pour $k \geq k(x)$.*

Démonstration. Notons que l'ensemble $R(x)$ est stable par addition : s'il existe des boucles de longueur m et n reliant x à x dans le graphe dirigé $\mathcal{G}_P$, alors en les concaténant on obtient une boucle de longueur $m+n$. Par la relation de Bezout, il existe des entiers $n_1, \dots, n_r$ dans $R(x)$ et des entiers $u_1, \dots, u_r \in \mathbb{Z}$ tels que

$$u_1 n_1 + u_2 n_2 + \cdots + u_r n_r = h(x).$$

En utilisant la stabilité par somme de $R(x)$, et en réunissant les termes positifs d'une part et les termes négatifs d'autre part, on en déduit l'existence de deux entiers N_1 et N_2 dans $R(x)$ tels que

$$N_1 - N_2 = h(x).$$

Les entiers N_1 et N_2 sont divisibles par $h(x)$, et $R(x)$ contient tous les multiples de $h(x)$ au moins à partir de $N_1 N_2$. En effet, $R(x)$ contient

$$N_1 N_2 = \underbrace{N_2 + N_2 + \cdots + N_2}_{N_1 \text{ fois}}$$

par stabilité par addition, et si $k \geq 0$ admet pour division euclidienne par N_1

$$k = qN_1 + r,$$

alors

$$N_1 N_2 + kh(x) = (N_1 - r)N_2 + (r + qh(x))N_1$$

est une combinaison linéaire à coefficients entiers positifs d'éléments N_1 et N_2 dans $R(x)$, donc appartient à $R(x)$. □

Remarque 3.16. Le lemme ci-dessus montre que si $R \subset \mathbb{N}$ est une partie infinie stable par addition et si $h = \text{pgcd}(R)$, alors $h\mathbb{N} \setminus R$ est un ensemble fini. Cette propriété est facile à vérifier sur un exemple. Ainsi, si $R = \{3a + 5b \,|\, a, b \in \mathbb{N}\} = 3\mathbb{N} + 5\mathbb{N}$, alors $h = 1$, et par ailleurs,

$$R = \{0, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, ...\},$$

donc R contient presque tous les entiers positifs.

Preuve de la Proposition 3.14. Considérons deux états $x \neq y$ dans $\mathfrak{X}$; comme la chaîne est irréductible, il existe des chemins

$$x = x_0 \to x_1 \to \cdots \to x_m = y$$
$$\text{et } y = y_0 \to y_1 \to \cdots \to y_n = x$$

dans le graphe dirigé $\mathcal{G}_P$. Alors, $x_0 \to x_1 \to \cdots \to x_m = y_0 \to y_1 \to \cdots \to y_n$ est une boucle de longueur $m+n$ reliant x à x, et $y_0 \to y_1 \to \cdots \to y_n = x_0 \to x_1 \to \cdots \to x_m$ est une boucle de longueur $m+n$ reliant y à y. Donc, $m+n$ appartient à $R(x)$ et à $R(y)$, et est un multiple de $h(x)$ et de $h(y)$:

$$m + n = uh(x) = vh(y).$$

Pour k assez grand, $kh(x)$ et $(k+1)h(x)$ appartiennent à $R(x)$ par le lemme précédent ; fixons des boucles $(a_0, \dots, a_{kh(x)})$ et $(b_0, \dots, b_{(k+1)h(x)})$ reliant x à x dans le graphe orienté $\mathcal{G}_P$. Les chemins

$$y_0 \to y_1 \to \cdots \to y_n = a_0 \to a_1 \to \cdots \to a_{kh(x)} = x_0 \to x_1 \to \cdots \to x_m$$
$$\text{et } y_0 \to y_1 \to \cdots \to y_n = b_0 \to a_1 \to \cdots \to b_{(k+1)h(x)} = x_0 \to x_1 \to \cdots \to x_m$$

sont alors des boucles de longueurs $(k+u)h(x)$ et $(k+u+1)h(x)$ reliant y à y. Or, le pgcd de ces deux longueurs est

$$\text{pgcd}((k+u)h(x), (k+u+1)h(x)) = h(x)\,\text{pgcd}(k+u, k+u+1) = h(x).$$

Par conséquent, $h(y)$ divise $h(x)$, et symétriquement on montre que $h(x)$ divise $h(y)$, donc $h(x) = h(y)$. □

Définition 3.17 (Chaîne apériodique). *Une chaîne de Markov irréductible est dite apériodique si sa période est $h = 1$.*

Remarque 3.18. Notons qu'une condition suffisante, mais non nécessaire pour l'apériodicité d'une chaîne irréductible est l'existence d'un état $x \in \mathfrak{X}$ tel que $P(x, x) > 0$. Dans ce cas, on a en effet $1 \in R(x)$, donc $h(P) = h(x) = \mathrm{pgcd}(R(x)) = 1$.

Théorème 3.19 (Convergence des lois marginales). *Soit P la matrice de transition d'une chaîne de Markov irréductible sur un espace d'états $\mathfrak{X}$.*

(1) Si la chaîne de Markov associée à P est récurrente positive et apériodique, alors pour tout $x \in \mathfrak{X}$ et toute loi initiale π_0,

$$\mathbb{P}_{\pi_0}[X_n = x] = \pi_n(x) \to_{n\to\infty} \pi(x),$$

où $\pi(x)$ est l'unique probabilité invariante sur $\mathfrak{X}$.

(2) Si la chaîne est récurrente nulle ou transiente, alors pour tout $x \in \mathfrak{X}$ et toute loi initiale π_0,

$$\pi_n(x) \to_{n\to\infty} 0.$$

La preuve que nous allons donner du Théorème 3.19 repose sur un très joli argument de *couplage* de deux chaînes de Markov indépendantes de matrice P.

Lemme 3.20 (Carré d'une chaîne de Markov). *Soit P la matrice de transition d'une chaîne irréductible et apériodique sur un espace $\mathfrak{X}$. On note $P^{\otimes 2}$ la matrice de transition sur $\mathfrak{X}^2$ donnée par*

$$P^{\otimes 2}((x_1, x_2), (y_1, y_2)) = P(x_1, y_1)\, P(x_2, y_2).$$

Alors, $P^{\otimes 2}$ est irréductible. Si P est de plus récurrente positive de loi invariante π, alors $P^{\otimes 2}$ est aussi récurrente positive, de mesure de probabilité invariante

$$\pi^{\otimes 2}(x, y) = \pi(x)\, \pi(y).$$

Démonstration. Comme $h(P) = 1$, par le Lemme 3.15, pour tout état x, il existe des boucles de longueur k basées en x si $k \geq k(x)$ est assez grand. Fixons quatre états $x_1, x_2, y_1, y_2 \in \mathfrak{X}$. Par irréducibilité, il existe un chemin $x_1 = a_0 \to \cdots \to a_m = y_1$ dans $\mathcal{G}_P$, et un autre chemin $x_2 = b_0 \to \cdots \to b_n = y_2$, m et n étant des entiers positifs. Alors, en rajoutant au début de ces chemins des boucles basées en x_1 et en x_2 respectivement, on peut supposer que $m = n$; en effet, il suffit de rajouter une boucle de longueur $k+n$ à $(a_0, \dots, a_m)$ et une boucle de longueur $k + m$ à $(b_0, \dots, b_n)$, avec $k + n \geq \max(k(x_1), k(x_2))$. On a donc maintenant deux chemins *de même longueur*

$$\begin{aligned} x_1 = a_0 \to a_1 \to \cdots \to a_m = y_1 \\ \text{et } x_2 = b_0 \to b_1 \to \cdots \to b_m = y_2. \end{aligned}$$

Alors, $(a_0, b_0) \to (a_1, b_1) \to \cdots \to (a_m, b_m)$ est un chemin dans le graphe $\mathcal{G}_{P^{\otimes 2}}$ reliant (x_1, x_2) à (y_1, y_2) ; ceci prouve l'irréducibilité de la matrice stochastique $P^{\otimes 2}$.

Supposons maintenant P récurrente positive, de loi invariante π. La récurrence positive de $P^{\otimes 2}$ découle alors de l'existence d'une mesure stationnaire de masse finie (Proposition 3.9), à

savoir $\pi^{\otimes 2}$:

$$\begin{aligned}(\pi^{\otimes 2}\, P^{\otimes 2})(x,y) &= \sum_{(v,w)\in\mathfrak{X}^2} \pi^{\otimes 2}(v,w)\, P^{\otimes 2}((v,w),(x,y)) \\ &= \sum_{(v,w)\in\mathfrak{X}^2} (\pi(v)\, P(v,x))\, (\pi(w)\, P(w,y)) \\ &= (\pi P)(x)\, (\pi P)(y) = \pi(x)\, \pi(y) = \pi^{\otimes 2}(x,y). \qquad \square\end{aligned}$$

Lemme 3.21 (Temps d'atteinte de la diagonale). *On considère la chaîne de Markov double $(X_n, Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur $\mathfrak{X}^2$ de matrice de transition $P^{\otimes 2}$ et de loi initiale $\pi_0 \otimes \mu_0$, où π_0 et μ_0 sont deux mesures de probabilité sur $\mathfrak{X}$:*

$$(\pi_0 \otimes \mu_0)(x,y) = \pi_0(x)\, \mu_0(y).$$

On note T le temps d'atteinte par $(X_n, Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de la diagonale $\Delta = \{(x,x) \in \mathfrak{X}^2 \,|\, x \in \mathfrak{X}\}$:

$$T = \inf(\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n = Y_n\}),$$

qui est une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{N} \sqcup \{+\infty\}$.

(1) Notons $\pi_n = \pi_0 P^n$ et $\mu_n = \mu_0 P^n$. On a l'inégalité

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \mu_n) = \sup_{A\subset\mathfrak{X}} |\pi_n(A) - \mu_n(A)| \leq \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T > n],$$

d_{TV} étant la distance en variation totale entre les deux probabilités π_n et μ_n.

(2) Si P est irréductible récurrente positive et apériodique, alors le temps d'atteinte T est fini presque sûrement.

Démonstration. Remarquons que, pour tout état $x \in \mathfrak{X}$ et tous temps $n \geq m$,

$$\mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T = m \text{ et } X_n = x] = \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T = m \text{ et } Y_n = x].$$

En effet, on peut écrire la probabilité à gauche en termes de P, π_0 et μ_0 :

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T = m \text{ et } X_n = x] \\ &= \sum_{x_0\neq y_0,\dots,x_{m-1}\neq y_{m-1},w} \pi_0(x_0)\mu_0(y_0)\, P(x_0,x_1)\cdots P(x_{m-1},w) P(y_0,y_1)\cdots P(y_{m-1},w)\, P^{n-m}(w,x),\end{aligned}$$

et on obtient exactement la même formule pour l'autre probabilité. Remarquons par ailleurs que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sont deux chaînes de Markov sur $\mathfrak{X}$ de lois $\mathbb{P}_{(P,\pi_0)}$ et $\mathbb{P}_{(P,\mu_0)}$. En effet, pour $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ par exemple, la probabilité $\mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N]$ d'un cylindre à horizon N est donnée par

$$\begin{aligned}&\sum_{y_0,\dots,y_N\in\mathfrak{X}} \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N, Y_0 = y_0, \dots, Y_N = y_N] \\ &= \sum_{y_0,\dots,y_N\in\mathfrak{X}} (\pi_0 \otimes \mu_0)(x_0,y_0)\, P^{\otimes 2}((x_0,y_0),(x_1,y_1))\cdots P^{\otimes 2}((x_{N-1},y_{N-1}),(x_N,y_N)) \\ &= \sum_{y_0,\dots,y_N\in\mathfrak{X}} \pi_0(x_0)\, P(x_0,x_1)\cdots P(x_{N-1},x_N)\, \mu_0(x_0)\, P(y_0,y_1)\cdots P(y_{N-1},y_N) \\ &= \pi_0(x_0)\, P(x_0,x_1)\cdots P(x_{N-1},x_N).\end{aligned}$$

On peut alors écrire :

$$\begin{aligned}\pi_n(x) = \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[X_n = x] &= \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[X_n = x \text{ et } T \leq n] + \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[X_n = x \text{ et } T > n] \\ &= \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[Y_n = x \text{ et } T \leq n] + \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[X_n = x \text{ et } T > n]\end{aligned}$$

puis, pour une partie $A \subset \mathfrak{X}$,

$$\begin{aligned}\pi_n(A) &= \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[Y_n \in A \text{ et } T \leq n] + \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[X_n \in A \text{ et } T > n] \\ &\leq \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[Y_n \in A] + \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T > n] = \mu_n(A) + \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T > n].\end{aligned}$$

Symétriquement, $\mu_n(A) \leq \pi_n(A) + \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T > n]$, donc $|\pi_n(A) - \mu_n(A)| \leq \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T > n]$, et ceci est valable pour toute partie A ; par passage à la borne supérieure, on obtient l'inégalité sur la distance en variation totale. Pour la seconde partie du lemme, si P est irréductible récurrente positive et apériodique, alors on sait que $P^{\otimes 2}$ est irréductible récurrente positive ; ainsi, $(X_n, Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ atteint tout état en un temps fini, et c'est en particulier vrai pour les états de la diagonale Δ, donc $T < +\infty$ presque sûrement. □

Démonstration du théorème 3.19. Supposons d'abord P récurrente positive apériodique. On a $\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\mu_0}[T > n] = 0$ pour toutes lois π_0 et μ_0, car $T < +\infty$ avec probabilité 1. C'est en particulier vrai pour $\mu_0 = \pi$ égale à la mesure de probabilité invariante pour P. Alors, d'après le lemme précédent, puisque $\pi P^n = \pi$ pour tout n,

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \leq \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\pi}[T > n] \to_{n\to\infty} 0.$$

Ceci implique en particulier que $|\pi_n(x) - \pi(x)| \to_{n\to\infty} 0$ pour tout état $x \in \mathfrak{X}$.

Si l'on suppose P transiente, alors étant donné un état $y \in \mathfrak{X}$, la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ ne visite y qu'un nombre fini de fois. En effet, on a vu dans le chapitre précédent que cela était vrai sous une mesure $\mathbb{P}_x$ correspondant à une mesure initiale δ_x (seconde partie du théorème 2.11), mais la preuve est la même pour une mesure initiale arbitraire. On a donc

$$\lim_{m\to\infty} \mathbb{P}_{\pi_0}[\forall n \geq m,\ X_n \neq y] = 1,$$

et *a fortiori*, $\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_n \neq y] = \lim_{n\to\infty} 1 - \pi_n(y) = 1$, donc $\pi_n(y) \to 0$ pour tout état y.

Supposons finalement P récurrente nulle : tous les états de la chaîne sont visités infiniment souvent, mais les temps de retour sont d'espérance infinie. Dans ce cas, on peut supposer sans perte de généralité P apériodique. En effet, si P est irréductible récurrente nulle de période h, alors P^h est irréductible récurrente nulle de période 1, et la convergence vers 0 des lois marginales $\pi_0 P^{nh}$ lorsque n tend vers l'infini implique celle des lois marginales $\pi_0 P^n$ lorsque n tend vers l'infini. Ainsi, on peut supposer P apériodique, ce qui implique que $P^{\otimes 2}$ est irréductible apériodique. Si $P^{\otimes 2}$ est transiente, alors on sait d'après la discussion du cas transient de ce théorème que

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}_{\pi_0\otimes\pi_0}[(X_n, Y_n) = (x, x)] = 0.$$

Or, on peut calculer $\mathbb{P}_{\pi_0\otimes\pi_0}[(X_n, Y_n) = (x, x)] = ((\pi_0 \otimes \pi_0)(P^{\otimes 2})^n)(x, x) = (\pi_n(x))^2$, donc $\pi_n(x) \to_{n\to\infty} 0$. Supposons maintenant et jusqu'à la fin de la preuve P récurrente nulle apériodique et $P^{\otimes 2}$ récurrente. La récurrence de $P^{\otimes 2}$ implique de nouveau que $T < +\infty$ presque sûrement. Par conséquent, par le lemme 3.21, pour toutes lois initiales π_0 et μ_0 et tout état $y \in \mathfrak{X}$, $|\pi_n(y) - \mu_n(y)| \to_{n\to\infty} 0$. C'est en particulier vrai si les lois initiales sont des Diracs δ_x : pour tous états $x, z, y \in \mathfrak{X}$,

$$|P^n(x, y) - P^n(z, y)| \to_{n\to\infty} 0.$$

Fixons un état $x \in \mathfrak{X}$, et supposons par l'absurde que $(P^n(x, y))_{n\in\mathbb{N}}$ ne tend pas vers 0 pour tout état $y \in \mathfrak{X}$. Alors, comme toutes les probabilités sont dans $[0, 1]$, par extraction diagonale, il existe une suite croissante $(n_k)_{k\in\mathbb{N}}$ et une famille de nombres positifs $(\rho(y))_{y\in\mathfrak{X}}$ telle que

$$P^{n_k}(x, y) \to_{k\to\infty} \rho(y)$$

pour tout état $y \in \mathfrak{X}$, et telle que $\rho(y) > 0$ pour au moins un état y. Montrons alors que ρ est une mesure stationnaire de masse finie pour P ; ceci contredira le fait que P est récurrente

nulle, compte tenu de la proposition 3.9. Pour commencer, l'inégalité

$$\sum_{y\in A} P^{n_k}(x,y) \leq 1$$

valable pour toute partie A finie de $\mathfrak{X}$ passe à la limite et donne $\rho(A) \leq 1$ pour toute partie A finie, puis $\rho(\mathfrak{X}) \leq 1$ par union dénombrable croissante ; ainsi, ρ est bien de masse finie. Calculons maintenant ρP. Pour toute partie A finie de $\mathfrak{X}$, on a

$$\begin{aligned}\sum_{z\in A} \rho(z)\, P(z,y) &= \lim_{k\to\infty} \left(\sum_{z\in A} P^{n_k}(x,z)\, P(z,y) \right) \\ &\leq \liminf_{k\to\infty} \left(\sum_{z\in \mathfrak{X}} P^{n_k}(x,z)\, P(z,y) \right) = \liminf_{k\to\infty} \left(P^{n_k+1}(x,y) \right) \\ &\leq \liminf_{k\to\infty} \left(\sum_{z\in \mathfrak{X}} P(x,z) P^{n_k}(z,y) \right)\end{aligned}$$

Or, $P^{n_k}(z,y) \to \rho(y)$ pour n'importe quelle valeur de z ; en effet, c'est vrai par hypothèse pour $z = x$, et on a vu que les différences $P^n(x,y) - P^n(z,y)$ tendaient vers 0. Par convergence dominée contre la mesure $P(x,z)$, on peut donc passer à la limite dans le dernier terme de l'inégalité ci-dessus, et obtenir :

$$\sum_{z\in A} \rho(z) P(z,y) \leq \sum_{z\in \mathfrak{X}} P(x,z)\, \rho(y) = \rho(y).$$

Comme c'est vrai pour toute partie finie A, par union croissante dénombrable,

$$(\rho P)(y) = \sum_{z\in \mathfrak{X}} \rho(z)\, P(z,y) \leq \rho(y).$$

On a en fait égalité, car $\sum_{y\in\mathfrak{X}} (\rho P)(y) = \sum_{z,y\in\mathfrak{X}} \rho(z)\, P(z,y) = \sum_{z\in\mathfrak{X}} \rho(z) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} \rho(y)$; il ne peut donc pas y avoir d'inégalité stricte $(\rho P)(y) < \rho(y)$ pour un certain y. Ainsi, P admet une mesure stationnaire ρ non nulle et de masse finie (plus petite que 1) ; ceci impliquerait la récurrence positive de P, et c'est absurde. Donc, $P^n(x,y) \to 0$ pour tout couple $(x,y) \in \mathfrak{X}$. Ceci implique par convergence dominée que $\pi_n(y) = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi_0(x)\, P^n(x,y) \to 0$ pour tout état $y \in \mathfrak{X}$, quelque soit la loi initiale π_0. □

Exemple 3.22 (File d'attente récurrente positive). Considérons le modèle de file d'attente avec un paramètre $p < \frac{1}{2}$; on est alors dans le cas récurrent positif, et la loi stationnaire a été calculée dans l'exemple 3.4. Le théorème 3.19 implique que

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_n = 0] = \frac{1-2p}{2-2p}$$

quelque soit la loi initiale π_0 ; ainsi, on a une estimée de la probabilité que la file d'attente soit vide au bout d'un grand temps n.

3. Loi des grands nombres pour les nombres de visites.

Le théorème 3.19 répond entièrement à la première question posée au début de ce chapitre ; examinons maintenant la seconde question. Étant donnée une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, on note

$$V_{x,n} = \mathrm{card}(\{m \in [\![1,n]\!] \mid X_m = x\}) = \text{nombres de visites de } x \text{ jusqu'au temps } n;$$

on a $\lim_{n\to\infty} V_{x,n} = V_x$, donc si la chaîne est irréductible, alors soit $(V_{x,n})_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite bornée pour tout $x \in \mathfrak{X}$, soit $(V_{x,n})_{n\in\mathbb{N}}$ tend vers l'infini pour tout état $x \in \mathfrak{X}$.

THÉORÈME 3.23 (Asymptotique du nombre de visites). *Si la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est irréductible récurrente positive, alors*

$$\frac{V_{x,n}}{n} \to_{n\to\infty} \pi(x)$$

presque sûrement et pour tout état x, π étant la loi stationnaire. Si la chaîne est irréductible récurrente nulle ou transiente, alors

$$\frac{V_{x,n}}{n} \to_{n\to\infty} 0 \quad \textit{presque sûrement et pour tout état } x.$$

DÉMONSTRATION. Le cas d'une chaîne transiente est trivial, puisque $(V_{x,n})_{n\in\mathbb{N}}$ reste bornée pour tout x. Supposons maintenant la chaîne irréductible récurrente. On considère comme dans la preuve du théorème 2.7 les temps de passage $\tau_x^{(1)}$, $\tau_x^{(2)}$, *etc.* en l'état x ; ces temps aléatoires sont tous finis presque sûrement. On pose par convention $\tau_x^{(0)} = 0$. Sous $\mathbb{P}_x$, $(\tau_x^{(n)} - \tau_x^{(n-1)})_{n\geq 1}$ est une suite de variables indépendantes et de même loi, car il s'agit de la liste des longueurs des excursions $\varepsilon_{x,1}, \varepsilon_{x,2}$, *etc.* Par la loi des grands nombres, on a donc avec probabilité 1 :

$$\frac{\tau_x^{(n)}}{n} \to \mathbb{E}_x[\tau_x^{(1)}] = \begin{cases} \frac{1}{\pi(x)} & \text{si la chaîne est récurrente positive de loi invariante } \pi, \\ +\infty & \text{si la chaîne est récurrente nulle.} \end{cases}$$

Le résultat reste vrai sous une loi $\mathbb{P}_{\pi_0}$ avec une mesure initiale π_0 arbitraire. En effet, comme la chaîne est récurrente, le premier temps de passage $\tau_x^{(1)}$ est fini presque sûrement sous $\mathbb{P}_{\pi_0}$, donc

$$\frac{\tau_x^{(n)}}{n} = \frac{n-1}{n}\left(\frac{\tau_x^{(n)} - \tau_x^{(1)}}{n-1}\right) + \frac{\tau_x^{(1)}}{n};$$

la loi des grands nombres s'applique à la première partie comme précédemment (la chaîne décalée $(X_{n+\tau_x^{(1)}})_{n\in\mathbb{N}}$ suit une loi $\mathbb{P}_x$), tandis que $\frac{\tau_x^{(1)}}{n}$ est une quantité finie divisée par n, donc tend avec probabilité 1 vers 0.

Dans le cas récurrent positif, soit $\varepsilon > 0$ et $a = \pi(x) + \varepsilon$. Notons que

$$\left(\frac{V_{x,n}}{n} \geq a\right) \iff \left(\frac{\tau_x^{\lceil na\rceil}}{na} \leq \frac{1}{\pi(x)+\varepsilon}\right).$$

Or, par la loi des grands nombres précédemment établie, l'événement de droite ne se produit pas pour n assez grand. Donc, pour tout $\varepsilon > 0$, $\frac{V_{x,n}}{n} \leq \pi(x) + \varepsilon$ pour n assez grand, avec probabilité 1. On montre symétriquement que $\frac{V_{x,n}}{n} \geq \pi(x) - \varepsilon$ pour n assez grand, de sorte qu'on a bien $\frac{V_{x,n}}{n} \to_{n\to\infty} \pi(x)$ presque sûrement. Le cas récurrent nul est démontré de la même façon, en prenant $a = \varepsilon$. □

COROLLAIRE 3.24 (Théorème ergodique pour les chaînes récurrentes positives). *On considère une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ irréductible récurrente positive, de loi stationnaire π sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. Pour toute fonction $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}$ bornée, quelque soit la mesure initiale π_0, on a*

$$M_n(f) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(X_i) \to \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\, f(x)$$

avec probabilité 1.

Démonstration. Notons que

$$M_n(f) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(X_i) = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \frac{V_{x,n}}{n}\, f(x).$$

Fixons une partie finie $A \subset \mathfrak{X}$ de mesure sous π supérieure à $1-\varepsilon$. On a $\frac{V_{x,n}}{n} \to \pi(x)$ pour tout $x \in A$, donc, si $|f(x)| \leq B$ pour tout $x \in \mathfrak{X}$, alors

$$\begin{aligned}\left|M_n(f) - \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\, f(x)\right| &\leq \sum_{x\in A}\left|\frac{V_{x,n}}{n} - \pi(x)\right| B + \left(\sum_{x\notin A}\frac{V_{x,n}}{n} + \pi(x)\right) B \\ &\leq \sum_{x\in A}\left|\frac{V_{x,n}}{n} - \pi(x)\right| B + \left(1 - \sum_{x\in A}\frac{V_{x,n}}{n} + (1-\pi(A))\right) B.\end{aligned}$$

Le premier terme est une somme de quantités tendant vers 0, et le second terme a une limite supérieure inférieure à $2B(1-\pi(A)) = 2B\varepsilon$. Donc, pour tout $\varepsilon > 0$, avec probabilité 1,

$$\limsup_{n\to\infty}\left|M_n(f) - \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\, f(x)\right| \leq 2B\varepsilon.$$

La limite vaut donc 0. □

Remarque 3.25. Le corollaire 3.24 dit qu'une moyenne *temporelle* sur une trajectoire aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'une chaîne irréductible récurrente est asymptotiquement égale à une moyenne *spatiale* contre la mesure invariante π sur l'espace $\mathfrak{X}$; ce type de résultat est appelé *théorème ergodique* en mathématiques ou en physique statistique.

Remarque 3.26. Contrairement au théorème de convergence 3.19, le théorème ergodique 3.24 ne requiert pas l'hypothèse d'apériodicité.

Exemple 3.27. Considérons la marche aléatoire sur le cercle introduite dans l'exemple 2.14. Le théorème ergodique implique que, pour toute fonction $f : \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \to \mathbb{R}$, on a la convergence presque sûre

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(X_i) \to_{n\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} f(k).$$

En effet, on vérifie aisément que la mesure uniforme sur $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ est la mesure invariante de la chaîne de Markov, qui est récurrente positive puisque l'espace des états est fini.

4. Exercices.

Objectifs : Calculer la loi invariante d'une chaîne de Markov, en particulier en utilisant la notion de réversibilité ; utiliser le théorème de convergence vers la loi stationnaire dans le cas récurrent positif ; utiliser le théorème ergodique sur les nombres de visites.

1. Matrices bistochastiques. On dit qu'une matrice $(P(x,y))_{x,y\in\mathfrak{X}}$ sur un espace d'états fini $\mathfrak{X}$ est bistochastique si ses coefficients sont tous dans $[0,1]$, et si la somme des coefficients sur une ligne ou sur une colonne est toujours égale à 1.

(a) Montrer qu'une matrice de transition P est bistochastique si et seulement si la mesure uniforme $\pi(x) = \frac{1}{\mathrm{card}(\mathfrak{X})}$ est invariante par P.

(b) Application. Soit P la matrice de transition d'une chaîne de Markov sur un espace d'états fini $\mathfrak{X}$. On suppose P irréductible et symétrique : $P(x,y) = P(y,x)$ pour tous

états x, y. On suppose aussi que la diagonale de la matrice P n'est pas nulle. Montrer que, si $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P, alors

$$\pi_n(x) = \mathbb{P}_{\pi_0}[X_n = x] \to_{n\to\infty} \frac{1}{\mathrm{card}(\mathfrak{X})}$$

pour n'importe quel choix de mesure initiale π_0, et pour tout état $x \in \mathfrak{X}$.

2. Mesures réversibles, I. Soit P la matrice de transition d'une chaîne de Markov sur un espace d'états fini ou dénombrable. Une mesure positive π est dite réversible pour P si, pour tout couple d'états $(x, y) \in \mathfrak{X}^2$,

$$\pi(x)\, P(x, y) = \pi(y)\, P(y, x).$$

Montrer qu'une mesure réversible est invariante pour P. La réciproque est-elle vraie ?

3. Marche aléatoire sur un graphe fini. Soit $\mathcal{G}$ un graphe (simple, sans boucle) fini, c'est-à-dire un ensemble fini $\mathfrak{X}$ de sommets et un ensemble $\mathfrak{E}$ de paires $\{x \neq y\}$ de sommets. Le degré d'un sommet du graphe est

$$\deg x = \mathrm{card}(\{y \in \mathfrak{X} \,|\, \{x, y\} \in \mathfrak{E}\}).$$

On suppose que $\deg x \geq 1$ pour tout $x \in \mathfrak{X}$. On définit alors une matrice stochastique d'espace d'états $\mathfrak{X}$:

$$P(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{\deg x} & \text{si } \{x, y\} \in E, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

(a) À quelles conditions sur le graphe $\mathcal{G}$ la matrice P est-elle associée à une chaîne irréductible ? Si ces conditions sont vérifiées, que faut-il supposer en plus pour avoir une chaîne apériodique ?

(b) On suppose jusqu'à la fin de l'exercice que la chaîne irréductible. Trouver une mesure de probabilité réversible pour cette chaîne de Markov.

(c) Étant donnée une trajectoire $(X_n)_{0\leq n\leq N}$ observée sur un temps long $N \gg 1$, avec grande probabilité, quels sont les sommets du graphe qui sont le plus souvent visités par cette trajectoire ?

4. Les urnes d'Ehrenfest. On considère une urne avec N balles, qui sont réparties dans deux compartiments A et B. On note X_n le nombre de balles qui sont dans le compartiment A au temps n ; $X_n \in [\![0, N]\!]$, et le compartiment B contient $N - X_n$ balles au temps n. L'évolution de la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est la suivante. Pour passer de X_n à X_{n+1} :

- On tire au hasard l'une des N balles de l'urne, toutes les balles étant équiprobables, et ce tirage étant indépendant des autres étapes.
- Si la balle tirée au hasard appartient au compartiment A, on la déplace dans le compartiment B : alors, $X_{n+1} = X_n - 1$.
- Au contraire, si la balle tirée au hasard appartient au compartiment B, on la déplace dans le compartiment A : dans ce cas, $X_{n+1} = X_n + 1$.

(a) Donner la matrice de transition P de la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Montrer qu'elle est irréductible sur l'espace d'états $\mathfrak{X} = [\![0, N]\!]$.

