

# Chaînes de Markov

Master 2 de Mathématiques

Université d'Orléans

Nils Berglund

Version de Décembre 2007



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Chaînes de Markov sur un ensemble fini</b>	<b>1</b>
1.1	Exemples de chaînes de Markov . . . . .	1
1.2	Définitions . . . . .	7
1.3	Chaînes de Markov absorbantes . . . . .	10
1.4	Chaînes de Markov irréductibles . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Chaînes de Markov sur un ensemble dénombrable</b>	<b>21</b>
2.1	Marches aléatoires . . . . .	21
2.2	Généralités sur les processus stochastiques . . . . .	25
2.3	Récurrence, transience et période . . . . .	29
2.4	Distributions stationnaires . . . . .	34
2.5	Convergence vers la distribution stationnaire . . . . .	37
2.6	Chaînes de Markov réversibles . . . . .	38
<b>3</b>	<b>Application aux algorithmes MCMC</b>	<b>41</b>
3.1	Méthodes Monte Carlo . . . . .	41
3.2	Algorithmes MCMC . . . . .	44
3.3	L'algorithme de Metropolis . . . . .	46
3.4	Le recuit simulé . . . . .	48



# Chapitre 1

## Chaînes de Markov sur un ensemble fini

### 1.1 Exemples de chaînes de Markov

Les chaînes de Markov sont intuitivement très simples à définir. Un système peut admettre un certain nombre d'états différents. L'état change au cours du temps discret. A chaque changement, le nouvel état est choisi avec une distribution de probabilité fixée au préalable, et ne dépendant que de l'état présent.

**Exemple 1.1.1** (La souris dans le labyrinthe). Une souris se déplace dans le labyrinthe de la figure 1.1. Initialement, elle se trouve dans la case 1. A chaque minute, elle change de case en choisissant, de manière équiprobable, l'une des cases adjacentes. Dès qu'elle atteint soit la nourriture (case 4), soit sa tanière (case 5), elle y reste.

On se pose alors les questions suivantes :

1. Avec quelle probabilité la souris atteint-elle la nourriture plutôt que sa tanière?
2. Au bout de combien de temps atteint-elle sa tanière ou la nourriture?

On peut essayer de répondre à ces questions en construisant un arbre décrivant les chemins possibles. Par exemple, il est clair que la souris se retrouve dans sa tanière au bout d'une minute avec probabilité  $1/3$ . Sinon, elle passe soit dans la case 2, soit dans la case 3, et depuis chacune de ces cases elle a une chance sur deux de trouver la nourriture. Il y a donc une probabilité de  $1/6$  que la souris trouve la nourriture au bout de deux minutes. Dans les autres cas, elle se retrouve dans la case de départ, ce qui permet d'établir une formule de récurrence pour les probabilités cherchées.

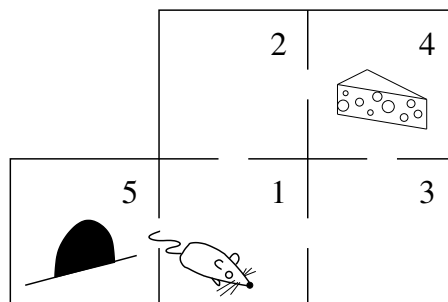


FIGURE 1.1. Le labyrinthe dans lequel vit la souris.

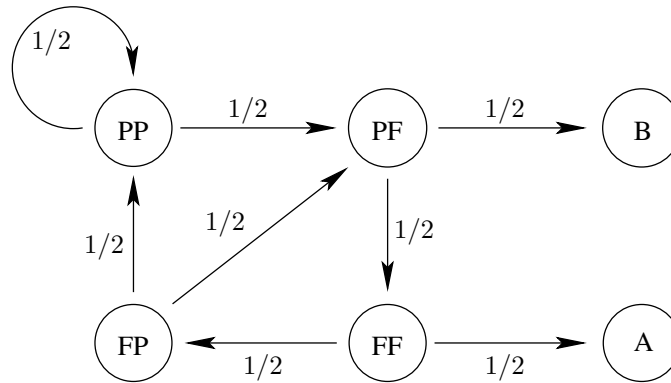


FIGURE 1.2. Graphe associé au jeu de Pile ou Face. Chaque symbole de deux lettres représente le résultat des deux derniers jets de pièce. Anatole gagne si la pièce tombe trois fois de suite sur Face, Barnabé gagne si la pièce tombe sur Pile-Face-Pile.

Cette manière de faire est toutefois assez compliquée, et devient rapidement impossible à mettre en oeuvre quand la taille du labyrinthe augmente. Dans la suite, nous allons développer une méthode plus efficace pour résoudre le problème, basée sur une représentation matricielle.

**Exemple 1.1.2** (Jeu de Pile ou Face). Anatole et Barnabé jouent à la variante suivante de Pile ou Face. Ils jettent une pièce de monnaie (parfaitement équilibrée) de manière répétée. Anatole gagne dès que la pièce tombe trois fois de suite sur Face, alors que Barnabé gagne dès que la suite Pile-Face-Pile apparaît.

On se pose les questions suivantes :

1. Avec quelle probabilité est-ce Anatole qui gagne le jeu?
2. Au bout de combien de jets de la pièce l'un de deux joueurs gagne-t-il?

La situation est en fait assez semblable à celle de l'exemple précédent. Un peu de réflexion montre que si personne n'a gagné au bout de  $n$  jets de la pièce, la probabilité que l'un de deux joueurs gagne au coup suivant ne dépend que des deux derniers résultats. On peut alors décrire le jeu par une chaîne de Markov sur l'ensemble

$$\mathcal{X} = \{PP, PF, FP, FF, \text{A gagne}, \text{B gagne}\}, \quad (1.1.1)$$

où par exemple PP signifie que la pièce est tombée sur Pile lors des deux derniers jets. On détermine alors les probabilités de transition entre les cinq états, et on retrouve un problème semblable à celui de la souris.

**Exemple 1.1.3** (Modèle d'Ehrenfest). C'est un système motivé par la physique, qui a été introduit pour modéliser de manière simple la répartition d'un gaz entre deux récipients.  $N$  boules, numérotées de 1 à  $N$ , sont réparties sur deux urnes. De manière répétée, on tire au hasard, de façon équiprobable, un numéro entre 1 et  $N$ , et on change d'urne la boule correspondante.

On voudrait savoir comment ce système se comporte asymptotiquement en temps :

1. Est-ce que la loi du nombre de boules dans chaque urne approche une loi limite?
2. Quelle est cette loi?
3. Avec quelle fréquence toutes les boules se trouvent-elles toutes dans la même urne?

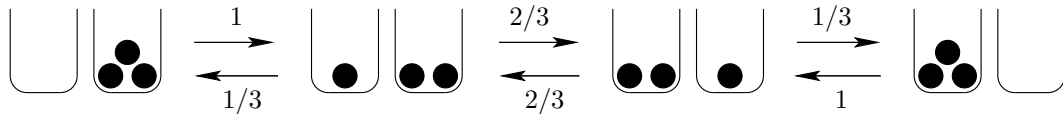


FIGURE 1.3. Le modèle d'urnes d'Ehrenfest, dans le cas de 3 boules.

On peut à nouveau décrire le système par une chaîne de Markov, cette fois sur l'espace des états  $\mathcal{X} = \{0, 1, \dots, N\}$ , où le numéro de l'état correspond au nombre de boules dans l'urne de gauche, par exemple.

**Exemple 1.1.4** (Texte aléatoires). Voici trois “textes” générés de manière aléatoire :

- A. YxUV,luUqHCLvE?,MRiKaoiWjyhg nEYKrMFD!rUFUy,qvW;e:FfIN.udbBdo!,  
ZpGwTEOfCa;;RrSMvPjA'Xtn.vP?JNZA;xWP, Cm?;i'MzLqVsAnlqHyk,ghDT  
:PwSwrnJojRhVjSe?dFkoVRN!MTfiFeemBXITdj m.h d'ea;Jkix,XvHIBPFFT  
s l'SLcSX;'X!S, ODjX.eMoLnQttneLnNE!qGRgCJ:BuYAAuJXoOCCsQkLcyPO  
MulKLrTsm;PNpFfp'PfgvJNur t l aXtIA?;TPhPxU.;ZmVGr,, 'DljzZDBY  
DrkPRiKDYRknDhivt;, LYXDuxNKpjegMvrtfz:JpNTDj'LFmHzXxotRM u.iya  
UUrgZRcA QmCZffwsNWbddBUPAhJIFJvs.CkKFLJoXef;kCnXrv'uWNcpULYsnl  
Kg OURmysAnxFjHawwsSpM H;PWPsmFYLMFyvRWOjbdPILQlaaspNZkuO'Ns.l  
jEXO,lxQ'GS;n;H:DH:VWJN :t'JMTUvPKCkVZ'NyKJMGilbQFXEgDEcWxMBiyo  
ybRIWIAC deMJnnL;SBAZ?:.UuGnC:B.!!BUT,pT?tyHHLICvN, mKZgwlMJOJd  
HHobua;KU.;kADVM?jr'v.SCq:hZLR;lqkmLkhn:ajhBM,gKexDAro,HlczWTv  
cFmNPt.MudUWPO, sTrWIJdgjoiJd.:d;CpJkJCW;FIRnpMGa;umFysOMAqQtmT  
pPaYZKtOFYppeE.KFX?SuvcbaDrQ XECeID;cfoQKf?'jCTUaISS;fv:gqoWfSq  
k:Tf!YuPBANtKhewiNg'ImOFs:UhcExmBjsAaMhBf UVP, 'dcFk;gxJMQGyXI;  
nVwwfWxS:YXQMELEIObTJiiLUYSIOsg.gCqlrN:nEU:irHM'nOLXWUbjLTU re'  
kk vAwMgt'KgWSxwxqJe,z'OBCrnolshSCDIZirla,rWNPkc?UgZm GOBX.QyIY  
jOtuF
- B. nsunragetnetelpnlac. pieln tJmends d e.imnqu caa aneezsconns re.tc oml d e c, paeisfuual  
irt ssna l df.ieulat a ese t hre edn ro m eeel slsplotasstp etuoMeiiseeaenemzeaeuqpeer  
enuoco sfehnir p ts 'mpisu qrd iraLp nFetesa,opQeey rieeaduset MuuisecG il e m ru  
daeiafasousfnircot i eedracev ever.nsn iaeulu!,mtel lpa rdbjdide tolr'murunlr bteaaua  
ieasilureseuavrmoce ntvqm qnurnaunsa.mraayVarinanr eumsu cnponf ciuo .pssre elreeY  
snrrq aani psu oqoddaiaaomrsslloe'avia,loei va eroltrsurdeduoe ffusir 'th'nilt has,slluooe  
tee ?eoxaea slsii i u edtvsear e,Mesatnd o o rvdocaeagiua apugiqn rclt smtee.te, gceade  
etsn e v in eag ent so ra te, oi seGndd i eet!dii e ese nanu d sp ul afeen aqelonens  
ssisaaoe cs eectadegotuudlru i 'c, uuuuts 'tt , dir atermdmuciqedn esovsioieierxdroie  
mqso,es rrvteen,r dtei xcalrionuaae e vtimplsz miuqa u aboir br gmcdexptedn pEua't vm  
vnic eeren ereaa,eegeta u rss nlmxomas ea nsbnt s,eEpeteae teiasbo cd ee tu em ue quee  
en, sd eeneepeot
- C. cesalu'act, bouleuivoie melarous die ndant leuvoiblue poit poids deuntaciroverchu llie  
e lle s r lerchar, laisueuayaissabes vet s cuetr i as, rdetite se d'iretie, de.. nendoules,  
le pablur e d ! copomouns ppait limmix a r aux urars laie Le r lercret ce c. n'are four  
nsirepapole pa vr s, nte le efit. itesit, le faun e ju estatusuet usoin prcilaisanonnout ssss  
l tosesace cole sientt, dent pontrtires. e, l mentoufssss chat Laneus c Chontrouc Ce  
e. Et deses j'ecci uleus mmon s mauit paga lanse l cont ciquner e c Cha s l'a Jes des

s'erattrlunt es de sacouen erends. ve e quns som'a aisajourait e ux lala pour ! a levionible  
 plaint n ss, danetrc ponce con du lez, l danoit, dirvecs'u ce ga vesai : chleme eesanl Pa  
 chiontotes anent fomberie vaud'untitez e esonsan t a ! bondesal'is llaies, vapa e ! Lers  
 jestsiee celesu unallas, t. ces. ta ce aielironi mmmileue cecoupe et dennt vanen A la  
 ajole quiet, scemmu tomtomotit me aisontouimmet Le s Prage ges peavoneuse ! blec  
 douffomurrd ntis.. rur, ns ablain i pouilait lertoipr ape. leus icoitth me e e, poiroia s. !  
 atuepout somise e la as

Il est clair qu'aucun de ces textes n'a de signification. Toutefois, le texte B. semble moins arbitraire que le texte A., et C. paraît moins éloigné d'un texte français que B. Il suffit pour cela d'essayer de lire les textes à haute voix.

Voici comment ces textes ont été générés. Dans les trois cas, on utilise le même alphabet de 60 lettres (les 26 minuscules et majuscules, quelques signes de ponctuation et l'espace).

1. Pour le premier texte, on a simplement tiré au hasard, de manière indépendante et avec la loi uniforme, des lettres de l'alphabet.
2. Pour le second texte, on a tiré les lettres de manière indépendante, mais pas avec la loi uniforme. Les probabilités des différentes lettres correspondent aux fréquences de ces lettres dans un texte de référence français (en l'occurrence, un extrait du *Colonel Chabert* de Balzac). Les fréquences des différentes lettres du texte aléatoire sont donc plus naturelles, par exemple la lettre e apparaît plus fréquemment (dans 13% des cas) que la lettre z (0.2%).
3. Pour le dernier texte, enfin, les lettres n'ont pas été tirées de manière indépendante, mais dépendant de la lettre précédente. Dans le même texte de référence que précédemment, on a déterminé avec quelle fréquence la lettre a est suivie de a (jamais), b (dans 3% des cas), et ainsi de suite, et de même pour toutes les autres lettres. Ces fréquences ont ensuite été choisies comme probabilités de transition lors de la génération du texte.

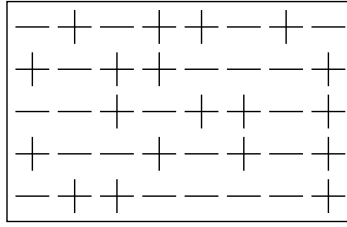
Ce procédé peut facilement être amélioré, par exemple en faisant dépendre chaque nouvelle lettre de plusieurs lettres précédentes. Mais même avec une seule lettre précédente, il est remarquable que les textes engendrés permettent assez facilement de reconnaître la langue du texte de référence, comme en témoignent ces deux exemples:

D. deser Eld s at heve tee opears s cof shan; os wikey coure tstheevons irads; Uneer l tomul  
 moove t nendoot Heilotetatoreagis his ud ang l ars thine br, we tinond end cksile:  
 hersest tear, Sove Whey tht in t ce tloour ld t as my aruswend Ne t nere es alte s  
 ubrk, t r s; penchike sowo Spotouchistey psushen, ron icoowe l Whese's oft Aneds t  
 aneiksanging t ungl o whommade bome, ghe; s, ne. torththilinen's, peny. d lloine's anets  
 but whsto a lt hoo tspinds l nafr Aneve powit tof f l afatichif m as tres, ime h but a  
 wrove Les des wined orr; t he ff teas be hende pith hty ll ven bube. g Bube d hitorend  
 tr, Mand nd nklichis okers r whindandy, Sovede brk f Wheye o edsucoure, thatovigh ld  
 Annaix; an eer, andst Sowery looublyereis isthalle Base whon ey h herotan wict of les,  
 h tou dends m'dys h Wh on'swerossictendoro whaloclocotolfrovatel aled ough rtrsspok,  
 ear'sustithimiovelime From alshis ffad, Spake's wen ee: hoves aloorth erthis n t Spagovekl  
 stat hetubr tes, Thuthiss oud s hind t s potrearall's ts dofe <sup>1</sup>

E. dendewoch wich iere Daf' lacht zuerckrech, st, Gebr d, Bes. jenditerullacht, keie Un! etot'  
 in To sendenus scht, ubteinraben Qun Jue die m arun dilesch d e Denuherelererufein ien.

<sup>1</sup>Texte de référence: Quelques sonnets de Shakespeare.



FIGURE 1.4. Une configuration du modèle d’Ising en dimension  $d = 2$ .

seurdan s ire Zein. es min? dest, in. maur as s san Gedein it Ziend en descruschn kt vontimelan. in, No Wimmmschrstich vom delst, esichm ispr jencht sch Nende Buchich-tannnlin Sphrr s Klldiche dichwieichst. ser Bollesilenztoprs uferm e mierchlls aner, d Spph! wuck e ing Erenich n sach Men. Sin s Gllaser zege schteun d, Gehrstren ite Spe Kun h Umischr Ihngertt, ms ie. es, bs del ieichtt f; Ginns lhe d aftalt veine im t’seir; He Zicknerssolanust, filll. mmichnennd wigeirdie h Zierewithennd, wast naun Wag, autonbe Wehn eietichank We dessonindeuchein ltichlich bsch n, Ichritienstam Lich uchodigem Din eieiers die it f tlo nenseicichenko Mechtarzaunuchrtzubuch aldert; l von. fteschan nn ih geier Schich Geitelten Deichst Fager Zule fer in vischtrn; Schtih Un Hit ach, dit? at ichuch Eihra! Hich g ure vollle Est unvochtelirn An <sup>2</sup>

Cela donne, inversement, une méthode assez économique permettant à une machine de déterminer automatiquement dans quelle langue un texte est écrit.

**Exemple 1.1.5** (Le modèle d’Ising). Comme le modèle d’Ehrenfest, ce modèle vient de la physique, plus particulièrement de la physique statistique. Il est sensé décrire un ferroaimant, qui a la propriété de s’aimanter spontanément à température suffisamment basse. On considère une partie (connexe)  $\Lambda$  du réseau  $\mathbb{Z}^d$  ( $d$  étant la dimension du système, par exemple 3), contenant  $N$  sites. A chaque site, on attache un “spin” (une sorte d’aimant élémentaire), prenant valeurs  $+1$  ou  $-1$ . Un choix d’orientations de tous les spins s’appelle une configuration, c’est donc un élément de l’espace de configuration  $\mathcal{X} = \{-1, 1\}^\Lambda$ . A une configuration  $\sigma$ , on associe l’énergie

$$H(\sigma) = - \sum_{\langle i, j \rangle \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i . \quad (1.1.2)$$

Ici, la notation  $\langle i, j \rangle$  indique que l’on ne somme que sur les paires de spins plus proches voisins du réseau, c’est-à-dire à une distance 1. Le premier terme est donc d’autant plus grand qu’il y a de spins voisins différents. Le second terme décrit l’interaction avec un champ magnétique extérieur  $h$ . Il est d’autant plus grand qu’il y a de spins opposés au champ magnétique.

Un principe de base de la physique statistique est que si un système est en équilibre thermique à température  $T$ , alors il se trouve dans la configuration  $\sigma$  avec probabilité proportionnelle à  $e^{-\beta H(\sigma)}$  (mesure de Gibbs), où  $\beta = 1/T$ . A température faible, le système privilégie les configurations de basse énergie, alors que lorsque la température tend vers l’infini, toutes les configurations deviennent équiprobables.