(b) Calculer l'unique mesure de probabilité invariante π pour P. On pourra la chercher réversible. Quelle mesure de probabilité classique obtient-on ?

(c) On suppose par exemple que $X_0 = 0$. A-t-on $\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}_0[X_n = k] = \pi(k)$ pour tout $k \in \mathbb{N}$?

(d) On modifie le modèle en supposant qu'à chaque étape, la balle tirée au hasard dans l'urne a une probabilité $\frac{1}{2}$ d'être laissée dans son compartiment, et une probabilité $\frac{1}{2}$ d'être changée de compartiment. Reprendre les questions précédentes avec ce nouveau modèle. Quel est le lien entre les deux matrices de transition des deux modèles ?

5. Les urnes de Bernoulli–Laplace. On considère une urne avec N_1 balles blanches et N_2 balles noires, et avec deux compartiments A et B contenant respectivement $a \geq 1$ balles et $b \geq 1$ balles ; $N_1 + N_2 = a + b$, et chaque compartiment peut contenir des balles blanches et des balles noires. On note X_n le nombre de balles blanches dans le compartiment A au temps n ; c'est une quantité entière entre $\max(0, a - N_2)$ et $\min(N_1, a)$.

(a) Exprimer en fonction des paramètres du modèle N_1, N_2, a, b et de X_n le nombre de balles blanches ou de balles noires dans chaque compartiment au temps n.

L'évolution de la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est la suivante. Pour passer de X_n à X_{n+1} :

- On tire au hasard dans chaque compartiment une balle ; toutes les balles du compartiment A sont équiprobables, et de même pour toutes les balles du compartiment B.
- On échange la position des deux balles tirées au hasard : celle du compartiment A va vers le compartiment B, et *vice versa*.

(b) Donner la matrice de transition P de la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Montrer qu'elle est irréductible sur l'espace d'états $\mathfrak{X} = [\![\max(0, a - N_2), \min(a, N_1)]\!]$.

(c) On suppose dans la suite $N_1 \leq a \leq N_2$: ainsi, le nombre de boules blanches dans le compartiment A peut varier entre 0 et N_1. Trouver l'unique mesure de probabilité invariante π pour P. Quelle mesure de probabilité classique obtient-on ?

(d) Pour $k \in \mathfrak{X}$, montrer que $\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}_{\pi_0}[X_n = k] = \pi(k)$.

6. Permutations aléatoires. Pour $N \geq 1$, on note $\mathfrak{S}(N)$ l'ensemble des bijections $\sigma : [\![1, N]\!] \to [\![1, N]\!]$ (aussi appelées permutations). On rappelle que $\mathfrak{S}(N)$ est de cardinal $N! = 1 \times 2 \times 3 \times \cdots \times N$. L'ensemble $\mathfrak{S}(N)$ est un groupe pour la composition $\circ$ des bijections.

(a) Pour $1 \leq i \neq j \leq N$, on note (i, j) la transposition qui échange i et j : $(i, j)(i) = j$, $(i, j)(j) = i$ et $(i, j)(k) = k$ pour $k \notin \{i, j\}$. Montrer que toute bijection $\sigma \in \mathfrak{S}(N)$ s'écrit comme un produit $\sigma = (i_1, j_1) \circ (i_2, j_2) \circ \cdots \circ (i_l, j_l)$ de transpositions.

(b) On définit une permutation $\sigma \in \mathfrak{S}(N)$ en listant ses valeurs :

$$\sigma = [\sigma(1), \sigma(2), \dots, \sigma(N)].$$

Par exemple, $[5, 2, 1, 7, 3, 4, 6]$ est un élément de $\mathfrak{S}(7)$. Si $\sigma \in \mathfrak{S}(N)$ et $i \neq j$, notons σ' la permutation où l'on échange dans la liste des valeurs de σ la i-ième valeur et la j-ième valeur. Montrer que $\sigma' = \sigma \circ (i, j)$.

(c) Soit $(i_n)_{n\geq 1}$ et $(j_n)_{n\geq 1}$ deux suites de variables indépendantes distribuées uniformément sur $[\![1, N]\!]$. On définit une suite de variables $(\sigma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ dans $\mathfrak{S}(N)$ comme suit : $\sigma_0 = \mathrm{id}_{[\![1,N]\!]} = [1, 2, \dots, N]$, et

$$\sigma_n = \begin{cases} \sigma_{n-1} \circ (i_n, j_n) & \text{si } i_n \neq j_n, \\ \sigma_{n-1} & \text{si } i_n = j_n. \end{cases}$$

Montrer que $(\sigma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{S}(N)$, et donner la valeur de sa matrice de transition $(P(\sigma, \tau))_{\sigma,\tau\in\mathfrak{S}(N)}$.

(d) Montrer que la matrice de transition P est : bistochastique, irréductible, apériodique.

(e) Quelle est la limite en loi de σ_n lorsque n tend vers l'infini ?

7. Découpage de polygones. Soit $\mathcal{P}$ un polygone convexe avec au moins 3 côtés, auquel on applique l'opération suivante : on choisit au hasard deux côtés de $\mathcal{P}$, on joint les milieux de ces côtés et on garde l'un des deux nouveaux polygones convexes plus petits ainsi obtenus. On réitère cette opération infiniment, et on note $(C_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la suite des nombres de côtés des polygones ainsi obtenus. On supposera que $C_0 = 3$, et que les choix de découpage sont indépendants et donnent une chaîne de Markov.

(a) Si $C_n = k$, montrer que $C_{n+1} \in [\![3, k+1]\!]$. Montrer ensuite que $(C_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est irréductible sur l'espace des états $\mathbb{N}_{\geq 3} = \{3, 4, 5, ...\}$.

(b) On pose $X_n = C_n - 3$. Montrer que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov irréductible sur $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$, et préciser sa matrice de transition P.

(c) Notons que $X_0 = 0$, puisque $C_0 = 3$. Calculer $\mathbb{E}_0[X_n]$ pour tout $n \geq 0$. En déduire que la chaîne est récurrente irréductible.

(d) On cherche une mesure de probabilité stationnaire π pour P (à ce stade, il n'est pas clair qu'il en existe une, car la chaîne pourrait être récurrente nulle). On pose $G(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \pi(k)\, s^k$. Montrer que, si $\pi P = \pi$, alors

$$(s-1)\, G(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\pi(k)}{k+2}\, (s^{k+2} - 1).$$

Dériver cette équation pour trouver une équation différentielle satisfaite par $G(s)$, et en déduire la valeur de cette fonction.

(e) Montrer que la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est récurrente positive et converge en loi vers une loi de Poisson de paramètre 1.

8. Modèle de file d'attente, II. On considère la matrice de transition sur l'espace $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$ donnée par

$$P(0,1) = 1 \qquad ; \qquad \forall k \geq 1,\ \ P(k, k+1) = p \qquad ; \qquad \forall k \geq 1,\ \ P(k, k-1) = 1-p,$$

p étant un paramètre réel dans $(0, 1)$.

(a) On suppose $p < \frac{1}{2}$. Montrer que la chaîne de Markov de matrice P est récurrente positive, et calculer sa loi stationnaire. La chaîne est-elle apériodique ? Quels résultats limites sont valables pour cette chaîne de Markov ?

(b) Toujours dans l'hypothèse $p < \frac{1}{2}$, on suppose que l'on part d'une file vide ($X_0 = 0$). Comme $P(0,1) = 1$, $X_1 = 1$ et la file est non vide pendant un certain intervalle de temps $[\![1, \tau_0^+]\!]$. Déterminer l'espérance du temps τ_0^+ nécessaire pour que la file d'attente soit de nouveau vide.

(c) On suppose $p = \frac{1}{2}$. Trouver une mesure invariante de masse infinie pour la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de matrice P. Trouver un lien entre $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et une marche aléatoire simple symétrique $(Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur $\mathbb{Z}$. En déduire que la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est dans ce cas récurrente nulle.

9. Chaîne de vie et de mort, II. On reprend le modèle de la chaîne de vie et de mort, qui a pour espace d'états $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$ et pour matrice de transition

$$P(k, k+1) = p_k \qquad ; \qquad P(k, k-1) = q_k \qquad ; \qquad P(k, k) = r_k,$$

avec $(p_k, q_k, r_k)_{k\geq 0}$ famille de réels positifs avec $p_k + q_k + r_k = 1$ pour tout k, et $q_0 = 0$. On a montré dans un exercice du précédent chapitre que la chaîne de Markov avec cette matrice de transition était récurrente irréductible si et seulement si $p_k > 0$, $q_k > 0$ pour tout $k \geq 1$ et $\sum_{l=0}^{\infty}(\prod_{j=1}^{l} \frac{q_j}{p_j}) = +\infty$. Montrer que la chaîne est récurrente positive si et seulement si

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^{l} \frac{p_{j-1}}{q_j} \right) < +\infty.$$

Dans ce cas, donner la mesure de probabilité stationnaire. Donner aussi une condition nécessaire et suffisante simple pour l'apériodicité de la chaîne de Markov.

10. Croissance ou retour en 0, II. On reprend le modèle de la chaîne avec croissance ou retour en 0, qui a pour espace d'états $\mathfrak{X} = \mathbb{N}$ et pour matrice de transition

$$P(k, k+1) = p_k \qquad ; \qquad P(k, 0) = 1 - p_k$$

avec $(p_k)_{k\geq 0}$ famille de réels positifs. On a montré dans un exercice du précédent chapitre que la chaîne de Markov avec cette matrice de transition était récurrente irréductible si et seulement si $p_k > 0$ pour tout $k \geq 0$ et $\lim_{k\to 0} q_k = 0$, où $q_k = \prod_{j=0}^{k-1} p_j$. Montrer que la chaîne est récurrence positive si et seulement si

$$\sum_{k=0}^{\infty} q_k < +\infty,$$

et donner dans ce cas la mesure de probabilité stationnaire.

11. Mesures réversibles, II. Soit P une matrice stochastique irréductible sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. On suppose que la chaîne de Markov associée est récurrente positive, ce qui est automatiquement le cas si l'espace d'états est fini ; on note π la mesure de probabilité stationnaire. L'objectif de l'exercice est de montrer l'équivalence entre les deux conditions suivantes :

- La mesure π est réversible : $\pi(x)\, P(x, y) = \pi(y)\, P(y, x)$ pour tous états $x, y \in \mathfrak{X}$.
- Pour tout $n \geq 2$ et tout n-uplet d'états $(x_1, x_2, \dots, x_n)$,

$$P(x_1, x_2) \cdots P(x_{n-1}, x_n)\, P(x_n, x_1) = P(x_1, x_n)\, P(x_n, x_{n-1}) \cdots P(x_2, x_1).$$

Autrement dit, le produit des probabilités de transition $x_1 \to x_2 \to \cdots \to x_n \to x_1$ est le même si l'on prend le « cycle » dans l'autre sens : $x_1 \to x_n \to \cdots \to x_2 \to x_1$. C'est le *critère de Kolmogorov*.

(a) Montrer que si π est réversible, alors le critère de Kolmogorov est vérifié.

(b) On suppose dans les questions suivantes que le critère de Kolmogorov est vérifié. Montrer que pour tous états x, y, et tout $n \geq 1$, on a

$$P^n(x, y)\, P(y, x) = P(x, y)\, P^n(y, x).$$

(c) On suppose la chaîne apériodique. Déduire de la question précédente que π est réversible pour P.

(d) On ne suppose plus la chaîne apériodique. Montrer qu'on a, pour tous états x et y,

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} P^n(x, y) \to_{N\to\infty} \pi(y).$$

En déduire de nouveau que la mesure π est réversible si le critère de Komogorov est vérifié.

(e) Application. Soit P une matrice stochastique irréductible d'espace des états $\mathfrak{X}$ fini, et dont le graphe dirigé $\mathcal{G}_P$ ne contient pas de cycle : il n'existe pas de suite de sommets tous distincts $x_1 \neq x_2 \neq \cdots \neq x_n$ avec $n \geq 3$ et $P(x_1, x_2) \cdots P(x_{n-1}, x_n)\, P(x_n, x_1) > 0$. C'est par exemple le cas du modèle de la ruine du joueur. Montrer que la mesure stationnaire pour P est forcément réversible.

12. Unicité de la loi stationnaire. Soit P une matrice stochastique irréductible sur un espace d'états $\mathfrak{X}$ fini ou dénombrable. L'objectif de l'exercice est de donner une preuve élémentaire du fait suivant : si P admet une mesure de probabilité invariante, alors celle-ci est unique. Dans ce qui suit, on ne suppose pas *a priori* que la chaîne associée à P est récurrente (s'il existe une mesure de probabilité invariante, on sait *a posteriori* que ceci implique la récurrence positive).

(a) Pour $x \in \mathbb{R}_+$, on pose $\phi(x) = \frac{x}{x+1}$. Montrer que pour tous réels positifs $x_1, \ldots, x_n$ et tous poids positifs $p_1, \ldots, p_n$ tels que $p_1 + p_2 + \cdots + p_n = 1$, on a

$$\phi\left(\sum_{i=1}^{n} p_i x_i\right) \geq \sum_{i=1}^{n} p_i\, \phi(x_i).$$

Étendre cette inégalité au cas d'une suite $(x_i)_{i\geq 1}$ et d'une distribution discrète $(p_i)_{i\geq 1}$ avec $\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$. Quand a-t-on égalité dans cette inégalité ?

(b) On suppose donnée une mesure de probabilité π sur $\mathfrak{X}$ invariante par P, et on définit l'*entropie* d'une autre mesure de probabilité μ sur $\mathfrak{X}$ par la formule suivante :

$$\mathcal{E}(\mu) = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\, \phi\left(\frac{\mu(x)}{\pi(x)}\right).$$

Justifier du fait que cette quantité est bien définie. Montrer que pour toute mesure de probabilité μ sur $\mathfrak{X}$, on a $\mathcal{E}(\mu P) \geq \mathcal{E}(\mu)$.

(c) On suppose pour cette question que $P(x, y) > 0$ pour tout couple $(x, y) \in \mathfrak{X}^2$. Montrer qu'on a égalité dans la question précédente si et seulement si $\mu = \pi$. En déduire dans ce cas l'unicité de la mesure de probabilité stationnaire.

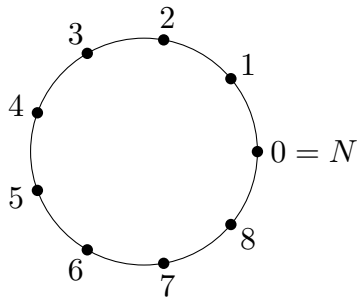
(d) Dans le cas général, on pose $\widetilde{P}(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n} P^n(x, y)$. Montrer que $\mathcal{E}(\mu\widetilde{P}) \geq \mathcal{E}(\mu)$ pour toute mesure de probabilité μ, avec égalité si et seulement si $\mu = \pi$. En déduire que si P est une matrice irréductible, alors il existe au plus une mesure de probabilité invariante par P.

A. Marches aléatoires

Ce chapitre propose une introduction alternative à la théorie des chaînes de Markov, *via* l'étude de trois marches aléatoires : sur le cercle discrétisé $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, sur la droite $\mathbb{Z}$, et dans l'espace $\mathbb{Z}^{d\geq 2}$. Pour ces trois modèles, des arguments combinatoires ou d'analyse harmonique permettent de retrouver tous les résultats de la partie théorique de ce cours, sans avoir besoin d'étudier en général les chaînes de Markov. Ainsi, l'essentiel de ce qui est écrit dans la suite ne requiert pas la connaissance des résultats de la partie théorique (nous pointerons néanmoins les résultats théoriques généraux que nous retrouverons dans des cas particuliers, et par ailleurs, nous uiliserons les mêmes notations que précédemment).

1. Marche aléatoire sur le cercle.

Dans toute cette section, on considère le cercle discrétisé sur N points, avec $N \geq 3$:



On part de la position $X_0 = 0$, et on considère le processus aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ suivant : à chaque étape, indépendamment de ce qui s'est passé précédemment,

- on fait un pas à droite sur le cercle avec probabilité $\frac{1}{3}$;
- on fait un pas à gauche sur le cercle avec probabilité $\frac{1}{3}$;
- on reste au même endroit avec probabilité $\frac{1}{3}$.

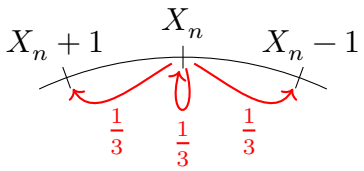


FIG. A.1. Probabilités de transition de la marche aléatoire sur le cercle.

Plus concrètement, si $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite de variables aléatoires indépendantes avec

$$\mathbb{P}[\xi_n = 1] = \mathbb{P}[\xi_n = 0] = \mathbb{P}[\xi_n - 1] = \frac{1}{3},$$

alors on pose

$$X_n = (\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n) \bmod N.$$

Remarque A.1. Le théorème de représentation 1.11 implique immédiatement que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$: $X_{n+1} = f(X_n, \xi_{n+1})$ avec une suite de variables i.i.d. $(\xi_n)_{n\geq 1}$, et la fonction

$$f : \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \times \{1, 0, -1\} \to \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$$
$$(x, \xi) \mapsto (x + \xi) \bmod N.$$

Remarque A.2. Le modèle de marche aléatoire sur le cercle étudié ici diffère de celui présenté dans l'Exemple 2.14, car on a maintenant une probabilité non nulle (égale à $\frac{1}{3}$) de rester au même endroit lors d'une transition $X_n \to X_{n+1}$. Ce choix garantit l'existence d'états x tels que $P(x, x) > 0$, et donc l'apériodicité de la chaîne, qui est requise pour avoir convergence vers la loi stationnaire. C'est pour cela qu'on a modifié le modèle en autorisant des pas $x \to x$ (on parle parfois de chaîne de Markov *paresseuse*).

Nous nous proposons de répondre aux deux questions suivantes :

(1) Peut-on calculer pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout $j \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ la probabilité $\pi_n(j) = \mathbb{P}[X_n = j]$?

(2) Quel est l'ensemble des états visités $\{X_n,\, n \geq 0\}$? Est-ce tout le cercle ? Si c'est le cas, quel est le nombre de visites d'un état $k \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$?

Dans ce qui suit, si k et l sont deux éléments de $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, on notera $d(k, l)$ leur distance *sur le cercle* ; le fait de raisonner modulo N implique que

$$d(k, l) = \min(|k - l|, |k - l + N|, |k - l - N|)$$

si on prend les représentants de k et l dans l'intervalle entier $[\![1, N]\!]$. Pour répondre à la première question, notons que tout chemin $(X_1, \dots, X_n)$ dans $(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})^n$ tel que les distances intermédiaires $d(X_{i-1}, X_i)$ sont plus petites que 1 a pour probabilité $\frac{1}{3^n}$. En effet,

$$\{d(X_{i-1}, X_i) \leq 1\} = \{\xi_i = 1\} \sqcup \{\xi_i = 0\} \sqcup \{\xi_i = -1\},$$

et chaque événement de l'union disjointe à droite a pour probabilité $\frac{1}{3}$; on conclut en utilisant l'indépendance des ξ_i. Par conséquent, pour calculer $\mathbb{P}[X_n = j]$, on peut écrire

$$\begin{aligned}\mathbb{P}[X_n = j] &= \sum_{(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}) \in (\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})^{n-1}} \frac{1_{d(0,x_1)\leq 1}\, 1_{d(x_1,x_2)\leq 1} \cdots 1_{d(x_{n-1},j)\leq 1}}{3^n} \\ &= \sum_{(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}) \in (\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})^{n-1}} P_N(0, x_1)\, P_N(x_1, x_2) \cdots P_N(x_{n-1}, j) = (P_N)^n(0, j),\end{aligned}$$

où P_N est la matrice carrée de taille $N \times N$ donnée par

$$P_N = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & & 1 \\ 1 & 1 & 1 & & 0 & \\ & 1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & & & & 1 & 1 \end{pmatrix};$$

P_N a des coefficients 1 sur la diagonale, juste au-dessus et juste en dessous de la diagonale, et dans les deux coins supérieur droit et inférieur gauche ; les autres coefficients sont nuls. Donc, calculer la loi marginale $\pi_n(j)$ se ramène au calcul des puissances de la matrice P_N (on retrouve dans un cas particulier la Proposition 1.6).

Il est bien connu que le calcul des puissances d'une matrice revient à la diagonalisation de celle-ci (lorsque c'est possible). Pour faire l'étude spectrale de P_N, remarquons pour commencer

que

$$P_N = \frac{I_N + C_N + (C_N)^{-1}}{3},$$

où C_N est la *matrice circulante*

$$C_N = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ 1 & & & & 0 \end{pmatrix}$$

avec des 1 juste au-dessus de la diagonale, et un 1 dans le coin inférieur gauche (les autres coefficients étant nuls). On calcule facilement l'inverse de C_N qui est la matrice avec des 1 juste en dessous de la diagonale, et un 1 dans le coin supérieur droit. Compte tenu du lien entre P_N et C_N, il suffira de savoir diagonaliser C_N ; nous allons effectuer cette diagonalisation en utilisant la théorie de la *transformée de Fourier discrète*.

Si $f : \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \to \mathbb{C}$ est une fonction à valeurs complexes, on note $\hat{f}$ sa transformée de Fourier définie par

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} f(j)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}}.$$

La formule ci-dessous ne dépend que de la classe de k modulo N, car si $k' = k + N$, alors

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} f(j)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk'\pi}{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} f(j)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}}\, \underbrace{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}j\pi}}_{=1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} f(j)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}}.$$

Pour les mêmes raisons, notons que la somme sur les indices $j \in [\![1, N]\!]$ peut en fait être prise sur les classes $j \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ d'entiers modulo N. Par ailleurs, il est clair que $\mathcal{F} : f \in \mathbb{C}^N \mapsto \hat{f} \in \mathbb{C}^N$ est une application linéaire.

Proposition A.3 (Propriétés de la transformée de Fourier discrète). *La transformée de Fourier $\mathcal{F}$ est un isomorphisme linéaire de $\mathbb{C}^N$, d'inverse donné par la formule :*

$$f(m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N} \hat{f}(k)\, \mathrm{e}^{-\frac{2\mathrm{i}km\pi}{N}}.$$

De plus, pour tout vecteur ligne $f \in \mathbb{C}^N$,

$$\widehat{(fC_N)}(k) = \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k\pi}{N}}\, \hat{f}(k).$$

Démonstration. Montrons que la formule d'inversion donne bien $f(m)$ pour tout $m \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$. Le terme de droite de la formule est égal à :

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N} \hat{f}(k)\, \mathrm{e}^{-\frac{2\mathrm{i}km\pi}{N}} = \frac{1}{N} \sum_{j,k=1}^{N} f(j)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}\pi(j-m)}{N}k} = \sum_{j=1}^{N} f(j) \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}\pi(j-m)}{N}k} \right).$$

Dans le terme entre parenthèses, si $j = m$, alors on obtient $\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} 1 = 1$. En revanche, si $j \neq m$, alors $\mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}\pi(j-m)}{N}} \neq 1$ et la somme des puissances de cette racine N-ième de l'unité vaut

$$\sum_{k=1}^{N} \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}\pi(j-m)}{N}k} = \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}\pi(j-m)}{N}} \frac{1 - \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\pi(j-m)}}{1 - \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}\pi(j-m)}{N}}} = 0.$$

Donc, on récupère le seul terme $j = m$, et on obtient bien $f(m)$. Voyons maintenant l'effet de la matrice circulante C_N sur la transformée de Fourier d'un vecteur. On calcule :

$$\begin{aligned}(\widehat{fC_N})(k) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j\in\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}} (fC_N)(j)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j\in\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}} f(j-1)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j'\in\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}} f(j')\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}(j'+1)k\pi}{N}} = \frac{\mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k\pi}{N}}}{\sqrt{N}} \sum_{j'\in\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}} f(j')\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}j'k\pi}{N}} = \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k\pi}{N}}\, \hat{f}(k).\end{aligned}$$

Cette propriété peut être reformulée comme suit : si F_N est la matrice de l'opération de transformée de Fourier $\mathcal{F}$, de sorte que $fF_N = \hat{f}$ pour tout vecteur ligne $f \in \mathbb{C}^N$, alors $fC_NF_N = fF_ND_N$, où D_N est la matrice diagonale $\mathrm{diag}((\mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k\pi}{N}})_{1\le k\le N})$. Par conséquent,

$$C_NF_N = F_ND_N \qquad ; \qquad C_N = F_ND_N(F_N)^{-1}.$$

Donc, la transformée de Fourier discrète diagonalise la matrice circulante C_N. □

La relation entre C_N et la transformée de Fourier peut être inversée : pour tout vecteur $g = f(C_N)^{-1}$, on a

$$\hat{f}(k) = (\widehat{gC_N})(k) = \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k\pi}{N}}\, \hat{g}(k) = \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k\pi}{N}}\, (f(\widehat{C_N})^{-1})(k),$$

donc $(f(\widehat{C_N})^{-1})(k) = \mathrm{e}^{-\frac{2\mathrm{i}k\pi}{N}}\, \hat{f}(k)$. On en déduit que :

$$(\widehat{fP_N})(k) = \frac{1}{3}\left((\widehat{fC_N})(k) + (f(\widehat{C_N})^{-1})(k) + \hat{f}(k)\right) = \frac{2\cos\left(\frac{2k\pi}{N}\right)+1}{3}\, \hat{f}(k).$$

Dans ce qui suit, on note $\lambda_k = \frac{2\cos\left(\frac{2k\pi}{N}\right)+1}{3}$. On peut maintenant calculer pour tout n la loi marginale $\pi_n(j) = (P_N)^n(0,j) = (\delta_0(P_N)^n)(j)$, où δ_0 est le vecteur ligne avec un 1 en position $0 = N$, et des 0 partout ailleurs. Ainsi,

$$(\delta_0(P_N)^n)(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N} (\delta_0\widehat{(P_N)^n})(k)\, \mathrm{e}^{-\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N} \widehat{\delta_0}(k)\, (\lambda_k)^n \mathrm{e}^{-\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}},$$

et par ailleurs,

$$\widehat{\delta_0}(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j\in\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}} \delta_0(j)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

pour tout $k \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$. On conclut :

Théorème A.4 (Loi marginale de la marche aléatoire sur le cercle). *La loi marginale au temps n de la marche aléatoire de matrice P_N sur $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ est donnée par la formule :*

$$\pi_n(j) = \frac{1}{N} \sum_{k\in\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}} (\lambda_k)^n\, \mathrm{e}^{-\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}} \quad \textit{pour tout } j \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}.$$

Corollaire A.5 (Convergence vers la loi uniforme de la marche aléatoire sur le cercle). *Pour tout $j \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, $\pi_n(j) \to_{n\to\infty} \frac{1}{N}$.*

Démonstration. Les nombres $\lambda_k = \frac{1+2\cos\left(\frac{2k\pi}{N}\right)}{3}$ sont tous compris entre $\frac{1-2}{3} = -\frac{1}{3}$ et $\frac{1+2}{3} = 1$. De plus, $\lambda_k = 1$ seulement pour $k = N$. Donc, $\pi_n(j)$ est une combinaison linéaire de puissances n-ièmes de nombres plus petits que 1 en module, le seul étant égal à 1 en module étant $\lambda_N = 1$. On en déduit que

$$\lim_{n\to\infty} \pi_n(j) = \frac{1}{N}\, \mathrm{e}^{-\frac{2\mathrm{i}jN\pi}{N}} = \frac{1}{N}.$$

□

On peut même être un peu plus précis, et estimer la *vitesse de convergence* de la mesure de probabilité π_n vers la loi uniforme

$$\pi_\infty(j) = \frac{1}{N} \quad \text{pour tout } j \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}.$$

LEMME A.6. *On équipe $\mathbb{C}^N$ du produit scalaire hermitien $\langle f \,|\, g\rangle = \sum_{j=1}^N \overline{f(j)}\, g(j)$. Alors, pour tous vecteurs f et g, on a*

$$\langle f \,|\, g\rangle = \langle \hat{f} \,|\, \hat{g}\rangle\,.$$

Autrement dit, la transformée de Fourier discrète est une isométrie.

DÉMONSTRATION. C'est un calcul :

$$\begin{aligned}\langle \hat{f} \,|\, \hat{g}\rangle &= \sum_{k=1}^N \overline{\hat{f}(k)}\, \hat{g}(k) = \frac{1}{N} \sum_{a,b,k=1}^N \overline{f(a)}\, g(b)\, \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k(b-a)\pi}{N}} \\ &= \sum_{a,b=1}^N \overline{f(a)}\, g(b)\, 1_{(a=b)} = \sum_{a=1}^N \overline{f(a)}\, g(a) = \langle f \,|\, g\rangle\,. \qquad \square\end{aligned}$$

On peut alors estimer la distance ℓ^2 entre π_n et π_∞ :

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^N \left|\pi_n(j) - \frac{1}{N}\right|^2 &= \|\pi_n - \pi_\infty\|^2 = \|\widehat{\pi_n} - \widehat{\pi_\infty}\|^2 = \left\|(\delta_0\widehat{(P_N)^n}) - \widehat{\pi_\infty}\right\|^2 \\ &= \sum_{k=1}^N \left|\widehat{\delta_0}(k)\,(\lambda_k)^n - \widehat{\pi_\infty}(k)\right|^2.\end{aligned}$$

On a calculé précédemment $\widehat{\delta_0}(k) = \frac{1}{\sqrt{N}}$ pour tout k, et par ailleurs,

$$\widehat{\pi_\infty}(k) = \frac{1}{N^{3/2}} \sum_{j=1}^N \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}jk\pi}{N}} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}} & \text{si } k = 0 = N, \\ 0 & \text{sinon.}\end{cases}$$

Donc, dans la dernière somme, le terme $k = N$ s'annule, et les autres termes sont simplement égaux à $\frac{1}{N}(\lambda_k)^{2n}$. On obtient donc :

$$\|\pi_n - \pi_\infty\|^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} (\lambda_k)^{2n} \leq \left(\max_{k\in[\![1,N-1]\!]} |\lambda_k|\right)^{2n}.$$

Pour $k \neq N$, on a $-\frac{1}{3} \leq \lambda_k \leq \lambda_1 = \frac{1+2\cos\frac{2\pi}{N}}{3}$. Le terme de droite dans cette inégalité a le plus grand module, donc

$$|\lambda_k| \leq \frac{1 + 2\cos\frac{2\pi}{N}}{3} \quad \text{pour tout } k \in [\![1, N-1]\!]\,.$$

Ainsi :

PROPOSITION A.7 (Vitesse de convergence de la loi de la marche aléatoire sur le cercle). *Si π_n est la loi marginale au temps n de la marche aléatoire de matrice P_N sur $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, alors*

$$\|\pi_n - \pi_\infty\| \leq \left(\frac{1 + 2\cos\frac{2\pi}{N}}{3}\right)^n$$

pour tout $n \geq 0$.