L’aimantation totale de l’échantillon est donnée par la variable aléatoire

$$m(\sigma) = \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i , \quad (1.1.3)$$

<sup>2</sup>Texte de référence: Un extrait du *Faust* de Goethe.

et son espérance vaut

$$\mathbb{E}(m) = \frac{\sum_{\sigma \in \mathcal{X}} m(\sigma) e^{-\beta H(\sigma)}}{\sum_{\sigma \in \mathcal{X}} e^{-\beta H(\sigma)}}. \quad (1.1.4)$$

L'intérêt du modèle d'Ising est qu'on peut montrer l'existence d'une transition de phase, en dimension  $d$  supérieure ou égale à 2. Dans ce cas il existe une température critique en-dessous de laquelle l'aimantation varie de manière discontinue en fonction de  $h$  dans la limite  $N \rightarrow \infty$ . Pour des températures supérieures à la valeur critique, l'aimantation est continue en  $h$ .

Si l'on veut déterminer numériquement l'aimantation, il suffit en principe de calculer la somme (1.1.4). Toutefois, cette somme comprend  $2^N$  termes, ce qui croît très rapidement avec la taille du système. Par exemple pour un cube de  $10 \times 10 \times 10$  spins, le nombre de termes vaut  $2^{1000}$ , ce qui est de l'ordre de  $10^{300}$ . Un ordinateur calculant  $10^{10}$  termes par seconde mettrait beaucoup plus que l'âge de l'univers à calculer la somme.

Une alternative est d'utiliser un algorithme dit de Metropolis. Au lieu de parcourir toutes les configurations possibles de  $\mathcal{X}$ , on n'en parcourt qu'un nombre limité, de manière bien choisie, à l'aide d'une chaîne de Markov. Pour cela, on part dans une configuration initiale  $\sigma$ , puis on transforme cette configuration en retournant un spin choisi au hasard. Plus précisément, on n'opère cette transition qu'avec une certaine probabilité, qui dépend de la différence d'énergie entre les configurations de départ et d'arrivée. L'idée est que si les probabilités de transition sont bien choisies, alors la chaîne de Markov va échantillonner l'espace de configuration de telle manière qu'il suffira de lui faire parcourir une petite fraction de toutes les configurations possibles pour obtenir une bonne approximation de l'aimantation  $\mathbb{E}(m)$ . Les questions sont alors

1. De quelle manière choisir ces probabilités de transition?
2. Combien de pas faut-il effectuer pour approcher  $\mathbb{E}(m)$  avec une précision donnée?

**Exemple 1.1.6** (Le problème du voyageur de commerce). C'est un exemple classique de problème d'optimisation. Un voyageur de commerce doit visiter  $N$  villes, en revenant à son point de départ après être passé exactement une fois par chaque ville. Comment choisir l'ordre des villes de manière à minimiser la longueur du circuit?

La difficulté est que le nombre de circuits possibles croît extrêmement vite avec le nombre  $N$  de villes, beaucoup plus vite qu'exponentiellement. En effet, il y a  $N!$  permutations possibles de l'ordre des villes. Si l'on ne tient compte ni de la ville de départ, ni du sens de parcours, il reste  $(N-1)!/2$  circuits possibles. Calculer les longueurs de tous ces circuits devient irréalisable dès que  $N$  dépasse 20 environ.

On peut tenter de trouver une solution approchée par approximations successives. Partant d'un circuit initial, on le modifie légèrement, par exemple en échangeant deux villes. Si cette modification raccourcit la longueur du circuit, on continue avec le circuit modifié. Si elle le rallonge, par contre, on rejette la modification et on en essaie une autre.

Le problème avec cette méthode est que le système peut se retrouver piégé dans un minimum local, qui est très différent du minimum global recherché de la longueur. On peut en effet se retrouver "bloqué" dans un circuit plus court que tous ses voisins (obtenus en permutant deux villes), mais une permutation de plus de deux villes pourrait raccourcir le circuit.

Une variante plus efficace de cette méthode est celle du *recuit simulé*. Dans ce cas, on ne rejette pas toutes les modifications qui allongent le circuit, mais on les accepte avec une certaine probabilité, qui décroît avec l'allongement. De cette manière, le processus peut s'échapper du minimum local et a une chance de trouver un minimum plus profond. La

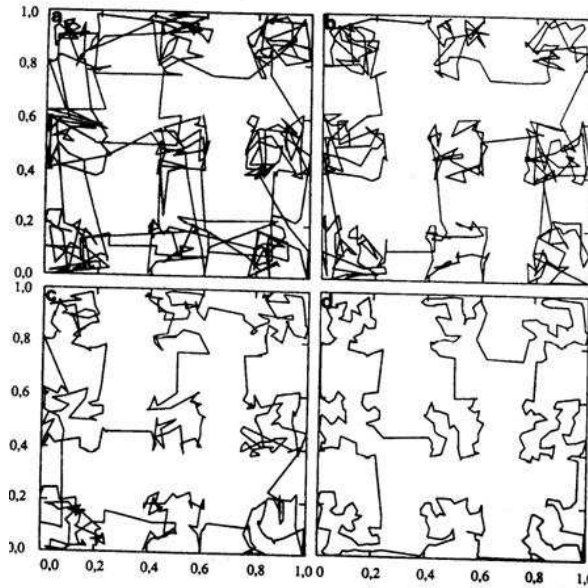


FIGURE 1.5. Approximations successives de la solution du problème du voyageur de commerce par la méthode du recuit simulé (tiré de l'article original : S. Kirkpatrick, C. Gelatt et M. Vecchi, *Optimization by Simulated Annealing*, Science, 220 (1983), pp. 671–680, copyright 1983 by A.A.A.S.).

terminologie vient de la métallurgie : Dans un alliage, les atomes des différents métaux sont disposés de manière plus ou moins régulière, mais avec des imperfections. Moins il y a d'imperfections, plus l'alliage est solide. En réchauffant et refroidissant plusieurs fois l'alliage, on donne aux atomes la possibilité de se réarranger de manière plus régulière, c'est-à-dire en diminuant l'énergie potentielle.

A nouveau, on se pose les questions suivantes :

1. Comment choisir les probabilités d'acceptation des modifications?
2. Comment la probabilité de s'approcher à une certaine distance du minimum cherché dépend-elle de la longueur de la simulation?

## 1.2 Définitions

**Définition 1.2.1.** Soit  $N$  un entier strictement positif. Une matrice  $P$  de taille  $N \times N$  est une matrice stochastique si ses éléments de matrice  $p_{ij} = (P)_{ij}$  satisfont

$$0 \leq p_{ij} \leq 1 \quad \forall i, j \quad (1.2.1)$$

et

$$\sum_{j=1}^N p_{ij} = 1 \quad \forall i. \quad (1.2.2)$$

On vérifie facilement que si  $P$  est une matrice stochastique, alors toutes ses puissances  $P^2, P^3, \dots$  sont encore des matrices stochastiques.

Les éléments  $p_{ij}$  vont définir les probabilités de transition de la chaîne de Markov de l'état  $i$  vers l'état  $j$ .

**Définition 1.2.2.** Soit  $\mathcal{X} = \{1, \dots, N\}$  un ensemble fini et  $P$  une matrice stochastique de taille  $N$ . Une chaîne de Markov sur  $\mathcal{X}$  de matrice de transition  $P$  est une suite  $(X_0, X_1, X_2, \dots)$  de variables aléatoires à valeurs dans  $\mathcal{X}$ , satisfaisant la propriété de Markov

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_n = j \mid X_{n-1} = i_{n-1}, X_{n-2} = i_{n-2}, \dots, X_0 = i_0\} &= \mathbb{P}\{X_n = j \mid X_{n-1} = i_{n-1}\} \\ &= p_{i_{n-1}j} \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

pour tout temps  $n \geq 1$  et tout choix  $(i_0, i_1, i_{n-1}, j)$  d'éléments de  $\mathcal{X}$ . La loi de  $X_0$ , que nous noterons  $\nu$ , est appelée la distribution initiale de la chaîne.

Pour s'assurer que cette définition fait bien sens, il faut vérifier que les  $X_n$  construits comme ci-dessus sont bien des variables aléatoires, c'est-à-dire que la somme sur tous les  $j \in \mathcal{X}$  des probabilités  $\mathbb{P}\{X_n = j\}$  vaut 1. Ceci est immédiat par récurrence sur  $n$ . Si les  $n$  variables  $X_0, \dots, X_{n-1}$  sont des variables aléatoires, alors on a :

$$\begin{aligned} \sum_{j \in \mathcal{X}} \mathbb{P}\{X_n = j\} &= \sum_{j \in \mathcal{X}} \mathbb{P}\{X_n = j, X_{n-1} \in \mathcal{X}, \dots, X_0 \in \mathcal{X}\} \\ &= \sum_{j \in \mathcal{X}} \sum_{i_{n-1} \in \mathcal{X}} \cdots \sum_{i_0 \in \mathcal{X}} \mathbb{P}\{X_n = j, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0\} \\ &= \sum_{i_{n-1} \in \mathcal{X}} \underbrace{\sum_{j \in \mathcal{X}} p_{i_{n-1}j}}_{=1} \underbrace{\sum_{i_{n-2} \in \mathcal{X}} \cdots \sum_{i_0 \in \mathcal{X}} \mathbb{P}\{X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0\}}_{=\mathbb{P}\{X_{n-1} = i_{n-1}, X_{n-2} \in \mathcal{X}, \dots, X_0 \in \mathcal{X}\} = \mathbb{P}\{X_{n-1} = i_{n-1}\}} \\ &= \mathbb{P}\{X_{n-1} \in \mathcal{X}\} = 1. \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

**Notation 1.2.3.** Si la loi initiale  $\nu$  est fixée, nous noterons souvent  $\mathbb{P}_\nu$  la loi de la chaîne de Markov associée. Si  $\nu$  est concentrée en un seul site  $i$  ( $\nu = \delta_i$ ), on notera la loi de la chaîne  $\mathbb{P}_i$  au lieu de  $\mathbb{P}_{\delta_i}$ . Enfin nous écrirons parfois  $X_{[n,m]}$  au lieu de  $(X_n, X_{n+1}, \dots, X_m)$ , et  $\mathbb{P}\{X_{[n,m]} = i_{[n,m]}\}$  au lieu de  $\mathbb{P}\{X_n = i_n, X_{n+1} = i_{n+1}, \dots, X_m = i_m\}$ .  $X_{[n,m]}$  est appelé la trajectoire de la chaîne entre les temps  $n$  et  $m$ .

**Exemple 1.2.4.** Dans le cas de l'exemple 1.1.1 de la souris dans le labyrinthe, la matrice de transition est donnée par

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 & 1/3 & 0 & 1/3 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.2.5)$$

Dans le cas de l'exemple 1.1.2 du jeu de Pile ou Face, la matrice de transition vaut

$$P = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.2.6)$$

Voici tout d'abord une caractérisation d'une chaîne de Markov en termes de ses trajectoires.

**Théorème 1.2.5.** *Soit  $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  une suite de variables aléatoires à valeurs dans  $\mathcal{X}$ ,  $\nu$  une distribution de probabilité sur  $\mathcal{X}$ , et  $P$  une matrice stochastique. Alors  $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  est une chaîne de Markov de matrice de transition  $P$  et de distribution initiale  $\nu$  si et seulement si pour tout  $n \geq 0$ , et pour tout choix de  $i_0, i_1, \dots, i_n$  d'éléments de  $\mathcal{X}$ , on a*

$$\mathbb{P}\{X_{[0,n]} = i_{[0,n]}\} = \nu_{i_0} p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{n-1} i_n}. \quad (1.2.7)$$

DÉMONSTRATION.

$\Rightarrow$ : Par récurrence sur  $n$ . C'est clair pour  $n = 0$ . Si c'est vrai pour  $n$ , alors

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_{[0,n+1]} = i_{[0,n+1]}\} &= \mathbb{P}\{X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_{[0,n]} = i_{[0,n]}\} \mathbb{P}\{X_{[0,n]} = i_{[0,n]}\} \\ &= p_{i_n i_{n+1}} \nu_{i_0} p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{n-1} i_n}. \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

$\Leftarrow$ : Par définition de la probabilité conditionnelle, on a

$$\mathbb{P}\{X_n = i_n \mid X_{[0,n-1]} = i_{[0,n-1]}\} = \frac{\mathbb{P}\{X_{[0,n]} = i_{[0,n]}\}}{\mathbb{P}\{X_{[0,n-1]} = i_{[0,n-1]}\}} = p_{i_{n-1} i_n}, \quad (1.2.9)$$

la dernière égalité suivant de (1.2.7).  $\square$

L'équation (1.2.7) donne la probabilité de la trajectoire  $X_{[0,n]}$ . Le résultat suivant montre que la propriété de Markov reste vraie pour des trajectoires : l'évolution sur un intervalle de temps  $[n+1, m]$  ne dépend que de l'état au temps  $n$ , et pas de la trajectoire passée de la chaîne.

**Proposition 1.2.6.** *Si  $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  est une chaîne de Markov sur  $\mathcal{X}$ , alors pour tous temps  $n < m \in \mathbb{N}$ , tous  $i_n \in \mathcal{X}$ ,  $A \subset \mathcal{X}^n$  et  $B \subset \mathcal{X}^{m-n}$  tels que  $\mathbb{P}\{X_n = i_n, X_{[0,n-1]} \in A\} > 0$  on a*

$$\mathbb{P}\{X_{[n+1,m]} \in B \mid X_n = i_n, X_{[0,n-1]} \in A\} = \mathbb{P}\{X_{[n+1,m]} \in B \mid X_n = i_n\}. \quad (1.2.10)$$

DÉMONSTRATION. On a

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_{[n+1,m]} \in B \mid X_n = i_n, X_{[0,n-1]} \in A\} &= \frac{\mathbb{P}\{X_{[n+1,m]} \in B, X_n = i_n, X_{[0,n-1]} \in A\}}{\mathbb{P}\{X_n = i_n, X_{[0,n-1]} \in A\}} \\ &= \frac{\sum_{i_{[n+1,m]} \in B} \sum_{i_{[0,n-1]} \in A} \nu_{i_0} p_{i_0 i_1} \cdots p_{i_{m-1} i_m}}{\sum_{i_{[0,n-1]} \in A} \nu_{i_0} p_{i_0 i_1} \cdots p_{i_{n-1} i_n}} \\ &= \sum_{i_{[n+1,m]} \in B} p_{i_n i_{n+1}} \cdots p_{i_{m-1} i_m}, \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

qui ne dépend pas de l'ensemble  $A$ . En particulier, choisissant  $A = \mathcal{X}^n$  dans l'égalité ci-dessus, on trouve

$$\mathbb{P}\{X_{[n+1,m]} \in B \mid X_n = i_n\} = \sum_{i_{[n+1,m]} \in B} p_{i_n i_{n+1}} \cdots p_{i_{m-1} i_m}, \quad (1.2.12)$$

d'où le résultat, en comparant (1.2.11) et (1.2.12).  $\square$

Un cas particulier important est celui où  $B = \mathcal{X}^{m-n-1} \times \{j\}$ , c'est-à-dire qu'on s'intéresse à toutes les trajectoires se terminant en  $i_m = j$  au temps  $m$ . Dans ce cas, la relation (1.2.12) donne

$$\mathbb{P}\{X_m = j \mid X_n = i\} = \sum_{i_{n+1} \in \mathcal{X}} \cdots \sum_{i_{m-1} \in \mathcal{X}} p_{ii_{n+1}} p_{i_{n+1}i_{n+2}} \cdots p_{i_{m-1}j}. \quad (1.2.13)$$

Par définition du produit matriciel, la somme ci-dessus n'est autre que l'élément de matrice  $(i, j)$  de la matrice  $P^{m-n}$ , que nous noterons  $p_{ij}^{(m-n)}$ . On remarquera que le membre de droite de (1.2.13) ne dépend que de la différence  $m - n$ . On a donc pour tout  $0 < n < m$

$$\mathbb{P}\{X_m = j \mid X_n = i\} = p_{ij}^{(m-n)} = \mathbb{P}\{X_{m-n} = j \mid X_0 = i\} \quad (1.2.14)$$

(propriété des incréments stationnaires). Enfin, pour tout  $n > 0$ ,

$$\mathbb{P}_\nu\{X_m = j\} = \sum_{i \in \mathcal{X}} \mathbb{P}_\nu\{X_m = j, X_0 = i\} = \sum_{i \in \mathcal{X}} \nu_i p_{ij}^{(m)}. \quad (1.2.15)$$

La matrice  $P^m$  donne donc les probabilités de transition en  $m$  pas.

**Exemple 1.2.7.** Pour la matrice de transition (1.2.5) de la souris dans le labyrinthe, on trouve

$$P^2 = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 1/6 & 1/6 & 1/2 & 1/6 \\ 0 & 1/6 & 1/6 & 1/2 & 1/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.2.16)$$

La  $i^{\text{ème}}$  ligne de la matrice correspond aux probabilités d'être dans les différents états si la souris est partie de la case  $i$ . Ainsi, si elle est partie de la case 1, on voit qu'elle se retrouve au temps 2 soit en 1, soit dans sa tanière, soit auprès de la nourriture, à chaque fois avec même probabilité  $1/3$ . Si elle est partie de l'une des cases 2 ou 3, elle a une chance sur 2 d'avoir trouvé la nourriture au temps 2, et une chance sur 6 de se retrouver dans l'une des cases 2, 3 ou 5.

### 1.3 Chaînes de Markov absorbantes

**Définition 1.3.1.** On dit qu'un état  $j \in \mathcal{X}$  est atteignable depuis un autre état  $i \in \mathcal{X}$ , et on note  $i \rightsquigarrow j$ , s'il existe un temps  $n \in \mathbb{N}$  tel que  $p_{ij}^{(n)} > 0$ , c'est-à-dire que partant de  $i$ , on atteint  $j$  avec probabilité positive en un nombre fini de pas. On notera  $i \sim j$  si on a à la fois  $i \rightsquigarrow j$  et  $j \rightsquigarrow i$ .

On vérifie facilement que la relation  $\rightsquigarrow$  est réflexive et transitive, et que  $\sim$  est une relation d'équivalence.

**Définition 1.3.2.** Un état  $i \in \mathcal{X}$  est dit absorbant si  $p_{ii} = 1$  (et donc nécessairement  $p_{ij} = 0$  pour tout  $j \neq i$ ). Une chaîne de Markov est dite absorbante s'il existe, pour tout état de  $\mathcal{X}$ , un état absorbant atteignable depuis cet état.

Dans le reste de cette section, nous allons considérer des chaînes absorbantes avec  $r \geq 1$  états absorbants. Les exemples 1.1.1 de la souris et 1.1.2 du jeu de Pile ou Face sont des exemples de chaînes absorbantes avec deux états absorbants.

Nous conviendrons de numérotter les états de manière à placer d'abord les  $q = N - r$  états non absorbants, et ensuite les  $r$  états absorbants. La matrice de transition prend alors la *forme canonique*

$$P = \begin{pmatrix} Q & R \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad (1.3.1)$$

où  $Q$  est une matrice de taille  $q \times q$ ,  $R$  est une matrice de taille  $q \times r$ ,  $0$  désigne la matrice nulle de taille  $r \times q$ , et  $I$  la matrice identité de taille  $r$ . Il est facile de montrer par récurrence que

$$P^n = \begin{pmatrix} Q^n & [I + Q + \cdots + Q^{n-1}]R \\ 0 & I \end{pmatrix}. \quad (1.3.2)$$

**Proposition 1.3.3.** *Soit  $P$  la matrice de transition d'une chaîne de Markov absorbante, écrite sous forme canonique. Alors*

1. On a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q^n = 0. \quad (1.3.3)$$

2. La matrice  $I - Q$  est inversible, et son inverse vaut

$$[I - Q]^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} Q^k. \quad (1.3.4)$$

DÉMONSTRATION.

1. Soit  $i \leq q$  un état non absorbant. L'élément de matrice  $(Q^n)_{ij}$  de  $Q^n$  est la probabilité de se trouver dans l'état non absorbant  $j$ , après  $n$  pas, partant de  $i$ . Par conséquent,  $(Q^n)_{ij}$  est inférieur ou égal à la probabilité de ne pas avoir atteint d'état absorbant en  $n$  pas. Soit

$$m_i = \min\{n \geq 1 : \exists k > q, (P^n)_{ik} > 0\} \quad (1.3.5)$$

le nombre minimal de pas nécessaire à atteindre un état absorbant  $k$  depuis  $i$ . Soit

$$p_i = \mathbb{P}_i\{X_{m_i} \leq q\} < 1 \quad (1.3.6)$$

la probabilité de ne pas atteindre d'état absorbant en  $m_i$  pas, partant de  $i$ . Soit enfin

$$M = \max_{i=1, \dots, q} m_i, \quad p = \max_{i=1, \dots, q} p_i. \quad (1.3.7)$$

Alors la probabilité de ne pas atteindre d'état absorbant en  $M$  pas, partant de n'importe quel état non absorbant, est bornée par  $p$ . Il suit que la probabilité de ne pas atteindre d'état absorbant en  $Mn$  pas est bornée par  $p^n$ . Cette probabilité tend vers 0 lorsque  $n$  tend vers l'infini. La probabilité de ne pas être absorbé après un nombre arbitraire  $m$  de pas étant une fonction décroissante de  $m$ , elle tend nécessairement vers 0. Par conséquent,  $(Q^n)_{ij}$  tend vers zéro lorsque  $n$  tend vers l'infini, pour tout  $j \in \{1, \dots, q\}$ .

2. Supposons qu'il existe un vecteur  $x$  tel que  $Qx = x$ . Dans ce cas on a

$$x = Qx = Q^2x = \cdots = Q^n x = \cdots = \lim_{n \rightarrow \infty} Q^n x = 0, \quad (1.3.8)$$

ce qui montre que  $Q$  n'admet pas la valeur propre 1. Par conséquent,  $I - Q$  est inversible. Enfin, comme

$$[I - Q] \sum_{k=0}^n Q^k = I - Q^{n+1} \rightarrow I \quad \text{lorsque } n \rightarrow \infty, \quad (1.3.9)$$

on obtient la relation (1.3.4) en multipliant à gauche par  $[I - Q]^{-1}$ .  $\square$

Nous noterons  $F$  la matrice  $[I - Q]^{-1}$ , et nous l'appellerons la *matrice fondamentale* de la chaîne. La relation (1.3.2) montre que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^n = \begin{pmatrix} 0 & FR \\ 0 & I \end{pmatrix}. \quad (1.3.10)$$

Le fait que  $Q^n$  tend vers zéro traduit donc le fait que la probabilité d'absorption tend vers 1 lorsque le temps tend vers l'infini. La matrice  $B = FR$  devrait représenter les probabilités de transition, dans la limite des temps infinis, entre état non absorbants et absorbants. Ceci est confirmé par le résultat suivant.

**Théorème 1.3.4.** *Soit  $F$  la matrice fondamentale d'une chaîne de Markov absorbante.*

1. *L'élément de matrice  $f_{ij}$  de  $F$  est l'espérance du nombre de passages en  $j$  partant de  $i$  :*

$$f_{ij} = \mathbb{E}_i \left( \sum_{n \geq 0} 1_{\{X_n=j\}} \right). \quad (1.3.11)$$

2. *Soit  $\tau = \inf\{n \geq 1 : X_n > q\}$  la variable aléatoire donnant le temps jusqu'à absorption. Alors*

$$\mathbb{E}_i(\tau) = \sum_{j=1}^q f_{ij}. \quad (1.3.12)$$

3. *Les éléments de matrice  $b_{ik}$  de  $B = FR$  donnent les propriétés d'être absorbés dans les différents états :*

$$b_{ik} = \mathbb{P}_i\{X_\tau = k\}. \quad (1.3.13)$$

DÉMONSTRATION.

1. Soit la variable de Bernoulli  $Y_n = 1_{\{X_n=j\}}$ . On a  $\mathbb{E}_i(Y_n) = \mathbb{P}_i\{Y_n = 1\} = (Q^n)_{ij}$ , et donc

$$\mathbb{E}_i \left( \sum_{n \geq 0} Y_n \right) = \sum_{n \geq 0} (Q^n)_{ij} = (F)_{ij} = f_{ij}. \quad (1.3.14)$$

2. Sommant la relation ci-dessus sur tous les états non absorbants, on a

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^q f_{ij} &= \sum_{j=1}^q \mathbb{E}_i \left( \sum_{n \geq 0} Y_n \right) = \mathbb{E}_i \left( \sum_{n \geq 0} 1_{\{X_n \leq q\}} \right) \\ &= \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}_i\{\tau > n\} = \sum_{n \geq 0} n \mathbb{P}_i\{\tau = n\} = \mathbb{E}_i(\tau). \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

3. En décomposant sur les valeurs possibles  $n$  de  $\tau - 1$ , puis sur les valeurs possibles  $j$  de  $X_n$ ,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_i\{X_\tau = k\} &= \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}_i\{X_n \leq q, X_{n+1} = k\} \\ &= \sum_{n \geq 0} \sum_{j=1}^q \mathbb{P}_i\{X_n = j\} \mathbb{P}\{X_{n+1} = k | X_n = j\} \\ &= \sum_{n \geq 0} \sum_{j=1}^q (Q^n)_{ij} (R)_{jk} = \sum_{n \geq 0} (Q^n R)_{ik} = (FR)_{ik}. \end{aligned} \quad (1.3.16)$$

□



**Exemple 1.3.5.** Pour l'exemple 1.1.2 du jeu de Pile ou Face, les matrices  $Q$  et  $R$  sont données par

$$Q = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1/2 \\ 0 & 0 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.3.17)$$

On calcule alors la matrice fondamentale

$$F = [I - Q]^{-1} = \begin{pmatrix} 7/3 & 4/3 & 1/3 & 2/3 \\ 1/3 & 4/3 & 1/3 & 2/3 \\ 4/3 & 4/3 & 4/3 & 2/3 \\ 2/3 & 2/3 & 2/3 & 4/3 \end{pmatrix}, \quad (1.3.18)$$

et la matrice donnant les probabilités d'absorption

$$B = FR = \begin{pmatrix} 1/3 & 2/3 \\ 1/3 & 2/3 \\ 1/3 & 2/3 \\ 2/3 & 1/3 \end{pmatrix}. \quad (1.3.19)$$

Ainsi, partant de l'un des états PP, PF ou FP, Anatole gagne avec probabilité  $1/3$ , et Barnabé gagne avec probabilité  $2/3$ . Partant de l'état FF, c'est Barnabé qui gagne avec probabilité  $1/3$ , et Anatole qui gagne avec probabilité  $2/3$ . Comme personne ne gagne lors des deux premiers jets, et que les quatre états PP, PF, FP et FF sont atteints avec la même probabilité, il faut choisir la distribution initiale  $\nu = (1/4, 1/4, 1/4, 1/4, 0)$ . Par conséquent, Anatole gagne le jeu avec probabilité

$$\mathbb{P}_\nu\{X_\tau = \text{"A gagne"}\} = \sum_{i=1}^4 \nu_i b_{i1} = \frac{5}{12}. \quad (1.3.20)$$

Quelle est la durée moyenne du jeu? La relation (1.3.12) montre que la somme des éléments de la ligne  $i$  de  $F$  donne l'espérance du temps d'absorption partant de  $i$ , donc par exemple  $\mathbb{E}_1(\tau) = 14/3$ . En moyennant sur la distribution initiale, on trouve  $\mathbb{E}_\nu(\tau) = 23/6$ . La durée moyenne du jeu est donc de  $2 + 23/6 = 35/6$ , soit un peu moins de 6 jets de pièce.

## 1.4 Chaînes de Markov irréductibles

**Définition 1.4.1.** Une chaîne de Markov est dite irréductible ou ergodique si  $i \sim j \forall i, j \in \mathcal{X}$ . La chaîne est dite régulière s'il existe une puissance  $P^n$  de  $P$  dont tous les éléments sont strictement positifs.

Une chaîne de Markov régulière est nécessairement irréductible, car tout état est atteignable depuis tout autre en  $n$  pas au plus. La réciproque n'est pas vraie, car dans la définition de l'irréductibilité on n'a pas spécifié le nombre de pas.

**Exemple 1.4.2.** La chaîne décrivant le modèle d'Ehrenfest est irréductible. En effet, quel que soit le nombre de boules dans l'urne de gauche, on peut atteindre tout autre état en déplaçant au plus  $N$  boules d'une urne à l'autre. Cependant, la chaîne n'est pas régulière. En effet, comme à chaque pas de temps on déplace exactement une boule, le nombre de boules dans l'urne de gauche sera alternativement pair et impair. Par conséquent, chaque élément de matrice des puissance  $P^n$  sera nul pour un  $n$  sur deux.

**Définition 1.4.3.** Pour un sous-ensemble  $A \subset \mathcal{X}$ , on appelle temps de premier passage de la chaîne dans  $A$  la variable aléatoire

$$\tau_A = \inf\{n > 0 : X_n \in A\} . \quad (1.4.1)$$

Dans le cas où  $A = \{i\}$  consiste en un seul point, nous écrirons aussi  $\tau_i$  au lieu de  $\tau_{\{i\}}$ .

Une différence importante entre chaînes absorbantes et irréductibles est que ces dernières finissent toujours par revenir dans chacun de leurs états.

**Proposition 1.4.4.** Pour une chaîne de Markov irréductible sur un ensemble fini  $\mathcal{X}$ , le temps de premier passage en tout sous-ensemble  $A \subset \mathcal{X}$  est fini presque sûrement :

$$\mathbb{P}\{\tau_A < \infty\} := \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}\{\tau_A \leq n\} = 1 . \quad (1.4.2)$$

DÉMONSTRATION. Considérons une autre chaîne de Markov de matrice de transition  $\widehat{P}$ , obtenue à partir de la chaîne de départ en rendant absorbants les états de  $A$  :

$$\widehat{p}_{ij} = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{si } i \in A , \\ p_{ij} & \text{sinon .} \end{cases} \quad (1.4.3)$$

Les trajectoires de la chaîne initiale et de la chaîne modifiée coïncident jusqu'au temps  $\tau_A$ . Il suffit donc de montrer (1.4.2) pour la chaîne absorbante. Or dans ce cas, le résultat est une conséquence directe de la Proposition 1.3.3. En effet, la probabilité  $\mathbb{P}_i\{\tau_A > n\}$  de ne pas avoir été absorbé jusqu'au temps  $n$ , partant de  $i$ , est donnée par la somme des  $(Q^n)_{ij}$  sur les  $j \in A$ , qui tend vers 0.  $\square$

Il est important de remarquer que le résultat ci-dessus n'est plus forcément vrai lorsque  $\mathcal{X}$  n'est pas fini! Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre suivant.

Nous étudions maintenant de plus près les chaînes de Markov régulières. Leur propriété principale est le fait remarquable suivant.

**Théorème 1.4.5.** Soit  $P$  la matrice de transition d'une chaîne de Markov régulière. Alors il existe des nombres  $\pi_1, \dots, \pi_N > 0$ , dont la somme vaut 1, tels que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^n = \Pi := \begin{pmatrix} \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_N \\ \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \pi_1 & \pi_2 & \dots & \pi_N \end{pmatrix} . \quad (1.4.4)$$

De plus, le vecteur ligne  $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_N)$  satisfait

$$\pi P = \pi . \quad (1.4.5)$$

DÉMONSTRATION. Si la chaîne n'a qu'un état, le résultat est immédiat, donc nous pouvons admettre que  $N \geq 2$ . Nous pouvons supposer que tous les éléments de  $P^n$  sont positifs pour  $n = 1$ , sinon il suffit de considérer la chaîne dont la matrice de transition est  $P^n$  au lieu de  $P$ . Soit  $d > 0$  le plus petit élément de  $P$ . Alors  $d \leq 1/2$ , puisque  $Nd \leq 1$ . Soit  $y$  un vecteur colonne tel que

$$0 \leq m_0 \leq y_i \leq M_0 \quad \forall i \in \{1, \dots, N\} . \quad (1.4.6)$$

Soit  $z = Py$ . La plus grande valeur possible d'une composante  $z_j$  de  $z$  est obtenue si  $y^T = (m_0, M_0, \dots, M_0)$  et  $p_{k1} = d$ . Dans ce cas, la somme des  $N - 1$  derniers éléments de la ligne  $j$  de  $P$  vaut  $1 - d$ , et par conséquent  $z_j = dm_0 + (1 - d)M_0$ . On a donc nécessairement

$$z_j \leq dm_0 + (1 - d)M_0 =: M_1 \quad \forall j \in \{1, \dots, N\}. \quad (1.4.7)$$

Un raisonnement similaire montre que

$$z_j \geq dM_0 + (1 - d)m_0 =: m_1 \quad \forall j \in \{1, \dots, N\}. \quad (1.4.8)$$

Par conséquent, nous avons  $m_1 \leq z_j \leq M_1$ , avec

$$M_1 - m_1 = (1 - 2d)(M_0 - m_0). \quad (1.4.9)$$

De plus, on voit facilement que  $m_1 \geq m_0$  et  $M_1 \leq M_0$ . Après  $n$  itérations, les composantes de  $P^n y$  seront comprises entre des nombres  $m_n$  et  $M_n$ , satisfaisant

$$M_n - m_n = (1 - 2d)^n (M_0 - m_0) \quad (1.4.10)$$

et

$$m_0 \leq m_1 \leq \dots \leq m_n \leq M_n \leq \dots \leq M_1 \leq M_0. \quad (1.4.11)$$

Les suites  $\{m_n\}_{n \geq 1}$  et  $\{M_n\}_{n \geq 1}$  sont donc adjacentes, et convergent vers une même limite  $u$ . On a donc

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^n y = \begin{pmatrix} u \\ \vdots \\ u \end{pmatrix}, \quad (1.4.12)$$

où  $u$  dépend de  $y$ . Appliquons cette relation sur les vecteurs de base  $e_1, \dots, e_N$ . Il existe des nombres  $\pi_i$  tels que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^n e_i = \begin{pmatrix} \pi_i \\ \vdots \\ \pi_i \end{pmatrix} \quad (1.4.13)$$

pour chaque  $i$ . Or  $P^n e_i$  est la  $i$ -ème colonne de  $P^n$ , nous avons donc prouvé la relation (1.4.4). Par ailleurs, comme dans le cas  $y = e_i$  on a  $m_0 = 0$  et  $M_0 = 1$ , la relation (1.4.8) donne  $m_1 \geq d$ , donc  $\pi_i \geq d$ . Par conséquent, tous les  $\pi_i$  sont strictement positifs. La somme des  $\pi$  vaut 1 car toute puissance de  $P$  est une matrice stochastique.

Enfin, pour montrer (1.4.5), il suffit d'observer que  $\Pi P = \lim_{n \rightarrow \infty} P^{n+1} = \Pi$ . Chaque ligne de cette équation matricielle est équivalente à (1.4.5).  $\square$

**Remarque 1.4.6.** Le résultat précédent montre que toute matrice stochastique régulière  $P$  admet 1 comme valeur propre. En fait, nous aurions déjà pu le remarquer avant, car la définition (1.2.2) d'une matrice stochastique (quelconque) implique que  $P\mathbf{1} = \mathbf{1}$ , où  $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)^T$ . La relation (1.4.4) montre en plus que pour une matrice stochastique régulière, la valeur propre 1 est simple, et toutes les autres valeurs propres sont strictement inférieures à 1 en module.

Le vecteur ligne  $\pi$  a plusieurs propriétés importantes :

1. Par (1.4.4) on a,  $\forall i, j \in \mathcal{X}$ ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}_i \{X_n = j\} = \lim_{n \rightarrow \infty} (P^n)_{ij} = \pi_j. \quad (1.4.14)$$

$\pi$  décrit donc la distribution de probabilité asymptotique de la chaîne, qui est indépendante de l'état initial.

2. L'équation (1.4.5) implique que pour tout temps  $n$ ,

$$\mathbb{P}_\pi\{X_n = j\} = \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i (P^n)_{ij} = (\pi P^n)_j = \pi_j, \quad (1.4.15)$$

ce qui motive la définition suivante.

**Définition 1.4.7.** *La distribution de probabilité  $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_N)$  satisfaisant la relation (1.4.4) est appelée distribution stationnaire (ou invariante) de la chaîne de Markov.*

Enfin, on a le résultat général suivant :

**Théorème 1.4.8.** *Pour une chaîne régulière et toute distribution initiale  $\nu$ , on a*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}_\nu\{X_n = j\} = \pi_j \quad \forall j \in \mathcal{X}. \quad (1.4.16)$$

DÉMONSTRATION. Ce résultat peut être dérivé de manière très simple à l'aide de quelques identités de calcul matriciel. Il est plus intéressant de présenter une autre preuve, très élégante, due à Doeblin. Considérons une autre chaîne de Markov, définie sur l'espace  $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$ . Ses probabilités de transition  $P^*$  sont données par

$$P_{(i,j),(k,l)}^* = p_{ik} p_{jl}. \quad (1.4.17)$$

Nous supposons que la distribution initiale de cette chaîne est une mesure produit  $\rho = \nu \otimes \pi$ , c'est-à-dire que

$$\rho((i, j)) = \nu_i \pi_j \quad \forall (i, j) \in \mathcal{X} \times \mathcal{X}. \quad (1.4.18)$$

Nous dénotons cette chaîne par  $\{(X_n, Y_n)\}_{n \geq 0}$ . Par construction, les variables aléatoires  $X_0$  et  $Y_0$  sont indépendantes. Il suit alors de la définition (1.4.17) des probabilités de transition que  $X_n$  et  $Y_n$  sont indépendantes pour tout  $n$ , et que les suites  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  et  $\{Y_n\}_{n \geq 0}$  sont en fait deux chaînes de Markov sur  $\mathcal{X}$  de matrice de transition  $P$ , et de distributions initiales respectivement données par  $\nu$  et  $\pi$ .