Pour N assez grand (plus grand que 4), avec $x = \frac{2\pi}{N}$, on a

$$\cos x \leq 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} \leq 1 - \frac{3x^2}{8};$$
$$\frac{1+2\cos x}{3} \leq 1 - \frac{x^2}{4} \leq \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4}} = \mathrm{e}^{-\frac{\pi^2}{N^2}}.$$

On obtient donc l'inégalité $\|\pi_n - \pi_\infty\| \leq \mathrm{e}^{-\frac{\pi^2 n}{N^2}}$ pour $N \geq 4$. En particulier, le temps nécessaire pour atteindre à ε près la loi stationnaire semble croître en N^2 ; ce genre d'estimées sera étudié en détail dans un chapitre ultérieur.

Remarque A.8. La convergence vers la loi stationnaire a ici été établie grâce à une analyse spectrale de la matrice de transition P_N. Un point important sous-jacent à nos calculs est le fait que P_N admet pour valeur propre 1 avec multiplicité 1, puis d'autres valeurs propres qui sont toutes inférieures à 1 en module. Nous exploiterons cette propriété pour d'autres exemples de chaînes de Markov lorsque nous nous intéresserons au problème général de la vitesse de convergence vers la loi stationnaire.

Remarque A.9. On peut se demander pourquoi l'outil de la transformée de Fourier discrète a été introduit pour calculer les lois marginales π_n de la marche sur $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, et pourquoi il a été si efficace. C'est l'application d'un principe mathématique très général : pour étudier des fonctions définies sur un groupe G ou sur un espace X sur lequel agit un groupe G, on peut essayer de décomposer les dites fonctions sur une base adaptée à cette action de groupe et qui en diagonalise l'action d'éléments de base. Cette idée est le fondement de l'*analyse harmonique*.

- Si $G = \mathbb{T} = \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$ est le cercle unité, la base de Fourier est formée par les fonctions $\theta \mapsto \mathrm{e}^{2\mathrm{i}n\pi}$, et on obtient la théorie des séries de Fourier.
- Si $G = \mathbb{R}$, la base de Fourier est formée par les fonctions $x \mapsto \mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi x}$, et la théorie sous-jacente est celle de la transformée de Fourier.
- Pour $G = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, une base judicieuse de l'espace de fonctions $\mathbb{C}^G$ est formée par les fonctions $k \mapsto \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}\pi kl}{N}}$, que nous avons utilisées pour décomposer les lois marginales de la marche aléatoire.

De façon générale, la base adaptée de l'espace de fonctions $\mathscr{L}^2(G)$ ou $\mathscr{L}^2(X)$ est indexée par les représentations irréductibles du groupe G, et par des choix de paramètres pour chaque représentation irréductible. Dans le cas d'un groupe abélien, chaque représentation irréductible est de dimension 1, et il n'y a pas de paramètres additionnels à préciser. Toute marche aléatoire sur un groupe G ou sur un espace homogène X peut être étudié par ce spectre de l'analyse de Fourier, qui souvent simplifie la matrice de transition et le calcul des lois marginales.

On a maintenant répondu à la première question posée après l'introduction de notre modèle de marche aléatoire sur le cercle. La seconde question est beaucoup plus simple, et sa réponse repose sur l'utilisation du lemme de Borel–Cantelli 2.9.

Proposition A.10 (Récurrence de la marche aléatoire sur le cercle). *Avec probabilité* 1,

$$\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\} = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z},$$

et plus précisément, tous les états $j \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ sont visités infiniment souvent.

Autrement dit, la chaîne de Markov de matrice P_N est récurrente ; avec la théorie générale, c'est un point évident, car on a une chaîne irréductible d'espace d'états fini.

Démonstration. Considérons pour tout $i \geq 1$ l'événement

$$A_i = \{\xi_{N(i-1)+1} = \xi_{N(i-1)+2} = \cdots = \xi_{Ni} = 1\};$$

A_i se réalise si, sur l'intervalle de temps $[\![N(i-1)+1, Ni]\!]$, tous les pas de la marche aléatoire sont positifs. Dans ce cas, on effectue un tour complet du cercle, et on visite tous les états un à un durant cet intervalle de temps. Comme les événements A_i mettent en jeu des ensembles de variables ξ_j disjoints, ils sont indépendants. Par ailleurs, $\mathbb{P}[A_i] = \frac{1}{3^N} > 0$. Donc, par le Lemme 2.9,

$$\mathbb{P}[\text{une infinité d'événements } A_i \text{ se réalisent}] = 1.$$

Ainsi, infiniment souvent, la marche fait un tour complet du cercle durant un intervalle de temps de la forme $[\![N(i-1)+1, Ni]\!]$, ce qui implique que tous les états $j \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ sont visités infiniment souvent. □

2. Marche aléatoire sur la droite.

Dans cette section, on fixe un paramètre $p \in (0,1)$, et on considère la marche aléatoire

$$X_n = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n,$$

où les ξ_n sont des variables indépendantes à valeurs dans $\{\pm 1\}$, de loi

$$\mathbb{P}[\xi_n = 1] = 1 - \mathbb{P}[\xi_n = -1] = p.$$

C'est la marche aléatoire introduite dans l'Exemple 1.16, et on se propose de l'étudier en utilisant uniquement des arguments combinatoires. Les questions pertinentes sont les mêmes que pour la marche aléatoire sur le cercle : quelle est la loi de X_n ? quel est l'ensemble des états visités ? *etc.*

Le calcul de la loi de X_n est ici très facile : comme X_n est une somme de variables de Bernoulli à valeurs dans ± 1, on s'attend à voir apparaître une loi binomiale. Plus précisément, notons que l'ensemble des valeurs possibles pour X_n est

$$E_n = \{-n, -n+2, -n+4, \dots, n-2, n\} = \{j \in [\![-n, n]\!] \mid j \equiv n \bmod 2\}.$$

En effet, comme les pas de la marche sont de taille 1, au bout de n pas on ne peut pas dépasser n en module, et par ailleurs la parité de X_n est égale à la parité de n pour tout $n \in \mathbb{N}$, puisqu'elle change à chaque pas. Pour $j \in E_n$, un chemin $(X_1, X_2, \dots, X_n)$ atteint j au temps n s'il a fait $\frac{n+j}{2}$ pas vers le haut, et $\frac{n-j}{2}$ pas vers le bas. La probabilité d'un chemin de longueur n avec $\frac{n+j}{2}$ pas vers le haut est

$$p^{\frac{n+j}{2}} (1-p)^{\frac{n-j}{2}},$$

et l'emplacement des pas vers le haut est arbitraire, donc :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}[X_n = j] &= (\text{nombres de chemins atteignant } j \text{ au temps } n) \times p^{\frac{n+j}{2}} (1-p)^{\frac{n-j}{2}} \\ &= \binom{n}{\frac{n+j}{2}} p^{\frac{n+j}{2}} (1-p)^{\frac{n-j}{2}}.\end{aligned}$$

Le calcul de la loi marginale $\pi_n(j)$ est donc beaucoup plus simple que dans le cas de la marche sur le cercle ; déterminer l'ensemble des états visités va en revanche demander plus de travail. Une quantité importante est le temps d'atteinte de l'état 1 :

$$\tau_1 = \inf(\{n \in \mathbb{N} \mid X_n = 1\}).$$

Cette variable aléatoire prend ses valeurs dans $(2\mathbb{N}+1) \sqcup \{+\infty\}$ (si on atteint 1, c'est au bout d'un nombre impair de pas). Déterminons sa loi :

Proposition A.11 (Loi du temps d'atteinte de 1 par la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$). *Pour tout $k = 2m+1$ avec $m \in \mathbb{N}$, on a*

$$\mathbb{P}[\tau_1 = k] = \frac{1}{m+1}\binom{2m}{m} p^{m+1}(1-p)^m.$$

Nous allons donner deux preuves de cette proposition ; ces preuves commencent toutes les deux par le même argument. Si $\tau_1 = 2m+1$, alors la marche aléatoire $(X_1, X_2, \dots, X_{2m+1})$ atteint 1 pour la première fois au temps $2m+1$, donc elle est restée négative tout le long de l'intervalle $[\![1, 2m]\!]$, et son dernier pas est $(X_{2m} = 0) \to (X_{2m+1} = 1)$. Ainsi,

$$\{\tau_1 = 2m+1\} = \{X_1, \dots, X_{2m-1} \leq 0, X_{2m} = 0, X_{2m+1} = 1\}.$$

Supposons donné un chemin $(x_1, \dots, x_{2m+1})$ avec $|x_i - x_{i-1}| = 1$ pour tout i, $x_{i\leq 2m} \leq 0$ et $x_{2m+1} = 1$. Alors,

$$\mathbb{P}[X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_{2m+1} = x_{2m+1}] = p^{m+1}\,(1-p)^m,$$

car un tel chemin est composé de $m+1$ pas vers le haut et m pas vers le bas. On a donc :

$$\mathbb{P}[\tau_1 = 2m+1] = (\text{nombre de chemins négatifs jusqu'au temps } 2m) \times p^{m+1}(1-p)^m.$$

On note dans ce qui suit C_m le nombre d'*excursions négatives* de longueur $2m$; c'est le nombre de suites d'entiers $(x_1, x_2, \dots, x_{2m})$ avec $x_0 = x_{2m} = 0$, $x_i \leq 0$ pour tout $i \in [\![1, 2m]\!]$, et $|x_i - x_{i-1}| = 1$ pour tout $i \in [\![1, 2m]\!]$. D'après ce qui précède, pour démontrer la Proposition A.11, il faut établir la formule

$$C_m = \frac{1}{m+1}\binom{2m}{m}.$$

Méthode 1 : utilisation de la série génératrice. Les premières valeurs de la suite $(C_m)_{m\in\mathbb{N}}$ des *nombres de Catalan* sont :

$$C_0 = 1,\ \ C_1 = 1,\ \ C_2 = 2,\ \ C_3 = 5,\ \ C_4 = 14,\ \ C_5 = 42.$$

En effet, pour C_3 par exemple, les chemins suivants sont les 5 excursions négatives de longueur égale à 6.

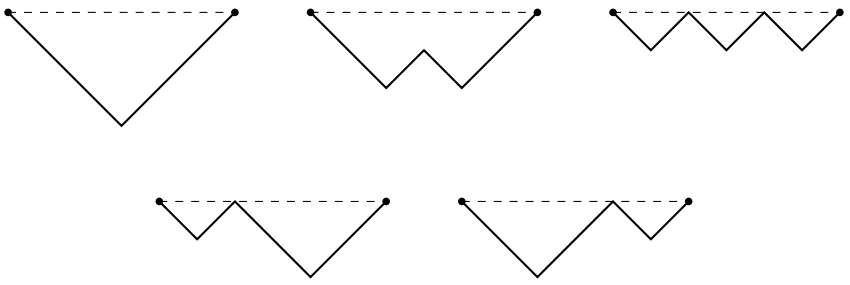


Fig. A.2. Les 5 excursions négatives de longueur $6 = 2 \times 3$, qui sont comptées par le nombre de Catalan C_3.

Lemme A.12 (Récurrence vérifiée par les nombres de Catalan). *Pour tout $m \in \mathbb{N}$,*

$$C_{m+1} = \sum_{n=0}^{m} C_n\, C_{m-n}.$$

Démonstration. On va associer à une excursion négative de longueur $2(m+1)$ un entier $n \in [\![0, m]\!]$ et deux excursions négatives de longueurs respectives $2n$ et $2(m-n)$. Étant donnée une excursion négative de longueur $2(m+1)$, elle commence forcément par un pas $(x_0 = 0) \to$

$(x_1 = -1)$, puis reste strictement négative jusqu'à un temps pair que nous noterons $2(n+1)$, avec $n \in [\![0, m]\!]$; $2(n+1)$ est donc le temps du premier retour en 0. La partie de l'excursion négative entre les instants $2(n+1)$ et $2(m+1)$ est une excursion négative arbitraire de longueur $2(n-m)$ (en bleu sur la Figure A.3). Par ailleurs, entre les instants 1 et $2n+1$, le chemin reste toujours en dessous de -1, donc

$$(x_1 + 1, \dots, x_{2n+1} + 1)$$

est une excursion négative arbitraire de longueur $2n$ (en rouge sur la Figure A.3).

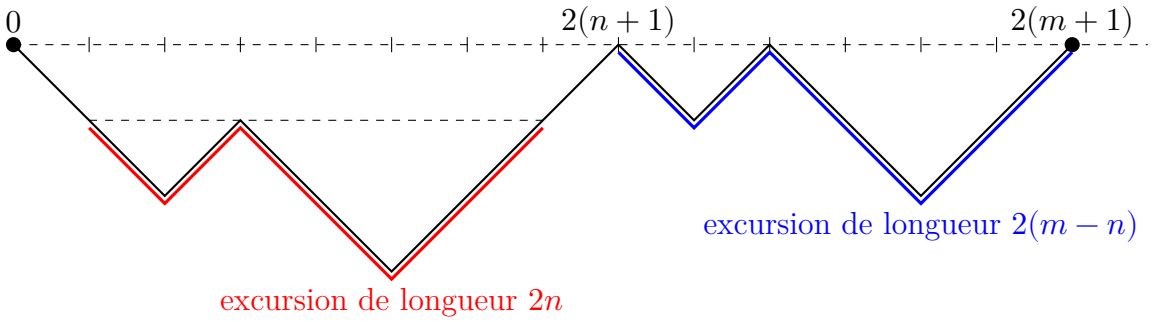


FIG. A.3. Le découpage d'une excursion négative de longueur $2(m+1)$ en deux excursions négatives de longueurs respectives $2n$ et $2(m-n)$.

Il est clair que l'entier n et les deux excursions de longueurs $2n$ et $2(m-n)$ déterminent bijectivement l'excursion de longueur $2(m+1)$. On a donc construit une bijection :

$$\{\text{excursions négatives de longueur } 2(m+1)\} \to \bigsqcup_{n=0}^{m} \begin{matrix}\{\text{excursions négatives de longueur } 2m\} \\ \times \{\text{excursions négatives de longueur } 2(n-m)\}\end{matrix};$$

le résultat s'en déduit en prenant les cardinaux des deux ensembles. □

Introduisons alors la *série génératrice*

$$C(z) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m \, z^m.$$

Cette série entière a un rayon de convergence au moins égal à $\frac{1}{4}$, car pour tout m, $C_m \leq 2^{2m}$ (le nombre total de chemins de longueur $2m$ avec des pas ± 1). De plus, on a l'équation suivante :

$$z\,(C(z))^2 = \sum_{n_1, n_2 = 0}^{\infty} C_{n_1} C_{n_2} \, z^{n_1+n_2+1} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{n=0}^{m} C_n \, C_{m-n} \right) z^{m+1}$$
$$= \sum_{m=0}^{\infty} C_{m+1} z^{m+1} = C(z) - C_0 \, z^0 = C(z) - 1.$$

La fonction $y = C(z)$ vérifie donc sur son disque de convergence l'équation $zy^2 - y + 1 = 0$. Les deux solutions sont :

$$y = \frac{1 \pm \sqrt{1-4z}}{2z}.$$

Appelons ces deux solutions respectivement positive et négative. Remarquons que la solution positive $\frac{1+\sqrt{1-4z}}{2z}$ se comporte au voisinage de 0 comme $\frac{1+1}{2z} = \frac{1}{z}$; mais $C(z)$ est continue en 0 et sans pôle. Par conséquent, la bonne solution est

$$y = C(z) = \frac{1 - \sqrt{1-4z}}{2z},$$

qui tend bien vers $1 = C_0$ lorsque z tend vers 0. Plus précisément : la solution négative est la bonne solution au moins au voisinage de 0 car l'autre solution est trop grande, mais par

ailleurs, $C(z)$ et la solution négative sont holomorphes sur le disque $D(0, \frac{1}{4})$. Par unicité du prolongement analytique, $C(z)$ est donc égale à la solution négative sur tout le disque. En redéveloppant la racine carrée en série entière, on obtient

$$C_m = \frac{2m(2m-1)\cdots(m+2)}{m(m-1)\cdots 1} = \frac{(2m)!}{(m+1)!\,m!} = \frac{1}{m+1}\binom{2m}{m},$$

ce qui achève notre première preuve de la Proposition A.11.

Méthode 2 : principe de réflexion. On va retrouver la formule pour le nombre de Catalan C_m en séparant en deux classes l'ensemble des chemins avec des pas ± 1, de longueur $2m$, issus de 0 et se terminant en 0 :

- les excursions négatives, comptées par le nombre de Catalan C_m ;
- les chemins qui ne restent pas négatifs, et qui atteignent donc 1 avant le temps $2m$. Notons $2k+1$ le premier temps d'atteinte de 1, avec $k \in [\![0, m-1]\!]$. On associe au chemin

$$(x_0 = 0, x_1, \dots, x_{2k} = 0, x_{2k+1} = 1, \dots, x_{2m} = 0)$$

le chemin suivant :

$$(x_0, x_1, \dots, x_{2k}, x_{2k+1}, 2 - x_{2k+2}, \dots, 2 - x_{2m} = 2).$$

On a effectué une réflexion partielle du chemin, en prenant la partie après le temps $2k+1$ et en la réflechissant par rapport à l'axe horizontal d'équation $y = 1$; voir la Figure A.4. Le chemin partiellement réfléchi commence en 0 et se termine en $2 - x_{2m} = 2 - 0 = 2$. Réciproquement, étant donné un tel chemin, il passe forcément par le niveau intermédiaire 1, donc il est obtenu par réflexion partielle par rapport à l'axe $y = 1$ d'un chemin allant de 0 à 0 en $2m$ pas et ne restant pas négatif. On en déduit que le nombre de chemins de cette classe est égal à

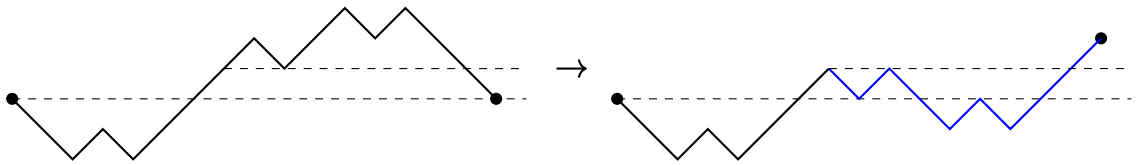


FIG. A.4. Réflexion partielle d'un chemin s'il ne reste pas négatif.

$$(\text{nombre de chemins de longueur } 2m \text{ reliant } x_0 = 0 \text{ à } x_{2m} = 2) = \binom{2m}{m+1},$$

puisque les chemins comptés ont $(m+1)$ pas vers le haut et $(m-1)$ pas vers le bas, à répartir parmi $2m$ pas.

Comme le nombre total de chemins de longueur $2m$ issus de 0 et se terminant en 0 est $\binom{2m}{m}$ (on a m pas vers le haut à répartir parmi $2m$ pas), on conclut que

$$C_m = \binom{2m}{m} - \binom{2m}{m+1} = \frac{(2m)!}{(m-1)!\,m!}\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{m+1}\right) = \frac{(2m)!}{(m+1)!\,m!}.$$

Ceci achève notre seconde preuve de la Proposition A.11. Voyons maintenant les conséquences de cette proposition pour la marche aléatoire de paramètre p sur $\mathbb{Z}$.

Corollaire A.13 (Probabilité d'atteinte de 1 par la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$). *On a*

$$\mathbb{P}[1 \in \{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}] = \mathbb{P}[\tau_1 < +\infty] = \begin{cases} 1 & \text{si } p \geq \frac{1}{2}, \\ \frac{p}{1-p} & \text{si } p < \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Démonstration. La probabilité d'atteinte de 1 est reliée à la fonction génératrice $C(z)$ des nombres de Catalan :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[\tau_1 < +\infty] &= \sum_{m=0}^{\infty} \mathbb{P}[\tau_1 = 2m+1] = \sum_{m=0}^{\infty} C_m\, p^{m+1}\, (1-p)^m \\ &= p \sum_{m=0}^{\infty} C_m\, (p(1-p))^m = p\, C(p(1-p)) = \frac{1-|1-2p|}{2(1-p)}. \end{aligned}$$

Le résultat s'en déduit en distinguant les cas $p \geq \frac{1}{2}$ et $p < \frac{1}{2}$. □

Nous sommes maintenant en mesure de décrire la loi de l'ensemble aléatoire $\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}$ des états visités par la marche aléatoire :

Théorème A.14 (Ensemble des états visités par la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$). *On considère la marche aléatoire de paramètre $p \in (0,1)$ sur $\mathbb{Z}$.*

(1) Si $p = \frac{1}{2}$, alors avec probabilité 1,

$$\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\} = \mathbb{Z},$$

et plus précisément, tous les états $j \in \mathbb{Z}$ sont visités infiniment souvent.

(2) Si $p > \frac{1}{2}$, alors tous les états $j \in \mathbb{Z}$ sont visités un nombre fini de fois avec probabilité 1, et

$$\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\} =_{(\text{loi})} [\![-M, +\infty]\!],$$

où M suit une loi géométrique de paramètre $\frac{1-p}{p}$.

(3) Si $p < \frac{1}{2}$, alors tous les états $j \in \mathbb{Z}$ sont visités un nombre fini de fois avec probabilité 1, et

$$\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\} =_{(\text{loi})} [\![-\infty, M]\!],$$

où M suit une loi géométrique de paramètre $\frac{p}{1-p}$.

Lemme A.15. *Si $\tau_k = \inf(\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n = k\})$ est le temps d'atteinte de $k \geq 1$, alors on a l'identité en loi*

$$\tau_k = \underbrace{\tau_1 + \tau_1 + \cdots + \tau_1}_{k \text{ fois}},$$

où dans le terme de droite on a k copies indépendantes de τ_1.

Démonstration. Le temps d'atteinte de $k \geq 1$ est un élément aléatoire de $(2\mathbb{N}+k) \sqcup \{+\infty\}$. Pour tout $m \in \mathbb{N}$, calculons la probabilité $\mathbb{P}[\tau_k = 2m+k]$. Si cet événement se réalise, le chemin $(x_1, x_2, \ldots, x_{2m+k})$ se décompose en k parties de longueurs respectives $2m_1 + 1, \ldots, 2m_k + 1$, avec $m = m_1 + \cdots + m_k$; pour se faire on pose

$$2(m_1 + \cdots + m_j) + j = \inf(\{i \in \mathbb{N} \,|\, x_i = j\})$$

pour tout $j \in [\![1, k]\!]$ (voir la Figure A.5).

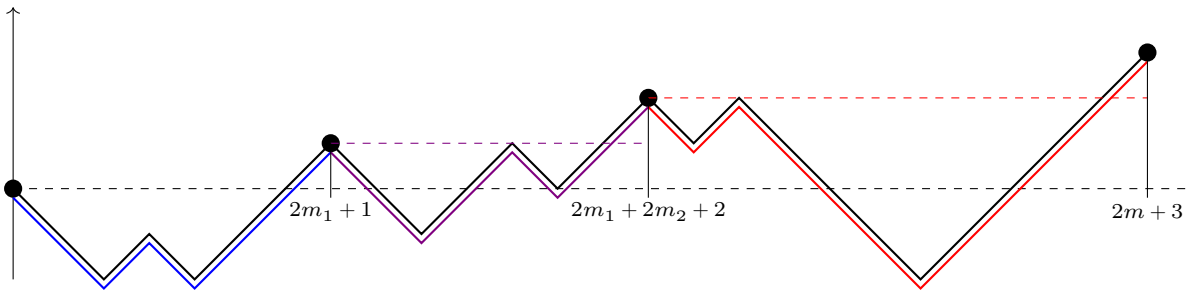


FIG. A.5. Décomposition en k morceaux d'un chemin atteignant k au temps $2m+k$ (ici, $k=3$).

Si les m_j sont fixés, alors le nombre de k-uplets de chemins possibles est $C_{m_1}C_{m_2}\cdots C_{m_k}$, et chaque chemin a pour probabilité $p^{m+k}(1-p)^m = \prod_{j=1}^k p^{m_j+1}(1-p)^{m_j}$. Par conséquent,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}[\tau_k = 2m+k] &= \sum_{m_1+m_2+\cdots+m_k=m} \left(\prod_{j=1}^k C_{m_j}\, p^{m_j+1}(1-p)^{m_j}\right) \\ &= \sum_{m_1+m_2+\cdots+m_k=m} \left(\prod_{j=1}^k \mathbb{P}[\tau_1 = 2m_j+1]\right),\end{aligned}$$

et on reconnaît la formule du produit de convolution de mesures de probabilité. Ainsi, on a montré que

(loi de τ_k sachant τ_k fini)
= (loi d'une somme de k copies de τ_1 sachant que la somme est finie)

et le cas $\{\tau_k = +\infty\}$ s'en déduit par complémentation. □

PREUVE DU THÉORÈME A.14. Supposons d'abord $p = \frac{1}{2}$. Alors, pour tout $k \geq 1$, d'après le Lemme A.15,

$$\mathbb{P}[\tau_k < +\infty] = (\mathbb{P}[\tau_1 < +\infty])^k = 1^k = 1.$$

Par conséquent, tous les états positifs sont contenus avec probabilité 1 dans $\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}$. De plus, dans ce cas symétrique, $(-X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ a la même loi que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ (ces deux objets étant des trajectoires aléatoires dans $\mathbb{Z}^{\mathbb{N}}$). Il s'en déduit que les temps d'atteinte τ_{-k} des nombres négatifs sont aussi finis presque sûrement. Ainsi, $\mathbb{Z} = \{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}$ avec probabilité 1. Alors, pour une raison topologique *déterministe*, la marche aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ doit visiter tous les états infiniment souvent avec probabilité 1 (voir la Figure A.6). En effet, considérons un chemin infini $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ qui atteint tous les entiers de $\mathbb{Z}$, avec $|x_i - x_{i-1}| = 1$ pour tout i. On suppose par l'absurde qu'un état $k \in \mathbb{Z}$ vérifie

$$\mathrm{card}(\{n \in \mathbb{N} \,|\, x_n = k\}) < +\infty.$$

Alors, si N est le dernier temps de passage en k, on a soit $x_n > k$ pour tout $n > N$, soit $x_n < k$ pour tout $n < N$. Supposons par exemple $x_n > k$ pour tout $n > N$. Alors, le chemin $(x_1, \ldots, x_N = k)$ ne contient que des entiers plus grands que $-N$, et comme $x_n > k \geq -N$ pour $n > N$, le chemin infini $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ ne contient aucun entier strictement inférieur à $-N$; ceci contredit l'hypothèse de départ. Cet argument clôt l'étude du cas $p = \frac{1}{2}$.

Pour $p \neq \frac{1}{2}$, la partie qualitative du théorème est une conséquence immédiate de la loi des grands nombres. En effet, $X_n = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n$ est une somme de variables i.i.d. avec $\mathbb{E}[\xi_1] = p - (1-p) = 2p - 1 \neq 0$, donc $\frac{X_n}{n} \to 2p-1$ presque sûrement, ce qui implique que

$$(\mathrm{sgn}(2p-1))\, X_n \to +\infty$$

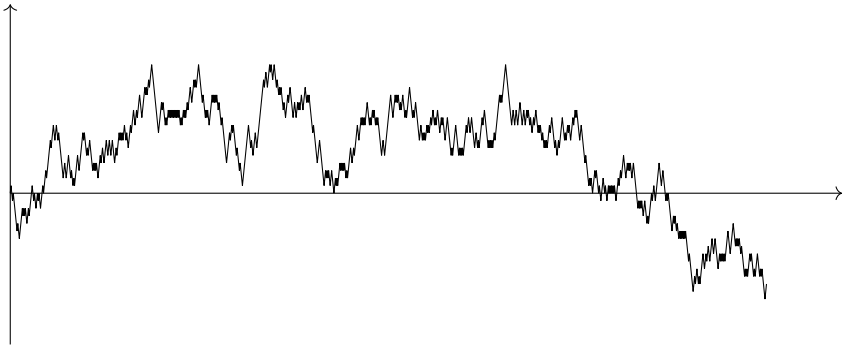


FIG. A.6. Un chemin qui visite tous les états de $\mathbb{Z}$ ne peut le faire qu'en effectuant des allers-retours perpétuels de plus en plus haut et de plus en plus bas ; par conséquent, les états sont visités infiniment souvent. Ici, on a représenté avec un changement d'échelle les 1000 premiers pas d'une marche aléatoire symétrique.

avec probabilité 1. Une trajectoire qui tend vers $+\infty$ ou $-\infty$ ne peut visiter chaque état qu'un nombre fini de fois, d'où l'énoncé qualitatif. Pour la partie quantitative et la description explicite de la loi de $\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}$, considérons par exemple le cas $p < \frac{1}{2}$. Alors, $X_n \to -\infty$, donc $\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}$ est un intervalle borné par en-dessous de la forme $[\![-\infty, M]\!]$, avec

$$M = \max(\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\}).$$

De plus, $\{M \geq k\} = \{\tau_k < +\infty\}$, ce qui implique que

$$\mathbb{P}[M \geq k] = \mathbb{P}[\tau_k < +\infty] = (\mathbb{P}[\tau_1 < +\infty])^k = \left(\frac{p}{1-p}\right)^k$$

compte tenu du Corollaire A.13 et du Lemme A.15. Le maximum d'une marche aléatoire de paramètre $p < \frac{1}{2}$ suit donc une loi géométrique, et le cas du minimum d'une marche de paramètre $p > \frac{1}{2}$ se traite de la même façon. En effet, remarquons que si $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ a paramètre p, alors $(-X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une marche aléatoire de paramètre $1-p$. □

REMARQUE A.16. Avec la terminologie introduite dans la partie théorique du cours, on a donc démontré que la marche de paramètre $p = \frac{1}{2}$ était récurrente, et que les autres paramètres donnaient des chaînes de Markov transientes.

Pour conclure notre étude de la marche aléatoire de paramètre p sur $\mathbb{Z}$, voyons comment utiliser les arguments combinatoires développés jusqu'ici pour expliciter la loi du *temps de retour* τ_0^+ en 0. C'est l'un des seuls cas non triviaux de chaîne de Markov où ce calcul est possible.

PROPOSITION A.17 (Loi du temps de retour). *Si $p = \frac{1}{2}$, alors pour tout $m \geq 0$,*

$$\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)] = \frac{1}{2^{2m+1}}\, C_m,$$

où C_m est le m-ième nombre de Catalan. On a alors $\mathbb{P}_0[\tau_0^+ < +\infty] = 1$ et $\mathbb{E}_0[\tau_0^+] = +\infty$. Si $p \neq \frac{1}{2}$, alors

$$\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)] = 2\, C_m\, (p\,(1-p))^{m+1},$$

et $\mathbb{P}_0[\tau_0^+ < +\infty] = 1 - |1-2p|$.

Démonstration. On utilisera la méthode d'un pas en avant décrite dans le premier chapitre de la partie théorique. Supposons d'abord $p = \frac{1}{2}$. Alors,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)] \\
&= \frac{1}{2}\,\mathbb{P}_0[\tau_0^+((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2(m+1)\,|\,X_1 = 1] + \frac{1}{2}\,\mathbb{P}_0[\tau_0^+((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2(m+1)\,|\,X_1 = -1] \\
&= \frac{1}{2}\,\mathbb{P}_0[\tau_0^+((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2(m+1)\,|\,X_1 = 1] + \frac{1}{2}\,\mathbb{P}_0[\tau_0^+((-X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2(m+1)\,|\,-X_1 = 1] \\
&= \mathbb{P}_0[\tau_0^+((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2(m+1)\,|\,X_1 = 1]
\end{aligned}$$

car si $p = \frac{1}{2}$, alors $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et $(-X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ ont la même loi dans $\mathbb{Z}^{\mathbb{N}}$ sous $\mathbb{P}_0$. Maintenant,

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_0[\tau_0^+((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2(m+1)\,|\,X_1 = 1] &= \mathbb{P}_0[\tau_0^+((X_{n+1})_{n\in\mathbb{N}}) = 2m+1\,|\,X_1 = 1] \\
&= \mathbb{P}_1[\tau_0((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2m+1] \\
&= \mathbb{P}_0[\tau_{-1}((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2m+1] \\
&= \mathbb{P}_0[\tau_1((X_n)_{n\in\mathbb{N}}) = 2m+1]
\end{aligned}$$

en utilisant la propriété de Markov à la seconde ligne ; à la troisième ligne, le fait que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sous $\mathbb{P}_1$ suit la même loi que $(X_n+1)_{n\in\mathbb{N}}$ sous $\mathbb{P}_0$; et la symétrie de la marche à la dernière ligne. Ainsi, par la Proposition A.11,

$$\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)] = \frac{1}{2^{2m+1}}\,C_m.$$

On en déduit

$$\mathbb{P}_0[\tau_0^+ < +\infty] = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2^{2m+1}}\,C_m = \frac{1}{2}\,C\Big(\frac{1}{4}\Big) = 1.$$

Par ailleurs,

$$\mathbb{E}_0[\tau_0^+] = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)]\,(2(m+1)) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(m+1)}{4^m}\,C_m = D'\Big(\frac{1}{4}\Big)$$

où $D(z) = z\,C(z) = \frac{1-\sqrt{1-4z}}{2}$. En effet, $z\,C(z) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m\,z^{m+1}$, donc en dérivant on obtient $D'(z) = \sum_{m=0}^{\infty}(m+1)\,C_m\,z^m$, et l'évaluation en $\frac{1}{4}$ mène à la formule ci-dessus. Mais la fonction racine carrée a pour dérivée $+\infty$ en 0, d'où $\mathbb{E}_0[\tau_0^+] = +\infty$ si $p = \frac{1}{2}$.

Supposons maintenant $p \neq \frac{1}{2}$. En utilisant toujours la méthode d'un pas en avant et le même type d'arguments que dans le cas $p = \frac{1}{2}$, on obtient :

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)] &= p\,\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)\,|\,X_1 = 1] + (1-p)\,\mathbb{P}_0[\tau_0^+ = 2(m+1)\,|\,X_1 = -1] \\
&= p\,\mathbb{P}_1[\tau_0 = 2m+1] + (1-p)\,\mathbb{P}_{-1}[\tau_0 = 2m+1] \\
&= p\,\mathbb{P}_0[\tau_{-1} = 2m+1] + (1-p)\,\mathbb{P}_0[\tau_1 = 2m+1] \\
&= p\,C_m\,p^m(1-p)^{m+1} + (1-p)\,C_m\,p^{m+1}(1-p)^m \\
&= 2\,C_m\,(p\,(1-p))^{m+1}.
\end{aligned}$$

Alors,

$$\mathbb{P}_0[\tau_0^+ < +\infty] = \sum_{m=0}^{\infty} 2\,C_m\,(p\,(1-p))^{m+1} = 2\,D(p\,(1-p)) = 1 - |1-2p|. \qquad \square$$

3. Marche aléatoire dans l'espace.

On peut généraliser l'étude de la marche aléatoire symétrique sur $\mathbb{Z}$ ($p = \frac{1}{2}$) en considérant la marche aléatoire sur le *réseau* $\mathbb{Z}^d$ avec $d \geq 1$. Pour tout $i \in [\![1, d]\!]$, notons $e_i = (0, \dots, 1_i, \dots, 0)$ le vecteur de la base canonique avec un 1 comme i-ième coefficient, et des 0 partout ailleurs. On considère une suite $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de variables à valeurs dans $\mathbb{Z}$, indépendantes et identiquement distribuées, de loi

$$\mathbb{P}[\xi_n = e_i] = \mathbb{P}[\xi_n = -e_i] = \frac{1}{2d} \quad \text{pour tout } i \in [\![1, d]\!] \text{ et tout } n \in \mathbb{N}.$$

On pose ensuite $X_n = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n$. Le processus aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est la marche aléatoire sur le graphe dont les sommets sont les points de $\mathbb{Z}^d$, et dont les arêtes relient deux vecteurs entiers $(x_1, \dots, x_d)$ et $(y_1, \dots, y_d)$ s'ils diffèrent de ± 1 en une seule coordonnée.

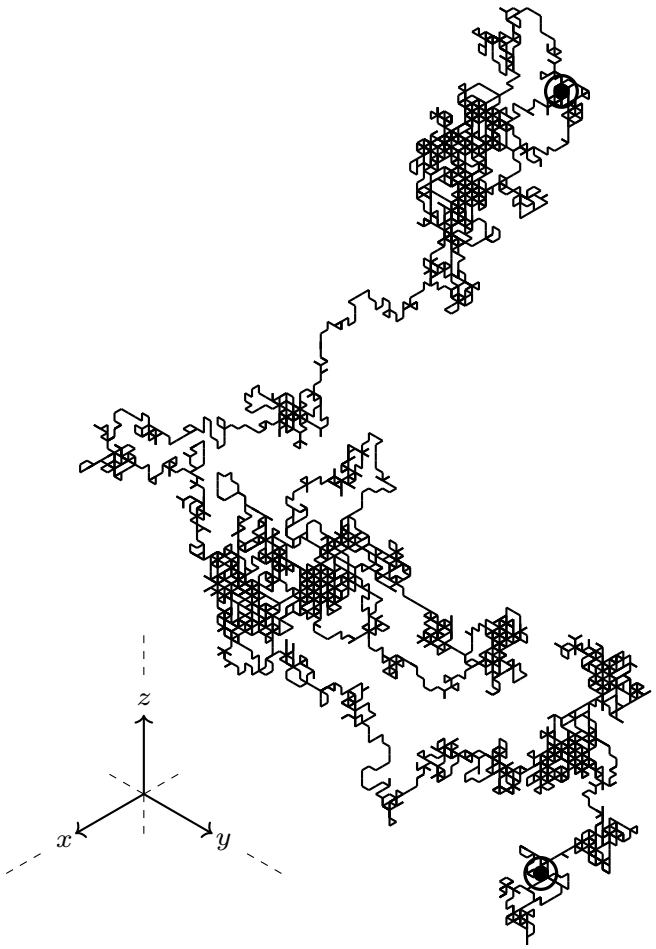


FIG. A.7. Une trajectoire de la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}^3$ (les 5000 premiers pas, le point de départ est en bas et le point d'arrivée en haut).

On avait représenté sur la Figure 1.3 une trajectoire de la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}^2$; sur la Figure A.7 ci-après, on a fait de même pour la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}^3$. Un point non trivial et pas vraiment évident sur ces dessins est que l'addition d'une dimension change fondamentalement le comportement de la marche aléatoire. Plus précisément, on va démontrer :

THÉORÈME A.18 (Récurrence ou transience de la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}^d$). *Si $d \leq 2$, alors la marche aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur $\mathbb{Z}^d$ est récurrente : avec probabilité 1,*

$$\{X_n,\, n \in \mathbb{N}\} = \mathbb{Z}^d, \text{ et tous les états sont visités infiniment souvent.}$$

À l'inverse, si $d \geq 3$, alors la marche aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur $\mathbb{Z}^d$ est transiente : pour toute partie bornée $B \subset \mathbb{Z}^d$,

$$\{n \in \mathbb{N} \,|\, X_n \in B\} \text{ est fini avec probabilité } 1.$$

On aura ici besoin d'une partie de la théorie générale :

- La marche aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur $\mathbb{Z}^d$ est une chaîne de Markov irréductible ; ses états sont donc tous transients, ou tous récurrents.
- Par le critère de récurrence numérique 2.4, la chaîne est irréductible récurrente si et seulement si, pour un site $x \in \mathbb{Z}^d$, on a

$$\mathbb{E}_x[V_x] = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_x[X_n = x] = +\infty.$$

  Les probabilités de transition étant invariantes par translation, la quantité ci-dessus ne dépend pas de x et on fera le calcul pour $x = (0, \dots, 0)$ origine du réseau.

Nous allons traiter successivement les cas $d = 1$, $d = 2$ et $d \geq 3$; le cas $d = 1$ est déjà inclus dans le Théorème A.14 (pour $p = \frac{1}{2}$). Remarquons que pour toute valeur de la dimension d, l'ensemble $R(0)$ des temps possibles de retour en 0 est $\{0, 2, 4, 6, \dots\} = 2\mathbb{N}$. En effet, par répétition de la boucle $0 \to e_1 \to 0$, on voit que tous les entiers pairs sont des temps de retour en l'origine 0, et pour l'inclusion réciproque, notons que la parité de la somme des coordonnées change à chaque pas de la marche aléatoire ; donc, pour revenir en $0 = (0, \dots, 0)$, on ne peut le faire qu'en un nombre pair de pas. On a par conséquent

$$\mathbb{E}_0[V_0] = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_0[X_{2n} = 0].$$

Cas d = 1. Pour le cas uni-dimensionnel, on a calculé dans la section précédente la loi de X_n pour tout $n \in \mathbb{N}$. On obtient ainsi :

$$\mathbb{P}_0[X_{2n} = 0] = \frac{1}{2^{2n}} \binom{2n}{n}.$$

En effet, chaque chemin dans $\mathbb{Z}$ constitué de pas ± 1 et de longueur $2n$ a probabilité $\frac{1}{2^{2n}}$, et parmi ces chemins, $\binom{2n}{n}$ chemins vont de 0 à 0 : on doit répartir n pas vers le haut parmi $2n$ pas. Pour montrer la non-sommabilité de la série $\mathbb{E}_0[V_0]$, on utilisera la *formule de Stirling* :

$$n! = \left(\frac{n}{\mathrm{e}}\right)^n \sqrt{2\pi n}\,(1 + o(1)).$$

Remarque A.19 (Formule de Stirling). Rappelons l'une des preuves les plus simples de la formule de Stirling. Par récurrence sur n et en utilisant une intégration par parties, on montre facilement que :

$$n! = \int_0^\infty x^n \,\mathrm{e}^{-x}\, dx = \int_0^\infty \mathrm{e}^{n\log x - x}\, dx.$$

La fonction $x \mapsto n\log x - x$ atteint son maximum en $x = n$, égal à $n\log n - n$. Ceci amène à mettre en facteur $\mathrm{e}^{n\log n - n} = (\frac{n}{\mathrm{e}})^n$:

$$n!\left(\frac{\mathrm{e}}{n}\right)^n = \int_0^\infty \mathrm{e}^{n\log\frac{x}{n} - (x-n)}\, dx = n\int_0^\infty \mathrm{e}^{n\,(\log u - (u-1))}\, du.$$

Notons que la fonction $u \mapsto \log u - (u-1)$ est négative sur $\mathbb{R}_+$, et atteint son maximum en $u = 1$, égal à 0. Dans un voisinage de ce point, on peut remplacer $\log u - (u-1)$ par son

développement de Taylor $-\frac{(u-1)^2}{2}(1+o(1))$:

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{n\,(\log u-(u-1))}\,du = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \mathrm{e}^{-\frac{nv^2(1+o(1))}{2}} + \int_{|u-1|>\varepsilon} \mathrm{e}^{n\,(\log u-(u-1))}\,du$$
$$= \sqrt{\frac{2\pi}{n}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$$

en faisant le changement de variables $nv^2 = w^2$ et en utilisant la valeur de l'intégrale gaussienne $\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\frac{w^2}{2}}\,dw = \sqrt{2\pi}$. On laisse au lecteur le soin de vérifier que les approximations réalisées ci-dessus sont valides ; elles mènent bien à la formule asymptotique annoncée pour les factorielles.

La formule de Stirling donne l'asymptotique suivante pour les coefficients binomiaux centraux :

$$\binom{2n}{n} = \frac{(\frac{2n}{\mathrm{e}})^{2n}\sqrt{4\pi n}}{(\frac{n}{\mathrm{e}})^{2n}\,2\pi n}\,(1+o(1)) = \frac{2^{2n}}{\sqrt{\pi n}}\,(1+o(1)).$$

Par conséquent, $\mathbb{P}_0[X_{2n}=0] = \frac{1}{\sqrt{\pi n}}\,(1+o(1))$ n'est pas sommable, et $\mathbb{E}_0[V_0] = +\infty$; on retrouve la récurrence de la marche aléatoire symétrique sur $\mathbb{Z}$.

Cas d = 2. Pour la marche aléatoire sur le plan, notons que si l'on revient au temps $2n$ en 0, alors il existe deux entiers n_1 et n_2 tels que $n_1+n_2=n$, et tels qu'au cours de l'intervalle de temps $[\![1,2n]\!]$, la marche a fait n_1 pas vers le haut, n_1 pas vers le bas, n_2 pas vers la gauche et n_2 pas vers la droite. Si n_1 et n_2 sont fixés, alors le nombre de chemins dans le plan correspondant à ces quantités est

$$\frac{(2n)!}{(n_1!)^2(n_2!)^2} = \binom{2n}{n}\binom{n}{n_1}\binom{n}{n_2}.$$

Par ailleurs, la probabilité de tout chemin de longueur $2n$ dans le plan est $\frac{1}{4^{2n}}$. On obtient donc :

$$\mathbb{P}_0[X_{2n}=0] = \frac{1}{4^{2n}}\binom{2n}{n}\sum_{n_1+n_2=n}\binom{n}{n_1}\binom{n}{n_2}.$$

Lemme A.20 (Formule de Vandermonde). *Soit m,p,q trois entiers positifs. On a*

$$\sum_{m_1+m_2=m}\binom{p}{m_1}\binom{q}{m_2} = \binom{p+q}{m},$$

la somme étant effectuée sur les paires d'entiers positifs ou nuls dont la somme vaut m.

Démonstration. Les deux termes de la formule correspondent au coefficient de x^m dans le polynôme $(1+x)^{p+q} = (1+x)^p\,(1+x)^q$. □

Avec $m=p=q=n$, on obtient donc dans le cas planaire :

$$\mathbb{P}_0[X_{2n}=0] = \frac{1}{4^{2n}}\binom{2n}{n}^2.$$

Notons que c'est le carré de la formule du cas uni-dimensionnel. En particulier, la formule de Stirling donne $\mathbb{P}_0[X_{2n}=0] = \frac{1}{\pi n}\,(1+o(1))$, donc la famille $(\mathbb{P}_0[X_{2n}=0])_{n\geq 1}$ n'est pas sommable. La marche aléatoire sur $\mathbb{Z}^2$ est donc de nouveau récurrente.

Cas d $\geq$ 3. Dans les deux précédents cas, on a obtenu une formule asymptotique du type

$$\mathbb{P}_0[X_{2n}=0] = O\Big(n^{-\frac{d}{2}}\Big).$$

Si cela est encore vrai pour $d \geq 3$, alors la transience de la marche aléatoire en dimension supérieure à 3 sera établie, car on obtiendra une série sommable dans ces cas. Comme dans le cas $d=2$, si l'on revient au temps $2n$ en l'origine du réseau, alors il existe des entiers $n_1, \dots, n_d$ positifs ou nuls tels que $n_1+n_2+\cdots+n_d = n$, et tels que, pour chaque direction e_i avec $i \in [\![1,d]\!]$, on a fait n_i pas $+e_i$ et n_i pas $-e_i$ sur l'intervalle de temps $[\![1,n]\!]$. Le nombre de chemins avec ces caractéristiques est

$$\frac{(2n)!}{(n_1!)^2(n_2!)^2\cdots(n_d!)^2} = \binom{2n}{n}\binom{n}{n_1,n_2,\dots,n_d}^2,$$

et chaque chemin de longueur $2n$ a pour probabilité $\frac{1}{(2d)^{2n}}$. Ainsi,

$$\mathbb{P}_0[X_{2n}=0] = \frac{1}{(2d)^{2n}}\binom{2n}{n}\sum_{n_1+n_2+\cdots+n_d=n}\binom{n}{n_1,n_2,\dots,n_d}^2.$$

Pour $d \geq 3$, il n'y a pas de formule de type Vandermonde permettant de simplifier la somme des carrés des coefficients multinomiaux. On dispose néanmoins de la formule du multinôme de Newton :

$$\sum_{n_1+n_2+\cdots+n_d=n}\binom{n}{n_1,n_2,\dots,n_d} = n^d.$$

Puisqu'on veut borner la probabilité $\mathbb{P}_0[X_{2n}=0]$ par une suite sommable, on est donc tenté d'écrire :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_0[X_{2n}=0] &\leq \frac{1}{(2d)^{2n}}\binom{2n}{n}\left(\sum_{n_1+\cdots+n_d=n}\binom{n}{n_1,\dots,n_d}\right)\left(\max_{n_1+\cdots+n_d=n}\binom{n}{n_1,\dots,n_d}\right)\\ &\leq \frac{1}{(4d)^n}\binom{2n}{n}\left(\max_{n_1+\cdots+n_d=n}\binom{n}{n_1,\dots,n_d}\right).\end{aligned}$$

Il s'agit alors d'identifier quelle est la valeur maximale possible d'un coefficient multinomial de somme n fixée. Dans le cas binomial, il est bien connu que le coefficient $\binom{n}{k}$ le plus grand possible avec n fixé est le coefficient central $\binom{n}{\lfloor \frac{n}{2}\rfloor}$. On a un résultat analogue avec les coefficients mutlinomiaux :

Lemme A.21 (Coefficient multinomial maximal). *Si $n \geq 1$ et $d \geq 2$ sont deux entiers positifs, alors*

$$M_{n,d} = \max_{n_1+\cdots+n_d=n}\binom{n}{n_1,\dots,n_d} = \binom{n}{\lfloor \frac{n}{d}\rfloor^{\otimes d-r}\ \lfloor \frac{n}{d}+1\rfloor^{\otimes r}},$$

où $r \in [\![0,d-1]\!]$ est le reste de la division euclidienne de n par d.

Démonstration. Notons que la division euclidienne de n par d s'écrit $n = qd+r$ avec $q = \lfloor \frac{n}{d}\rfloor$. En particulier,

$$(d-r)\left\lfloor \frac{n}{d}\right\rfloor + r\left\lfloor \frac{n}{d}+1\right\rfloor = dq+r = n.$$

Par ailleurs, la suite avec $d-r$ entrées $\lfloor \frac{n}{d}\rfloor$ et r entrées égales à $\lfloor \frac{n}{d}+1\rfloor$ est (à permutation des termes près) l'unique décomposition de n en somme $n_1+\cdots+n_d$ de d entiers telle que $\max_{i\neq j}|n_i-n_j| \leq 1$. Pour établir le lemme, il suffit donc de montrer que si une décomposition

$n = n_1 + \cdots + n_d$ contient deux termes n_i et n_j avec $|n_i - n_j| \geq 2$, alors le coefficient multinomial correspondant n'est pas maximal. Or, ceci est facile à établir : si $n_i - n_j \geq 2$, alors sans changer la somme $n_1 + \cdots + n_d = n$, on peut remplacer n_i par $n_i - 1$ et n_j par $n_j + 1$, et ceci modifie le coefficient multinomial par un facteur

$$\frac{n_i}{n_j + 1} > 1. \qquad \square$$

Ainsi, le coefficient d-multinomial maximal avec somme n fixée est obtenu lorsque les entiers $n_1, \ldots, n_d$ sont les plus proches possibles de $\frac{n}{d}$. Utilisons maintenant la formule de Stirling pour estimer $M_{n,d}$. Supposons d'abord que d divise n ; alors, $r = 0$ dans le lemme qui précède, et

$$M_{n,d} = \binom{n}{\frac{n}{d}, \ldots, \frac{n}{d}} = \frac{(\frac{n}{\mathrm{e}})^n \sqrt{2\pi n}}{(\frac{n}{d\mathrm{e}})^n \, (2\pi \frac{n}{d})^{\frac{d}{2}}} \, (1 + o(1)) = \frac{d^{n+\frac{d}{2}}}{(2\pi n)^{\frac{d-1}{2}}} \, (1 + o(1)) = O\left(\frac{d^n}{n^{\frac{d-1}{2}}} \right),$$

la constante dans le $O(\cdot)$ ne dépendant que de d. Pour les termes suivants (de reste 1, 2, *etc.* dans la division euclidienne par n), on a

$$M_{n+1,d} = \frac{n+1}{\frac{n}{d} + 1} \, M_{n,d} \leq d \, M_{n,d};$$
$$M_{n+2,d} = \frac{n+2}{\frac{n}{d} + 1} \, M_{n+1,d} \leq d^2 \, M_{n,d}$$

etc. ; ainsi, $M_{n+r,d}$ avec $r \in [\![1, d-1]\!]$ est plus petit que

$$d^r \, M_{n,d} = O\left(\frac{d^{n+r}}{(n+r)^{\frac{d-1}{2}}} \right).$$

L'estimée $M_{n,d} = O(d^n \, n^{-\frac{d-1}{2}})$ est donc vraie pour tout n, y compris lorsque d ne divise pas n. On peut maintenant achever l'estimation de $\mathbb{P}_0[X_{2n} = 0]$:

$$\mathbb{P}_0[X_{2n} = 0] = O\left(\frac{1}{(4d)^n} \binom{2n}{n} M_{n,d} \right) = O\left(\frac{1}{(4d)^n} \, \frac{4^n}{n^{\frac{1}{2}}} \, \frac{d^n}{n^{\frac{d-1}{2}}} \right) = O\left(\frac{1}{n^{\frac{d}{2}}} \right),$$

avec une constante dans le $O(\cdot)$ ne dépendant que de la dimension $d \geq 2$. On conclut que

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_0[X_{2n} = 0] < +\infty$$

puisque $d \geq 3$, et donc que la marche aléatoire sur $\mathbb{Z}^{d \geq 3}$ est transiente. Elle ne visite donc chaque état qu'un nombre fini de fois, et si l'on fixe une boîte B finie, alors avec probabilité 1, X_n n'est plus dans cette boîte pour n assez grand ; la marche aléatoire s'échappe donc vers l'infini.

B. Simulation de variables aléatoires

Dans ce second chapitre d'applications, nous nous intéressons à deux modèles combinatoires aléatoires : le modèle des configurations de spins sous la mesure d'Ising, et le modèle des partitions planes aléatoires. La définition des mesures de probabilité $\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{N,\beta}$ et $\mathbb{P}^{\text{pp}}_{N,q}$ correspondant à ces modèles n'est pas très compliquée, mais même pour une taille de modèle N très petite (disons $N = 10$), une méthode naïve de simulation n'est pas possible (même avec un ordinateur très puissant). La théorie des chaînes de Markov va permettre de résoudre ce problème, en deux temps :

- En utilisant le théorème de convergence vers la loi stationnaire 3.19, nous pourrons facilement construire des variables aléatoires issues de chaînes de Markov et qui suivent *presque* la mesure de probabilité souhaitée π. En effet, il suffira de considérer une chaîne irréductible apériodique $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de loi stationnaire π, et de prendre X_n avec n assez grand. Cette méthode est communément appelée *algorithme de Metropolis*, et les chaînes de Markov que nous contruirons pour nos deux modèles suivent une *dynamique de type Glauber*.
- En modifiant un peu la construction des chaînes de Markov et en utilisant un argument de couplage, nous pourrons en fait construire une variable X de loi exactement égale à la mesure de probabilité souhaitée π ; c'est la méthode du *couplage par le passé* introduite par Propp et Wilson dans les années 1990.

1. Le modèle d'Ising et les partitions planes aléatoires.

Soit $N \geq 1$ un entier, et β un paramètre réel positif. Une *configuration de spins* sur la grille de taille $N \times N$ est une fonction $\sigma : [\![1, N]\!] \times [\![1, N]\!] \to \{\pm 1\}$: on attribue à chaque site d'une grille carrée un signe. Graphiquement, on pourra représenter ces signes par deux couleurs, disons bleu (sites positifs) et gris (sites négatifs). On a représenté sur la Figure B.2 le modèle de configuration de spins aléatoires le plus simple, où toutes les variables $\sigma(x)$ avec $x \in [\![1, N]\!]^2$ sont indépendantes de loi de Bernoulli $\mathbb{P}[\sigma(x) = +1] = \mathbb{P}[\sigma(x) = -1] = \frac{1}{2}$. On observe quelque chose d'assez chaotique et sans structure. Le *modèle d'Ising* est une famille de mesures de probabilité sur l'espace

$$\mathfrak{X}^{\text{Ising}}_N = \{\pm 1\}^{[\![1,N]\!]^2}$$

qui créent une dépendance entre les sites, et qui donnent plus de structure aux configurations aléatoires typiques que le modèle indépendant. Étant donnée une configuration σ, son *énergie* est

$$H(\sigma) = -\sum_{x\sim y} \sigma(x)\,\sigma(y),$$

où la somme est effectuée sur les paires $\{x, y\}$ de sites voisins dans la grille. Si deux sites voisins x et y ont le même signe $\sigma(x) = \sigma(y)$, ceci a tendance à diminuer l'énergie de la configuration. Inversement, deux sites voisins de signes différents contribuent à une énergie plus élevée. On a listé dans la Figure B.1 des configurations de taille 2×2 (à symétries du carré près et interversion des signes, elles apparaissent toutes) et leurs énergies respectives.

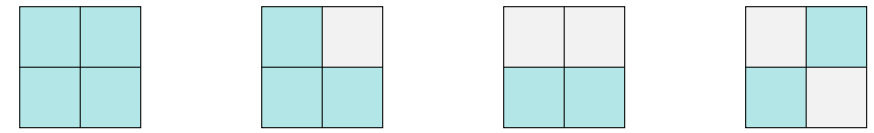


FIG. B.1. Les énergies des configurations de taille 2×2.

DÉFINITION B.1 (Modèle d'Ising). *Le modèle d'Ising de paramètre $\beta \in \mathbb{R}_+$ sur la grille de taille $N \times N$ est la mesure de probabilité sur $\mathfrak{X}_N^{\text{Ising}}$ donnée par*

$$\mathbb{P}_{N,\beta}^{\text{Ising}}[\sigma] = \frac{1}{Z_{N,\beta}^{\text{Ising}}} \mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)},$$

où $Z_{N,\beta}^{\text{Ising}}$ est la constante de normalisation (parfois appelée fonction de partition) qui fait de $\mathbb{P}_{N,\beta}^{\text{Ising}}$ une mesure de probabilité :

$$Z_{N,\beta}^{\text{Ising}} = \sum_{\sigma \in \mathfrak{X}_N^{\text{Ising}}} \mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}.$$

FIG. B.2. Une configuration de spins de taille $N = 50$ avec des sites indépendants ($\beta = 0$).

La mesure d'Ising a tendance à favoriser les configurations avec beaucoup de paires de sites voisins qui ont même signe : plus une configuration a de sites voisins semblables, plus son énergie est faible et plus le facteur $\mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}$ est grand. L'effet est d'autant plus prononcé que le paramètre β est grand (en physique, le paramètre β est proportionnel à l'inverse de la température). On a représenté sur la Figure B.3 des configurations de taille 30×30 sous les mesures d'Ising avec des paramètres $\beta \in [0.2, 0.5]$; on constate que plus β est grand, moins il y a de zones disjointes de spins positifs ou négatifs (par exemple, pour $\beta = 0.4$, on observe une

seule région connexe géante de spins négatifs, et quelques ilôts négatifs de taille très petite ; c'est encore plus clair pour $\beta = 0.5$ où il n'y a plus qu'une seule région négative). Il y a un changement assez net de comportement aux alentours de

$$\beta = \beta_c = \log\left(\sqrt{1+\sqrt{2}}\right) \simeq 0.4407;$$

pour $\beta > \beta_c$, on observe une *magnétisation spontanée* des configurations. Cette transition de phase est un phénomène assez célèbre en mécanique statistique ; d'un point de vue mathématique, ceci dépasse largement le cadre de ce cours (pour rendre l'énoncé rigoureux, on aurait en particulier besoin de définir la mesure d'Ising en volume infini).



FIG. B.3. Configurations de spins sous la mesure d'Ising $\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{30,\beta}$ avec $\beta \in \{0.2, 0.3, 0.4, 0.5\}$.

Le problème que l'on se propose de résoudre est le suivant : comment simuler comme sur la Figure B.3 une configuration aléatoire de loi $\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{N,\beta}$, avec N raisonnablement grand (disons de l'ordre de $N = 100$), et β un paramètre arbitraire ? Pour comprendre la difficulté de ce problème, commençons par décrire la méthode naïve de simulation d'un objet aléatoire de loi de probabilité connue sur un ensemble fini $\mathfrak{X}$.

MÉTHODE NAÏVE. *Supposons donnés un ensemble fini* $\mathfrak{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_M\}$, *et une mesure de probabilité* $\mathbb{P}$ *sur* $\mathfrak{X}$. *Pour simuler une variable aléatoire* X *de loi* $\mathbb{P}$, *on procède comme suit :*

(1) On calcule toutes les probabilités $\mathbb{P}[x_i]$, *ainsi que les sommes partielles* $\sum_{i=1}^{k} \mathbb{P}[x_i]$.

(2) On tire au hasard un nombre réel U *dans* $[0,1]$ *sous la loi uniforme.*

(3) On choisit l'unique entier k *tel que* $\sum_{i=1}^{k-1} \mathbb{P}[x_i] \leq U < \sum_{i=1}^{k} \mathbb{P}[x_i]$.

Alors, $X = x_k$ *est bien une variable aléatoire de loi* $\mathbb{P}$.

Le problème de la méthode naïve est que, à moins qu'il existe une formule simple pour calculer l'indice k à partir de U, on a besoin de stocker en mémoire toutes les probabilités $\mathbb{P}[x_i]$ pour $i \in [\![1, M]\!]$ avec $M = \mathrm{card}(\mathfrak{X})$. Or, même si le modèle aléatoire considéré est de petite taille, le nombre de possibilités pour l'objet aléatoire $X \in \mathfrak{X}$ peut être gigantesque. Dans le cas du modèle d'Ising, on a par exemple :

$$\mathrm{card}\left(\mathfrak{X}_N^{\mathrm{Ising}}\right) = 2^{N^2},$$

donc pour tirer au hasard une configuration de taille 10×10 avec la méthode naïve, il faudrait calculer et stocker en mémoire 2^{100} probabilités ! Ce qui est impossible même avec l'ordinateur le plus puissant au monde. Au cours de ce chapitre, nous présenterons deux algorithmes pas beaucoup plus compliqués que la méthode naïve, et qui résolvent ce problème.