La matrice de transition  $P^*$  est également régulière : il suffit de se convaincre que les éléments de matrice des puissances  $(P^*)^n$  sont donnés par des produits  $p_{ik}^{(n)} p_{jl}^{(n)}$ . Considérons alors l'ensemble

$$A = \{(i, i) : i \in \mathcal{X}\} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{X}. \quad (1.4.19)$$

Le temps de premier passage  $\tau_A$  peut aussi s'écrire

$$\tau_A = \inf\{n > 0 : X_n = Y_n\}. \quad (1.4.20)$$

Nous prétendons que les deux chaînes ont la même loi pour  $n \geq \tau_A$ . Plus précisément,

$$\mathbb{P}_\rho\{X_n = j, \tau_A \leq n\} = \mathbb{P}_\rho\{Y_n = j, \tau_A \leq n\} \quad \forall j \in \mathcal{X}, \forall n \geq 0. \quad (1.4.21)$$

Pour montrer cela, nous introduisons un nouveau processus  $\{Z_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  défini par

$$Z_n = \begin{cases} X_n & \text{pour } n \leq \tau_A, \\ Y_n & \text{pour } n > \tau_A. \end{cases} \quad (1.4.22)$$

On vérifie par un calcul direct, en décomposant sur les valeurs possibles de  $\tau_A$ , que

$$\mathbb{P}_\rho\{[Z_{[0,n]} = i_{[0,n]}\} = \nu_{i_0} \prod_{m=1}^n p_{i_{m-1} i_m} \quad (1.4.23)$$

pour tout  $n \geq 0$  et tout choix de  $i_{[0,n]} \in \mathcal{X}^{n+1}$ . Par le Théorème 1.2.5, il suit que  $\{Z_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  est une chaîne de Markov de distribution initiale  $\nu$  et matrice de transition  $P$ , et est donc égale en loi à  $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ . Ceci prouve (1.4.21). Finalement, on a

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_\nu\{X_n = j\} &= \mathbb{P}_\rho\{X_n = j, \tau_A \leq n\} + \mathbb{P}_\rho\{X_n = j, \tau_A > n\}, \\ \pi_j &= \mathbb{P}_\pi\{Y_n = j\} = \mathbb{P}_\rho\{Y_n = j, \tau_A \leq n\} + \mathbb{P}_\rho\{Y_n = j, \tau_A > n\}. \end{aligned} \quad (1.4.24)$$

En prenant la différence et en utilisant (1.4.21), il vient

$$\begin{aligned} |\mathbb{P}_\nu\{X_n = j\} - \pi_j| &\leq |\mathbb{P}_\rho\{X_n = j, \tau_A > n\} - \mathbb{P}_\rho\{Y_n = j, \tau_A > n\}| \\ &\leq 2\mathbb{P}_\rho\{\tau_A > n\}. \end{aligned} \quad (1.4.25)$$

Or cette dernière quantité tend vers zéro lorsque  $n \rightarrow \infty$ , puisque  $\tau_A$  est fini presque sûrement en vertu de la Proposition 1.4.4.  $\square$

**Remarque 1.4.9.** La preuve de Doeblin permet aussi d'exprimer la vitesse de convergence vers la distribution stationnaire à l'aide du temps  $\tau_A$  introduit dans la preuve. En effet, en sommant la première ligne de (1.4.25) sur tous les  $j \in \mathcal{X}$ , on obtient

$$\sum_{j \in \mathcal{X}} |\mathbb{P}_\nu\{X_n = j\} - \pi_j| \leq 2\mathbb{P}_{\nu \otimes \pi}\{\tau_A > n\}. \quad (1.4.26)$$

Le membre de gauche peut être considéré comme la distance  $\ell_1$  entre la distribution de  $X_n$  et la distribution stationnaire. Ce genre d'argument est appelé un argument de couplage.

Nous revenons maintenant au cas général de chaînes de Markov irréductibles. Dans ce cas, la loi de  $X_n$  ne converge pas nécessairement vers une loi  $\pi$  donnée. Toutefois, une partie des résultats précédents reste vraie :

**Proposition 1.4.10.** *Soit  $P$  la matrice de transition d'une chaîne de Markov irréductible. Alors  $P$  admet 1 comme valeur propre simple. L'unique vecteur propre à gauche  $\pi$  de  $P$  pour la valeur propre 1 tel que  $\sum_i \pi_i = 1$  sera à nouveau appelé la distribution stationnaire de la chaîne.*

DÉMONSTRATION. Considérons la matrice stochastique  $Q = \frac{1}{2}[P + I]$ . Soit

$$m = \max_{i,j \in \mathcal{X}} \left\{ \min\{n \geq 1 : p_{ij}^{(n)} > 0\} \right\}. \quad (1.4.27)$$

Considérons la matrice

$$Q^m = I + \binom{m}{1}P + \binom{m}{2}P^2 + \cdots + \binom{m}{m-1}P^{m-1} + P^m. \quad (1.4.28)$$

Pour tout couple  $(i, j)$ , il existe en terme de cette somme dont l'élément de matrice  $(i, j)$  soit strictement positif. Comme tous les autres éléments de matrice sont non-négatifs, on conclut que  $(Q^m)_{i,j} > 0$ . Par conséquent,  $Q$  est la matrice de transition d'une chaîne régulière. Par le théorème 1.4.5, il existe une unique distribution de probabilité  $\pi$  telle que  $\pi Q = \pi$ , ce qui implique  $\frac{1}{2}[\pi + \pi P] = \pi$ , donc  $\pi P = \pi$ .  $\square$

**Exemple 1.4.11.** On vérifie facilement par calcul direct que la distribution stationnaire du modèle d'Ehrenfest est binomiale de paramètre  $1/2$  :  $\nu_i = 2^{-N} \binom{N}{i}$ . Nous verrons plus loin une interprétation plus intuitive de ce résultat.

Quelle est l'interprétation de la distribution stationnaire? D'une part, nous savons déjà que si  $X_n$  suit la loi  $\pi$  à un temps  $n$ , alors  $X_m$  suivra la même loi  $\pi$  à tous les temps ultérieurs  $m > n$ . Par contre, les Théorèmes 2.1.3 et 2.1.5 ne sont plus nécessairement vrais dans ce cas : Il suffit de considérer l'exemple du modèle d'Ehrenfest. Toutefois, on a encore convergence vers la distribution stationnaire dans le sens de la moyenne ergodique (ou moyenne de Cesaro) :

**Théorème 1.4.12.** *Pour une chaîne de Markov irréductible, et pour toute distribution initiale  $\nu$ , la fréquence moyenne de passage en tout état  $j$  converge vers  $\pi_j$ :*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \mathbb{E}_\nu \left( \sum_{m=0}^{n-1} 1_{\{X_m=j\}} \right) = \pi_j \quad \forall j \in \mathcal{X} . \quad (1.4.29)$$

DÉMONSTRATION. Soit  $\Pi$  la matrice dont toutes les ligne sont égales à  $\pi$ , cf. (1.4.4). Alors on a  $\Pi P = \Pi$ , et le fait que  $P \mathbf{1} = \mathbf{1}$  implique qu'on a également  $P \Pi = \Pi$ . Il suit que

$$(I + P + \dots + P^{n-1})(I - P + \Pi) = I - P^n + n\Pi . \quad (1.4.30)$$

Montrons que la matrice  $I - P + \Pi$  est inversible. Soit  $x$  un vecteur colonne tel que  $(I - P + \Pi)x = 0$ . Alors on a

$$0 = \pi(I - P + \Pi)x = \underbrace{\pi(I - P)x}_{=0} + \pi \Pi x = \pi x , \quad (1.4.31)$$

puisque  $\pi \Pi = \pi$  en raison du fait que  $\sum_i \pi_i = 1$ . Il suit que  $\Pi x = 0$ , et donc  $(I - P)x = 0$ . Comme  $P$  admet 1 comme valeur propre simple, avec vecteur propre à droite  $\mathbf{1}$ , ceci implique que  $x \parallel \mathbf{1}$ , ce qui n'est possible que si  $x = 0$  puisque  $\pi x = 0$  et tous les  $\pi_i$  sont positifs. La matrice  $I - P + \Pi$  est donc bien inversible.

Soit  $Z = (I - P + \Pi)^{-1}$ . Comme  $\pi(I - P + \Pi) = \pi$ , on a aussi  $\pi = \pi Z$  et  $\Pi = \Pi Z$ . En multipliant (1.4.30) à droite par  $Z$ , il vient

$$I + P + \dots + P^{n-1} = (I - P^n)Z + n\Pi Z = (I - P^n)Z + n\Pi . \quad (1.4.32)$$

Or nous avons, pour tout état initial  $i$ ,

$$\frac{1}{n} \mathbb{E}_i \left( \sum_{m=0}^{n-1} 1_{\{X_m=j\}} \right) = \frac{1}{n} \sum_{m=0}^{n-1} (P^m)_{ij} = \left[ \frac{1}{n} (I - P^n)Z + \Pi \right]_{ij} . \quad (1.4.33)$$

Comme les éléments de matrice de  $P^n$  sont uniformément bornés par 1, cette quantité converge vers  $(\Pi)_{ij} = \pi_j$  lorsque  $n \rightarrow \infty$ . Pour une distribution initiale quelconque  $\nu$ , on obtient de la même manière la convergence vers  $(\nu \Pi)_j = \pi_j$ .  $\square$

La distribution stationnaire  $\pi$  a également un lien intéressant avec l'espérance du temps de premier retour en un site  $i$ , appelé *temps de récurrence moyen en  $i$*  :

**Théorème 1.4.13.** *Pour une chaîne de Markov irréductible de distribution stationnaire  $\pi$ , les temps de récurrence moyens sont donnés par*

$$\mathbb{E}_i(\tau_i) = \frac{1}{\pi_i} . \quad (1.4.34)$$

DÉMONSTRATION. Nous commençons par établir une équation reliant divers temps de premier passage moyens. Pour  $i, j \in \mathcal{X}$ , on a

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_i(\tau_j) &= \mathbb{P}_i\{\tau_j = 1\} + \sum_{n \geq 2} n \mathbb{P}_i\{\tau_j = n\} \\
&= p_{ij} + \sum_{n \geq 2} n \sum_{k \neq j} \mathbb{P}_i\{\tau_j = n, X_1 = k\} \\
&= p_{ij} + \sum_{n \geq 2} n \sum_{k \neq j} p_{ik} \mathbb{P}_k\{\tau_j = n - 1\} \\
&= p_{ij} + \sum_{k \neq j} p_{ik} \sum_{m \geq 1} (m + 1) \mathbb{P}_k\{\tau_j = m\} \\
&= p_{ij} + \sum_{k \neq j} p_{ik} \left[ \mathbb{E}_k(\tau_j) + \underbrace{\sum_{m \geq 1} \mathbb{P}_k\{\tau_j = m\}}_{=1} \right] \\
&= 1 + \sum_{k \neq j} p_{ik} \mathbb{E}_k(\tau_j). \tag{1.4.35}
\end{aligned}$$

Cette relation peut être réécrite sous la forme

$$1 - \mathbb{E}_i(\tau_j) = - \sum_{k \in \mathcal{X}} (1 - \delta_{kj}) p_{ik} \mathbb{E}_k(\tau_j). \tag{1.4.36}$$

Il suit que

$$\begin{aligned}
1 - \pi_j \mathbb{E}_j(\tau_j) &= \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i [1 - \delta_{ij} \mathbb{E}_i(\tau_j)] \\
&= \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i [1 - \mathbb{E}_i(\tau_j) + (1 - \delta_{ij}) \mathbb{E}_i(\tau_j)] \\
&= \sum_{k \in \mathcal{X}} \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i (\delta_{ik} - p_{ik}) (1 - \delta_{kj}) \mathbb{E}_k(\tau_j).
\end{aligned}$$

La somme sur  $i$  s'annule, puisque  $\pi_k = \sum_i \pi_i p_{ik}$ .  $\square$

**Exemple 1.4.14.** Dans le cas du modèle d'Ehrenfest avec  $N$  boules, le temps de récurrence moyen vers l'état à  $i$  boules est donné par

$$\mathbb{E}_i(\tau_i) = \frac{1}{\nu_i} = 2^N \frac{i!(N-i)!}{N!}. \tag{1.4.37}$$

En particulier, le temps moyen entre configurations où toutes les boules sont dans l'urne de gauche est de  $2^N$ . Ce temps devient gigantesque pour des nombres de boules de l'ordre du nombre d'Avogadro, c'est-à-dire du nombre de molécules dans un échantillon d'une mole de gaz. Ce modèle simple peut donc justifier pourquoi, lorsque deux récipients contenant des gaz sont mis en contact, on n'observe jamais toutes les molécules dans le même récipient.





## Chapitre 2

# Chaînes de Markov sur un ensemble dénombrable

### 2.1 Marches aléatoires

Les marches aléatoires constituent un exemple relativement simple, et néanmoins très important de chaînes de Markov sur un ensemble dénombrable infini. Dans ce cas, en effet,  $\mathcal{X} = \mathbb{Z}^d$  est un réseau infini, de dimension  $d \in \mathbb{N}^*$ . D'habitude, on considère que la chaîne démarre en  $X_0 = 0$ . Ensuite, elle choisit à chaque instant l'un des  $2d$  sites voisins, selon une loi fixée d'avance.

**Définition 2.1.1.** Une marche aléatoire sur  $\mathbb{Z}^d$  est une chaîne de Markov à valeurs dans  $\mathbb{Z}^d$ , de distribution initiale  $\nu = \delta_0$ , et de probabilités de transition satisfaisant

$$p_{ij} = 0 \quad \text{si } i = j \text{ ou } \|i - j\| > 1 . \quad (2.1.1)$$

La marche est dite symétrique si

$$p_{ij} = \frac{1}{2d} \quad \text{pour } \|i - j\| = 1 . \quad (2.1.2)$$

Les trajectoires de la marche aléatoire sont des suites de points de  $\mathbb{Z}^d$  à distance 1, qu'on a coutume à identifier à la ligne brisée reliant ces points (Figure 2.1).

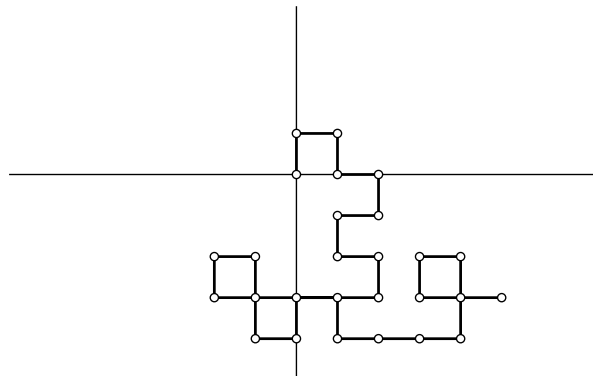


FIGURE 2.1. Une trajectoire d'une marche aléatoire en dimension  $d = 2$ .

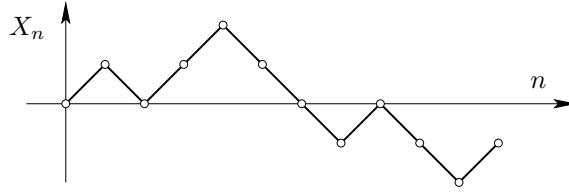


FIGURE 2.2. Une réalisation d'une marche aléatoire unidimensionnelle.

Dans le cas symétrique, il suit directement du Théorème 1.2.5 que chaque segment de trajectoire  $X_{[0,n]}$  a probabilité  $(2d)^{-n}$ . On peut facilement déterminer quelques propriétés de la loi de  $X_n$ .

**Proposition 2.1.2.** *Pour la marche aléatoire symétrique sur  $\mathbb{Z}^d$ , les variables aléatoires  $X_n$  satisfont*

$$\mathbb{E}(X_n) = 0 \quad \text{et} \quad \text{cov}(X_n) = \frac{n}{d}I \quad (2.1.3)$$

pour tout temps  $n$ . De plus, lorsque  $n \rightarrow \infty$  on a

$$\frac{X_n}{\sqrt{n}} \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}\left(0, \frac{1}{d}I\right), \quad (2.1.4)$$

où  $\mathcal{L}$  désigne la convergence en loi, et  $\mathcal{N}(0, \Sigma)$  dénote la loi normale centrée de matrice de covariance  $\Sigma$ .

DÉMONSTRATION. On vérifie facilement que les variables aléatoires  $Y_n = X_n - X_{n-1}$  sont i.i.d., d'espérance nulle et de matrice de covariance  $\frac{1}{d}I$ , ce qui implique (2.1.3). La relation (2.1.4) suit alors directement du théorème de la limite centrale.  $\square$

En conséquence, la position de la marche aléatoire au temps  $n$  se trouvera avec grande probabilité dans une boule de rayon d'ordre  $\sqrt{n}$  autour de l'origine. On dit que la marche aléatoire a un comportement *diffusif* (par opposition à *ballistique*, où la distance à l'origine croîtrait proportionnellement à  $n$ ).

Nous considérons maintenant plus particulièrement le cas de la marche aléatoire unidimensionnelle ( $d = 1$ ) symétrique. Dans ce cas, on voit facilement que la loi de  $X_n$  est binomiale centrée :

$$\mathbb{P}\{X_n = k\} = \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{n+k}{2}} \quad \forall k \in \{-n, -n+2, \dots, n-2, n\}. \quad (2.1.5)$$

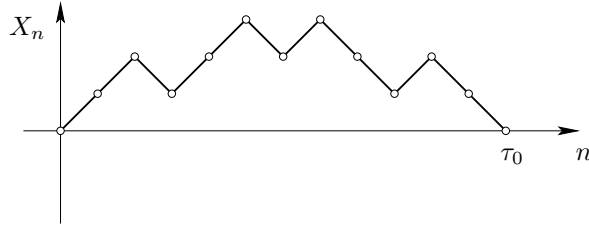
En particulier, la probabilité que le processus se trouve en 0 au  $n^{\text{ème}}$  pas est donnée par

$$\mathbb{P}\{X_n = 0\} = \begin{cases} 0 & \text{si } n \text{ est impair,} \\ \frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} & \text{si } n = 2m \text{ est pair.} \end{cases} \quad (2.1.6)$$

Remarquons que la formule de Stirling implique que pour  $m$  grand,

$$\mathbb{P}\{X_{2m} = 0\} \sim \frac{1}{2^{2m}} \frac{\sqrt{4\pi m} e^{-2m} (2m)^{2m}}{2\pi m e^{-2m} m^{2m}} = \frac{1}{\sqrt{\pi m}}. \quad (2.1.7)$$

En tout temps pair, l'origine est l'endroit le plus probable où trouver la marche, mais cette probabilité décroît avec le temps.

FIGURE 2.3. Une réalisation d'une marche aléatoire unidimensionnelle pour laquelle  $\tau_0 = 12$ .