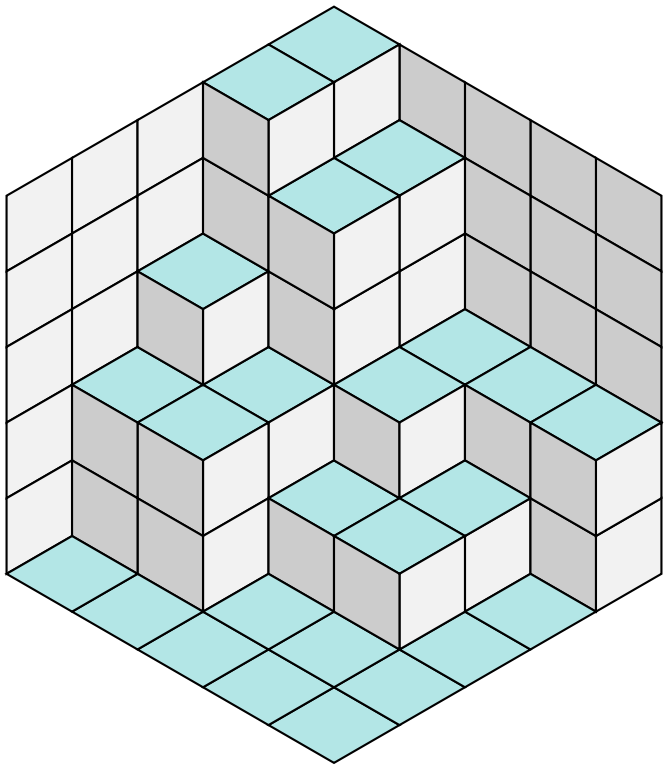


FIG. B.4. Une partition plane inscrite dans le cube $5 \times 5 \times 5$.

Le second modèle que l'on souhaite étudier est celui des partitions planes aléatoires inscrites dans un cube $N \times N \times N$ et choisies suivant une probabilité proportionnelle à $q^{\mathrm{vol}(P)}$. Considérons l'octant $(\mathbb{R}_+)^3$, où l'on peut placer à chaque coordonnée entière (k, l, m) un cube de taille $1 \times 1 \times 1$. On place le cube de sorte qu'il remplisse le produit d'intervalles $[k, k+1] \times [l, l+1] \times [m, m+1]$. Une *partition plane* est une collection finie de cubes, avec les règles suivantes :

- si un cube est placé en (k,l,m) avec $k \geq 1$, alors il y a aussi un cube placé en $(k-1,l,m)$.
- si un cube est placé en (k,l,m) avec $l \geq 1$, alors il y a aussi un cube placé en $(k,l-1,m)$.
- si un cube est placé en (k,l,m) avec $m \geq 1$, alors il y a aussi un cube placé en $(k,l,m-1)$.

Autrement dit, on empile des cubes en respectant les règles de la gravité, et en interdisant des trous dans l'empilement. On dit que la partition plane est inscrite dans le cube $N \times N \times N$ si tous les petits cubes $1 \times 1 \times 1$ le sont (autrement dit, ils sont positionnés à des emplacements (k,l,m) avec $0 \leq k < N$, $0 \leq l < N$ et $0 \leq m < N$). On a représenté sur la Figure B.4 une partition plane P inscrite dans un cube de taille $N = 5$. Elle contient $15+12+5+4+2 = 38$ cubes ; on dira que le *volume* de P est $\mathrm{vol}(P) = 38$.

Il est clair sur la Figure B.4 que toute partition plane inscrite dans un cube de taille N peut aussi être considérée comme un *pavage par des losanges* de l'hexagone régulier dont les côtés sont de taille N. Il y a trois types de losange ; si on les remplace par des arêtes reliant deux points suivant la règle de la Figure B.5, on obtient une *configuration de dimères* sur une partie du réseau hexagonal.

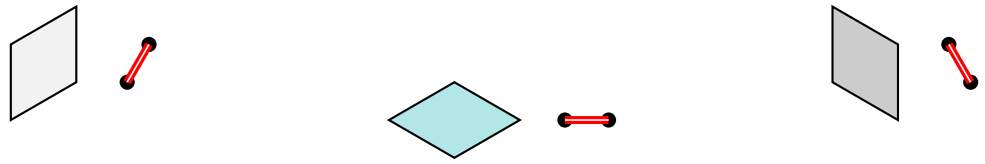


FIG. B.5. Dimères équivalents aux losanges.

On a par exemple dessiné sur la Figure B.6 la configuration équivalente à la partition plane de la Figure B.4. Le dessin que l'on obtient est un coloriage de certaines des arêtes du réseau hexagonal, la partie du réseau hexagonal mise en jeu étant un hexagone régulier dont les côtés sont formés par N petits hexagones (avec $N = 5$ dans l'exemple considéré). Certaines arêtes sont coloriées en rouge et indiquent l'orientation des losanges du pavage correspondant ; la règle est que tout sommet de la figure est relié à exactement un voisin par une arête rouge. Autrement dit, on a un *appariement complet* des sommets du graphe donné par la partie de taille N du réseau hexagonal ; c'est ce que l'on appelle aussi une configuration de dimères.

On note $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}$ l'ensemble des partitions planes inscrites dans un cube de taille N (y compris la partition plane vide avec 0 petits cubes). Le cardinal de $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}$ est donné par une formule relativement simple :

$$\mathrm{card}(\mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}) = \prod_{1 \leq i,j,k \leq N} \frac{i+j+k-1}{i+j+k-2}.$$

Par exemple, on peut montrer par énumération exhaustive que $\mathrm{card}(\mathfrak{X}_2^{\mathrm{pp}}) = 20$, et on peut vérifier que le produit ci-dessus donne la même chose. Dans ce qui suit, on s'intéresse à la mesure uniforme sur $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}$, et plus généralement à la q-mesure de probabilité donnée par :

$$\mathbb{P}_{N,q}^{\mathrm{pp}}[P] = \frac{1}{Z_{N,q}^{\mathrm{pp}}}\, q^{\mathrm{vol}(P)},$$

où $q > 0$ est un réel positif, et $Z_{N,q}^{\mathrm{pp}} = \sum_{P \in \mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}} q^{\mathrm{vol}(P)}$ est la constante positive qui fait de $\mathbb{P}_{N,q}^{\mathrm{pp}}$ une probabilité sur $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}$. Le cas $q = 1$ donne la mesure uniforme sur les partitions planes. On peut donner une formule explicite pour $Z_{n,q}^{\mathrm{pp}}$ généralisant le cas $q = 1$:

$$Z_{N,q}^{\mathrm{pp}} = \prod_{1 \leq i,j,k \leq N} \frac{q^{i+j+k-1}-1}{q^{i+j+k-2}-1}.$$

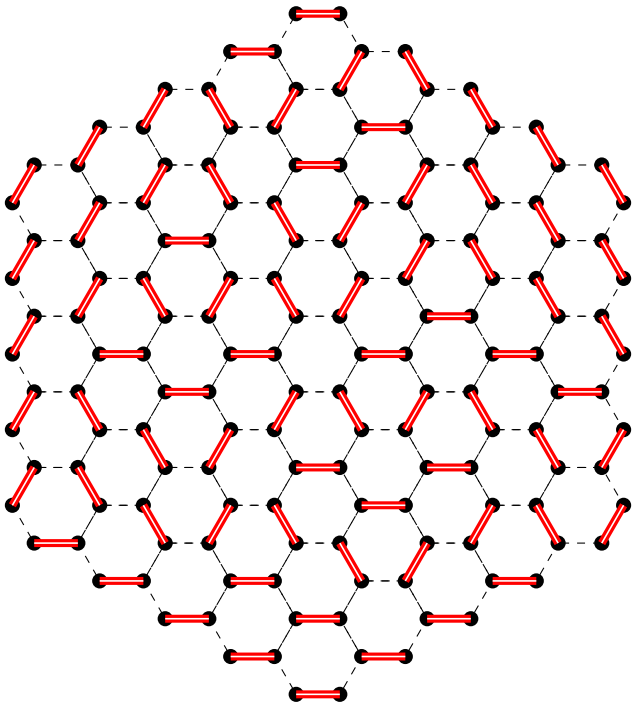


FIG. B.6. La configuration de dimères équivalente à la partition plane de la Figure B.4.

La preuve de cette formule dépasse largement le cadre de ce cours. La Figure B.7 représente une partition plane aléatoire sous la mesure uniforme $\mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{10,1}$, et une autre sous la mesure $\mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{10,0.8}$; un paramètre $q < 1$ a tendance à favoriser les partitions planes de faible volume.

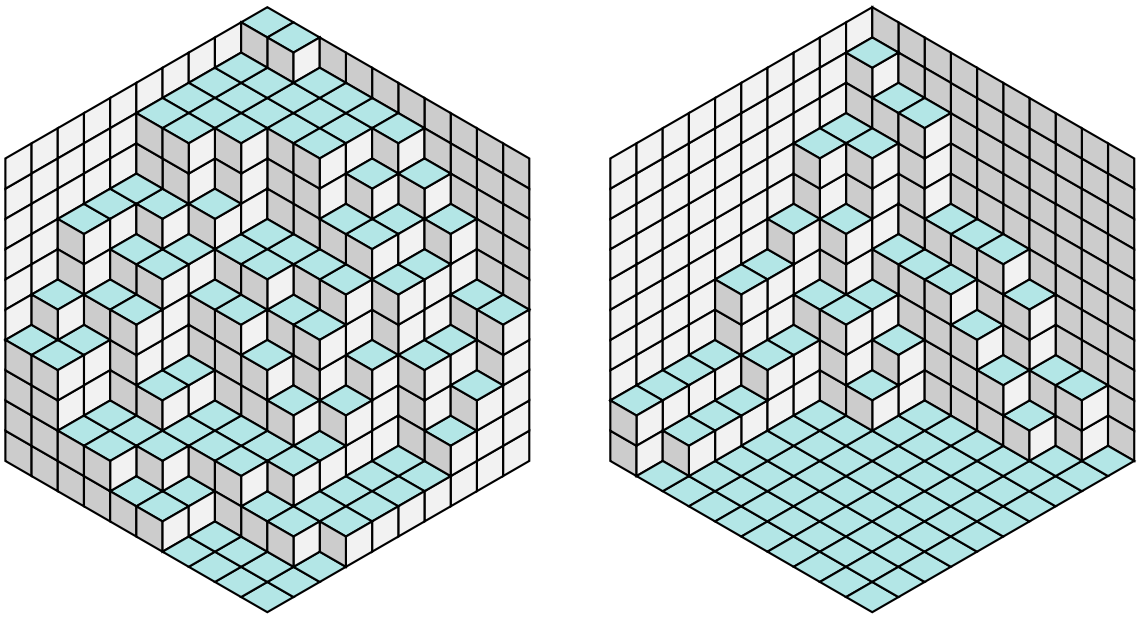


FIG. B.7. Deux partitions planes aléatoires choisies suivant les mesures $\mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{10,1}$ (à gauche) et $\mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{10,0.8}$ (à droite).

On souhaite de nouveau être capable de simuler une partition plane aléatoire sous une mesure $\mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{N,q}$, pour q arbitraire et N relativement grand (disons $N = 20$). De nouveau, $\mathrm{card}(\mathfrak{X}^{\mathrm{pp}}_N) = Z^{\mathrm{pp}}_{N,1}$ croît très rapidement avec N : une comparaison de $\log Z^{\mathrm{pp}}_{N,1}$ avec une intégrale triple

montre en effet que

$$\log \operatorname{card}(\mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}) = O\left(N^2 \log N\right).$$

On a donc comme précédemment besoin de techniques plus avancées que la méthode de simulation naïve.

2. Algorithme de Metropolis.

Un *algorithme de type Metropolis* pour la simulation d'une variable aléatoire de loi π sur un ensemble fini $\mathfrak{X}$ repose sur l'idée suivante. Supposons que l'on dispose d'une matrice de transition P sur $\mathfrak{X}$ irréductible et apériodique. Comme l'espace des états est fini, la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ associée à P est récurrente positive, et par le théorème de convergence 3.19, la loi π_n de X_n converge vers la loi stationnaire pour P. En particulier, si P a été choisie de telle sorte que $\pi P = \pi$ (π est la loi stationnaire de P), alors on obtient une bonne approximation d'une variable de loi π en prenant simplement X_n avec n grand, car $d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \to_{n\to\infty} 0$. Donc, l'algorithme est :

- construire P matrice stochastique irréductible et apériodique telle que $\pi P = \pi$;
- construire la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ associée à P ;
- renvoyer X_n avec n suffisamment grand.

Le calcul de la variable X_n demande un nombre d'opérations qui croît linéairement avec n. En effet, le théorème de représentation 1.11 assure que l'on peut construire X_n par récurrence en posant $X_{n+1} = f(X_n, \xi_n)$, pour une certaine fonction f et une famille d'aléas i.i.d. $(\xi_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Par conséquent, chaque transition $X_n \to X_{n+1}$ a un coût constant, à savoir le temps de calcul d'un aléa ξ et d'une application de la fonction f. Si l'on a une idée de l'ordre de grandeur du paramètre n à choisir pour que la distance en variation totale $d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi)$ soit raisonnablement petite, alors on obtient une estimation de la complexité de l'algorithme Metropolis, qui produit une variable aléatoire de loi *presque égale* à la loi recherchée π. Le problème du calcul du paramètre n « suffisant » est celui de la *vitesse de convergence* des chaînes de Markov récurrentes positives ; il sera abordé dans le Chapitre C.

Pour les deux modèles présentés dans la section précédente, il existe une chaîne de Markov qui a pour mesure stationnaire $\mathbb{P}_{N,\beta}^{\mathrm{Ising}}$ ou $\mathbb{P}_{N,q}^{\mathrm{pp}}$, et dont les transitions sont des modifications *locales* de la configuration :

- une modification d'un seul spin $\sigma(x)$ pour le modèle d'Ising,
- une modification d'un seul hexagone pour le modèle des partitions planes, qui sont équivalentes à des configurations de dimères sur le réseau hexagonal.

On parle de *dynamique (aléatoire) de Glauber*. Commençons par énoncer un lemme très utile pour montrer qu'une mesure est invariante par rapport à une certaine matrice stochastique P.

Lemme B.2 (Mesures réversibles). *Soit P une matrice stochastique sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, et π une mesure de probabilité qui vérifie*

$$\pi(x)\, P(x,y) = \pi(y)\, P(y,x)$$

pour toute paire d'états $(x,y) \in \mathfrak{X}^2$. On parle dans ce cas de mesure réversible. Alors, π est une mesure invariante pour la matrice P.

Démonstration. En sommant la relation de réversibilité sur tous les états $y \in \mathfrak{X}$, on obtient :

$$\pi(x) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} \pi(x)\, P(x,y) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} \pi(y)\, P(y,x) = (\pi P)(x). \qquad \square$$

Remarque B.3. À l'inverse, une mesure invariante n'est pas forcément réversible ; la condition de réversibilité est strictement plus forte que l'invariance, mais l'équation correspondante est beaucoup plus simple à résoudre.

Décrivons maintenant les chaînes de Markov pertinentes sur les espaces $\mathfrak{X}_N^{\text{Ising}}$ et $\mathfrak{X}_N^{\text{pp}}$. On va les construire *via* une équation de récurrence comme dans le théorème de représentation.

Chaîne de Markov du modèle d'Ising. Soit $\sigma \in \mathfrak{X}_N^{\text{Ising}}$, $u \in [0,1]$ et $x \in [\![1,N]\!]^2$ un site de la grille carrée. On note dans ce qui suit σ_+^x la configuration qui est égale à σ en tous les sites, sauf éventuellement en x où l'on pose $\sigma_+^x(x) = +1$; on a donc, pour $y \neq x$, $\sigma_+^x(y) = \sigma(y)$. On définit de même σ_-^x, qui est égale à σ partout sauf éventuellement en x, avec $\sigma_-^x(x) = -1$. On pose :

$$f(\sigma,(x,u)) = \begin{cases} \sigma_+^x & \text{si } u \leq \dfrac{\mathrm{e}^{\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)}}{2\cosh\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)\bigr)}, \\[2ex] \sigma_-^x & \text{si } u > \dfrac{\mathrm{e}^{\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)}}{2\cosh\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)\bigr)}, \end{cases}$$

où les sommes sont effectuées sur les sites y voisins de x. La fonction f modifie donc la configuration σ au niveau du site x, en imposant un signe positif ou un signe négatif en fonction de la valeur de u. On se donne ensuite :

- une configuration σ_0 arbitraire, éventuellement aléatoire, indépendante des deux suites ci-dessous ;
- une suite $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de sites indépendants choisis suivant la mesure uniforme de $[\![1,N]\!]^2$;
- une suite $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de réels indépendants choisis suivant la mesure uniforme de $[0,1]$, indépendants entre eux et indépendants de σ_0 et de $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$.

On définit alors la chaîne de Markov $(\sigma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ par la récurrence $\sigma_{n+1} = f(\sigma_n,(x_n,u_n))$.

Théorème B.4 (Algorithme de Metropolis pour le modèle d'Ising). *La chaîne de Markov $(\sigma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est irréductible récurrente positive, apériodique, de loi réversible et donc stationnaire $\mathbb{P}_{N,\beta}^{\text{Ising}}$.*

Démonstration. Commençons par établir l'irréducibilité. Pour tout site x de la grille carrée et toute configuration $\sigma \in \mathfrak{X}_N^{\text{Ising}}$, en choisissant u suffisamment petit dans $[0,1]$, on peut modifier la valeur de $\sigma(x)$ et l'imposer à $+1$ par application de $f(\cdot,(x,u))$. De même, on peut modifier la valeur de $\sigma(x)$ et l'imposer à -1 en prenant u assez grand. Autrement dit, pour toute configuration σ et tout site x,

$$P(\sigma,\sigma_+^x) > 0 \qquad ; \qquad P(\sigma,\sigma_-^x) > 0.$$

En appliquant N^2 fois cette règle, on peut donc modifier un à un tous les signes des sites $x \in [\![1,N]\!]^2$ d'une configuration, et passer d'une configuration σ à une autre configuration σ' arbitraire. Ceci prouve l'irréductibilité, et comme l'espace d'états est fini on a automatiquement la récurrence positive. Par ailleurs, étant donnés $\sigma \in \mathfrak{X}_N^{\text{Ising}}$ et $x \in [\![1,N]\!]$, l'une des deux configurations σ_+^x et σ_-^x est égale à σ ; on a donc $P(\sigma,\sigma) > 0$ pour toute configuration σ, ce qui implique l'apériodicité. Il reste à montrer que la mesure d'Ising est réversible. Notons que la relation de réversibilité est triviale si $x = y$, et aussi si x et y sont deux états tels que $P(x,y) = P(y,x) = 0$. Pour la chaîne de Markov définie ci-dessus, deux configurations $\sigma \neq \rho$ vérifient $P(\sigma,\rho) > 0$ si et seulement si σ et ρ diffèrent en exactement un site x. Vérifions alors que dans ce cas, on a bien

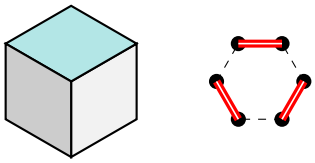
$$\mathbb{P}_{N,\beta}^{\text{Ising}}(\sigma)\,P(\sigma,\rho) = \mathbb{P}_{N,\beta}^{\text{Ising}}(\rho)\,P(\rho,\sigma).$$

Quitte à permuter σ et ρ, on peut supposer $\sigma(x) = -1$ et $\rho(x) = +1$; on a par ailleurs $\sigma(y) = \rho(y)$ pour tout site $y \neq x$. On écrit alors :

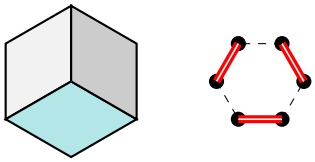
$$\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{N,\beta}(\sigma)\, P(\sigma,\rho) = \frac{1}{Z^{\text{Ising}}_{N,\beta}} \exp\left(\beta \sum_{\{y,z\}\,|\,y\sim z} \sigma(y)\,\sigma(z)\right) \frac{\mathrm{e}^{\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)}}{2\,\cosh\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)\bigr)}$$
$$= \frac{1}{Z^{\text{Ising}}_{N,\beta}} \exp\left(\beta \sum_{\substack{\{y,z\}\,|\,y\sim z\\ y,z\neq x}} \sigma(y)\,\sigma(z)\right) \frac{1}{2\,\cosh\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)\bigr)}.$$

Remarquons alors que $\sigma(y)\,\sigma(z) = \rho(y)\,\rho(z)$ pour toute paire de sites voisins ne contenant pas x, et que $\sigma(y) = \rho(y)$ pour tout site y voisin de x. Dans l'expression ci-dessus, on peut donc remplacer σ par ρ sans changer la valeur calculée ; c'est l'expression que l'on obtiendrait en calculant de la même façon $\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{N,\beta}(\rho)\, P(\rho,\sigma)$. □

Chaîne de Markov des partitions planes. Dans ce qui suit, on appelle bord ou frontière d'une partition plane la partie de la bordure topologique de l'empilement de cubes qui n'est pas incluse dans l'un des quarts de plan Oxy, Oxz ou Oyz. Si on réfléchit en termes de configurations de dimères, un cube plein au bord d'une partition plane correspond à l'hexagone suivant :



De même, un cube vide qui longe le bord d'une partition plane correspond à l'hexagone suivant :



Remarquons alors que l'ajout ou le retrait d'un cube à la frontière correspond à la rotation de 60 degrés de l'hexagone correspondant. Dans la partie du réseau hexagonal de taille N, il n'est pas difficile de voir que le nombre de petits hexagones est une fonction quadratique de N : plus précisément, il y a

$$3N^2 - 3N + 1$$

petits hexagones inscrits dans le grand hexagone de taille N. On parlera d'hexagone *modifiable* si les sommets de l'hexagone sont reliés par des dimères suivant l'un des deux schémas ci-dessus (hexagone plein ou hexagone vide). Si p est une partition plane dans $\mathfrak{X}^{\text{pp}}_N$ et h est un hexagone qui est modifiable dans p, on notera p^h_+ la partition plane obtenue à partir de p en imposant un hexagone plein en h (avec $p^h_+ = p$ si l'hexagone était déjà plein), et p^h_- la partition plane obtenue à partir de p en imposant un hexagone vide en h. On peut alors construire une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}^{\text{pp}}_N$ comme suit. On se donne :

- une partition plane σ_0 inscrite dans le cube de taille N, arbitraire et éventuellement aléatoire, indépendante des deux suites ci-dessous ;
- une suite $(h_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'hexagones indépendants choisis suivant la mesure uniforme ;
- une suite $(b_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de variables de Bernoulli indépendantes entre elles et indépendantes de σ_0 et de $(h_n)_{n\in\mathbb{N}}$, avec $\mathbb{P}[b_n = 1] = 1 - \mathbb{P}[b_n = 0] = \frac{q}{1+q}$.

On définit alors la chaîne de Markov $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ par la récurrence $p_{n+1} = f(p_n, (h_n, b_n))$, où f est la fonction suivante :

$$f(p,(h,u)) = \begin{cases} p & \text{si l'hexagone } h \text{ n'est pas modifiable dans } p, \\ p^h_+ & \text{si l'hexagone } h \text{ est modifiable dans } p, \text{ et si } b = 1, \\ p^h_- & \text{si l'hexagone } h \text{ est modifiable dans } p, \text{ et si } b = 0. \end{cases}$$

THÉORÈME B.5 (Algorithme de Metropolis pour les partitions planes). *La chaîne de Markov $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est irréductible récurrente positive, apériodique, de loi réversible et donc stationnaire $\mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{N,q}$.*

DÉMONSTRATION. Les transitions possibles de la chaîne permettent de passer de toute partition plane p à la partition plane vide $\emptyset$ (sans petit cube) en retirant un à un les cubes ; et on peut bien sûr aller dans l'autre sens pour recréer par ajout de cubes successifs n'importe quelle autre partition plane p' inscrite dans le cube de taille N. Ceci montre l'irréductibilité, et par ailleurs, on a $P(p,p) > 0$ pour toute partition plane $p \in \mathfrak{X}^{\mathrm{pp}}_N$. En effet, lors d'une transition régie par un couple (h,b), il y a une probabilité non nulle de tirer h égal à l'un des hexagones modifiables de p, puis une probabilité non nulle $\frac{q}{1+q}$ ou $\frac{1}{1+q}$ de tirer b de sorte que l'hexagone ne soit pas modifié (puisque l'on a soit $p = p^h_+$, soit $p = p^h_-$). La chaîne de Markov est donc bien apériodique. Finalement, pour vérifier l'équation de réversibilité, on peut se ramener au cas où p et p' sont deux partitions planes qui ne diffèrent qu'en un hexagone modifiable h pour p et pour p', avec h vide dans p et plein dans p'. Alors, $\mathrm{vol}(p') = \mathrm{vol}(p) + 1$, et

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{N,q}[p]\, P(p,p') &= \frac{1}{Z^{\mathrm{pp}}_{N,q}\,(3N^2-3N+1)}\, q^{\mathrm{vol}(p)}\, \frac{q}{1+q} \\ &= \frac{1}{Z^{\mathrm{pp}}_{N,q}\,(3N^2-3N+1)}\, q^{\mathrm{vol}(p')}\, \frac{1}{1+q} = \mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{N,q}[p']\, P(p',p). \end{aligned}$$ □

Applications. Dans la Figure B.3, les trois premières configurations ($\beta \in \{0.2, 0.3, 0.4\}$) suivent exactement la loi $\mathbb{P}^{\mathrm{Ising}}_{N,\beta}$, et elles ont été obtenues grâce à l'algorithme qui sera présenté dans le paragraphe suivant. Cet algorithme ne converge pas assez vite pour $\beta = 0.5$ (et de façon générale, pour $\beta > \beta_c$) ; la dernière figure du cas $\beta = 0.5$ a donc été obtenue en utilisant plutôt l'algorithme de Metropolis présenté ci-dessus, avec 10^7 transitions de la chaîne de Markov. Par conséquent, la loi de cette configuration aléatoire $\sigma \in \mathfrak{X}^{\mathrm{Ising}}_{30}$ n'est pas exactement $\mathbb{P}^{\mathrm{Ising}}_{30,0.5}$, mais c'est une très bonne approximation.

Sur la Figure B.8 qui suit, on a représenté une partition plane de taille $N = 20$ suivant une loi très proche de $\mathbb{P}^{\mathrm{pp}}_{20,1}$: on a utilisé l'algorithme de Metropolis avec de nouveau 10^7 transitions. La figure illustre un résultat important appelé *théorème du cercle arctique* : si N est grand, alors avec très grande probabilité, les 6 régions (pôles) situées à l'extérieur du cercle inscrit dans l'hexagone de taille N sont figées, et chacun de ces pôles ne contient qu'un seul type de losanges (le type de losange dépend du pôle considéré).

3. Couplage par le passé.

L'inconvénient principal de l'algorithme de Metropolis est qu'il ne produit qu'une approximation de la loi recherchée ; cette approximation peut être assez mauvaise si n n'est pas choisi assez grand, et pour le moment on ne sait pas comment choisir le paramètre n pour éviter cela. La méthode du *couplage par le passé* va nous permettre de résoudre ce problème : c'est un algorithme dérivé de l'algorithme de Metropolis et qui fournit une variable aléatoire suivant exactement la loi recherchée. Le prix à payer est que le temps de calcul de ce nouvel algorithme est aléatoire et éventuellement très grand. Pour commencer, reformulons la construction des

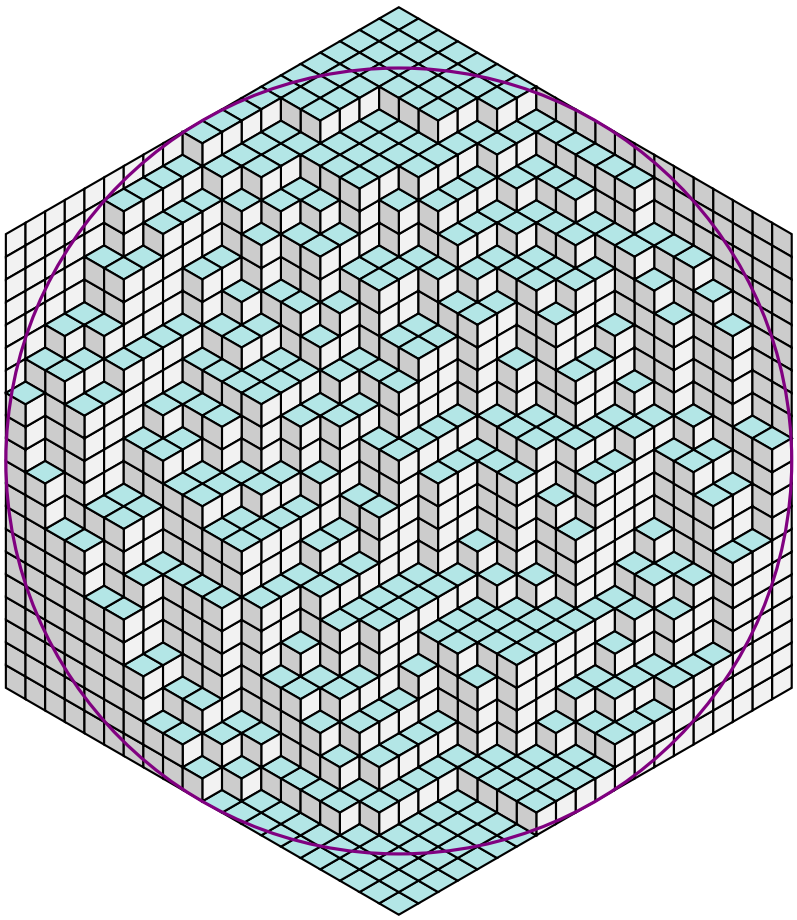


FIG. B.8. Une partition plane inscrite dans le cube de taille $N = 20$, obtenue par 10^7 transitions de la chaîne de Markov (avec paramètre $q = 1$).

chaînes de Markov de l'algorithme de Metropolis. Dans chaque cas (modèle d'Ising ou partition aléatoire), on a construit la chaîne $(\omega_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur l'espace $\mathfrak{X}$ par récurrence, en posant $\omega_{n+1} = f(\omega_n, \xi_n)$, avec des variables ξ_n i.i.d. à valeurs dans un certain espace mesurable E, et $f : \mathfrak{X} \times E \to E$ une fonction mesurable. On avait :

- pour le modèle d'Ising, $E = [\![1, N]\!]^2 \times [0, 1]$ et $\xi_n = (x_n, u_n)$;
- pour le modèle des partitions planes aléatoires,

$$E = \{\text{hexagones dans la partie de taille } N \text{ du réseau hexagonal}\} \times \{0, 1\}$$

et $\xi_n = (h_n, b_n)$.

On note dans ce qui suit $f_n = f(\cdot, \xi_n)$; c'est une transformation aléatoire de l'espace d'états $\mathfrak{X}$. Par construction, les chaînes de Markov $(\sigma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ précédemment construites s'écrivaient :

$$\omega_n = (f_{n-1} \circ f_{n-2} \circ \cdots \circ f_0)(\omega_0),$$

en utilisant génériquement la notation $(\omega_n)_{n\in\mathbb{N}}$ pour la chaîne de Markov, et $\mathfrak{X}$ pour l'espace d'états.