Cependant, la loi de chaque  $X_n$  ne détermine pas le processus, les  $X_n$  n'étant pas indépendants, et on peut étudier beaucoup d'autres propriétés de la marche aléatoire. Une première quantité intéressante est le temps  $\tau_0$  du premier retour du processus en 0 (Figure 2.3) :

$$\tau_0 = \inf\{n \geq 1 : X_n = 0\} . \quad (2.1.8)$$

Il est clair que  $\tau_0$  ne peut prendre que des valeurs paires. De plus, si  $\tau_0 = n$  alors  $X_n = 0$ , donc  $\mathbb{P}\{\tau_0 = n\} \leq \mathbb{P}\{X_n = 0\}$ . En fait, il nous faut déterminer

$$\mathbb{P}\{\tau_0 = n\} = \mathbb{P}\{X_1 \neq 0, X_2 \neq 0, \dots, X_{n-1} \neq 0, X_n = 0\} . \quad (2.1.9)$$

**Théorème 2.1.3.** *La loi de  $\tau_0$  est donnée par*

$$\mathbb{P}\{\tau_0 = n\} = \begin{cases} 0 & \text{pour } n \text{ impair ,} \\ \frac{1}{n} \mathbb{P}\{X_{n-2} = 0\} & \text{pour } n \text{ pair .} \end{cases} \quad (2.1.10)$$

DÉMONSTRATION. Supposons que  $\tau_0 = n$ . Comme le processus ne peut pas changer de signe sans passer par 0, on a

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\tau_0 = n\} &= \mathbb{P}\{X_1 > 0, X_2 > 0, \dots, X_{n-1} > 0, X_n = 0\} \\ &\quad + \mathbb{P}\{X_1 < 0, X_2 < 0, \dots, X_{n-1} < 0, X_n = 0\} \\ &= 2\mathbb{P}\{X_1 > 0, X_2 > 0, \dots, X_{n-1} > 0, X_n = 0\} \\ &= 2\mathbb{P}\{X_1 = 1, X_2 > 0, \dots, X_{n-2} > 0, X_{n-1} = 1, X_n = 0\} \\ &= 2\mathbb{P}\{X_n = 0 | X_{n-1} = 1\} \mathbb{P}\{X_1 = 1, X_2 > 0, \dots, X_{n-2} > 0, X_{n-1} = 1\} , \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

où nous avons utilisé la propriété de Markov dans la dernière ligne. La propriété des incréments stationnaires (cf. (1.2.14)) implique

$$\mathbb{P}\{X_n = 0 | X_{n-1} = 1\} = \mathbb{P}\{X_1 = -1\} = \frac{1}{2} . \quad (2.1.12)$$

Il suit que

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\tau_0 = n\} &= \mathbb{P}\{X_1 = 1, X_2 > 0, \dots, X_{n-2} > 0, X_{n-1} = 1\} \\ &= \mathbb{P}\{X_1 = X_{n-1} = 1\} - \mathbb{P}\{X_1 = X_{n-1} = 1, \exists m \in \{2, \dots, n-2\} : X_m = 0\} . \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

Nous utilisons maintenant un argument important, appelé le *principe de réflexion* : A tout chemin allant de  $(1, 1)$  à  $(n-1, 1)$  passant par 0, on peut faire correspondre un unique

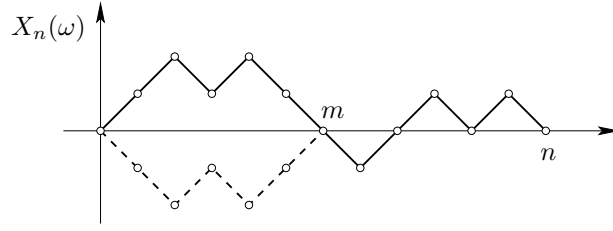


FIGURE 2.4. Pour chaque réalisation d'une marche aléatoire avec  $\tau_0 = m < n$  telle que  $X_1 = 1$ , il existe une autre réalisation telle que  $\tau_0 = m$  et  $X_1 = -1$ , obtenue par réflexion par rapport à l'axe des abscisses.

chemin de  $(-1, 1)$  à  $(n-1, 1)$ , obtenu en réfléchissant par rapport à l'axe des abscisses la partie du chemin antérieure au premier passage en 0. On a donc

$$\mathbb{P}\{X_1 = X_{n-1} = 1, \exists m \in \{2, \dots, n-2\} : X_m = 0\} = \mathbb{P}\{X_1 = -1, X_{n-1} = 1\}. \quad (2.1.14)$$

Finalement, en appliquant de nouveau la propriété des incréments stationnaires, on a

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_1 = 1, X_{n-1} = 1\} &= \mathbb{P}\{X_{n-1} = 1 | X_1 = 1\} \mathbb{P}\{X_1 = 1\} = \mathbb{P}\{X_{n-2} = 0\} \cdot \frac{1}{2}, \\ \mathbb{P}\{X_1 = -1, X_{n-1} = 1\} &= \mathbb{P}\{X_{n-1} = 1 | X_1 = -1\} \mathbb{P}\{X_1 = -1\} = \mathbb{P}\{X_{n-2} = 2\} \cdot \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

En remplaçant dans (2.1.13), il vient

$$\mathbb{P}\{\tau_0 = n\} = \frac{1}{2} [\mathbb{P}\{X_{n-2} = 0\} - \mathbb{P}\{X_{n-2} = 2\}]. \quad (2.1.16)$$

Le reste de la preuve est un calcul direct. Comme

$$\frac{\mathbb{P}\{X_{n-2} = 2\}}{\mathbb{P}\{X_{n-2} = 0\}} = \frac{\binom{n-2}{n/2}}{\binom{n-2}{n/2-1}} = \frac{(\frac{n}{2}-1)!(\frac{n}{2}-1)!}{(\frac{n}{2})!(\frac{n}{2}-2)!} = \frac{\frac{n}{2}-1}{\frac{n}{2}} = 1 - \frac{2}{n}, \quad (2.1.17)$$

on obtient

$$\mathbb{P}\{\tau_0 = n\} = \frac{1}{2} \mathbb{P}\{X_{n-2} = 0\} \left[ 1 - 1 + \frac{2}{n} \right] = \frac{1}{n} \mathbb{P}\{X_{n-2} = 0\}, \quad (2.1.18)$$

ce qui conclut la démonstration.  $\square$

Le tableau suivant donne les premières valeurs de la loi de  $\tau_0$  :

$n$	2	4	6	8	10	12	14
$\mathbb{P}\{\tau_0 = n\}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{5}{128}$	$\frac{7}{256}$	$\frac{21}{1024}$	$\frac{33}{2048}$
	= 0.5	= 0.125	$\cong 0.063$	$\cong 0.039$	$\cong 0.027$	$\cong 0.021$	$\cong 0.016$

Il est donc assez probable de revenir rapidement en 0, puis la loi prend des valeurs plutôt faibles, tout en décroissant lentement. Il suit de (2.1.7) que pour des grands  $n$ ,  $\mathbb{P}\{\tau_0 = n\}$  décroît comme  $1/n^{3/2}$ . Ce fait a une conséquence surprenante :

**Corollaire 2.1.4.**  $\mathbb{E}(\tau_0) = +\infty$ .

DÉMONSTRATION. On a

$$\mathbb{E}(\tau_0) = \sum_{n \geq 1} n \mathbb{P}\{\tau_0 = n\} = \sum_{m \geq 1} 2m \frac{1}{2^m} \mathbb{P}\{X_{2m-2} = 0\} \sim \sum_{m \geq 1} \frac{1}{\sqrt{\pi m}} = +\infty. \quad (2.1.19)$$

□

En d'autres termes, la marche aléatoire finit toujours par revenir en 0, mais la loi de  $\tau_0$  décroît trop lentement pour que son espérance soit finie. Cela est lié au fait que si la marche aléatoire s'éloigne beaucoup de 0, il lui faut longtemps pour y revenir.

Par un raisonnement analogue, on peut déterminer la loi du temps de passage

$$\tau_i = \inf\{n \geq 0 : X_n = i\} \quad (2.1.20)$$

Nous donnons simplement le résultat, la démonstration est laissée en exercice.

**Théorème 2.1.5.** *La loi de  $\tau_i$  est donnée par*

$$\mathbb{P}\{\tau_i = n\} = \begin{cases} \frac{|i|}{n} \mathbb{P}\{X_n = i\} & \text{pour } n \in \{|i|, |i| + 2, \dots\}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.1.21)$$

Pour des raisons similaires à celles du cas du retour en 0, la loi de  $\tau_L$  décroît en  $1/n^{3/2}$ , et son espérance est donc infinie.

## 2.2 Généralités sur les processus stochastiques

Jusqu'à présent, nous avons parlé de chaînes de Markov, qui sont des processus stochastiques particuliers, sans préciser l'espace probabilisé sous-jacent. Cela ne pose pas de problème tant qu'on parle de segments de trajectoire finis : Il suffit de considérer des espaces produits comprenant un nombre fini de termes. Le cas de trajectoires infinies nécessite quelques précautions supplémentaires. Nous donnons ici un survol de la construction générale des processus stochastiques en temps discret.

Soit  $(E, \mathcal{E})$  un espace mesurable. L'ensemble  $E^n = E \times E \times \dots \times E$  peut être muni d'une tribu  $\mathcal{E}^{\otimes n}$ , définie comme la tribu engendrée par tous les événements du type

$$A^{(i)} = \{\omega \in E^n : \omega_i \in A\}, \quad A \in \mathcal{E}, \quad (2.2.1)$$

appelés *cylindres*. On dénote par  $E^{\mathbb{N}}$  l'ensemble des applications  $x : \mathbb{N} \rightarrow E$ , c'est-à-dire l'ensemble des suites  $(x_0, x_1, x_2, \dots)$  à valeurs dans  $E$ . Cet ensemble peut à nouveau être muni d'une tribu construite à partir de tous les cylindres, notée  $\mathcal{E}^{\otimes \mathbb{N}}$ .

**Définition 2.2.1.**

- *Un processus stochastique à valeurs dans  $(E, \mathcal{E})$  est une suite  $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  de variables aléatoires à valeurs dans  $(E, \mathcal{E})$ , définies sur un même espace probabilisé  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$  (autrement dit, chaque  $X_n$  est une application  $\mathcal{F}$ - $\mathcal{E}$ -mesurable de  $\Omega$  dans  $E$ ). C'est donc également une variable aléatoire à valeurs dans  $(E^{\mathbb{N}}, \mathcal{E}^{\otimes \mathbb{N}})$ .*

- Soit  $\mathbb{Q}$  une mesure de probabilité sur  $(E^{\mathbb{N}}, \mathcal{E}^{\otimes \mathbb{N}})$ . Les distributions de dimension finie de  $\mathbb{Q}$  sont les mesures sur  $(E^{n+1}, \mathcal{E}^{\otimes n+1})$  définies par

$$\mathbb{Q}^{(n)} = \mathbb{Q} \circ (\pi^{(n)})^{-1}, \quad (2.2.2)$$

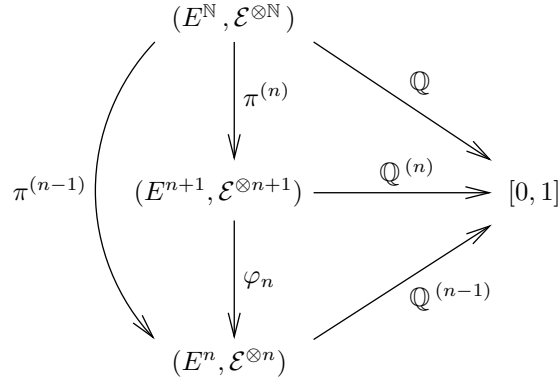
où  $\pi^{(n)}$  est la projection  $\pi^{(n)} : E^{\mathbb{N}} \rightarrow E^{n+1}, (x_0, x_1, x_2, \dots) \mapsto (x_0, \dots, x_n)$ .

On se convainc facilement que la suite des  $\{\mathbb{Q}^{(n)}\}_{n \in \mathbb{N}}$  détermine  $\mathbb{Q}$  univoquement. Inversément, pour qu'une suite donnée  $\{\mathbb{Q}^{(n)}\}_{n \in \mathbb{N}}$  corresponde effectivement à une mesure  $\mathbb{Q}$ , les  $\mathbb{Q}^{(n)}$  doivent satisfaire une *condition de compatibilité* :

Soit  $\varphi_n$  la projection  $\varphi_n : E^{n+1} \rightarrow E^n, (x_0, \dots, x_n) \mapsto (x_0, \dots, x_{n-1})$ . Alors on a  $\pi^{(n-1)} = \varphi_n \circ \pi^{(n)}$ , donc pour tout  $A \in \mathcal{E}^{\otimes n}$ ,  $(\pi^{(n-1)})^{-1}(A) = (\pi^{(n)})^{-1}(\varphi_n^{-1}(A))$ . La condition de compatibilité s'écrit donc

$$\mathbb{Q}^{(n-1)} = \mathbb{Q}^{(n)} \circ \varphi_n^{-1}. \quad (2.2.3)$$

Le diagramme suivant illustre la situation (toutes les projections étant mesurables, on peut les considérer à la fois comme applications entre ensembles et entre tribus) :



Nous allons voir comment construire une suite de  $\mathbb{Q}^{(n)}$  satisfaisant la condition (2.2.3).

**Définition 2.2.2.** Soient  $(E_1, \mathcal{E}_1)$  et  $(E_2, \mathcal{E}_2)$  deux espaces mesurables. Un noyau markovien de  $(E_1, \mathcal{E}_1)$  vers  $(E_2, \mathcal{E}_2)$  est une application  $K : E_1 \times \mathcal{E}_2 \rightarrow [0, 1]$  satisfaisant les deux conditions

1. Pour tout  $x \in E_1$ ,  $K(x, \cdot)$  est une mesure de probabilité sur  $(E_2, \mathcal{E}_2)$ .
2. Pour tout  $A \in \mathcal{E}_2$ ,  $K(\cdot, A)$  est une application  $\mathcal{E}_1$ -mesurable.

**Exemple 2.2.3.**

1. Soit  $\mu$  une mesure de probabilité sur  $(E_2, \mathcal{E}_2)$ . Alors  $K$  défini par  $K(x, A) = \mu(A)$  pour tout  $x \in E_1$  est un noyau markovien.
2. Soit  $f : E_1 \rightarrow E_2$  une application mesurable. Alors  $K$  défini par  $K(x, A) = 1_A(f(x))$  est un noyau markovien.
3. Soit  $\mathcal{X} = \{1, \dots, N\}$  un ensemble fini, et posons  $E_1 = E_2 = \mathcal{X}$  et  $\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_2 = \mathcal{P}(\mathcal{X})$ . Alors  $K$  défini par

$$K(i, A) = \sum_{j \in A} p_{ij}, \quad (2.2.4)$$

où  $P = (p_{ij})_{i,j \in \mathcal{X}}$  est une matrice stochastique, est un noyau markovien.

Si  $\mu$  est une mesure de probabilité sur  $(E_1, \mathcal{E}_1)$  et  $K$  est un noyau markovien de  $(E_1, \mathcal{E}_1)$  vers  $(E_2, \mathcal{E}_2)$ , on définit une mesure de probabilité  $\mu \otimes K$  sur  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  par

$$(\mu \otimes K)(A) := \int_{E_1} K(x_1, A_{x_1}) \mu(dx_1), \quad (2.2.5)$$

où  $A_{x_1} = \{x_2 \in E_2 : (x_1, x_2) \in A\} \in \mathcal{E}_2$  est la *section* de  $A$  en  $x_1$ . On vérifie que c'est bien une mesure de probabilité. Afin de comprendre sa signification, calculons ses marginales. Soient  $\pi_1$  et  $\pi_2$  les projections définies par  $\pi_i(x_1, x_2) = x_i$ ,  $i = 1, 2$ .

1. Pour tout ensemble mesurable  $A_1 \in \mathcal{E}_1$ , on a

$$\begin{aligned} ((\mu \otimes K) \circ \pi_1^{-1})(A_1) &= (\mu \otimes K)(A_1 \otimes E_2) \\ &= \int_{E_1} 1_{A_1}(x_1) K(x_1, E_2) \mu(dx_1) \\ &= \int_{A_1} K(x_1, E_2) \mu(dx_1) = \mu(A_1), \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

où on a utilisé le fait que la section  $(A_1 \otimes \mathcal{E}_1)_{x_1}$  est donnée par  $E_2$  si  $x_1 \in A_1$ , et  $\emptyset$  sinon. Ceci implique

$$(\mu \otimes K) \circ \pi_1^{-1} = \mu. \quad (2.2.7)$$

La première marginale de  $\mu \otimes K$  est donc simplement  $\mu$ .

2. Pour tout ensemble mesurable  $A_2 \in \mathcal{E}_2$ , on a

$$\begin{aligned} ((\mu \otimes K) \circ \pi_2^{-1})(A_2) &= (\mu \otimes K)(E_1 \otimes A_2) \\ &= \int_{E_1} K(x_1, A_2) \mu(dx_1). \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

La seconde marginale de  $\mu \otimes K$  s'interprète comme suit: c'est la mesure sur  $E_2$  obtenue en partant avec la mesure  $\mu$  sur  $E_1$ , et en "allant de tout  $x \in E_1$  vers  $A_2 \in \mathcal{E}_2$  avec probabilité  $K(x_1, A_2)$ ".

Enfin, par une variante du théorème de Fubini–Tonelli, on vérifie que pour toute fonction  $(\mu \otimes K)$ -intégrable  $f : E_1 \times E_2 \rightarrow \mathbb{R}$ , on a

$$\int_{E_1 \times E_2} f d(\mu \otimes K) = \int_{E_1} \left( \int_{E_2} f(x_1, x_2) K(x_1, dx_2) \right) \mu(dx_1). \quad (2.2.9)$$

Nous pouvons maintenant procéder à la construction de la suite  $\{\mathbb{Q}^{(n)}\}_{n \in \mathbb{N}}$  de distributions de dimension finie, satisfaisant la condition de compatibilité (2.2.3). Sur l'espace mesurable  $(E, \mathcal{E})$ , on se donne une mesure de probabilité  $\nu$ , appelée *mesure initiale*. On se donne pour tout  $n \in \mathbb{N}$  un noyau markovien  $K_n$  de  $(E^n, \mathcal{E}^{\otimes n})$  vers  $(E, \mathcal{E})$ . On définit alors la suite  $\{\mathbb{Q}^{(n)}\}_{n \in \mathbb{N}}$  de mesures de probabilité sur  $(E^n, \mathcal{E}^{\otimes n})$  récursivement par

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}^{(0)} &= \nu, \\ \mathbb{Q}^{(n)} &= \mathbb{Q}^{(n-1)} \otimes K_{n-1}, \quad n \geq 2. \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

Par (2.2.7), on a  $\mathbb{Q}^{(n)} \circ \varphi_n^{-1} = (\mathbb{Q}^{(n-1)} \otimes K_{n-1}) \circ \varphi_n^{-1} = \mathbb{Q}^{(n-1)}$ , donc la condition de compatibilité est bien satisfaite.

L'interprétation de (2.2.10) est simplement que chaque noyau markovien  $K_n$  décrit les probabilités de transition entre les temps  $n$  et  $n + 1$ , et permet ainsi de définir une

mesure sur les segments de trajectoire plus longs d'une unité. Remarquons enfin qu'on peut également construire pour tout  $m, n$  un noyau  $K_{n,m}$  de  $(E^n, \mathcal{E}^{\otimes n})$  vers  $(E^m, \mathcal{E}^{\otimes m})$  tel que  $\mathbb{Q}^{(n+m)} = \mathbb{Q}^{(n)} \otimes K_{n,m}$ .

On peut noter par ailleurs que si  $\psi_n : E^{n+1} \rightarrow E$  désigne la projection sur la dernière composante  $(x_0, \dots, x_n) \mapsto x_n$ , alors la formule (2.2.8) montre que la loi de  $X_n$ , qui est donnée par la marginale  $\nu_n = \mathbb{Q}^{(n)} \circ \psi_n^{-1}$ , s'exprime comme

$$\mathbb{P}\{X_n \in A\} = \nu_n(A) = \int_{E^n} K_{n-1}(x, A) \mathbb{Q}^{(n-1)}(dx). \quad (2.2.11)$$

La situation est illustrée par le diagramme suivant :

$$\begin{array}{ccc}
 (E, \mathcal{E}) & & \\
 \uparrow \psi_n & \searrow \nu_n & \\
 (E^{n+1}, \mathcal{E}^{\otimes n+1}) & \xrightarrow{\mathbb{Q}^{(n)}} & [0, 1] \\
 \downarrow \varphi_n & \nearrow \mathbb{Q}^{(n-1)} & \\
 (E^n, \mathcal{E}^{\otimes n}) & & 
 \end{array}$$

Nous donnons maintenant, sans démonstration, le résultat général assurant la légitimité de toute la procédure.

**Théorème 2.2.4** (Ionescu–Tulcea). *Pour la suite de mesures  $\{\mathbb{Q}^{(n)}\}_{n \in \mathbb{N}}$  construites selon (2.2.10), il existe une unique mesure de probabilité  $\mathbb{Q}$  sur  $(E^{\mathbb{N}}, \mathcal{E}^{\otimes \mathbb{N}})$  telle que  $\mathbb{Q}^{(n)} = \mathbb{Q} \circ (\pi^{(n)})^{-1}$  pour tout  $n$ , c'est-à-dire que les  $\mathbb{Q}^{(n)}$  sont les distributions de dimension finie de  $\mathbb{Q}$ .*

### Exemple 2.2.5.

1. **Mesures produit:** On se donne une suite  $\{\mu_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  de mesures de probabilité sur l'espace mesurable  $(E, \mathcal{E})$ . Soit, pour tout  $n$ ,  $\mathbb{Q}^{(n)} = \mu_0 \otimes \mu_1 \otimes \dots \otimes \mu_n$  la mesure produit. C'est une mesure de la forme ci-dessus, avec noyau markovien

$$K_n(x, A) = \mu_{n+1}(A) \quad \forall x \in E^n, \forall A \in \mathcal{E}. \quad (2.2.12)$$

La relation (2.2.11) montre que la loi  $\nu_n$  de  $X_n$  est donnée par  $\mu_n$ . On dit que les variables aléatoires  $X_n$  sont *indépendantes*. Si tous les  $\mu_n$  sont les mêmes, on dit qu'elles sont *indépendantes et identiquement distribuées (i.i.d.)*.

2. **Système dynamique:** On se donne une application mesurable  $f : E \rightarrow E$ , une mesure de probabilité initiale  $\nu$  sur  $E$ . Soit pour tout  $n$  le noyau markovien

$$K_n(x, A) = 1_A f(x_n), \quad (2.2.13)$$

et construisons les  $\mathbb{Q}^{(n)}$  comme ci-dessus. Alors la formule (2.2.11) montre qu'on a



pour tout  $A \in E$

$$\begin{aligned} \nu_n(A) &= \int_{E^n} 1_A f(x_n) \mathbb{Q}^{(n-1)}(dx) \\ &= \int_E 1_A f(x_n) \nu_{n-1}(dx_n) \\ &= \int_{f^{-1}(A)} \nu_{n-1}(dx_n) = \nu_{n-1}(f^{-1}(A)) . \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

Il suit que

$$\nu_n = \nu \circ f^{-n} \quad \forall n \in \mathbb{N} . \quad (2.2.15)$$

Cette situation correspond à un système dynamique déterministe. Par exemple, si  $f$  est bijective et  $\nu = \delta_{x_0}$  est concentrée en un point, on a  $\nu_n = \delta_{f^n(x_0)}$ .

3. **Chaînes de Markov:** Soit  $\mathcal{X}$  un ensemble fini ou dénombrable, muni de la tribu  $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ , et  $P = (p_{ij})_{i,j \in \mathcal{X}}$  une matrice stochastique sur  $\mathcal{X}$ , c'est-à-dire que  $0 \leq p_{ij} \leq 1 \forall i, j \in \mathcal{X}$  et  $\sum_{j \in \mathcal{X}} p_{ij} = 1 \forall i \in \mathcal{X}$ . On se donne une mesure de probabilité  $\nu$  sur  $\mathcal{X}$ , et une suite  $\mathbb{Q}^{(n)}$  construite à partir de (2.2.10) avec pour noyaux markoviens

$$K_n(i_{[0,n-1]}, i_n) = p_{i_{n-1}i_n} . \quad (2.2.16)$$

Le processus stochastique de mesure  $\mathbb{Q}$ , dont les distributions de dimension finie sont les  $\mathbb{Q}^{(n)}$ , est la chaîne de Markov sur  $\mathcal{X}$  de distribution initiale  $\nu$  et de matrice de transition  $P$ . Dans ce cas la relation (2.2.11) se traduit en

$$\mathbb{P}\{X_n \in A\} = \nu_n(A) = \sum_{i \in \mathcal{X}} \sum_{j \in A} p_{ij} \nu_{n-1}(\{i\}) = \sum_{j \in A} \sum_{i \in \mathcal{X}} \mathbb{P}\{X_{n-1} = i\} p_{ij} . \quad (2.2.17)$$

## 2.3 Récurrence, transience et période

Nous revenons maintenant à l'étude des propriétés de chaînes de Markov sur un ensemble dénombrable  $\mathcal{X}$ . Rappelons que le *temps de premier passage* de la chaîne en un site  $i \in \mathcal{X}$  est la variable aléatoire

$$\tau_i = \inf\{n \geq 1 : X_n = i\} , \quad (2.3.1)$$

avec la convention que  $\tau_i = \infty$  si  $X_n \neq i \forall n \geq 1$ . Dans le cas où la chaîne démarre dans l'état  $i$  au temps 0,  $\tau_i$  s'appelle également le *temps de premier retour en  $i$* .

Dans le cas où  $\mathcal{X}$  est fini, nous avons vu que pour une chaîne irréductible,  $\tau_i$  était fini presque sûrement (cf. Proposition 1.4.4). Dans le cas où  $\mathcal{X}$  est infini, ce n'est plus forcément le cas. En effet, la preuve que nous avons donnée de la Proposition 1.4.4 utilise la Proposition 1.3.3 sur les chaînes absorbantes, dont la preuve ne marche plus dans le cas infini (la définition (1.3.7) de  $p$  n'interdit pas que  $p = 1$ ). On est donc amené à introduire la distinction suivante.

**Définition 2.3.1.** *Un état  $i \in \mathcal{X}$  est dit récurrent si*

$$\mathbb{P}_i\{\tau_i < \infty\} := \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_i\{\tau_i = n\} = 1 . \quad (2.3.2)$$

*Dans le cas contraire, il est dit transient. La chaîne de Markov est appelée récurrente, respectivement transiente, si tous ses états sont récurrents, respectivement transients.*

Le fait qu'un état soit récurrent signifie que la chaîne revient vers cet état presque sûrement, et donc qu'elle y revient infiniment souvent. Le fait qu'un état soit transient signifie que la chaîne a une probabilité positive de ne jamais retourner dans cet état.

La condition (2.3.2) n'est en général pas aisée à vérifier, car elle présuppose la connaissance exacte de la loi de  $\tau_i$ . Toutefois, on peut obtenir une condition équivalente beaucoup plus facile à vérifier. Pour cela, nous commençons par démontrer une équation dite de renouvellement.

**Proposition 2.3.2.** *Pour tout  $i, j \in \mathcal{X}$  et tout temps  $n \in \mathbb{N}$  on a la relation*

$$\mathbb{P}_i\{X_n = j\} = \sum_{m=1}^n \mathbb{P}_i\{\tau_j = m\} \mathbb{P}_j\{X_{n-m} = j\}. \quad (2.3.3)$$

DÉMONSTRATION. En décomposant sur les temps de premier passage en  $j$ , il vient

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_i\{X_n = j\} &= \sum_{m=1}^n \mathbb{P}_i\{j \notin X_{[1, m-1]}, X_m = j, X_n = j\} \\ &= \sum_{m=1}^n \underbrace{\mathbb{P}_i\{X_n = j | j \notin X_{[1, m-1]}, X_m = j\}}_{=\mathbb{P}_i\{X_n=j|X_m=j\}=\mathbb{P}_j\{X_{n-m}=j\}} \underbrace{\mathbb{P}_i\{j \notin X_{[1, m-1]}, X_m = j\}}_{=\mathbb{P}_i\{\tau_j=m\}}, \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

où nous avons utilisé la propriété des incréments indépendants.  $\square$

Nous pouvons maintenant prouver un critère de récurrence plus simple à vérifier que la définition (2.3.2).

**Théorème 2.3.3.** *Les deux conditions suivantes sont équivalentes:*

1. *L'état  $i$  est récurrent.*
2. *On a*

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_n = i\} = +\infty. \quad (2.3.5)$$

DÉMONSTRATION.

$\Rightarrow$ : L'équation de renouvellement (2.3.3) permet d'écrire

$$\begin{aligned} S := \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_n = i\} &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_n = i\} \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^n \mathbb{P}_i\{\tau_i = m\} \mathbb{P}_i\{X_{n-m} = i\} \\ &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_i\{\tau_i = m\} \sum_{n=m}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_{n-m} = i\} \\ &= 1 + \underbrace{\sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_i\{\tau_i = m\}}_{=1} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_n = i\} = 1 + S. \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Comme  $S \in [0, \infty]$ , l'égalité  $S = 1 + S$  implique nécessairement  $S = +\infty$ .

⇐: On ne peut pas directement inverser les implications ci-dessus. Cependant, on peut montrer la contraposée en définissant pour tout  $0 < s < 1$  les séries entières

$$\begin{aligned}\psi(s) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_n = i\} s^n, \\ \phi(s) &= \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_i\{\tau_i = n\} s^n.\end{aligned}\tag{2.3.7}$$

Ces séries ont un rayon de convergence supérieur ou égal à 1 car leurs coefficients sont inférieurs ou égaux à 1. Un calcul analogue au calcul (2.3.6) ci-dessus donne alors

$$\begin{aligned}\psi(s) &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_i\{\tau_i = m\} \sum_{n=m}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_{n-m} = i\} s^n \\ &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_i\{\tau_i = m\} s^m \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_n = i\} s^n \\ &= 1 + \psi(s)\phi(s),\end{aligned}\tag{2.3.8}$$

d'où

$$\psi(s) = \frac{1}{1 - \phi(s)}.\tag{2.3.9}$$

Par conséquent, si  $\mathbb{P}_i\{\tau_i < \infty\} = \phi(1) < 1$ , alors on obtient, en prenant la limite  $s \nearrow 1$ ,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_i\{X_n = i\} = \lim_{s \nearrow 1} \psi(s) = \frac{1}{1 - \phi(1)} < \infty.\tag{2.3.10}$$

□

Une application de ce critère de récurrence est le résultat important suivant.

**Corollaire 2.3.4.** *La marche aléatoire symétrique sur  $\mathbb{Z}^d$  est récurrente pour  $d = 1$  et  $d = 2$  et transiente pour  $d \geq 3$ .*

DÉMONSTRATION. Comme la marche aléatoire est invariante par translation, il suffit de vérifier que l'origine est récurrente, respectivement transiente.

1. En dimension  $d = 1$ , nous avons vu dans la Section 2.1 que  $\mathbb{P}_0\{X_{2m} = 0\}$  se comportait en  $1/\sqrt{\pi m}$  pour  $m$  grand. Il suit que

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_0\{X_n = 0\} = +\infty,\tag{2.3.11}$$

donc par le théorème précédent, l'origine est récurrente.

2. En dimension  $d = 2$ , on peut encore calculer explicitement  $\mathbb{P}_0\{X_{2m} = 0\}$ . Parmi les  $4^{2m}$  trajectoires de longueur  $2m$ , il faut déterminer combien sont revenues à l'origine. Munissons le réseau  $\mathbb{Z}^2$  des quatres directions Nord, Sud, Est et Ouest. Une trajectoire de longueur  $2m$  partant et revenant de l'origine doit avoir fait autant de pas (disons  $k$ ) vers le Nord que vers le Sud, et autant de pas (c'est-à-dire  $m - k$ ) vers l'Est que vers l'Ouest. Le nombre de telles trajectoires est donc donné par

$$\sum_{k=0}^m \binom{2m}{2k} \binom{2k}{k} \binom{2(m-k)}{m-k} = \sum_{k=0}^m \frac{(2m)!}{[k!(m-k)!]^2} = \binom{2m}{m} \sum_{k=0}^m \binom{m}{k}^2.\tag{2.3.12}$$

Cette dernière somme peut se simplifier grace aux identités suivantes:

$$\begin{aligned} \binom{2m}{m} &= \binom{2m-1}{m} + \binom{2m-1}{m-1} = \binom{2m-2}{m} + 2\binom{2m-2}{m-1} + \binom{2m-2}{m-2} \\ &= \dots = \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} \binom{m}{m-k} = \sum_{k=0}^m \binom{m}{k}^2. \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

Il suit que

$$\mathbb{P}_0\{X_{2m} = 0\} = \frac{1}{4^{2m}} \binom{2m}{m}^2 \sim \frac{1}{\pi m}, \quad (2.3.14)$$

où la dernière équivalence découle de la formule de Stirling. Ceci implique la divergence de la somme des  $\mathbb{P}_0\{X_n = 0\}$ , donc la récurrence de l'origine.

3. En dimension  $d = 3$ , on obtient de manière analogue que le nombre de chemins revenus à l'origine après  $6m$  pas est donné par

$$\binom{6m}{3m} \sum_{k_1+k_2+k_3=3m} \left( \frac{(3m)!}{k_1!k_2!k_3!} \right)^2. \quad (2.3.15)$$

Cette fois-ci, nous ne disposons pas d'une expression exacte pour la somme. Nous pouvons toutefois l'estimer comme suit:

$$\begin{aligned} \sum_{k_1+k_2+k_3=3m} \left( \frac{(3m)!}{k_1!k_2!k_3!} \right)^2 &\leq \left( \max_{k_1+k_2+k_3=3m} \frac{(3m)!}{k_1!k_2!k_3!} \right) \sum_{k_1+k_2+k_3=3m} \frac{(3m)!}{k_1!k_2!k_3!} \\ &= \frac{(3m)!}{(m!)^3} \cdot 3^{3m}. \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

En effet, le maximum est atteint lorsque tous les  $k_i$  sont égaux, alors que la somme est égale au nombre de mots de longueur  $3m$  qu'on peut écrire avec trois lettres différentes, avec répétition (les  $k_i$  correspondant au nombre de lettres de chaque type choisies). En utilisant la formule de Stirling, on trouve alors

$$\mathbb{P}_0\{X_{6m} = 0\} \leq \frac{3^{3m}}{6^{6m}} \binom{6m}{3m} \frac{(3m)!}{(m!)^3} \sim \frac{1}{2(\pi m)^{3/2}}. \quad (2.3.17)$$

Comme par ailleurs

$$\mathbb{P}_0\{X_{6m} = 0\} \geq \underbrace{\mathbb{P}_0\{X_{6m} = 0 | X_{6m-2} = 0\}}_{=\mathbb{P}_0\{X_2=0\}=1/6} \mathbb{P}_0\{X_{6m-2} = 0\} \quad (2.3.18)$$

$$\geq \left(\frac{1}{6}\right)^2 \mathbb{P}_0\{X_{6m-4} = 0\}, \quad (2.3.19)$$

les termes de la série des  $\mathbb{P}_0\{X_{2n} = 0\}$  décroissent en  $n^{-3/2}$ , ce qui implique que la série est sommable, et donc que l'origine est un point transient.

4. En dimension  $d \geq 4$ , on montre de manière analogue que  $\mathbb{P}_0\{X_{2n} = 0\}$  décroît comme  $n^{-d/2}$ , ce qui implique à nouveau la transience de l'origine.  $\square$

Nous avons utilisé à plusieurs reprises le fait qu'une marche aléatoire ne peut revenir au même endroit qu'aux temps pairs. On dit qu'elle a la période 2. Plus généralement, on introduit la définition suivante.

**Définition 2.3.5.** La période d'un état  $i \in \mathcal{X}$  est le nombre

$$d_i = \text{pgcd}\{n \geq 1 : \mathbb{P}_i\{X_n = i\} > 0\}. \quad (2.3.20)$$

Si  $d_i = 1$ , on dit que l'état  $i$  est apériodique. Si tout  $i \in \mathcal{X}$  est apériodique, on dit que la chaîne est apériodique.

**Remarque 2.3.6.** Une chaîne régulière est apériodique. En effet, pour tout état  $i$ , il existe un état  $j$  tel que  $p_{ij} > 0$ . Par définition, il existe un temps  $n$  tel que  $\mathbb{P}_k\{X_n = \ell\} > 0$  pour tout  $k, \ell \in \mathcal{X}$ . Par conséquent, on a  $\mathbb{P}_i\{X_n = i\} > 0$  et aussi

$$\mathbb{P}_i\{X_{n+1} = i\} \geq \mathbb{P}_i\{X_1 = j, X_{n+1} = i\} = p_{ij}\mathbb{P}_j\{X_n = i\} > 0. \quad (2.3.21)$$

Ceci implique que  $d_i = \text{pgcd}\{n, n+1\} = 1$ .

Nous avons introduit la relation d'équivalence  $i \sim j$  signifiant que  $i$  est atteignable depuis  $j$  est inversément. On montre assez facilement que les propriétés de récurrence/transcience et la période sont constantes sur les classes d'équivalence. On peut alors parler de classes récurrentes ou transientes, et de la période d'une classe. Si la chaîne est irréductible, alors elle est respectivement récurrente, transiente ou apériodique si et seulement si elle admet un état récurrent, transient ou apériodique.

**Proposition 2.3.7.** Si  $i$  et  $j$  sont dans la même classe récurrente, alors

$$\mathbb{P}_i\{\tau_j < \infty\} = \mathbb{P}_j\{\tau_i < \infty\} = 1. \quad (2.3.22)$$

DÉMONSTRATION. Soit  $A_M = \cup_{m=1}^M \{X_m = j\}$  l'événement "la chaîne visite le site  $j$  lors des  $M$  premiers pas". Alors

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \mathbb{P}_i(A_M) = \sum_{m=1}^{\infty} \mathbb{P}_j\{\tau_j = m\} = 1. \quad (2.3.23)$$

Soit  $n_0$  le plus petit entier tel que  $\mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i\} > 0$ . Alors pour tout  $M > n_0$ ,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_j(A_M \cap \{X_{n_0} = i\}) &= \sum_{n=1}^{M-n_0} \mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i, \tau_j = n_0 + n\} \\ &= \sum_{n=1}^{M-n_0} \mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i, j \notin X_{[1, n_0]}\} \mathbb{P}_i\{\tau_j = n\} \\ &\leq \mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i\} \sum_{n=1}^{M-n_0} \mathbb{P}_i\{\tau_j = n\}. \end{aligned} \quad (2.3.24)$$

La première égalité suit du fait que la chaîne ne peut pas retourner en  $j$  avant  $n_0$  et visiter  $i$  au temps  $n_0$ , par définition de  $n_0$ . Nous faisons maintenant tendre  $M$  vers l'infini des deux côtés de l'inégalité. Le membre de gauche tend vers  $\mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i\}$  en vertu de (2.3.23). Il vient donc

$$\mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i\} \leq \mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i\} \mathbb{P}_i\{\tau_j < \infty\}. \quad (2.3.25)$$

Comme  $\mathbb{P}_j\{X_{n_0} = i\} \neq 0$  et  $\mathbb{P}_i\{\tau_j < \infty\} \leq 1$ , on a nécessairement  $\mathbb{P}_i\{\tau_j < \infty\} = 1$ .  $\square$

## 2.4 Distributions stationnaires

Nous considérons une chaîne de Markov irréductible sur un ensemble dénombrable  $\mathcal{X}$ , de matrice de transition  $P = (p_{ij})_{i,j \in \mathcal{X}}$ .