LEMME B.6 (Relation d'ordre sur l'espace des états). *Dans les deux cas étudiés, il existe une relation d'ordre $\preceq$ sur l'espace d'états $\mathfrak{X}$ pour laquelle les fonctions $f(\cdot, \xi)$ sont croissantes : si $\omega_1 \preceq \omega_2$, alors $f(\omega_1, \xi) \preceq f(\omega_2, \xi)$ pour tout paramètre $\xi \in E$.*

DÉMONSTRATION. Pour le modèle d'Ising, on notera $\sigma \preceq \sigma'$ si $\sigma(x) \leq \sigma'(x)$ pour tout site $x \in [\![1, N]\!]^2$. Considérons alors un élément $(x, u) \in [\![1, N]\!]^2 \times [0, 1]$, et deux configurations

σ et σ' telles que $\sigma \preceq \sigma'$. On notera $\sigma_1 = f(\sigma,(x,u))$ et $\sigma'_1 = f(\sigma',(x,u))$. Si $y \neq x$, alors $\sigma_1(y) = \sigma(y)$ et $\sigma'_1(y) = \sigma'(y)$, donc on a encore $\sigma_1(y) \leq \sigma'_1(y)$. Pour le site x, remarquons que

$$p_x = \frac{\mathrm{e}^{\beta \sum_{y\,|\,y\sim x} \sigma(y)}}{2\cosh\bigl(\beta \sum_{y\,|\,y\sim x} \sigma(y)\bigr)} \leq \frac{\mathrm{e}^{\beta \sum_{y\,|\,y\sim x} \sigma'(y)}}{2\cosh\bigl(\beta \sum_{y\,|\,y\sim x} \sigma'(y)\bigr)} = p'_x,$$

car la fonction $t \mapsto \frac{\mathrm{e}^t}{2\cosh t}$ est croissante. On a donc les possibilités suivantes en fonction de la valeur de u :

$$\begin{aligned}(u \leq p_x) &\Rightarrow (\sigma_1(x) = \sigma'_1(x) = +1);\\ (p_x \leq u < p'_x) &\Rightarrow (-1 = \sigma_1(x) < \sigma'_1(x) = +1);\\ (p'_x \leq u) &\Rightarrow (\sigma_1(x) = \sigma'_1(x) = -1).\end{aligned}$$

Dans tous les cas, on a donc bien $\sigma_1(x) \leq \sigma'_1(x)$, et ainsi $\sigma_1 \preceq \sigma'_1$.

Le cas des partitions planes est similaire : notons $p \preceq p'$ si la partition plane p' contient (tous les cubes de) la partition plane p. Alors, étant donné un couple (h,b) :

- Si $b = 1$, alors $f(p,(h,b))$ est obtenu en rajoutant si cela est possible un cube à p au niveau de l'hexagone h. De même, $f(p',(h,b))$ est obtenu en rajoutant si cela est possible un cube à p' au niveau de l'hexagone h. On a alors trois possibilités :

  (1) On ne peut pas rajouter de cube à p au niveau de h (soit parce que l'hexagone h est non modifiable, soit parce qu'il est déjà plein en p). Alors, $f(p,(h,b)) = p \preceq p' \preceq f(p',(h,b))$.

  (2) L'hexagone h est vide en p et ne l'est pas en p'. Alors, comme $p \preceq p'$, ceci n'est possible que si le cube de p^h_+ est dans p', donc $f(p,(h,b)) = p^h_+ \preceq p' = f(p',(h,b))$.

  (3) L'hexagone h est vide en p et aussi en p'. Alors, le rajout d'un cube au même emplacement est compatible avec l'inclusion, donc $f(p,(h,b)) = p^h_+ \preceq (p')^h_+ = f(p',(h,b))$.

- Le cas $b = 0$ se traite de la même façon, cette fois-ci en retirant si cela est possible un cube à p et p' au niveau de l'hexagone h.

Dans tous les cas, on a donc bien $f(p,(h,b)) \preceq f(p',(h,b))$ si $p \preceq p'$. □

La méthode du couplage par le passé consiste à retourner l'ordre de composition des fonctions aléatoires f_n dans la relation de récurrence de la chaîne de Markov de loi invariante π. Posons, pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$Y_n = f_0 \circ f_1 \circ \cdots \circ f_{n-1},$$

où les f_n sont comme précédemment les transformations aléatoires $f(\cdot,\xi_n) : \mathfrak{X} \to \mathfrak{X}$.

Théorème B.7 (Propp–Wilson). *On considère une chaîne de Markov irréductible (récurrente positive) sur un espace fini $\mathfrak{X}$, et on suppose qu'on peut l'écrire sous la forme $\omega_{n+1} = f(\omega_n,\xi_n) = f_n(\omega_n)$ avec des aléas ξ_n indépendants et identiquement distribués. On suppose également qu'il existe une relation d'ordre $\preceq$ sur $\mathfrak{X}$ telle que :*

(1) Les fonctions $f(\cdot,\xi)$ sont toutes croissantes pour la relation d'ordre.

(2) Il existe un élément minimal $\omega_{\min}$ et un élément maximal $\omega_{\max}$, avec $\omega_{\min} \preceq \omega \preceq \omega_{\max}$ pour tout état $\omega \in \mathfrak{X}$.

Posons

$$T = \inf(\{n \in \mathbb{N} \,|\, Y_n(\omega_{\min}) = Y_n(\omega_{\max})\}).$$

Le temps aléatoire T est fini presque sûrement, et la valeur de $Y_T(\omega)$ ne dépend pas de l'état $\omega \in \mathfrak{X}$. Cette variable aléatoire $X = Y_T(\omega)$ a pour loi la mesure de probabilité invariante π de la chaîne de Markov.

Avant la démonstration du Théorème B.7, notons que ses conditions sont bien vérifiées par nos deux modèles. Le lemme précédent a permis d'établir la croissance des fonctions $f(\cdot, \xi)$, donc il suffit de vérifier que les ordres partiels introduits dans la preuve du lemme admettent chacun un élément minimal et un élément maximal. Pour le modèle d'Ising, la configuration minimale est

$$\sigma_{\min} = -1 \text{ sur toute la grille } [\![1, N]\!]^2,$$

et de même, la configuration maximale est la fonction constante $\sigma_{\max} = +1$. Pour les partitions planes, la partition plane minimale dans $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{pp}}$ est la partition vide $\emptyset$, et la partition plane maximale est celle qui remplit tout le cube $N \times N \times N$ (elle est donc de volume N^3).

Preuve du Théorème B.7. Comme la chaîne de Markov est irréductible, il existe un entier $n \geq 1$ pour lequel $P^n(\omega_{\min}, \omega_{\max}) > 0$. Autrement dit, pour tous aléas i.i.d. $\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n}$ de lois correspondant aux transitions de la chaîne de Markov,

$$\mathbb{P}[(f(\cdot, \xi_{i_1}) \circ \cdots \circ f(\cdot, \xi_{i_n}))(\omega_{\min}) = \omega_{\max}] = p > 0$$

pour une certaine constante p. Notons

$$A_i = \{(f(\cdot, \xi_{(n-1)i}) \circ f(\cdot, \xi_{(n-1)i+1}) \circ \cdots \circ f(\cdot, \xi_{ni-1}))(\omega_{\min}) = \omega_{\max}\}.$$

Les événements $A_{i \geq 1}$ sont indépendants et tous de même probabilité positive, donc le premier événement A_i qui se réalise a un indice i qui suit une loi géométrique de paramètre p (en fait, par le lemme de Borel–Cantelli 2.9, avec probabilité 1, on sait même qu'une infinité de A_i se réalisent). Or, si A_i est réalisé, alors pour tout état $\omega \in \mathfrak{X}$,

$$\omega_{\max} \geq (f(\cdot, \xi_{(n-1)i}) \circ \cdots \circ f(\cdot, \xi_{ni-1}))(\omega) \geq (f(\cdot, \xi_{(n-1)i}) \circ \cdots \circ f(\cdot, \xi_{ni-1}))(\omega_{\min}) = \omega_{\max}$$

en utilisant la croissance des fonctions $f(\cdot, \xi)$. La composée $(f(\cdot, \xi_{(n-1)i}) \circ \cdots \circ f(\cdot, \xi_{ni-1}))$ envoie donc tous les éléments de $\mathfrak{X}$ sur la même image $\omega_{\max}$, et *a fortiori*,

$$Y_{ni} = Y_{(n-1)i} \circ (f(\cdot, \xi_{(n-1)i}) \circ \cdots \circ f(\cdot, \xi_{ni-1}))$$

envoie tous les éléments de $\mathfrak{X}$ sur la même image. En particulier, $Y_{ni}(\omega_{\min}) = Y_{ni}(\omega_{\max})$, donc $T \leq ni$. On a donc établi la finitude du temps aléatoire T avec probabilité 1. Ce temps T est le *temps de coalescence* des suites aléatoires $(Y_n(\omega))_{n \in \mathbb{N}}$ pour $\omega \in \mathfrak{X}$: en effet, pour les mêmes raisons de croissance que précédemment, si $X = Y_T(\omega_{\min}) = Y_T(\omega_{\max})$, alors pour tout autre état $\omega \in \mathfrak{X}$,

$$X = Y_T(\omega_{\min}) \leq Y_T(\omega) \leq Y_T(\omega_{\max}) = X,$$

donc on a égalité partout. Il reste à montrer que $Y_T(\omega)$ suit la loi π stationnaire de la chaîne de Markov. Pour ce faire, notons que si $X = Y_T(\omega)$, alors on a aussi

$$X = Y_{T+1}(\omega) = Y_{T+2}(\omega) = \cdots$$

puisque, compte tenu de l'ordre de composition des fonctions f_n, tous ces éléments s'écrivent $Y_T(\omega')$ pour un certain ω'. Autrement dit :

$$\forall n \geq T, \quad \forall \omega \in \mathfrak{X}, \quad X = Y_n(\omega).$$

Notons ω_0 une variable aléatoire de loi π, π étant l'unique loi stationnaire de la chaîne de Markov. Pour tout $n \in \mathbb{N}$, $Y_n(\omega_0)$ est la composée évaluée en ω_0 de n transformations aléatoires

correspondant aux transitions de la chaîne de la Markov ; cette variable aléatoire a donc encore pour loi π par invariance de cette mesure de probabilité. On écrit alors :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}[X=\omega] &= \mathbb{P}[X=\omega \text{ et } n\geq T] + \mathbb{P}[X=\omega \text{ et } n<T]\\ &= \mathbb{P}[Y_n(\omega_0)=\omega \text{ et } n\geq T] + \mathbb{P}[X=\omega \text{ et } n<T].\end{aligned}$$

Par finitude de T, lorsque n tend vers l'infini, le premier terme tend vers $\mathbb{P}[Y_n(\omega_0)=\omega]=\pi(\omega)$, et le second terme tend vers 0 ; ceci prouve que X a bien pour loi π. □

On a donc exhibé un algorithme qui calcule en un temps fini une variable aléatoire $X = Y_T(\omega)$ qui suit exactement la loi π recherchée. D'un point de vue pratique, pour réaliser l'algorithme :

- On calcule seulement les trajectoires $Y_n(\omega)$ pour $\omega=\omega_{\min}$ et $\omega=\omega_{\max}$; au moment de coalescence de ces deux trajectoires, toutes les valeurs $Y_n(\omega)$ sont égales par l'argument de croissance.
- Comme $Y_n(\omega)$ est stationnaire après le temps T, il n'est pas nécessaire de trouver *exactement* la valeur de T. On peut se contenter d'examiner les deux suites

  $$Y_{2^k}(\omega_{\min}) \quad \text{et} \quad Y_{2^k}(\omega_{\max}),\ \ k\geq 1$$

  et de s'arrêter lorsqu'elles sont égales à la même valeur ; cette valeur suit la loi invariante π de la chaîne de Markov.

Un problème qui subsiste est l'estimation du temps T requis pour que l'algorithme s'achève. Pour comprendre intuitivement ce qui se passe, il est utile de changer un peu les notations et de numéroter négativement les transformations aléatoires f_{-n} : ainsi, $Y_n = f_0 \circ f_{-1} \circ \cdots \circ f_{-(n-1)}$. Chaque transformation f_{-n} est croissante et peut envoyer plusieurs configurations $\omega \in \mathfrak{X}$ sur la même image ; voir le Schéma B.9.

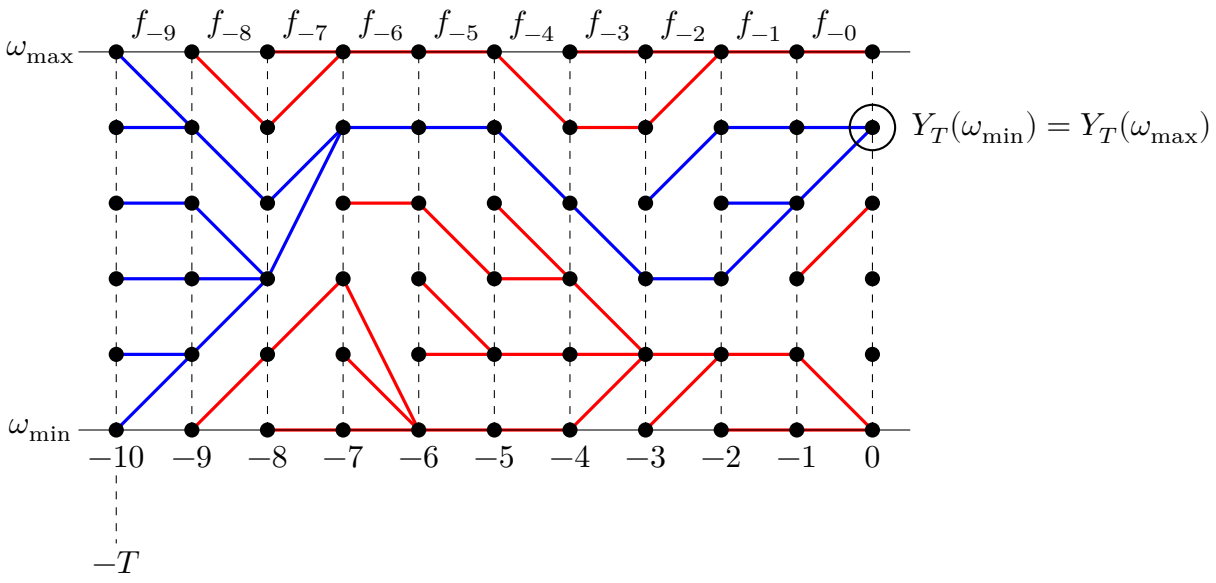


FIG. B.9. Trajectoires aléatoires de la méthode du couplage par le passé.

Pour trouver le temps T, on regarde dans le passé le temps le plus récent à partir duquel toutes les trajectoires convergent vers le même état (qui suit alors la loi stationnaire π). Malheureusement, dans certains cas, les trajectoires se mélangent très peu, et la coalescence demande un temps très grand. C'est exactement ce qui se produit pour le modèle d'Ising lorsque β est trop grand (plus grand que le paramètre critique β_c) : les configurations avec beaucoup de spins positifs donnent des trajectoires qui restent sur les configurations avec beaucoup de spins

positifs, et qui ne viennent quasiment jamais intersecter les trajectoires issues de configurations avec beaucoup de spins négatifs. Il faut donc remonter dans le passé un temps T extrêmement long avant que les trajectoires issues de $\sigma_{\min}$ et $\sigma_{\max}$ coalescent ; c'est la raison pour laquelle on a préféré utiliser l'algorithme de Metropolis pour la simulation de la Figure B.3 dans le cas $\beta = 0.5$.

4. Chaînes de Markov et Python.

Objectifs de la séance : apprendre à utiliser Python et ses modules dans un contexte de simulations aléatoires.

Ouvrir un terminal, puis lancer `Python/Jupyter` avec la commande `jupyter lab`. Créer une feuille de calcul `Python 3`. Pour exécuter le contenu d'une cellule de la feuille de calcul, taper (Shift+Enter). Dans la première cellule, importer les modules suivants :

```
import numpy as np
import scipy.stats as scs
import matplotlib.pyplot as plt
```

Le module `Numpy` aide à la manipulation de vecteurs et à l'exécution de fonctions mathématiques ; le module `Scipy` définit notamment les distributions de probabilité usuelles ; et le module `Matplotlib` permettra de faire tous les dessins.

Opérations, fonctions, méthodes. On commence par rappeler les bases de `Python` et de son module `Numpy`, qui est essentiel pour les mathématiques.

(1) Calculer

$$3+2+5 \quad ; \quad \sin\Big(\frac{\pi}{3}\Big) \quad ; \quad \sqrt{1-\sin^2\Big(\frac{\pi}{3}\Big)} - \cos\Big(\frac{\pi}{3}\Big).$$

Les fonctions mathématiques comme sin ou $\sqrt{\cdot}$ sont implantées par le module `Numpy` (on utilisera respectivement `np.sin` et `np.sqrt`).

(2) On stocke ou modifie une variable nommée x avec la commande `x = val`, où `val` est la valeur que l'on veut donner à x. Recalculer la troisième quantité de la première question en stockant d'abord une variable égale `x` à $\sin\big(\frac{\pi}{3}\big)$. Pour afficher la valeur d'une variable `x`, on utilise la commande `print(x)`, ou simplement `x`.

(3) Le module `Numpy` introduit aussi les vecteurs et les matrices. Avec `help(np.array)`, demander la documentation de la classe `array`. Créer une variable `M` égale à la matrice $\left(\begin{smallmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{smallmatrix}\right)$.

(4) On peut appliquer une fonction à tous les termes d'un vecteur ou d'une matrice stockée dans un `array Numpy`. Par exemple, `np.cos(np.pi/3 * M)` calcule la matrice

$$\begin{pmatrix} \cos\big(\frac{\pi}{3}\big) & \cos\big(\frac{2\pi}{3}\big) \\ 0 & \cos\big(\frac{\pi}{3}\big) \end{pmatrix}.$$

Effectuer ce calcul.

(5) Tous les objets dans `Python` ont des méthodes qui leurs sont associées, et qui dépendent du type de l'objet en question. Une méthode `method` d'un objet `x` est appelée par la commande `x.method()`. Pour avoir la liste des méthodes associées à un objet `x`, on peut taper `x.` + (Tab). Calculer la transposée de la matrice `M`.

(6) Les outils d'algèbre linéaire sont introduits par le sous-module `np.linalg` ; on renvoie à https://numpy.org/doc/stable/reference/routines.linalg.html. Calculer le déterminant, les valeurs propres et l'inverse de la matrice `M`.

(7) Une fonction $f(x)$ d'une variable x est définie dans `Python` comme suit :

```
def f(x):
    instructions
    return (le résultat)
```

Créer une fonction $g(x) = \sqrt{1 - \exp(-x)}$, et calculer ses valeurs en $0, 0.1, 0.2, \dots, 1$. On pourra utiliser la commande `np.linspace(a, b, N)`, qui crée un vecteur de taille N avec des valeurs régulièrement espacées entre a et b.

Dessins. La syntaxe générale pour faire un dessin avec `Matplotlib` est :

```
fig, ax = plt.subplots()
instructions de dessin: ax.dessin(args)
paramètres pour afficher: ax.parametres(args)
plt.show()
```

(1) Pour dessiner une fonction $f(x)$ sur un intervalle $[a, b]$, on utilise un échantillonnage régulier `xx` de cet intervalle, et la commande `ax.plot(xx, f(xx))`.

```
fig, ax = plt.subplots()
xx = np.linspace(a, b, 500)
ax.plot(xx, f(xx))
plt.show()
```

Dessiner le graphe de la fonction $g(x) = \sqrt{1 - \exp(-x)}$ sur l'intervalle $[0, 5]$. Trouver les options d'affichage pour que la courbe soit dessinée en rouge, pour que les axes des abscisses et des ordonnées contiennent respectivement les intervalles $[-0.1, 5.1]$ et $[-0.1, 1.1]$, pour que les graduations de l'axe des abscisses soient en tous les entiers entre 0 et 5, et pour qu'une légende de la fonction g apparaisse.

(2) Superposer au graphe précédent celui de la fonction $h(x) = \sqrt{1 + x}\,\sin\frac{x}{2}$, dessinée en bleu. C'est l'un des principes importants du dessin avec `Matplotlib` : on peut réaliser des dessins complexes en listant des opérations simples, qu'on applique à `ax`.

(3) Dessiner sur le même graphique les courbes des fonctions $f_\alpha(x) = \sin(\alpha x)$ avec $\alpha \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$. On pourra utiliser une boucle `for` :

```
for x in L:
    instructions(x)
```

où `L` est un itérable `Python`, par exemple une liste ou un `array Numpy`.

Nous verrons dans un instant d'autres types de dessin dans le contexte de simulation de variables aléatoires.

Variables aléatoires. Les lois usuelles sont implantées par le module `Scipy`. Par exemple, `G = scs.norm(0, 1)` définit la loi gaussienne, et on peut avoir un échantillon de N variables indépendantes de loi $\mathcal{N}(0, 1)$ avec la commande `G.rvs(N)`.

(1) Avec la documentation https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/stats.html, trouver les commandes pour obtenir des échantillons de taille 20 des lois suivantes :

- loi binomiale $\mathcal{B}(n,p)$ avec $n=10$ et $p=0.3$;
- loi exponentielle $\mathcal{E}(\lambda)$ avec $\lambda=3$;
- loi gaussienne $\mathcal{N}(m,\sigma^2)$ avec $m=1$ et $\sigma^2=2$;
- loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda)$ avec $\lambda=3$.

Engendrer aussi une matrice A de taille 5×5 dont les entrées sont des variables aléatoires indépendantes de loi $\mathcal{N}(0,1)$.

(2) Si `scs.loi` est une distribution de probabilité à densité, sa densité $f(x)$ en x est obtenue avec la commande `scs.loi.pdf(x)`, et la fonction de répartition correspondante $F(x)=\int_{-\infty}^{x} f(s)\,ds$ est obtenue avec la commande `scs.loi.cdf(x)`. Dessiner sur deux graphiques la densité et la fonction de répartition de la loi normale $\mathcal{N}(0,1)$.

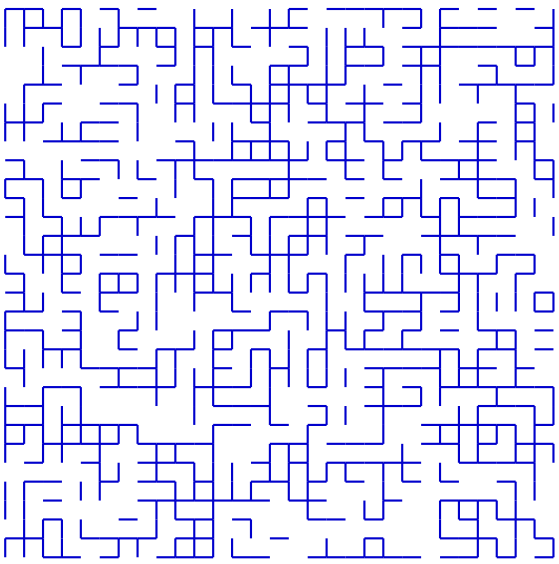
(3) Si $(X_n)_{1\leq n\leq N}$ est un échantillon d'une loi de fonction de répartition F, la *fonction de répartition empirique* est l'approximation de F définie par :

$$F_N(x)=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} 1_{(X_n\leq x)}.$$

Le théorème de Glivenko–Cantelli garantit que presque sûrement, F_N converge en norme infinie vers F lorsque N tend vers l'infini. Vérifier ce théorème avec la loi normale $\mathcal{N}(0,1)$ et un échantillon de taille 200. On pourra utiliser la commande `ax.ecdf(E)` pour tracer la fonction de répartition empirique d'un échantillon E.

(4) Si `scs.loi` est une distribution de probabilité sur l'ensemble des entiers, on la représente plutôt avec un diagramme en bâtons / histogramme. Les valeurs $\mathbb{P}[X=k]$ sont obtenues avec la commande `scs.loi.pmf(k)`, et l'histogramme avec la commande `ax.bar(np.arange(a, b+1), scs.loi.pmf(np.arange(a, b+1)))`, où $[\![a,b]\!]$ est l'intervalle sur lequel on veut dessiner l'histogramme. Dessiner l'histogramme de la loi de Poisson de paramètre $\lambda=3$.

(5) La commande `ax.plot(X, Y)` relie dans le plan les points dont l'abscisse est dans la liste `X`, et dont l'ordonnée est dans la liste `Y`. On peut absolument tout dessiner avec des suites de telles instructions, en découpant toute figure en petits traits. Écrire une fonction `percolation(n, p)` qui garde chaque arête de la grille $[\![0,n]\!]\times[\![0,n]\!]$ avec probabilité p indépendamment pour chaque arête, et qui affiche le résultat.



Commenter les dessins obtenus avec $n = 50$ et $p \in \{0.3, 0.4, 0.5, 0.6\}$.

Chaînes de Markov. Attaquons-nous finalement à la programmation de diverses chaînes de Markov : marches aléatoires, processus de branchement, *etc.*

(1) Écrire un programme `marche(n, p)` qui affiche les n premières étapes d'une marche aléatoire sur $\mathbb{Z}$ de paramètre p. Vérifier expérimentalement que si $p > \frac{1}{2}$, alors la marche aléatoire tend presque sûrement vers $+\infty$; tandis que si $p = \frac{1}{2}$, alors la marche semble revenir infiniment souvent en 0.

(2) Écrire un programme `marche_cercle(n, N)` qui calcule les n premières étapes d'une marche aléatoire sur $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, issue de 0 et avec probabilités de transition

$$P(k,k) = P(k,k-1) = P(k,k+1) = \frac{1}{3}.$$

Pour calculer dans `Python` la réduction modulo N d'un entier a, on utilisera la commande `a % N`. Vérifier avec un histogramme empirique que pour n grand, la loi de la position X_n est quasi-uniforme sur $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ (on pourra par exemple prendre $n = 100$, $N = 10$ et un échantillon de taille 10000).

(3) Soit μ une mesure de probabilité sur $\mathbb{N}$. Le *processus de Galton–Watson* de loi μ est la suite aléatoire $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$, telle que X_{n+1} est la somme de X_n variables aléatoires indépendantes de loi μ. Il représente l'évolution d'une population dont chaque individu a aléatoirement $Y \sim \mu$ enfants, indépendamment pour chaque individu. Calculer la matrice de transition de cette chaîne de Markov, et écrire un programme `galton_watson(mu, n)` qui dépend d'une distribution de probabilité `mu` et qui donne les n premières générations du processus, partant de $X_0 = 1$. Tester ce programme avec des lois de Poisson de paramètre $\lambda \in \{1, 1.5, 2\}$.

(4) On peut définir une classe `Markov` qui s'initialise à partir d'une matrice stochastique (de taille finie) P, et qui a des méthodes pour calculer toutes les quantités de la théorie des chaînes de Markov, en particulier des trajectoires aléatoires $(X_n)_{0\le n\le N}$ issues d'un point X_0 donné. Si P est de taille N, l'espace des états sera $[\![0, N-1]\!]$.

```
class Markov:

    def __init__(self, P: np.ndarray):
        self.transition = P
        self.size = P.shape[0]

    def trajectoire(self, n: int, x0: int) -> np.ndarray:
        res = np.zeros(n+1, dtype=np.int64)
        res[0] = x0
        for i in range(n):
            res[i+1] = np.random.choice(self.size,
                                        p=self.transition[res[i], :])
        return res
```

La commande `C = Markov(P)`, qui prend en argument un `array P` bidimensionnel, crée l'espace et la matrice de transition ; et la commande `C.trajectoire(n, x0)` calcule la trajectoire jusqu'au temps n.

- Utiliser cette classe pour programmer le modèle des urnes d'Ehrenfest (voir les exercices du Chapitre 3), et pour reprogrammer la marche aléatoire sur le cercle.

- Rajouter à la classe `Markov` des méthodes pour calculer la loi marginale au temps n sachant la loi de départ, et la mesure empirique d'une trajectoire ; pour déterminer si la matrice de transition est irréductible ; et pour calculer dans ce cas la mesure invariante de la chaîne.
- Utiliser ces méthodes pour vérifier la validité du théorème ergodique pour le modèle des urnes d'Ehrenfest, et pour la marche aléatoire sur le cercle.

5. Simulation de lois par l'algorithme de Metropolis.

Objectifs de la séance : manipuler les configurations du modèle d'Ising et les partitions planes aléatoires, et simuler les lois $\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{N,\beta}$ *et* $\mathbb{P}^{\text{pp}}_{N,q}$ *avec l'algorithme de Metropolis ou la méthode du couplage par le passé.*

Télécharger `metropolis.py` à l'adresse http://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~pierre-loic.meliot/markov/metropolis.py. Ouvrir un terminal, puis lancer `Python` avec la commande `jupyter lab`. Copier l'intégralité du contenu de `metropolis.py` dans une cellule de la feuille de calcul, et l'exécuter (Shift+Enter).

Modèle d'Ising.

(1) Créer une configuration de spins sur une grille de taille $N \times N = 10 \times 10$ avec la commande `I = IsingConfiguration(10)`. Expérimenter les méthodes suivantes (pour appeler une méthode `method` sur `I`, on tapera `I.method()`, et `I.method(arg)` si la méthode admet pour arguments `arg`) :

- `plot()` dessine la configuration de spins, le rouge correspondant aux spins $+1$ et le gris aux spins -1.
- `energy()` calcule l'énergie de la configuration (on pourra éventuellement vérifier le calcul sur un exemple de plus petite taille).
- `magnetization()` calcule la somme de tous les spins.
- `random_sites()` retourne un site aléatoire de la grille.
- `switch_site(y, u, beta)` modifie le site y en

$$\begin{cases} +1 & \text{si } u < \dfrac{\exp\big(\beta \sum_{x\sim y} I(x)\big)}{2\cosh\big(\beta \sum_{x\sim y} I(x)\big)}, \\ -1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

- `transform(n, beta)` applique n transitions markoviennes de paramètre β à la configuration. Essayer d'abord avec un petit nombre de transitions ($n < 10$), puis un plus grand nombre $n \sim 1000$. On prendra par exemple $\beta = 0.3$, et on dessinera la nouvelle configuration entre chaque essai. Commenter.

(2) Pour chaque valeur de β dans $\{0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6\}$, approximer la loi $\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{50,\beta}$ en appliquant $n = 10^6$ transitions de paramètre β à une configuration de taille $N = 50$. On pourra utiliser la commande `MarkovIsingConfiguration(N, n, beta)`. Comparer les résultats.

(3) Le programme `MarkovIsingConfiguration(N, n, beta)` admet comme argument optionnel `boundary="positive"` ou `boundary="war"`. Ces options correspondent à

la loi d'Ising conditionnellement au fait que la frontière soit entièrement positive, ou conditionnellement au fait que le bord gauche soit positif et que le bord droit soit négatif. Expérimentez ces deux options.

(4) Le programme `RandomIsingConfiguration(N, beta)` utilise la méthode de couplage pour simuler exactement $\mathbb{P}^{\text{Ising}}_{N,\beta}$. Expérimentez-le (on commencera avec N suffisamment petit et $\beta < 0.5$). Vérifier que le code applique bien la méthode de couplage.

Partitions planes aléatoires.