**Définition 2.4.1.** Une distribution de probabilité  $\pi$  sur  $\mathcal{X}$  est dite stationnaire si elle satisfait

$$\pi_j = \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i p_{ij} \quad \forall j \in \mathcal{X}. \quad (2.4.1)$$

Plus généralement, une mesure  $\mu$  sur  $\mathcal{X}$  (qui n'est pas nécessairement une mesure de probabilité) satisfaisant  $\mu_j = \sum_{i \in \mathcal{X}} \mu_i p_{ij}$  pour tout  $j \in \mathcal{X}$  est appelée une mesure invariante de la chaîne.

Dans le cas où  $\mathcal{X}$  est fini, nous avons vu qu'une chaîne irréductible admettait toujours une distribution stationnaire. Dans le cas infini, ce n'est plus nécessairement le cas. Nous verrons par exemple que les marches aléatoires sur  $\mathbb{Z}^d$  n'admettent pas de distribution stationnaire (par contre, elles admettent beaucoup de mesures invariantes).

Nous allons maintenant dériver une condition nécessaire et suffisante pour qu'une chaîne de Markov irréductible admette une distribution stationnaire, qui sera toujours unique dans ce cas. Un rôle important est joué par la quantité

$$\gamma_i^{(k)} = \mathbb{E}_k \left( \sum_{n=1}^{\tau_k} 1_{\{X_n=i\}} \right), \quad (2.4.2)$$

c'est-à-dire le nombre moyen de passages en  $i$  entre deux passages en  $k$ . Intuitivement, si  $k$  est récurrent alors la chaîne revient infiniment souvent en  $k$ , et donc  $\gamma_i^{(k)}$  devrait mesurer le temps moyen passé en  $i$ . On peut s'attendre à ce que ce temps corresponde à une mesure invariante.

**Proposition 2.4.2.** Supposons la chaîne irréductible et récurrente. Alors on a  $\forall k \in \mathcal{X}$ :

1.  $\gamma_k^{(k)} = 1$ ;
2.  $\gamma^{(k)}$  est une mesure invariante;
3. Pour tout  $i \in \mathcal{X}$ , on a  $0 < \gamma_i^{(k)} < \infty$ ;
4.  $\gamma^{(k)}$  est l'unique mesure invariante telle que  $\gamma_k^{(k)} = 1$ .

DÉMONSTRATION.

1. Evident, puisque  $X_{\tau_k} = k$  et  $X_n \neq k$  pour  $1 \leq n < \tau_k$ .
2. Nous avons

$$\begin{aligned} \gamma_i^{(k)} &= \mathbb{E}_k \left( \sum_{n=1}^{\infty} 1_{\{X_n=i, n \leq \tau_k\}} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_k \{X_n = i, n \leq \tau_k\} \\ &= \sum_{j \in \mathcal{X}} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_k \{X_{n-1} = j, n \leq \tau_k\} p_{ji} \\ &= \sum_{j \in \mathcal{X}} p_{ji} \sum_{m=0}^{\infty} \mathbb{P}_k \{X_m = j, m \leq \tau_k - 1\}. \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

Or la seconde somme dans cette expression peut s'écrire

$$\mathbb{E}_k \left( \sum_{m=0}^{\tau_k-1} 1_{\{X_m=j\}} \right) = \mathbb{E}_k \left( \sum_{m=1}^{\tau_k} 1_{\{X_m=j\}} \right) = \gamma_j^{(k)}, \quad (2.4.4)$$

vu que  $\mathbb{P}_k\{X_0 = j\} = \delta_{kj} = \mathbb{P}_k\{X_{\tau_k} = j\}$ . Ceci prouve l'invariance de la mesure  $\gamma^{(k)}$ .

3. L'invariance de la mesure implique que pour tout  $n \geq 0$ ,

$$\gamma_i^{(k)} = \sum_{j \in \mathcal{X}} \gamma_j^{(k)} \mathbb{P}_j\{X_n = i\}. \quad (2.4.5)$$

En particulier,  $1 = \gamma_k^{(k)} \geq \gamma_j^{(k)} \mathbb{P}_j\{X_n = k\}$  pour tout  $j$ . Comme par irréductibilité, il existe un  $n$  tel que  $\mathbb{P}_j\{X_n = k\} > 0$ , on en déduit que  $\gamma_j^{(k)} < \infty$  pour tout  $j$ . D'autre part, on a aussi  $\gamma_i^{(k)} \geq \mathbb{P}_k\{X_n = i\}$ , qui est strictement positif pour au moins un  $n$ .

4. Soit  $\lambda$  une mesure invariante telle que  $\lambda_k = 1$ . Alors pour tout  $j$  on a

$$\lambda_j = \sum_{i \neq k} \lambda_i p_{ij} + p_{kj} \geq p_{kj}. \quad (2.4.6)$$

Il vient alors, en minorant  $\lambda_i$  par  $p_{ki}$  dans l'expression ci-dessus,

$$\begin{aligned} \lambda_j &\geq \sum_{i \neq k} p_{ki} p_{ij} + p_{kj} \\ &= \mathbb{P}_k\{X_2 = j, \tau_k \geq 2\} + \mathbb{P}_k\{X_1 = j, \tau_k \geq 1\} \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

Par récurrence, on trouve donc pour tout  $n \geq 1$  ( $a \wedge b$  désigne le minimum de  $a$  et  $b$ )

$$\lambda_j \geq \sum_{m=1}^{n+1} \mathbb{P}_k\{X_m = j, \tau_k \geq m\} = \mathbb{E}_k \left( \sum_{m=1}^{(n+1) \wedge \tau_k} 1_{\{X_m=j\}} \right). \quad (2.4.8)$$

Lorsque  $n$  tend vers l'infini, le membre de droite tend vers  $\gamma_j^{(k)}$ . On a donc  $\lambda_j \geq \gamma_j^{(k)}$  pour tout  $j$ . Par conséquent,  $\mu = \lambda - \gamma^{(k)}$  est une mesure invariante, satisfaisant  $\mu_k = 0$ . Comme  $\mu_k = \sum_j \mu_j \mathbb{P}_j\{X_n = k\}$  pour tout  $n$ , l'irréductibilité implique  $\mu_j = 0 \forall j$ , donc nécessairement  $\lambda = \gamma^{(k)}$ .  $\square$

Nous pouvons maintenant énoncer et démontrer le théorème principal sur les distributions stationnaires.

**Théorème 2.4.3.** *Pour une chaîne de Markov irréductible, les propriétés suivantes sont équivalentes :*

1. Il existe une distribution stationnaire.
2. Il existe un état  $k \in \mathcal{X}$  tel que

$$\mu_k := \mathbb{E}_k(\tau_k) < \infty. \quad (2.4.9)$$

3. La relation (2.4.9) est vérifiée pour tout  $k \in \mathcal{X}$ .

De plus, si ces propriétés sont vérifiées, alors la distribution stationnaire est unique, et donnée par

$$\pi_i = \frac{1}{\mu_i} \quad \forall i \in \mathcal{X}. \quad (2.4.10)$$

DÉMONSTRATION.

2  $\Rightarrow$  1 : Si  $\mu_k < \infty$  alors  $k$  est récurrent, donc la chaîne, étant irréductible, est récurrente. Par la proposition précédente,  $\gamma^{(k)}$  est l'unique mesure invariante prenant valeur 1 en  $k$ . Or nous avons

$$\sum_{j \in \mathcal{X}} \gamma_j^{(k)} = \mathbb{E}_k \left( \underbrace{\sum_{n=1}^{\tau_k} \sum_{j \in \mathcal{X}} 1_{\{X_n=j\}}}_{=1} \right) = \mathbb{E}_k(\tau_k) = \mu_k < \infty . \quad (2.4.11)$$

Par conséquent, la mesure  $\pi$  définie par  $\pi_j = \gamma_j^{(k)} / \mu_k$  est une mesure de probabilité invariante, c'est-à-dire une distribution stationnaire.

1  $\Rightarrow$  3 : Soit  $\pi$  une distribution stationnaire, et  $k \in \mathcal{X}$ . Alors  $\hat{\gamma}$  défini par  $\hat{\gamma}_j = \pi_j / \pi_k$  est une mesure invariante telle que  $\hat{\gamma}_k = 1$ . Par la proposition précédente, on a nécessairement  $\hat{\gamma} = \gamma^{(k)}$ . Il suit par le même calcul que ci-dessus

$$\mathbb{E}_k(\tau_k) = \sum_{j \in \mathcal{X}} \hat{\gamma}_j = \frac{\sum_j \pi_j}{\pi_k} = \frac{1}{\pi_k} < \infty . \quad (2.4.12)$$

3  $\Rightarrow$  2 : Evident.

Dans ce cas, l'unicité de la mesure suit de celle de  $\gamma^{(k)}$ , et la relation (2.4.10) suit de (2.4.12).  $\square$

Ce résultat motive la définition suivante.

**Définition 2.4.4.** *Un état  $i \in \mathcal{X}$  tel que*

$$\mathbb{E}_i(\tau_i) < \infty \quad (2.4.13)$$

*est appelé récurrent positif. Un état récurrent  $i$  qui n'est pas récurrent positif est appelé récurrent nul. La chaîne est dite récurrente positive si tous ses états le sont. C'est par exemple le cas s'il existe un tel état, et que la chaîne est irréductible.*

Une chaîne irréductible admet donc une distribution stationnaire si et seulement si elle est récurrente positive.

**Exemple 2.4.5.** Les marches aléatoires sur  $\mathbb{Z}^d$  n'admettent pas de distribution stationnaire. En effet, si  $\pi$  était une distribution stationnaire, l'invariance par translation impliquerait que tout translaté de  $\pi$  serait encore une distribution stationnaire. Mais nous savons que si une telle distribution existait, alors elle serait unique.  $\pi$  devrait donc être uniforme, mais il n'existe pas de mesure de probabilité uniforme sur  $\mathbb{Z}^d$ .

Par contre, toutes les mesures uniformes sont invariantes. Les fonctions pas nécessairement positives satisfaisant (2.4.1) dans le cas d'une marche aléatoire symétrique sont appelées *harmoniques*. Toutes les fonctions affines sont harmoniques, mais en dimension supérieure ou égale à 2, il y en a beaucoup d'autres.

Nous avons donc obtenu le résultat suivant :

**Théorème 2.4.6.** *La marche aléatoire symétrique est récurrente nulle en dimensions  $d = 1$  et  $d = 2$ .*



## 2.5 Convergence vers la distribution stationnaire

Dans le cas fini, nous avons montré que si la chaîne était régulière, alors la loi de  $X_n$  convergerait vers la distribution stationnaire. Dans le cas d'un espace infini, une chaîne de Markov ne peut jamais être régulière : les probabilités de transition étant sommables, elles ne peuvent être minorées par une quantité strictement positive. Il s'avère toutefois que la récurrence positive et l'apériodicité suffisent à garantir la convergence vers la distribution stationnaire.

**Théorème 2.5.1.** *Soit  $\{X_n\}_{n \geq 0}$  une chaîne de Markov irréductible, apériodique et récurrente positive, et soit  $\pi$  son unique distribution stationnaire. Alors pour toute distribution initiale  $\nu$ , on a*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}_\nu \{X_n = j\} = \pi_j \quad \forall j \in \mathcal{X}. \quad (2.5.1)$$

DÉMONSTRATION. Nous allons généraliser la preuve de Doeblin, déjà vue dans le cas fini (voir le Théorème 1.4.8).

- Nous introduisons une chaîne de Markov  $(X_n, Y_n)_{n \geq 0}$  sur  $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$ , de probabilités de transition

$$P_{(i,j),(k,l)}^* = P_{ik}P_{jl}, \quad (2.5.2)$$

et de distribution initiale  $\rho = \nu \otimes \pi$ . Dans ce cas,  $X_n$  et  $Y_n$  sont deux chaînes indépendantes de matrice de transition  $P$ , et de distributions initiales  $\nu$  et  $\pi$ .

- Le seul point non trivial de la généralisation est de montrer que  $P^*$  est irréductible et apériodique. Pour cela, fixons un état  $k \in \mathcal{X}$ . Considérons d'abord l'ensemble

$$\Gamma_k = \{n \in \mathbb{N} : \mathbb{P}_k \{X_n = k\} > 0\}. \quad (2.5.3)$$

La propriété de Markov implique que si  $n, m \in \Gamma_k$ , alors  $n + m \in \Gamma_k$ . D'autre part, par définition de l'apériodicité,  $\text{pgcd } \Gamma_k = 1$ . Nous prétendons qu'il existe un  $n_0$  tel que tout  $t \geq n_0$  appartienne à  $\Gamma_k$ .

Pour cela, supposons d'abord qu'il existe  $n, m \in \Gamma_k$  premiers entre eux. Par le théorème de Bezout, il existe des entiers  $p, q \geq 1$  tels que  $pn - qm = \pm 1$ . Quitte à intervertir  $n$  et  $m$ , on peut supposer que  $pn - qm = 1$ . Soit  $n_0 = qnm$ . Alors pour  $1 \leq r \leq n$ , on a  $n_0 + r = qnm + r(pn - qm) = qm(n - r) + rpn \in \Gamma_k$ . Il suffit alors d'écrire tout  $t > n_0$  comme  $t = n_0 + r + ns$  avec  $1 \leq r \leq n$  pour conclure que  $t \in \Gamma_k$ .

Il se pourrait que  $\text{pgcd } \Gamma_k = 1$  sans que cet ensemble ne contienne deux entiers premiers entre eux. Mais par le théorème de Bezout, il existe forcément un ensemble d'éléments de  $\Gamma_k$  dont une combinaison linéaire vaut 1, et le raisonnement ci-dessus s'adapte facilement à ce cas.

- Fixons des états  $i, j, k, \ell \in \mathcal{X}$ .  $P$  étant supposée irréductible, il existe  $r \in \mathbb{N}$  tel que  $\mathbb{P}_i \{X_r = k\} > 0$ . Comme pour tout  $n \geq n_0$ ,

$$\mathbb{P}_i \{X_{r+n} = k\} \geq \mathbb{P}_i \{X_r = k\} \mathbb{P}_k \{X_n = k\} > 0, \quad (2.5.4)$$

il suit que  $\mathbb{P}_i \{X_n = k\} > 0$  pour tous les  $n \geq n_0 + r$ . Pour des raisons similaires, il existe  $m_0, s \in \mathbb{N}$  tels que  $\mathbb{P}_j \{X_m = \ell\} > 0$  pour tous les  $m \geq m_0 + s$ . Par conséquent, il existe un temps  $M$  tel que  $\mathbb{P}_{(i,j)}^* \{(X_t, Y_t) = (k, \ell)\} > 0$  pour tous les  $t \geq M$ . Ceci implique que la chaîne composée est irréductible et apériodique.

- Comme la chaîne composée admet manifestement la distribution invariante  $\pi \otimes \pi$ , le Théorème 2.4.3 implique qu'elle est récurrente positive.

- Le reste de la preuve est identique au cas fini. On introduit le temps  $\tau_A$  de premier passage sur la diagonale  $A = \{(i, i) : i \in \mathcal{X}\}$ , et on montre comme dans le cas fini que

$$|\mathbb{P}_\nu\{X_n = j\} - \pi_j| \leq 2\mathbb{P}_\rho\{\tau_A > n\}. \quad (2.5.5)$$

La Proposition 2.3.7 implique que  $\tau_A$  est fini presque sûrement, et donc que la différence ci-dessus tend vers zéro pour  $n \rightarrow \infty$ .  $\square$

Un problème important, mais en général difficile, est d'estimer la vitesse de convergence vers la distribution stationnaire. La preuve de Doeblin fournit (voir le cas fini) l'estimation

$$\sum_{j \in \mathcal{X}} |\mathbb{P}_\nu\{X_n = j\} - \pi_j| \leq 2\mathbb{P}_{\nu \otimes \pi}\{\tau_A > n\}, \quad (2.5.6)$$

qui est utile dans les cas où on arrive à contrôler le temps de couplage  $\tau_A$ .

Une autre approche est basée sur la théorie spectrale. Nous avons vu que la matrice de transition  $P$  admet la valeur propre 1, avec comme vecteurs propres à gauche et à droite, respectivement, la distribution stationnaire  $\pi$  et le vecteur  $\mathbf{1}$  dont toutes les composantes sont égales à 1 :

$$\pi P = \pi \quad \text{et} \quad P \mathbf{1} = \mathbf{1}. \quad (2.5.7)$$

Soit  $\mu$  un vecteur ligne tel que

$$\mu \mathbf{1} = \sum_{i \in \mathcal{X}} \mu_i = 0. \quad (2.5.8)$$

Alors  $\mu P \mathbf{1} = \mu \mathbf{1} = 0$ , ce qui montre que le sous-espace  $\mathbf{1}_\perp = \{\mu \in \mathbb{R}^{\mathcal{X}} : \sum_i \mu_i = 0\}$  est invariant (à droite) par  $P : \mathbf{1}_\perp P \subset \mathbf{1}_\perp$ . On remarquera que les éléments de  $\mathbf{1}_\perp$  ne sont pas des mesures, mais des mesures signées. Toutefois, pour certains  $\mu \in \mathbf{1}_\perp$ , la somme  $\pi + \mu$  est une mesure de probabilité : il suffit pour cela que  $\mu_i \geq -\pi_i$  pour tout  $i \in \mathcal{X}$ .

Si  $\mu \in \mathbf{1}_\perp$  est un vecteur propre à gauche de  $P$ , de valeur propre  $\lambda$ , et si  $P$  est irréductible, apériodique et récurrente positive, alors on aura nécessairement  $|\lambda| < 1$ . En effet, si ce n'était pas le cas, la loi de la chaîne de condition initiale  $\pi + \varepsilon\mu$  ( $\varepsilon$  un réel suffisamment petit) ne convergerait pas vers  $\pi$ .

Cette observation donne une caractérisation de la vitesse de convergence en termes de *trou spectral* : Soit  $\lambda_0$  la plus grande valeur propre de  $P$  de module strictement inférieur à 1. On sait que le vecteur propre correspondant se trouve dans  $\mathbf{1}_\perp$  (éventuellement avec des composantes complexes). Alors la loi de  $X_n$  converge exponentiellement vite vers la distribution stationnaire  $\pi$ , à vitesse  $|\lambda_0|^n$ . Toutefois, la détermination du trou spectral est en général un problème difficile si l'ensemble  $\mathcal{X}$  est grand. Le problème est un peu plus facile dans le cas des chaînes de Markov dites *réversibles*.

## 2.6 Chaînes de Markov réversibles

**Définition 2.6.1.** Soit  $P$  une matrice stochastique. Un vecteur  $\alpha = \{\alpha_i\}_{i \in \mathcal{X}} \in [0, \infty)^{\mathcal{X}}$ ,  $\alpha \neq 0$ , est dit réversible par rapport à  $P$  si

$$\alpha_i p_{ij} = \alpha_j p_{ji} \quad \forall i, j \in \mathcal{X}. \quad (2.6.1)$$

Une chaîne de Markov est dite réversible si sa matrice admet un vecteur réversible.

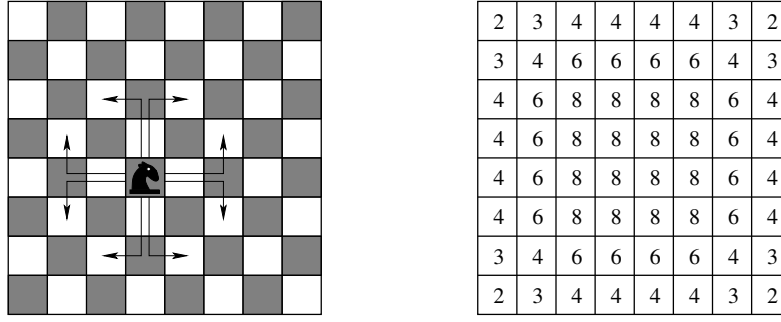


FIGURE 2.5. Mouvements permis du cavalier sur l'échiquier. Nombre de mouvements possibles à partir de chaque case.