(1) Créer une partition plane vide inscrite dans le cube de taille $N \times N \times N = 5 \times 5 \times 5$ avec la commande `P = DimerCovering(5)`. Expérimenter les méthodes suivantes :

- `plot()` dessine la partition plane. L'argument optionnel `beautiful`, par défaut égal à `True`, permet de choisir entre un dessin d'empilements de cubes et un dessin d'une configuration de dimères. Ainsi, on peut appeler la méthode `plot(False)` pour dessiner la configuration de dimères correspondant à la partition plane.
- `plot_honeycomb()` donne le système de coordonnées du réseau hexagonal sous-jacent à la partition plane.
- `volume()` calcule le volume de la partition plane.
- `plane_partition()` décrit la partition plane par une matrice dont l'entrée (i, j) est le nombre de cubes au-dessus de la position (i, j) dans le plan Oxy.
- `switchup(Hexagon(a, b))` ajoute une case / effectue une rotation des dimères au niveau de l'hexagone de coordonnées a et b, si cela est possible. On définit de façon analogue la méthode `switchdown(Hexagon(a, b))`. Construire manuellement une partition plane de volume au moins égal à 5. Vérifier que chaque ajout ou retrait de cube correspond à une rotation d'un hexagone dans la configuration de dimères.
- `transform(n, q)` applique n transitions markoviennes de paramètre q à la configuration. Essayer d'abord avec un petit nombre de transitions ($n < 50$), puis un plus grand nombre $n \sim 1000$. On prendra par exemple $q = 1$ ou $q = 2$, et on dessinera la nouvelle partition plane entre chaque essai. Commenter.

(2) Pour chaque valeur de q dans $\{0.5, 0.9, 1\}$, simuler la loi $\mathbb{P}^{\text{PP}}_{5,q}$ en appliquant 10000 transitions de paramètre q à une partition plane inscrite dans le cube de taille $5 \times 5 \times 5$. Commenter. Essayer en taille plus grande.

(3) Le programme `RandomDimerCovering(N, q)` simule exactement la loi $\mathbb{P}^{\text{PP}}_{N,q}$ avec la méthode de couplage. Expérimentez ce programme (avec des valeurs de N petites).

Lorsque $q = 1$ (mesure uniforme), il existe une méthode de simulation exacte beaucoup plus efficace, qui requiert seulement $O(N^3)$ opérations (Borodin–Gorin, 2009), mais qui repose sur des arguments combinatoires avancés.

C. Temps de mélange

Dans le chapitre précédent, on a expliqué comment utiliser une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ pour simuler une loi π sur un ensemble fini $\mathfrak{X}$. Le problème de l'algorithme de Metropolis est que l'on a besoin de savoir comment choisir n de sorte que la loi de X_n soit proche de π, par exemple en distance en variation totale : étant donné $\varepsilon > 0$, on veut que

$$d_{\mathrm{TV}}(X_n, \pi) = \left(\sup_{A\subset\mathfrak{X}} |\mathbb{P}[X_n \in A] - \pi(A)| \right) \leq \varepsilon,$$

étant entendu que si la chaîne est irréductible apériodique de mesure invariante π, alors l'inégalité ci-dessus est vraie *pour n assez grand*. Dans de nombreux cas, ce problème est essentiellement équivalent à l'estimation de l'espérance ou de la queue de distribution du temps de coalescence T de l'algorithme du couplage par le passé ; on admettra ce fait, et on se concentrera donc uniquement sur le calcul de la vitesse de convergence de l'algorithme de Metropolis.

1. Généralités sur la distance en variation totale.

Commençons par énoncer quelques généralités sur la distance en variation totale. Si $\mathfrak{X}$ est un espace d'états et ρ, π sont deux mesures de probabilité sur $\mathfrak{X}$, leur distance en variation totale est la quantité

$$d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = \sup_{A\subset\mathfrak{X}} |\rho(A) - \pi(A)|,$$

qui appartient à $[0, 1]$; $d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = 0$ si et seulement si $\rho = \pi$.

Proposition C.1 (Distance en variation totale et distance ℓ^1). *Pour toutes mesures de probabilité ρ et π sur un ensemble $\mathfrak{X}$ fini ou dénombrable, on a*

$$d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = \frac{1}{2} \sum_{x\in\mathfrak{X}} |\rho(x) - \pi(x)|.$$

Démonstration. Pour commencer, notons que si A est une partie qui contient deux éléments x et y tels que $\rho(x) - \pi(x) > 0 > \rho(y) - \pi(y)$, alors on augmente la quantité $|\rho(A) - \pi(A)|$ en retirant à A l'élément x ou l'élément y. En effet, si l'on a par exemple $\rho(A) - \pi(A) \geq 0$, alors

$$\begin{aligned} \rho(A \setminus \{y\}) - \pi(A \setminus \{y\}) &= (\rho(A) - \pi(A)) - (\rho(y) - \pi(y)) \\ &> \rho(A) - \pi(A) \geq 0, \end{aligned}$$

d'où $|\rho(A\setminus\{y\}) - \pi(A\setminus\{y\})| > |\rho(A) - \pi(A)|$. De même, dans le cas contraire $\rho(A) - \pi(A) \leq 0$, on a $|\rho(A\setminus\{x\}) - \pi(A\setminus\{x\})| > |\rho(A) - \pi(A)|$. On en déduit que le supremum dans la définition de la distance en variation totale peut être pris sur les parties A constituées d'éléments x où le signe de $\rho(x) - \pi(x)$ est constant. De plus, pour toute partie A,

$$|\rho(A^{\mathrm{c}}) - \pi(A^{\mathrm{c}})| = |(1 - \rho(A)) - (1 - \pi(A))| = |\rho(A) - \pi(A)|,$$

donc par complémentation, on peut se ramener aux parties A constituées d'éléments x tels que $\rho(x) - \pi(x) \geq 0$:

$$d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = \sup_{A\subset\{x\in\mathfrak{X} \,|\, \rho(x)-\pi(x)\geq 0\}} (\rho(A) - \pi(A)).$$

Il est alors évident que le supremum est atteint si l'on prend la partie

$$A = \mathfrak{X}_+ = \{x \in \mathfrak{X} \,|\, \rho(x) - \pi(x) \geq 0\}.$$

Notons $\mathfrak{X}_- = \mathfrak{X} \setminus \mathfrak{X}_+ = \{x \in \mathfrak{X} \,|\, \rho(x) - \pi(x) < 0\}$. On peut maintenant écrire :

$$\begin{aligned} d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) &= |\rho(\mathfrak{X}_+) - \pi(\mathfrak{X}_+)| = \frac{1}{2}\big(|\rho(\mathfrak{X}_+) - \pi(\mathfrak{X}_+)| + |\rho(\mathfrak{X}_-) - \pi(\mathfrak{X}_-)|\big) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x \,|\, \rho(x) \geq \pi(x)} (\rho(x) - \pi(x)) + \frac{1}{2} \sum_{x \,|\, \rho(x) < \pi(x)} (\pi(x) - \rho(x)) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x \in \mathfrak{X}} |\rho(x) - \pi(x)|. \end{aligned}$$

□

La proposition précédente assure que, à un facteur multiplicatif près, la distance en variation totale par rapport à une mesure de probabilité de référence π est une norme dans l'espace $\mathscr{L}^1(\mathfrak{X}, \pi)$:

$$2\, d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = \sum_{x \in \mathfrak{X}} |\rho(x) - \pi(x)| = \sum_{x \in \mathfrak{X}} \pi(x)\, |h(x) - 1| = \|h - 1\|_{\mathscr{L}^1(\mathfrak{X}, \pi)},$$

où $h(x) = \frac{\rho(x)}{\pi(x)}$ peut être vue comme la densité de la mesure ρ par rapport à la mesure de référence π. Plus généralement, si l'on veut mesurer la distance entre une mesure de probabilité ρ et une mesure de référence π sur un espace d'états $\mathfrak{X}$, on pourra utiliser une norme $\mathscr{L}^p$:

$$d_p(\rho, \pi) = \|h - 1\|_{\mathscr{L}^p(\mathfrak{X}, \pi)} = \left(\sum_{x \in \mathfrak{X}} \pi(x)\, |h(x) - 1|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

avec $p \geq 1$. L'inégalité de Hölder garantit que, si $1 \leq p \leq q$, alors

$$d_p(\rho, \pi) \leq d_q(\rho, \pi).$$

En particulier, $2\, d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = d_1(\rho, \pi) \leq d_2(\rho, \pi)$ par l'inégalité de Cauchy–Schwarz (cas particulier de Hölder pour $p = 1$ et $q = 2$). Nous utiliserons cette inégalité dans la prochaine section pour trouver des bornes supérieures sur les distances en variation totale.

Remarque C.2. Pour $p \neq 1$, les *distances* $d_p(\rho, \pi) = \|\frac{\rho}{\pi} - 1\|_{\mathscr{L}^p(\mathfrak{X}, \pi)}$ ne sont pas symétriques : $d_p(\rho, \pi) \neq d_p(\pi, \rho)$. Le terme distance n'est donc pas entièrement approprié. Néanmoins, comme la plupart du temps on cherchera à évaluer à quel point la loi marginale π_n d'une chaîne de Markov est proche de la loi stationnaire π, dans tout ce qui suit l'une des deux mesures de probabilité π sera bien une mesure de référence qu'on pourra utiliser comme « point pivot » de l'ensemble des mesures de probabilité sur l'espace $\mathfrak{X}$.

Remarque C.3. Si $p = 2$ et si π est la mesure uniforme $\pi(x) = \frac{1}{N}$ sur un ensemble $\mathfrak{X}$ fini de cardinal N, alors pour toute autre mesure de probabilité ρ,

$$(d_2(\rho, \pi))^2 = \frac{1}{N} \sum_{x \in \mathfrak{X}} |N\, \rho(x) - 1|^2 = N \sum_{x \in \mathfrak{X}} |\rho(x) - \pi(x)|^2 = N\, (\|\rho - \pi\|)^2,$$

où la norme dans la formule de droite est la norme euclidienne standard sur $\mathbb{C}^{\mathfrak{X}} = \mathbb{C}^N$.

Il existe une autre définition de la distance en variation totale qui sera très utile pour certaines estimations. Si ρ et π sont deux mesures de probabilité sur $\mathfrak{X}$, on appelle *couplage* de ρ et π une mesure de probabilité M sur $\mathfrak{X}^2$ dont les deux marginales sont ρ et π :

$$\forall x \in \mathfrak{X},\ \sum_{y \in \mathfrak{X}} M(x, y) = \rho(x) \qquad ; \qquad \forall y \in \mathfrak{X},\ \sum_{x \in \mathfrak{X}} M(x, y) = \pi(y).$$

Un couple de variables aléatoires (X, Y) à valeurs dans $\mathfrak{X}^2$ est appelé couplage de ρ et π si sa loi $M(x, y) = \mathbb{P}[X = x,\, Y = y]$ est un couplage de ρ et π. Un point important à comprendre est qu'il existe en général une infinité de façons possibles de coupler deux lois ρ et π ; on peut prendre le *couplage indépendant* $M(x, y) = \rho(x)\,\pi(y)$, mais ce n'est pas le seul couplage et pour certaines applications, d'autres couplages sont plus intéressants.

Théorème C.4 (Distance en variation totale et couplages). *Pour tout couple de mesures de probabilité (ρ, π) sur un ensemble fini ou dénombrable $\mathfrak{X}$,*

$$d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = \inf_{(X,Y)\ \textit{couplage de}\ (\rho,\pi)} (\mathbb{P}[X \neq Y]).$$

Démonstration. Pour commencer, considérons un couplage (X, Y) de ρ et π, et une partie $A \subset \mathfrak{X}$. On a

$$\rho(A) - \pi(A) = \mathbb{P}[X \in A] - \mathbb{P}[Y \in A] \leq \mathbb{P}[X \in A \text{ et } Y \notin A] \leq \mathbb{P}[X \neq Y]$$

et de même, $\pi(A) - \rho(A) \leq \mathbb{P}[X \neq Y]$, donc $|\rho(A) - \pi(A)| \leq \mathbb{P}[X \neq Y]$. Par passage à la borne supérieure à gauche et à la borne inférieure à droite dans cette inégalité, on obtient

$$d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) \leq \inf_{(X,Y)\ \text{couplage de}\ (\rho,\pi)} (\mathbb{P}[X \neq Y]).$$

Pour montrer que l'on a en fait une égalité, il faut construire un couplage (X, Y) *optimal* tel que $\mathbb{P}[X \neq Y] = d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) = \frac{1}{2}\sum_{x\in\mathfrak{X}} |\rho(x) - \pi(x)|$. Notons $\delta = d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi)$; on a alors

$$2\delta + 2\sum_{x\in\mathfrak{X}} \min(\rho(x), \pi(x)) = 2,$$

voir la Figure C.1.

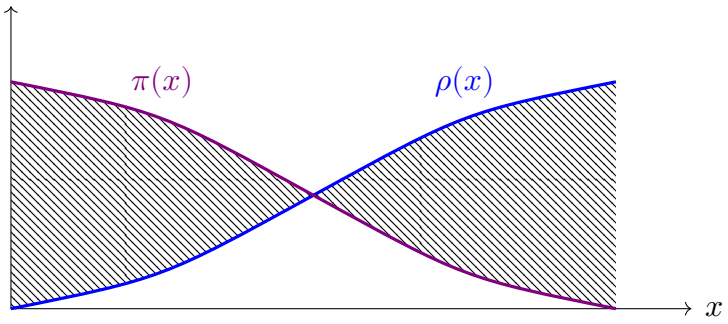


Fig. C.1. Si ρ et π sont deux mesures de probabilité de distance en variation totale δ, alors 2δ est l'aire hachurée dans le dessin ci-dessus, et sous chaque courbe l'aire totale vaut 1. La partie blanche sous les deux courbes a pour aire $\sum_{x\in\mathfrak{X}} \min(\rho(x), \pi(x))$.

Si $\delta = 0$, alors $\rho = \pi$ et un couplage optimal est obtenu en prenant $X = Y$. Si $\delta = 1$, alors ρ et π ont des supports disjoints et tout couplage est optimal. Supposons maintenant $0 < \delta < 1$, et notons B une variable aléatoire de Bernoulli de paramètre $1 - \delta$. On introduit également trois variables U, V, W indépendantes entre elles et indépendantes de B :

- U de loi $\frac{\min(\rho(x),\pi(x))}{1-\delta}$;
- V de loi $\frac{\rho(x)-\min(\rho(x),\pi(x))}{\delta}$;
- W de loi $\frac{\pi(x)-\min(\rho(x),\pi(x))}{\delta}$.

Notons que V et W ont des lois à supports disjoints, car si $\rho(x) - \min(\rho(x), \pi(x)) > 0$, alors $\pi(x) - \min(\rho(x), \pi(x)) = 0$. On pose $X = BU + (1 - B)V$ et $Y = BU + (1 - B)W$. Montrons

que (X, Y) est un couplage optimal de ρ et π. Si $B = 1$, alors $X = Y = U$, tandis que si $B = 0$, alors $X = V \neq W = Y$ d'après ce que l'on vient de dire sur les supports des lois de V et W. On a donc $\mathbb{P}[X \neq Y] = \mathbb{P}[B = 0] = \delta$. Il reste à montrer que X a loi ρ et que Y a loi π. Or, pour X par exemple,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}[X = x] &= \mathbb{P}[B = 1]\,\mathbb{P}[U = x] + \mathbb{P}[B = 0]\,\mathbb{P}[V = x] \\ &= \min(\rho(x), \pi(x)) + (\rho(x) - \min(\rho(x), \pi(x))) = \rho(x).\end{aligned}$$ □

2. Méthodes spectrales et phénomène de coupure.

Considérons une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ irréductible et apériodique sur un espace d'états fini $\mathfrak{X}$ de cardinal N. Par le théorème de convergence 3.19, les lois marginales π_n vérifient

$$\pi_n \to_{n\to\infty} \pi,$$

où π est la loi stationnaire de la chaîne, et où la convergence ci-dessus peut être envisagée comme une convergence de vecteurs dans $\mathbb{C}^N$. Or, $\pi_n = \pi_0\, P^n$, où P est la matrice de transition. Le théorème de convergence doit donc être relié au comportement des puissances d'une matrice stochastique, et aux propriétés spectrales de cette matrice. Le résultat algébrique qui explique le théorème de convergence 3.19 dans le cas des espaces finis est le *théorème de Perron–Frobenius*, que nous énonçons ci-dessous sans démonstration.

Théorème C.5 (Perron–Frobenius). *Soit P une matrice stochastique irréductible de taille $N \times N$. L'ensemble des valeurs propres (complexes) de P est inclus dans le disque unité $\{z \in \mathbb{C} \,|\, |z| \leq 1\}$. De plus, si z est une valeur propre de P de module 1, alors z a multiplicité 1 comme racine du polynôme caractéristique de P (valeur propre simple), et z s'écrit sous la forme*

$$z = \mathrm{e}^{\frac{2\mathrm{i}k\pi}{h}},$$

où h est la période de P et $k \in [\![1, h]\!]$. En particulier, si P est une matrice stochastique irréductible et apériodique, alors le spectre de P est

$$\{1\} \cup \{\textit{valeurs propres de module strictement inférieur à } 1\},$$

la valeur propre 1 étant de multiplicité 1.

Il y a un cas particulier du théorème de Perron–Frobenius qui est relativement simple à démontrer, et que nous allons illustrer par un exemple dans cette section. Rappelons qu'une mesure de probabilité π sur un espace $\mathfrak{X}$ est dite réversible par rapport à une matrice de transition P si $\pi(x)\,P(x, y) = \pi(y)\,P(y, x)$ pour tout couple $(x, y) \in \mathfrak{X}^2$. Dans ce cas, la mesure π est invariante pour P (Lemme B.2).

Lemme C.6 (Chaînes réversibles et opérateurs symétriques). *Si P est une matrice stochastique de taille finie, irréductible et qui admet une mesure réversible, alors toutes les valeurs propres de P sont réelles.*

Démonstration. Notons π la mesure de probabilité réversible, qui est l'unique loi invariante pour P. Comme la matrice est irréductible, $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in \mathfrak{X}$, donc

$$\langle f \,|\, g \rangle_\pi = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\, f(x)\, g(x)$$

est un produit scalaire (forme bilinéaire symétrique définir positive) sur $\mathbb{R}^{\mathfrak{X}}$. Alors, la matrice P est un opérateur symétrique pour ce produit scalaire :

$$\begin{aligned}\langle f \,|\, Pg\rangle_\pi &= \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\, f(x)\, (Pg)(x) = \sum_{x,y} \pi(x)\, f(x)\, P(x,y)\, g(y)\\ &= \sum_{x,y} \pi(y)\, P(y,x)\, f(x)\, g(y) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} \pi(y)\, (Pf)(y)\, g(y) = \langle Pf \,|\, g\rangle_\pi\,.\end{aligned}$$

Le résultat s'en déduit immédiatement, puisqu'un opérateur symétrique de dimension finie est diagonalisable en base orthonormée, avec des valeurs propres réelles. □

Remarque C.7. On a montré ci-dessus que dans le cas réversible, l'action à gauche de P sur les vecteurs colonnes était un opérateur symétrique de l'espace $\mathscr{L}^2(\mathfrak{X},\pi)$. On peut aussi montrer que l'action à droite de P sur les vecteurs lignes est un opérateur symétrique de l'espace $\mathscr{L}^2(\mathfrak{X},\frac{1}{\pi})$. En effet,

$$\begin{aligned}\langle \mu \,|\, \nu P\rangle_{\frac{1}{\pi}} &= \sum_{x\in\mathfrak{X}} \frac{1}{\pi(x)}\, \mu(x)\, (\nu P)(x) = \sum_{x,y} \frac{1}{\pi(x)\,\pi(y)}\, \mu(x)\, \nu(y)\, \pi(y)\, P(y,x)\\ &= \sum_{x,y} \frac{1}{\pi(x)\,\pi(y)}\, \mu(x)\, \nu(y)\, \pi(x)\, P(x,y) = \sum_{y\in\mathfrak{X}} \frac{1}{\pi(y)}\, (\mu P)(y)\, \nu(y) = \langle \mu P \,|\, \nu\rangle_{\frac{1}{\pi}}\,.\end{aligned}$$

Preuve du théorème de Perron–Frobenius, cas réversible.
Considérons une matrice stochastique irréductible P avec une mesure de probabilité réversible π. Comme toutes les valeurs propres de P sont réelles, il faut montrer qu'elles sont incluses dans $[-1,1]$. Notons que le spectre pour l'action à gauche de P est le même que le spectre pour son action à droite. Remarquons que pour tout vecteur ligne $\mu \in \mathbb{R}^{\mathfrak{X}}$, on a

$$\begin{aligned}\left|\langle \mu \,|\, \mu P\rangle_{\frac{1}{\pi}}\right| &= \left|\sum_{x,y} \frac{1}{\pi(x)}\, \mu(x)\, \mu(y)\, P(y,x)\right| = \left|\sum_{x,y} \pi(y)\, \frac{\mu(x)}{\pi(x)}\, \frac{\mu(y)}{\pi(y)}\, P(y,x)\right|\\ &\le \frac{1}{2}\sum_{x,y} \pi(y) \left(\frac{\mu(x)}{\pi(x)}\right)^2 P(y,x) + \frac{1}{2}\sum_{x,y} \pi(y) \left(\frac{\mu(y)}{\pi(y)}\right)^2 P(y,x)\\ &\le \frac{1}{2}\sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x) \left(\frac{\mu(x)}{\pi(x)}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{y\in\mathfrak{X}} \pi(y) \left(\frac{\mu(y)}{\pi(y)}\right)^2\\ &\le \sum_{x\in\mathfrak{X}} \frac{1}{\pi(x)}\, (\mu(x))^2 = \langle \mu \,|\, \mu\rangle_{\frac{1}{\pi}}\,.\end{aligned}$$

En particulier, si μ est vecteur propre pour une valeur propre λ, alors $(\|\mu\|_{\frac{1}{\pi}})^2 \ge |\lambda|\, (\|\mu\|_{\frac{1}{\pi}})^2$, donc $1 \ge |\lambda|$. On a donc bien $\mathrm{Spec}(P) \subset [-1,1]$. Identifions les vecteurs propres pour la valeur propre $\lambda = 1$. Si $\lambda = 1$, alors la suite d'inégalités ci-dessus est une suite d'égalités, et on peut même ôter les valeurs absolues sur la première ligne. Ceci n'est possible que si

$$\frac{\mu(x)}{\pi(x)}\, \frac{\mu(y)}{\pi(y)} = \frac{1}{2}\left(\frac{\mu(x)}{\pi(x)}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\mu(y)}{\pi(y)}\right)^2$$

pour tout couple (x,y). Or, ceci implique $\frac{\mu(x)}{\pi(x)} = \frac{\mu(y)}{\pi(y)}$, donc $\mu = c\,\pi$ avec c constante. Réciproquement, le vecteur ligne π vérifie bien $\pi = \pi P$ par définition d'une mesure invariante. On a donc établi que la valeur propre 1 était une valeur propre simple.

Montrons finalement que si P est apériodique, alors -1 n'est pas valeur propre, de sorte que $\mathrm{Spec}(P) \subset (-1,1]$. On suppose par l'absurde qu'il existe un vecteur propre *à gauche* f pour la valeur propre -1 ; sans perte de généralité, on peut alors se donner $x \in \mathfrak{X}$ tel que

$f(x) > 0$ et $f(x) = \max_{y\in\mathfrak{X}} |f(y)|$ (quitte à prendre $-f$ au lieu de f). Le Lemme 3.15 implique que, pour n assez grand, $P^n(x,x) > 0$. Alors,

$$\begin{aligned} -f(x) = (P^{2n+1}f)(x) &= \sum_{y\in\mathfrak{X}} P^{2n+1}(x,y)\, f(y) \\ &> -\sum_{y\in\mathfrak{X}} P^{2n+1}(x,y)\, |f(y)| \\ &> -\sum_{y\in\mathfrak{X}} P^{2n+1}(x,y)\, f(x) = -f(x) \end{aligned}$$

l'inégalité étant stricte à la seconde ligne car $f(x) > 0 > -f(x)$; c'est une contradiction. □

Dans le cas réversible, on peut utiliser la théorie spectrale développée ci-dessus pour démontrer des bornes supérieures sur $d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi)$. Fixons une matrice irréductible apériodique P de taille $N \times N$ et de mesure réversible π, et notons le spectre de P

$$1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \cdots \geq \lambda_N > -1.$$

Le *trou spectral* de la matrice P est la quantité $\rho = 1 - |\lambda|$, où λ est la plus grande valeur propre en module parmi celles différentes de 1. On a donc avec nos notations

$$\rho = \min(1 - |\lambda_2|, 1 - |\lambda_N|).$$

Théorème C.8 (Vitesse de convergence des chaînes de Markov finies réversibles). *Soit P une matrice stochastique irréductible apériodique sur un espace d'états fini. On suppose que P est réversible, de loi invariante π et de trou spectral ρ. Alors, pour toute loi initiale π_0, on a*

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \leq C\, \mathrm{e}^{-\rho n}, \quad \textit{avec } C = \frac{1}{2}\sqrt{\max_{x\in\mathfrak{X}} \left(\frac{1}{\pi(x)} - 1\right)}.$$

Démonstration. D'après ce que l'on a vu dans la section précédente,

$$\begin{aligned} 2\, d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) = d_1(\pi_n, \pi) \leq d_2(\pi_n, \pi) &= \left(\sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x) \left(\frac{\pi_n(x)}{\pi(x)} - 1\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \left(\sum_{x\in\mathfrak{X}} \frac{1}{\pi(x)} \left(\pi_n(x) - \pi(x)\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} = \|\pi_n - \pi\|_{\mathscr{L}^2(\mathfrak{X}, \frac{1}{\pi})}. \end{aligned}$$

Or, P est un opérateur symétrique pour son action à droite sur $\mathscr{L}^2(\mathfrak{X}, \frac{1}{\pi})$, donc il existe une base orthonormée $(\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_N)$ de cet espace correspondant aux valeurs propres $(1, \lambda_2, \ldots, \lambda_N)$. Le vecteur propre orthonormé μ_1 pour la valeur propre 1 est simplement la mesure invariante π. Écrivons la décomposition de la loi initiale π_0 dans la base de diagonalisation de P :

$$\pi_0 = c\, \pi + \sum_{i=2}^{N} c_i\, \mu_i$$

pour certains coefficients réels c et $c_{i\in[\![2,N]\!]}$, avec $c_i = \langle \pi_0 \,|\, \mu_i \rangle_{\frac{1}{\pi}}$. En appliquant P^n à la formule ci-dessus, on obtient :

$$\pi_n = c\, \pi + \sum_{i=2}^{N} c_i\, (\lambda_i)^n\, \mu_i.$$

Comme toutes les valeurs propres $\lambda_{i\in[\![2,N]\!]}$ sont en modules plus petites que 1, en faisant tendre n vers l'infini, on obtient $c\,\pi = \lim_{n\to\infty} \pi_n$, ce qui impose $c = 1$. Alors,

$$\pi_n - \pi = \sum_{i=2}^{N} c_i\,(\lambda_i)^n\,\mu_i;$$
$$\left(\|\pi_n - \pi\|_{\frac{1}{\pi}}\right)^2 = \sum_{i=2}^{N}(c_i)^2\,(\lambda_i)^{2n} \leq \left(\sum_{i=2}^{N}(c_i)^2\right)(1-\rho)^{2n} \leq \left(\|\pi_0 - \pi\|_{\frac{1}{\pi}}\right)^2 \mathrm{e}^{-2n\rho}.$$

Pour conclure, on doit borner $F(\pi_0) = (\|\pi_0 - \pi\|_{\frac{1}{\pi}})^2 = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \frac{1}{\pi(x)}\,(\pi_0(x)-\pi(x))^2$ sur l'ensemble des mesures de probabilité sur $\mathfrak{X}$. Notons que la fonction F est quadratique et donc convexe sur une partie convexe de $\mathbb{R}^N$; elle atteint donc son maximum en un point extremal du convexe formé par les mesures de probabilité. Les points extrémaux de ce convexe sont exactement les mesures de Dirac δ_{x_0} (toute probabilité est une combinaison convexe de ces Diracs). Ainsi,

$$\max_{\pi_0 \text{ probabilité sur } \mathfrak{X}} \left(\|\pi_0 - \pi\|_{\frac{1}{\pi}}\right)^2 = \max_{x_0\in\mathfrak{X}} \left(\|\delta_{x_0} - \pi\|_{\frac{1}{\pi}}\right)^2.$$

Or, pour x_0 fixé,

$$\begin{aligned}\left(\|\delta_{x_0} - \pi\|_{\frac{1}{\pi}}\right)^2 &= \frac{(1-\pi(x_0))^2}{\pi(x_0)} + \sum_{x\neq x_0} \pi(x) \\ &= \frac{(1-\pi(x_0))^2}{\pi(x_0)} + (1-\pi(x_0)) = \frac{1}{\pi(x_0)} - 1.\end{aligned}$$ □

En pratique, nous n'aurons pas forcément besoin de connaître la théorie générale, car nous pourrons diagonaliser au cas par cas la matrice de transition P de la chaîne de Markov. C'est exactement ce qui a été fait lorsque nous avons étudié la marche aléatoire sur le cercle. Un autre exemple important et qui va nous permettre de mettre en évidence le *phénomène de coupure* est la marche aléatoire sur l'hypercube $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N = \{\pm 1\}^N$. Considérons ainsi l'espace d'états

$$\mathfrak{X} = (\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N = \{(x_1, \dots, x_N)\,|\,x_i \in \{-1, 1\}\},$$

et la matrice de transition

$$P_N(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{N+1} & \text{si } x = y, \\ \frac{1}{N+1} & \text{si } x_i = -y_i \text{ pour un seul indice } i \in [\![1,N]\!], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les transitions associées à cette matrice se déroulent comme suit : à chaque étape, on a une probabilité $\frac{1}{N+1}$ de rester au même endroit, et une probabilité $\frac{N}{N+1}$ de changer une des coordonnées du vecteur de taille N, chaque coordonnée étant équiprobable.

Proposition C.9 (Propriétés de la marche aléatoire sur l'hypercube). *La marche aléatoire sur l'hypercube est irréductible apériodique, de loi stationnaire et même réversible $\pi(x) = \frac{1}{2^N}$ pour tout $x \in (\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N$.*

Démonstration. Comme on peut changer une à une les coordonnées d'un vecteur par des transitions de la chaîne de Markov, elle est irréductible ; et l'apériodicité vient de

$$P_N(x,x) = \frac{1}{N+1} > 0$$

pour tout état x. Finalement, la mesure uniforme $\pi(x) = \frac{1}{2^N}$ est bien réversible, car pour tout couple (x,y), $P_N(x,y) = P_N(y,x)$. □

Pour trouver les valeurs propres de P_N, on va exhiber sa base de diagonalisation. Étant donnés $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N) \in \{0,1\}^N$ et $x \in \{\pm 1\}^N$, posons $\varepsilon(x) = x^\varepsilon = \prod_{i=1}^n (x_i)^{\varepsilon_i}$.

Lemme C.10 (Diagonalisation de la matrice de transition de la marche sur l'hypercube). *Les fonctions ε avec $\varepsilon \in \{0,1\}^N$ forment une base orthonormée de $\mathbb{R}^{\{\pm 1\}^N}$ pour le produit scalaire $\langle f \,|\, g \rangle = \frac{1}{2^N} \sum_{x \in \{\pm 1\}^N} f(x)\, g(x)$. De plus, vues comme vecteurs lignes de taille 2^N, ces fonctions diagonalisent l'action à droite de P_N :*

$$\varepsilon\, P_N = \left(1 - \frac{2\sum_{i=1}^N \varepsilon_i}{N+1}\right) \varepsilon \quad \textit{pour tout } \varepsilon \in \{0,1\}^N.$$

Démonstration. On calcule

$$\langle \varepsilon \,|\, \eta \rangle = \frac{1}{2^N} \sum_{x \in (\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N} x^{\varepsilon+\eta} = \prod_{i=1}^N \left(\frac{(-1)^{\varepsilon_i + \eta_i} + 1}{2} \right).$$

Si $\varepsilon = \eta$, alors chaque terme du produit vaut 1, donc $\langle \varepsilon \,|\, \varepsilon \rangle = 1$. Si $\varepsilon_i \neq \eta_i$, alors $\frac{(-1)^{\varepsilon_i+\eta_i}+1}{2} = \frac{-1+1}{2} = 0$ et le produit scalaire $\langle \varepsilon \,|\, \eta \rangle$ s'annule. Comme on a le bon nombre de fonctions orthogonales et de norme 1, on conclut que $\{\varepsilon \in \{0,1\}^N\}$ est une base orthonormée de l'espace de fonctions $\mathbb{R}^{(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N}$, qui est de dimension 2^N.

On a ensuite :

$$(\varepsilon\, P_N)(x) = \sum_y \varepsilon(y)\, P_N(y,x) = \frac{1}{N+1}\, \varepsilon(x) + \frac{1}{N+1} \sum_{i=1}^N (-1)^{\varepsilon_i}\, \varepsilon(x),$$

Comme $(-1)^{\varepsilon_i} = 1 - 2\varepsilon_i$, on conclut que

$$(\varepsilon\, P_N)(x) = \varepsilon(x) \left(1 - \frac{2\sum_{i=1}^N \varepsilon_i}{N+1}\right). \qquad \square$$

Remarque C.11. On retrouve sur ce cas particulier le théorème de Perron–Frobenius. En effet, si $\varepsilon = (0, \dots, 0)$, alors la valeur propre obtenue est égale à 1, et c'est la seule fonction qui donne cette valeur propre (valeur propre simple). Pour les autres fonctions ε, on obtient une valeur propre comprise entre $-\frac{N-1}{N+1}$ et $\frac{N-1}{N+1}$, donc de module strictement inférieur à 1.

Dans ce qui suit, on considère le cas particulier où $\pi_0 = \delta_{(1,1,\dots,1)}$ (on obtiendrait les mêmes estimées de la distance en variation totale pour toute loi initiale concentrée en un point, car tous les éléments de $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N$ jouent un rôle symétrique). La distibution au temps n de la chaîne de Markov est donnée par :

$$\pi_n = \pi_0\, (P_N)^n = \sum_{\varepsilon \in \{0,1\}^N} \langle \pi_0 \,|\, \varepsilon \rangle\ (\varepsilon\, (P_N)^n) = \sum_{\varepsilon \in \{0,1\}^N} \langle \pi_0 \,|\, \varepsilon \rangle \left(1 - \frac{2|\varepsilon|}{N+1}\right)^n \varepsilon,$$

où $|\varepsilon| = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i$. Notons alors que $\langle \varepsilon \,|\, \delta_{(1,\dots,1)} \rangle = \frac{1}{2^N}$ pour toute fonction ε. Donc,

$$\pi_n(x) - \pi(x) = \frac{1}{2^N} \sum_{k=1}^N \left(1 - \frac{2k}{N+1}\right)^n \sum_{\substack{\varepsilon \in \{0,1\}^N \\ |\varepsilon| = k}} \varepsilon(x).$$

On peut réécrire cette identité à l'aide de la fonction de densité $h_n(x) = \frac{\pi_n(x)}{\pi(x)} = 2^N \pi_n(x)$:

$$h_n(x) - 1 = \sum_{k=1}^{N} \left(1 - \frac{2k}{N+1}\right)^n \sum_{\substack{\varepsilon \in \{0,1\}^N \\ |\varepsilon| = k}} \varepsilon(x).$$

Dans l'espace $\mathscr{L}^2(\mathfrak{X}, \pi)$, les fonctions ε forment une base orthonormée, donc on obtient

$$\left(\|h_n - 1\|_{\mathscr{L}^2(\mathfrak{X},\pi)}\right)^2 = \sum_{k=1}^{N} \binom{N}{k} \left(1 - \frac{2k}{N+1}\right)^{2n}$$

puisqu'il y a $\binom{N}{k}$ façon de répartir les 1 pour obtenir une fonction ε avec $|\varepsilon| = k$. La quantité ci-dessus majore $4(d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi))^2$ d'après la discussion du début de ce chapitre. Notons que, si $k' = N + 1 - k$ avec $k \leq \frac{N}{2}$, alors

$$1 - \frac{2k'}{N+1} = -\left(1 - \frac{2k}{N+1}\right) \qquad ; \qquad \binom{N}{k'} \leq \binom{N}{k}.$$

Donc, si $n = \frac{1}{4}(N+1)(\log N + c)$, alors

$$\begin{aligned} 4(d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi))^2 &\leq 2 \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor} \binom{N}{k} \left(1 - \frac{2k}{N+1}\right)^{2n} \leq 2 \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor} \frac{N^k}{k!} \mathrm{e}^{-\frac{4kn}{N+1}} = 2 \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor} \frac{1}{k!} \mathrm{e}^{-ck} \\ &\leq 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathrm{e}^{-ck} = 2(\mathrm{e}^{\mathrm{e}^{-c}} - 1) \leq 2\,\mathrm{e}^{1-c}. \end{aligned}$$

Ainsi, au-delà du temps $\frac{1}{4} N \log N$, la distance en variation totale $d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi)$ devient très petite :

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\pi_{\frac{1}{4}(N+1)(\log N + c)}, \pi\right) \leq C\,\mathrm{e}^{-\frac{c}{2}} \quad \text{avec } C = \sqrt{\frac{\mathrm{e}}{2}}.$$

Il se trouve qu'inversement, avant le temps $\frac{1}{4} N \log N$, la distance en variation totale $d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi)$ n'est pas petite, et est même assez proche de 1. Pour montrer ceci, il faut exhiber des *événements discriminants* A qui ont une probabilité très faible sous π_n et très forte sous π. Considérons la quantité

$$S = \sum_{i=1}^{N} x_i \in [\![-N, N]\!].$$

Sous la loi initiale $\pi_0 = \delta_{(1,\ldots,1)}$, $S = N$ presque sûrement, tandis que sous la loi uniforme π, $\mathbb{E}[S] = 0$ et $\mathrm{Var}(S) = N$, de sorte que S est concentrée autour de la valeur 0 avec des fluctuations d'ordre $\sqrt{N}$. On a donc un comportement de la variable aléatoire $|x|$ très différent sous π_0 et sous π ; nous allons montrer que c'est encore le cas pour les deux lois π_n et π si $n \leq \frac{1}{4}(N-1)\log N$. Commençons par énoncer un lemme général qui permet de borner inférieurement la distance en variation totale de deux lois ρ et π lorsqu'il existe une variable aléatoire avec un comportement très différent sous ρ et sous π.

Lemme C.12 (Variable aléatoire discriminante). *Soit X une variable aléatoire telle que $a = \mathbb{E}_\rho[X]$, $b = \mathbb{E}_\pi[X]$ et*

$$\max(\mathrm{Var}_\rho(X), \mathrm{Var}_\pi(X)) \leq v.$$

Alors, $d_{\mathrm{TV}}(\rho, \pi) \geq 1 - \frac{8v}{(b-a)^2}$.

Démonstration. Supposons sans perte de généralité $a \le b$, quitte à échanger le rôle joué par ρ et π. On considère l'événement $A = \{X \ge \frac{a+b}{2}\}$. Par l'inégalité de Bienaymé–Chebyshev,

$$\rho(A) \le \rho\left(\left\{|X - \mathbb{E}_\rho[X]| \ge \frac{b-a}{2}\right\}\right) \le \frac{4v}{(b-a)^2},$$

et de même,

$$1 - \pi(A) = \pi\left(\left\{X < \frac{a+b}{2}\right\}\right) \le \pi\left(\left\{|X - \mathbb{E}_\rho[X]| \ge \frac{b-a}{2}\right\}\right) \le \frac{4v}{(b-a)^2},$$

donc $\pi(A) - \rho(A) \ge 1 - \frac{8v}{(b-a)^2}$. □

Sous la loi uniforme π, la somme $S = \sum_{i=1}^N x_i$ est une somme de variables de Bernoulli ± 1 de paramètre $\frac{1}{2}$, donc $\mathbb{E}_\pi[S] = 0 = a$ et $\mathrm{Var}_\pi(S) = N$. Calculons maintenant ces quantités sous la loi π_n. Pour toute fonction ε de la base orthonormée, on a

$$\mathbb{E}_{\pi_n}[\varepsilon(x)] = 2^N \,\langle \varepsilon \,|\, \pi_n\rangle = 2^N \,\langle \varepsilon \,|\, \pi_0 (P_N)^n\rangle = 2^N \,\langle \varepsilon (P_N)^n \,|\, \pi_0\rangle$$

car le produit scalaire considéré est à un facteur près celui de l'espace $\mathscr{L}^2(\mathfrak{X}, \frac{1}{\pi})$, pour lequel la matrice P_N est un opérateur à droite symétrique (voir la Remarque C.7). On obtient donc :

$$\mathbb{E}_{\pi_n}[\varepsilon(x)] = 2^N \left(1 - \frac{2|\varepsilon|}{N+1}\right)^n \langle \varepsilon \,|\, \delta_{(1,\dots,1)}\rangle = \left(1 - \frac{2|\varepsilon|}{N+1}\right)^n.$$

Si $\varepsilon_i = (0, \dots, 1_i, \dots, 0)$, alors $S = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i$, donc

$$\mathbb{E}_{\pi_n}[S] = N\left(1 - \frac{2}{N+1}\right)^n.$$

Dans ce qui suit, on prendra $n = \frac{1}{4}(N-1)(\log N - c)$. Notons que $\log\left(1 - \frac{2}{N+1}\right) \ge -\frac{2}{N-1}$, donc $\mathbb{E}_{\pi_n}[S] \ge N\,\mathrm{e}^{-\frac{2n}{N-1}} = N^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{\frac{c}{2}} = b$. Pour calculer la variance de S sous π_n, notons que

$$S^2 = \left(\sum_{i=1}^N \varepsilon_i\right)^2 = N + \sum_{\substack{i,j \in [\![1,N]\!] \\ i \ne j}} \varepsilon_i \varepsilon_j$$

et qu'un produit $\varepsilon_i \varepsilon_j$ est une fonction $\varepsilon_{i,j}$ correspondant au N-uplet $(0, \dots, 1_i, \dots, 1_j, \dots, 0)$. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\pi_n}[S^2] &= N + N(N-1)\left(1 - \frac{4}{N+1}\right)^n ; \\
\mathrm{Var}_{\pi_n}(S) &= N + N(N-1)\left(1 - \frac{4}{N+1}\right)^n - N^2\left(1 - \frac{2}{N+1}\right)^{2n} \\
&\le N + N^2\left(\left(1 - \frac{4}{N+1}\right)^n - \left(1 - \frac{2}{N+1}\right)^{2n}\right) \le N.
\end{aligned}$$

On peut donc appliquer le Lemme C.12 avec $v = N$:

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \ge 1 - 8\,\mathrm{e}^{-c}.$$

On a ainsi démontré une coupure au voisinage du temps $n = \frac{1}{4} N \log N$:

Théorème C.13 (Phénomène de coupure pour la marche aléatoire sur l'hypercube). *Considérons la marche aléatoire sur l'hypercube $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N$, de loi réversible la loi uniforme. On suppose que $\pi_0 = \delta_{(1,\dots,1)}$, et on pose $n_{\mathrm{coupure}} = \frac{1}{4} N \log N$.*

(1) Il existe une constante positive C telle que si $n = (1+\varepsilon)\, n_{\mathrm{coupure}}$ avec $\varepsilon \ge 0$, alors

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \le C\, N^{-\frac{\varepsilon}{2}}.$$

(2) Quitte à changer la constante C, si $n = (1-\varepsilon)\, n_{\text{coupure}}$ avec $\varepsilon \geq 0$, alors on a aussi

$$d_{\text{TV}}(\pi_n, \pi) \geq 1 - C\, N^{-\varepsilon}.$$

Démonstration. Il suffit dans chaque cas de faire un changement de variables, qui donne $c = \varepsilon \log N + o(1)$. □

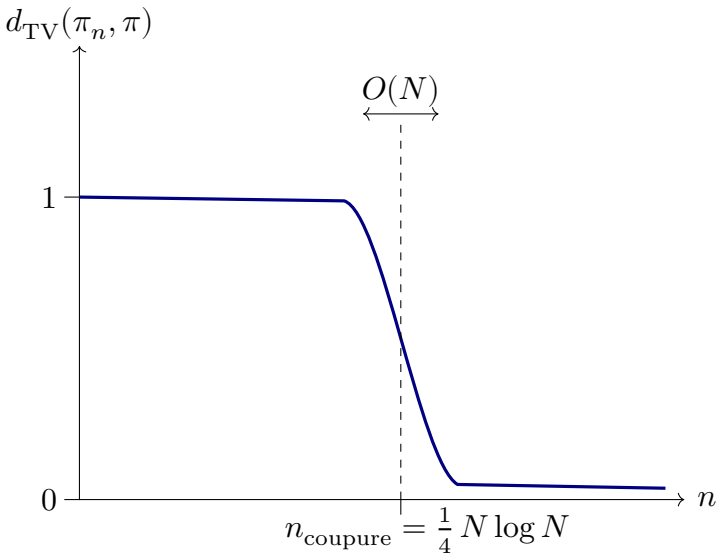


Fig. C.2. Phénomène de coupure : la distance en variation totale reste très proche de 1 jusqu'au temps $\frac{1}{4} N \log N$, puis se rapproche très rapidement de 0, en une fenêtre d'ordre de grandeur $O(N)$.

On dit aussi que $\frac{1}{4} N \log N$ est le *temps de mélange* de la marche aléatoire. Le phénomène de coupure se produit pour de très nombreuses familles de chaînes de Markov sur des espaces d'états finis : permutations aléatoires, marches aléatoires sur de grands graphes, *etc.*

Remarque C.14. Pour étudier la marche aléatoire sur l'hypercube $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N$, on a utilisé la même approche d'analyse harmonique que pour la marche aléatoire sur le cercle $(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ (voir la Remarque A.9). En effet, les fonctions ε sont les caractères irréductibles du groupe $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^N$, et elles forment une base de Fourier adaptée à l'étude de marches aléatoires sur ce groupe.

3. Méthodes de couplage.

Pour conclure ce chapitre, nous allons essayer de calculer le temps de mélange de la chaîne de Markov utilisée pour réaliser l'algorithme de Metropolis pour le modèle d'Ising ; ou au moins, une borne supérieure sur ce temps de mélange (c'est ce dont on a besoin pour savoir que l'approximation obtenue de la loi $\mathbb{P}_{N,\beta}^{\text{Ising}}$ est bonne). On rappelle les données de la chaîne de Markov :

- espace d'états : $\mathfrak{X} = \mathfrak{X}_N^{\text{Ising}} = \{\pm 1\}^{[\![1,N]\!]^2}$.
- loi stationnaire :

$$\pi(\sigma) = \mathbb{P}_{N,\beta}^{\text{Ising}}[\sigma] = \frac{1}{Z_{N,\beta}^{\text{Ising}}} \exp\left(\beta \sum_{x \sim y} \sigma(x)\, \sigma(y)\right).$$

- probabilités de transition :

$$P(\sigma,\sigma') = \begin{cases} 0 & \text{si } \sigma \text{ et } \sigma' \text{ différent en deux sites ou plus,} \\ \frac{1}{N^2}\,\frac{\exp\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma'(x)\,\sigma(y)\bigr)}{2\cosh\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim x}\sigma(y)\bigr)} & \text{si } \sigma \text{ et } \sigma' \text{ diffèrent uniquement en } x, \\ \text{le reste} & \text{si } \sigma = \sigma', \end{cases}$$

où par « le reste » on entend la quantité qui fait de $P(\sigma,\cdot)$ une probabilité.

On souhaite estimer $d_{\mathrm{TV}}(\pi_n,\pi)$. Par le Théorème C.4, c'est l'infimum sur tous les couplages de π_n et de π de $\mathbb{E}[1_{(X,Y)}]$. Une quantité plus simple à manipuler est

$$d_{\mathrm{C}}(\rho,\pi) = \inf_{(X,Y)\text{ couplage de }(\rho,\pi)} \mathbb{E}[d(X,Y)],$$

où la distance entre deux configurations σ et σ' est le nombre de sites où elles diffèrent, c'est-à-dire :

$$d(\sigma,\sigma') = \frac{1}{2}\sum_{x\in[\![1,N]\!]^2} |\sigma(x)-\sigma'(x)|.$$

Si $\sigma\neq\sigma'$, alors $d(\sigma,\sigma')\geq 1 = 1_{(\sigma\neq\sigma')}$, donc on obtient immédiatement en prenant les espérances l'inégalité

$$d_{\mathrm{C}}(\rho,\pi) \geq d_{\mathrm{TV}}(\rho,\pi)$$

pour toute paire de mesures (ρ,π) sur l'espace des configurations $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{Ising}}$.

Lemme C.15 (Couplage des probabilités de transition). *On suppose que le paramètre β est suffisamment petit, de sorte que*

$$c(\beta) = 1 - 4\tanh(2\beta) > 0.$$

Considérons deux configurations σ et τ telles que $d(\sigma,\tau)=1$. Alors, il existe un couplage (σ_1,τ_1) des lois de transition $P(\sigma,\cdot)$ et $P(\tau,\cdot)$ tel que

$$\mathbb{E}[d(\sigma_1,\tau_1)] \leq \exp\left(-\frac{c(\beta)}{N^2}\right).$$

Démonstration. Rappelons que les transitions de la chaîne de Markov ont été construites dans le chapitre précédent en appliquant une transformation aléatoire $f(\cdot,(X,U))$, où X est un site aléatoire de la grille $[\![1,N]\!]^2$ et U est un réel de $[0,1]$ choisi suivant la mesure uniforme. On va réaliser les transitions $\sigma\to\sigma_1$ et $\tau\to\tau_1$ en utilisant *le même couple* (X,U). Notons x_0 l'unique site tel que $\sigma(x_0)\neq\tau(x_0)$; quitte à échanger les deux configurations, on peut supposer $\sigma(x_0)=-1$ et $\tau(x_0)=+1$. On notera par ailleurs

$$p_X^\sigma = \frac{\exp\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim X}\sigma(y)\bigr)}{2\cosh\bigl(\beta\sum_{y\,|\,y\sim X}\sigma(y)\bigr)},$$

et de même pour p_X^τ. Selon que U soit plus petit ou plus grand que p_X^σ, on met à jour le site X avec un $+1$ ou -1 lorsque l'on passe de σ à σ_1 ; et de même pour p_X^τ et la transition $\tau\to\tau_1$. Distinguons trois cas :

(1) Si $X\notin\{x_0,\text{ voisins de }x_0\}$, alors $p_X^\sigma = p_X^\tau$, donc on a $\sigma_1(X)=\tau_1(X)$. Comme on avait déjà $\sigma(X)=\tau(X)$, la distance $d(\sigma_1,\tau_1)$ reste égale à 1 dans ce cas :

$$\mathbb{E}[d(\sigma_1,\tau_1)\,|\,X\notin\{x_0,\text{ voisins de }x_0\}] = 1.$$

(2) Si $X=x_0$, alors on a encore $p_X^\sigma = p_X^\tau$, car les configurations σ et τ coïncident sur les voisins de x_0. Donc, on a de nouveau $\sigma_1(X)=\tau_1(X)$, et les deux configurations σ_1 et τ_1 sont maintenant partout égales :

$$\mathbb{E}[d(\sigma_1,\tau_1)\,|\,X=x_0] = 0.$$

(3) Il reste à traiter le cas où X est l'un des voisins de x_0 (le nombre de ces voisins est au plus égal à 4, et il peut être inférieur à 4 si x_0 se situe au bord de la grille). On a $p_X^\sigma < p_X^\tau$, car dans la somme sur les voisins de X, le site x_0 intervient avec $\sigma(x_0) = -1$ et $\tau(x_0) = +1$. Alors, il est possible que l'on mette à jour le site X avec un -1 dans σ_1 et un $+1$ dans τ_1, à condition que

$$p_X^\sigma < U < p_X^\tau.$$

Dans ce cas, la distance $d(\sigma_1, \tau_1)$ augmente et vaut 2, puisque σ_1 et τ_1 diffèrent en x_0 et en son voisin X. Dans les autres cas, $d(\sigma_1, \tau_1) = d(\sigma, \tau) = 1$. Ainsi, si l'on dispose d'une borne δ déterministe sur la taille de l'intervalle $[p_X^\sigma, p_X^\tau]$, alors $\mathbb{P}[p_X^\sigma < U < p_X^\tau] \leq \delta$ et

$$\mathbb{E}[d(\sigma_1, \tau_1) \,|\, X \in \{\text{voisins de } x_0\}] \leq 1 + \delta.$$

Calculons une borne δ raisonnable. On peut réécrire

$$p_X^\sigma = \frac{1 + \tanh\bigl(\beta \sum_{y \,|\, y \sim X} \sigma(y)\bigr)}{2},$$

et la fonction tangente hyperbolique vérifie l'identité $\tanh(x+y) = \frac{\tanh x + \tanh y}{1 + \tanh x \tanh y}$, d'où $|\tanh x - \tanh y| \leq 2 \tanh(|x-y|)$ pour tout couple (x, y). Alors,

$$\begin{aligned} p_X^\tau - p_X^\sigma &= \frac{1}{2}\left(\tanh\left(\beta \sum_{y \,|\, y \sim X} \tau(y)\right) - \tanh\left(\beta \sum_{y \,|\, y \sim X} \sigma(y)\right)\right) \\ &\leq \tanh\left(\beta \sum_{y \,|\, y \sim X} (\tau(y) - \sigma(y))\right) = \tanh(2\beta). \end{aligned}$$

En réunissant ses trois cas, notant $v \in \{2, 3, 4\}$ le nombre de voisins de x_0 dans la grille carrée, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[d(\sigma_1, \tau_1)] &\leq \frac{N^2 - v - 1}{N^2} + \frac{v}{N^2}\,(1 + \tanh(2\beta)) = 1 - \frac{(1 - v\,\tanh(2\beta))}{N^2} \\ &\leq 1 - \frac{c(\beta)}{N^2} \leq \exp\left(-\frac{c(\beta)}{N^2}\right). \end{aligned}$$

□

Corollaire C.16. *Pour toutes configurations σ et τ dans $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{Ising}}$,*

$$d_{\mathrm{C}}(P(\sigma, \cdot), P(\tau, \cdot)) \leq d(\sigma, \tau)\, \exp\left(-\frac{c(\beta)}{N^2}\right).$$

Démonstration. On montre facilement que d_{C} est une distance sur les mesures de probabilité, donc elle vérifie l'inégalité triangulaire. En utilisant cette inégalité triangulaire avec une chaîne de configurations

$$\sigma = \eta_0, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_{l-1}, \eta_l = \tau$$

où les paires (η_i, η_{i+1}) sont à distance 1, on peut se ramener au cas où $d(\sigma, \tau) = 1$; or ce cas est contenu dans le lemme précédent. □

Proposition C.17. *Pour toutes mesures de probabilité μ et ρ sur l'espace $\mathfrak{X}_N^{\mathrm{Ising}}$, on a*

$$d_{\mathrm{C}}(\mu P, \rho P) \leq d_{\mathrm{C}}(\mu, \rho)\, \exp\left(-\frac{c(\beta)}{N^2}\right),$$

où P est la matrice de transition de l'algorithme de Metropolis.

Démonstration. Pour toute paire d'états (σ,τ), il existe un couplage $M_{\sigma,\tau}$ des deux lois $P(\sigma,\cdot)$ et $P(\tau,\cdot)$ tel que, si (σ_1,τ_1) suit la loi $M_{\sigma,\tau}$, alors

$$\mathbb{E}[d(\sigma_1,\tau_1)] \le d(\sigma,\tau)\,\exp\left(-\frac{c(\beta)}{N^2}\right).$$

En effet, c'est le contenu du Corollaire C.16. Par ailleurs, il existe un couplage $M_{\mu,\rho}$ des deux lois μ et ρ tel que, si (σ,τ) suit la loi $M_{\mu,\rho}$, alors

$$\mathbb{E}[d(\sigma,\tau)] \le d_{\mathrm{C}}(\mu,\rho).$$

En effet, la distance $d_{\mathrm{C}}(\mu,\rho)$ sur les mesures de probabilité est définie comme une borne inférieure

$$\inf_{M \text{ couplage de } (\mu,\rho)} \left(\sum_{\sigma,\tau\in\mathfrak{X}_N^{\mathrm{Ising}}} M(\sigma,\tau)\,d(\sigma,\tau) \right),$$

mais l'ensemble des couplages est une partie fermée du compact $[0,1]^{(\mathfrak{X}_N^{\mathrm{Ising}})^2}$; l'infimum est donc atteint pour un certain couplage optimal. On construit alors un couplage de μP et ρP comme suit :

$$M(\sigma_1,\tau_1) = \sum_{\sigma,\tau} M_{\mu,\rho}(\sigma,\tau)\,M_{\sigma,\tau}(\sigma_1,\tau_1).$$

Vérifions d'abord qu'on obtient bien un couplage de μP et ρP. Si l'on calcule la première marginale de M, on obtient :

$$\begin{aligned}
\sum_{\tau_1} M(\sigma_1,\tau_1) &= \sum_{\sigma,\tau,\tau_1} M_{\mu,\rho}(\sigma,\tau)\,M_{\sigma,\tau}(\sigma_1,\tau_1)\\
&= \sum_{\sigma,\tau} M_{\mu,\rho}(\sigma,\tau)\,P(\sigma,\sigma_1) \quad \text{car } M_{\sigma,\tau} \text{ est un couplage de } P(\sigma,\cdot) \text{ et de } P(\tau,\cdot),\\
&= \sum_{\sigma} \mu(\sigma)\,P(\sigma,\sigma_1) \qquad\quad \text{car } M \text{ est un couplage de } \mu \text{ et } \rho,\\
&= (\mu P)(\sigma_1).
\end{aligned}$$

Le même calcul montre que la seconde marginale de M est bien ρP, donc on a défini un couplage. Il suffit alors de vérifier que ce couplage donne une espérance $\mathbb{E}[d(\sigma_1,\tau_1)]$ plus petite que la borne annoncée. Or,

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[d(\sigma_1,\tau_1)] &= \sum_{\sigma_1,\tau_1} M(\sigma_1,\tau_1)\,d(\sigma_1,\tau_1) = \sum_{\sigma,\tau,\sigma_1,\tau_1} M_{\mu,\rho}(\sigma,\tau)\,M_{\sigma,\tau}(\sigma_1,\tau_1)\,d(\sigma_1,\tau_1)\\
&\le \left(\sum_{\sigma,\tau} M_{\mu,\rho}(\sigma,\tau)\,d(\sigma,\tau)\right)\exp\left(-\frac{c(\beta)}{N^2}\right) \le d_{\mathrm{C}}(\mu,\rho)\,\exp\left(-\frac{c(\beta)}{N^2}\right). \qquad \square
\end{aligned}$$

Les calculs ci-dessus mènent à un bon contrôle de la vitesse de convergence *si le paramètre β est suffisamment petit* :

Théorème C.18 (Vitesse de convergence du modèle d'Ising à très haute température). *Supposons β suffisamment petit, de sorte que $c(\beta) > 0$. Alors, si $n = \frac{1+\varepsilon}{c(\beta)}\,N^2\log N^2$ avec $\varepsilon > 0$, on a :*

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n,\pi) \le N^{-2\varepsilon},$$

quelque soit la mesure initiale π_0 de la chaîne de Markov de l'algorithme de Metropolis pour la simulation de $\pi = \mathbb{P}_{N,\beta}^{\mathrm{Ising}}$. Le temps de mélange est donc dans ce cas un $O(N^2\log N^2)$.

Démonstration. En appliquant n fois l'inégalité de la proposition précédente, on voit que pour toutes mesures de probabilité μ et ρ sur l'ensemble des configurations, on a :

$$d_{\mathrm{TV}}(\mu P^n, \rho P^n) \leq d_{\mathrm{C}}(\mu P^n, \rho P^n) \leq d_{\mathrm{C}}(\mu, \rho) \exp\left(-\frac{n\, c(\beta)}{N^2}\right).$$

De plus, $d_{\mathrm{C}}(\mu, \rho)$ est un infimum sur des couplages d'une espérance d'une quantité qui vaut au plus N^2 (lorsqu'on a la configuration $\sigma = \sigma_{\max} = 1$ et $\tau = \sigma_{\min} = -1$). Donc, on a toujours $d_{\mathrm{C}}(\mu, \rho) \leq N^2$, et en appliquant l'inégalité avec $\mu = \pi_0$ et $\rho = \pi$ (loi stationnaire), on obtient :

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \leq N^2 \exp\left(-\frac{n\, c(\beta)}{N^2}\right).$$

Le changement de variables $n = \frac{1+\varepsilon}{c(\beta)} N^2 \log N^2$ permet de conclure. □

Notons que $N^2 \log N^2$ est l'ordre de grandeur du temps requis pour que l'ensemble des sites aléatoires X choisis pour mettre à jour la configuration soit toute la grille carrée $[\![1, N]\!]^2$ (c'est le classique problème du collectionneur). Ainsi, intuitivement, si β n'est pas trop grand (très hautes températures), alors on est proche de la loi stationnaire une fois que tous les sites ont été visités par l'algorithme et mis à jour suivant la règle locale de la dynamique de Glauber. Le problème pour β grand (basses températures) est que les mises à jour locales ne mélangent pas suffisamment la configuration, car les grandes régions de spins positifs ou de spins négatifs ont tendance à rester figées. Autrement dit, visiter une seule fois des sites $X_1, \ldots, X_r$ ne fait pas vraiment évoluer la configuration $\sigma_{|\{X_1,\ldots,X_r\}}$, car les grandes régions de signe constant ont tendance à s'autostabiliser et ne pas évoluer. On peut montrer que si β est grand, alors le temps de mélange de la chaîne de Markov n'est pas un $O(N^2 \log N^2)$, mais est plutôt de l'ordre de $\exp(CN)$ pour une certaine constante $C = C(\beta)$. Cela ne veut pas dire que la simulation de $\mathbb{P}^{\mathrm{Ising}}_{N,\beta}$ avant ce temps de mélange exponentiellement grand (donc en pratique inatteignable) est sans intérêt : ce peut être une bonne approximation pour certaines propriétés des configurations, mais il existe des *propriétés discriminantes* qui n'ont pas du tout la même probabilité sous $\mathbb{P}^{\mathrm{Ising}}_{N,\beta}$ et sous $\pi_{n<n_{\mathrm{mélange}}}$.