La condition (2.6.1) est appelée *condition d'équilibre détaillé* en physique. Elle signifie que si les états  $i$  et  $j$  sont occupés avec probabilités proportionnelles à  $\alpha_i$  et  $\alpha_j$  respectivement, alors les taux de transition de  $i$  à  $j$  et de  $j$  à  $i$  sont égaux.

**Théorème 2.6.2.** Soit  $P$  une matrice stochastique et  $\alpha \in [0, \infty)^{\mathcal{X}}$  un vecteur non nul.

1. Si  $\alpha$  est réversible par rapport à  $P$ , alors  $\alpha$  est une mesure invariante.
2. Si  $\alpha$  est réversible par rapport à  $P$ , et  $\sum_{j \in \mathcal{X}} \alpha_j < \infty$ , alors la mesure  $\pi$  définie par  $\pi_i = \alpha_i / \sum_{j \in \mathcal{X}} \alpha_j$  est une distribution stationnaire.
3. Si  $\pi$  est une distribution stationnaire, alors

$$\mathbb{P}_\pi\{X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n\} = \mathbb{P}_\pi\{X_0 = i_n, X_1 = i_{n-1}, \dots, X_n = i_0\} \quad (2.6.2)$$

pour tout  $n \in \mathbb{N}$  et tout choix de  $i_0, \dots, i_n \in \mathcal{X}$ .

DÉMONSTRATION.

1. On a

$$\sum_{i \in \mathcal{X}} \alpha_i p_{ij} = \alpha_j \sum_{i \in \mathcal{X}} p_{ji} = \alpha_j. \quad (2.6.3)$$

2. Suit immédiatement de 1.
3. Par le Théorème 1.2.5,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_\pi\{X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n\} &= \pi_{i_0} p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{n-1} i_n} \\ &= p_{i_1 i_0} \pi_{i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{n-1} i_n} \\ &= \cdots = p_{i_1 i_0} p_{i_2 i_1} \cdots p_{i_n i_{n-1}} \pi_{i_n}, \end{aligned} \quad (2.6.4)$$

qui est égal à  $\mathbb{P}_\pi\{X_0 = i_n, X_1 = i_{n-1}, \dots, X_n = i_0\}$ .  $\square$

La relation (2.6.2) signifie qu'une trajectoire a la même probabilité que la trajectoire renversée dans le temps. C'est ce qui justifie le terme de réversibilité.

**Exemple 2.6.3** (Marche aléatoire du cavalier). On suppose qu'un cavalier se déplace sur un échiquier, en choisissant à chaque unité de temps, de manière équiprobable, l'un des mouvements autorisés par les règles des Echecs. Combien de temps se passe-t-il en moyenne entre deux passages du cavalier au coin inférieur gauche de l'échiquier?

Soit  $n_i$  le nombre de mouvements possibles à partir de la case  $i$  (Figure 2.5). La trajectoire du cavalier est donc décrite par une chaîne de Markov de probabilités de transition

$$p_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{n_i} & \text{si le mouvement } i \mapsto j \text{ est permis,} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.6.5)$$

On vérifie alors facilement que  $n = \{n_i\}_{i \in \mathcal{X}}$  est un vecteur réversible de la chaîne. Par conséquent,

$$\pi_i = \frac{n_i}{\sum_{j \in \mathcal{X}} n_j} = \frac{n_i}{336} \quad (2.6.6)$$

est la distribution stationnaire de la chaîne. Il suit alors du Théorème 2.4.3 que le temps de récurrence moyen vers le coin inférieur gauche est donné par  $1/\pi_{(1,1)} = 336/2 = 168$ .

**Exemple 2.6.4** (Modèle d'Ehrenfest). Nous sommes maintenant en mesure d'expliquer pourquoi la distribution invariante du modèle d'Ehrenfest est binomiale (cf. Exemples 1.1.3 et 1.4.11). Pour cela, au lieu de considérer le modèle comme une chaîne de Markov sur l'ensemble  $\{0, \dots, N\}$ , nous le considérons comme une chaîne sur  $\mathcal{X} = \{0, 1\}^N$  (qu'on peut considérer comme un hypercube de dimension  $N$ ). La composante  $x_i$  de l'état  $x = (x_1, \dots, x_N) \in \mathcal{X}$  vaut 0 si la  $i^{\text{ème}}$  boule est dans l'urne de gauche, et 1 si elle est dans l'urne de droite.

Depuis chaque état  $x \in \mathcal{X}$ , on peut atteindre exactement  $N$  autres états, obtenus en changeant exactement une composante de  $x$ , chaque fois avec probabilité  $1/N$ . Par conséquent, tout vecteur constant est réversible, et la distribution stationnaire est uniforme:  $\pi_x = 2^{-N} \forall x \in \mathcal{X}$ . Toutefois, il peut y avoir beaucoup d'états de  $\mathcal{X}$  correspondant à un nombre donné de boules dans une urne. En fait,

$$\mathbb{P}_\pi\{m \text{ boules dans l'urne de droite}\} = \sum_{x: \sum x_i = m} \pi_x = \binom{N}{m} \frac{1}{2^N}. \quad (2.6.7)$$

On retrouve le fait que la distribution stationnaire du modèle d'Ehrenfest est binomiale.

Les chaînes de Markov réversibles se prêtent mieux à une étude spectrale que les chaînes non réversibles. Pour le voir, supposons la chaîne irréductible et récurrente positive, de distribution stationnaire  $\pi$ , et introduisons le produit scalaire

$$\langle f | g \rangle_\pi = \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i \bar{f}_i g_i. \quad (2.6.8)$$

Alors on a

$$\langle f | Pg \rangle_\pi = \sum_{i \in \mathcal{X}} \pi_i \bar{f}_i \sum_{j \in \mathcal{X}} p_{ij} g_j = \sum_{j \in \mathcal{X}} \pi_j \sum_{i \in \mathcal{X}} p_{ji} \bar{f}_i g_j = \langle Pf | g \rangle_\pi. \quad (2.6.9)$$

Autrement dit, l'opérateur linéaire  $P$  est autoadjoint dans  $\ell^2(\mathbb{C}, \pi)$ .

Un résultat classique de la théorie des espaces de Hilbert dit que toutes les valeurs propres de  $P$  sont réelles, et que les espaces propres associés sont orthogonaux. En effet, soient  $x_1$  et  $x_2$  deux vecteurs propres à droite de  $P$ , de valeurs propres respectives  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$ . Alors

$$(\bar{\lambda}_1 - \lambda_2) \langle x_1 | x_2 \rangle_\pi = \langle \lambda_1 x_1 | x_2 \rangle_\pi - \langle x_1 | \lambda_2 x_2 \rangle_\pi = \langle P x_1 | x_2 \rangle_\pi - \langle x_1 | P x_2 \rangle_\pi = 0. \quad (2.6.10)$$

D'une part, prenant  $x_1 = x_2$ , on obtient que  $\lambda_1$  est réelle. D'autre part, si  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ , on obtient l'orthogonalité de  $x_1$  et  $x_2$ . On sait de plus que  $P$  est diagonalisable.

On a alors une représentation variationnelle du trou spectral :

$$|\lambda_0| = \sup_{x: \langle x | \mathbf{1} \rangle_\pi = 0} \frac{\langle x | P x \rangle_\pi}{\langle x | x \rangle_\pi}. \quad (2.6.11)$$

## Chapitre 3

# Application aux algorithmes MCMC

### 3.1 Méthodes Monte Carlo

On appelle *méthodes Monte Carlo* un ensemble d'algorithmes stochastiques permettant d'estimer numériquement des grandeurs pouvant être considérées comme des espérances. En voici pour commencer un exemple très simple.

**Exemple 3.1.1** (Calcul d'un volume). On aimerait calculer numériquement le volume  $|V|$  d'un sous-ensemble compact  $V$  de  $\mathbb{R}^N$ . On suppose que  $V$  est donné par un certain nombre  $M$  d'inégalités:

$$V = \{x \in \mathbb{R}^N : f_1(x) \geq 0, \dots, f_M(x) \geq 0\}. \quad (3.1.1)$$

Par exemple, si  $M = 1$  et  $f_1(x) = 1 - \|x\|^2$ , alors  $V$  est une boule. Dans ce cas, bien sûr, le volume de  $V$  est connu explicitement. On s'intéresse à des cas où  $V$  a une forme plus compliquée, par exemple une intersection d'un grand nombre de boules et de demi-plans. Dans la suite nous supposerons, sans limiter la généralité, que  $V$  est contenu dans le cube unité  $[0, 1]^N$ .

Une première méthode de calcul numérique du volume consiste à discrétiser l'espace. Divisons le cube  $[0, 1]^N$  en cubes de côté  $\varepsilon$  (avec  $\varepsilon$  de la forme  $1/K$ ,  $K \in \mathbb{N}$ ). Le nombre total de ces cubes est égal à  $1/\varepsilon^N = K^N$ . On compte alors le nombre  $n$  de cubes dont le centre est contenu dans  $V$ , et le volume de  $V$  est approximativement égal à  $n\varepsilon^N$ . Plus précisément, on peut encadrer  $|V|$  par  $n_-\varepsilon^N$  et  $n_+\varepsilon^N$ , où  $n_-$  est le nombre de cubes entièrement contenus dans  $V$ , et  $n_+$  est le nombre de cubes dont l'intersection avec  $V$  est vide, mais effectuer ces tests n'est en général pas aisé numériquement.

Quelle est la précision de l'algorithme? Si le bord  $\partial V$  est raisonnablement lisse, l'erreur faite pour  $\varepsilon$  petit est de l'ordre de la surface du bord fois  $\varepsilon$ . Pour calculer  $|V|$  avec une précision donnée  $\delta$ , il faut donc choisir  $\varepsilon$  d'ordre  $\delta/|\partial V|$ . Cela revient à un nombre de cubes d'ordre

$$\left(\frac{|\partial V|}{\delta}\right)^N, \quad (3.1.2)$$

ou encore, comme on effectue  $M$  tests pour chaque cube, à un nombre de calculs d'ordre  $(M|\partial V|/\delta)^N$ . Ce nombre ne pose pas de problème pour les petites dimensions ( $N = 1, 2$  ou 3 par exemple), mais croît vite avec la dimension  $N$ .

Une alternative intéressante pour les  $N$  grands est fournie par l'algorithme de Monte Carlo. Dans ce cas, on génère une suite  $X_1, X_2, \dots, X_n, \dots$  de variables aléatoires indépendantes, identiquement distribuées (i.i.d.), de loi uniforme sur  $[0, 1]^N$ . Ceci est facile à réaliser numériquement, car on dispose de générateurs de nombres (pseudo-)aléatoires distribués uniformément sur  $[0, 1]$  (ou plutôt sur  $\{0, 1, \dots, n_{\max}\}$  où  $n_{\max}$  est un entier du genre  $2^{31} - 1$ , mais en divisant ces nombres par  $n_{\max}$ , on obtient de bonnes approximations de variables uniformes sur  $[0, 1]$ ). Il suffit alors de considérer des  $N$ -uplets de tels nombres.

Considérons alors les variables aléatoires i.i.d.

$$Y_i = 1_{\{X_i \in V\}}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (3.1.3)$$

On aura

$$\mathbb{E}(Y_i) = \mathbb{P}\{X_i \in V\} = |V|. \quad (3.1.4)$$

Les moyennes

$$S_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \quad (3.1.5)$$

ont espérance  $\mathbb{E}(S_n) = |V|$  et variance  $\text{Var } S_n = \text{Var } Y_1/n$ . La loi faible des grands nombres implique que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}\{|S_n - \mathbb{E}(S_n)| > \delta\} = 0 \quad (3.1.6)$$

pour tout  $\delta > 0$ . Par conséquent,  $S_n$  devrait donner une bonne approximation du volume  $|V|$  lorsque  $n$  est suffisamment grand. (La loi forte des grands nombres affirme par ailleurs que  $S_n$  tend vers  $|V|$  presque sûrement, c'est-à-dire que  $S_n$  n'est plus vraiment aléatoire à la limite.)

Pour savoir comment choisir  $n$  en fonction de la précision désirée, il nous faut estimer la probabilité que  $|S_n - |V|| > \delta$ , pour  $n$  grand mais fini. Une première estimation est fournie par l'inégalité de Bienaymé–Chebychev, qui affirme que

$$\mathbb{P}\{|S_n - \mathbb{E}(S_n)| > \delta\} \leq \frac{\text{Var}(S_n)}{\delta^2} = \frac{\text{Var}(Y_1)}{\delta^2 n} < \frac{1}{\delta^2 n}, \quad (3.1.7)$$

où nous avons utilisé le fait que  $\text{Var}(Y_1) \leq \mathbb{E}(Y_1^2) \leq 1$ . On peut donc affirmer que pour que la probabilité de faire une erreur supérieure à  $\delta$  soit inférieure à  $\varepsilon$ , il suffit de choisir

$$n > \frac{1}{\delta^2 \varepsilon}. \quad (3.1.8)$$

Comme pour chaque  $i$ , il faut générer  $N$  variables aléatoires, et effectuer  $M$  tests, le nombre de calculs nécessaires est d'ordre  $MN/(\delta^2 \varepsilon)$ . L'avantage de cette méthode est que ce nombre ne croît que linéairement avec  $N$ , par opposition à la croissance exponentielle dans le cas de la discrétisation. On notera toutefois que contrairement à la discrétisation, qui donne un résultat certain aux erreurs près, la méthode de Monte Carlo ne fournit que des résultats vrais avec très grande probabilité (d'où son nom).

Remarquons que l'estimation (3.1.7) est assez pessimiste, et peut être considérablement améliorée. Par exemple, le théorème de la limite centrale montre que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}\left\{\frac{(S_n - \mathbb{E}(S_n))^2}{\text{Var}(S_n)} > \eta^2\right\} = \int_{|x| > \eta} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dx, \quad (3.1.9)$$

dont le membre de droite décroît comme  $e^{-\eta^2/2}$  pour  $\eta$  grand. Cela indique que pour  $n$  grand,

$$\mathbb{P}\{|S_n - |V|| > \delta\} \simeq e^{-n\delta^2/2 \text{Var}(Y_1)} . \quad (3.1.10)$$

Ceci permet d'améliorer le critère (3.1.8) en

$$n > \text{const} \frac{\log(1/\varepsilon)}{\delta^2} , \quad (3.1.11)$$

d'où un nombre de calculs d'ordre  $NM \log(1/\varepsilon)/\delta^2$ . Cette estimation n'est pas une borne rigoureuse, contrairement à (3.1.8), parce qu'on n'a pas tenu compte de la vitesse de convergence dans (3.1.9), qui par ailleurs ne s'applique que pour  $\eta$  indépendant de  $\varepsilon$ . On devrait plutôt utiliser des estimations provenant de la théorie des grandes déviations, que nous n'aborderons pas ici. Les résultats sont toutefois qualitativement corrects.

A titre d'illustration, supposons qu'on veuille déterminer le volume d'un domaine de dimension  $N = 1000$ , défini par  $M = 10$  inégalités, avec une précision de  $\delta = 10^{-4}$ . La méthode de discrétisation nécessite un nombre de calculs d'ordre  $10^{5000}$ , ce qui est irréalisable avec les ordinateurs actuels. La méthode de Monte Carlo, par contre, fournit un résultat de la même précision, sûr avec probabilité  $1 - 10^{-6}$ , avec un nombre de calculs d'ordre  $\log(10^6) \cdot 10^{12} \simeq 10^{13}$ , ce qui ne prend que quelques minutes sur un PC.

La méthode de Monte Carlo se généralise facilement à d'autres problèmes que des calculs de volume. Supposons par exemple donné un espace probabilisé  $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ , et une variable aléatoire  $Y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ . On voudrait estimer l'espérance de  $Y$ . Pour cela, l'algorithme de Monte Carlo consiste à générer des variables aléatoires indépendantes  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n, \dots$ , toutes de loi  $\mu Y^{-1}$ , et de calculer leur moyenne. Cette moyenne doit converger vers l'espérance cherchée (pourvu que  $Y$  soit intégrable).

Cet algorithme n'est toutefois efficace que si l'on arrive à générer les variables aléatoires  $Y_i$  de manière efficace. Une fois de plus, ceci est relativement facile en dimension faible, mais devient rapidement difficile lorsque la dimension croît.

**Exemple 3.1.2** (Cas unidimensionnel). Une variable aléatoire unidimensionnelle  $Y$  s'obtient facilement à partir d'une variable de loi uniforme. Soit en effet  $U$  une variable uniforme sur  $[0, 1]$ . Sa fonction de répartition est donnée par

$$F_U(u) = \mathbb{P}\{U \leq u\} = u \quad \text{pour } 0 \leq u \leq 1. \quad (3.1.12)$$

On cherche une fonction  $\varphi$  telle que la variable  $Y = \varphi(U)$  admette la fonction de répartition prescrite  $F_Y(y)$ . Or on a

$$F_Y(y) = \mathbb{P}\{Y \leq y\} = \mathbb{P}\{\varphi(U) \leq y\} = \mathbb{P}\{U \leq \varphi^{-1}(y)\} = \varphi^{-1}(y) . \quad (3.1.13)$$

Il suffit donc de prendre  $Y = F_Y^{-1}(U)$ .

Par exemple, pour générer une variable de loi exponentielle, dont la fonction de répartition est donnée par  $F_Y(y) = 1 - e^{-\lambda y}$ , il suffit de prendre

$$Y = -\frac{1}{\lambda} \log(1 - U) . \quad (3.1.14)$$

Pour la loi normale, cette méthode nécessiterait le calcul approché de sa fonction de répartition, ce qui est numériquement peu efficace. Il existe toutefois une alternative permettant d'éviter ce calcul. Soient en effet  $U$  et  $V$  deux variables aléatoires indépendantes,

de loi uniforme sur  $[0, 1]$ . On introduit successivement les variables

$$\begin{aligned} R &= \sqrt{-2 \log(1 - U)}, & Y_1 &= R \cos \Phi, \\ \Phi &= 2\pi V, & Y_2 &= R \sin \Phi. \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

Alors  $Y_1$  et  $Y_2$  sont des variables aléatoires indépendantes, de loi normale centrée réduite. Pour le voir, on vérifie d'abord que  $R$  a la fonction de répartition  $1 - e^{-r^2/2}$ , donc la densité  $r e^{-r^2/2}$ . Le couple  $(R, \Phi)$  a donc la densité jointe  $r e^{-r^2/2} / (2\pi)$ , et la formule de changement de variable montre que le couple  $(Y_1, Y_2)$  a la densité jointe  $e^{-(y_1^2 + y_2^2)/2} / (2\pi)$ , qui est bien celle d'un couple de variables normales centrées réduites indépendantes.

Bien entendu, les espérances de variables aléatoires de loi unidimensionnelle sont soit connues explicitement, soit calculables numériquement par la simple estimation d'une intégrale. Nous nous intéressons ici à des situations où la loi de  $Y$  n'est pas aussi simple à représenter.

## 3.2 Algorithmes MCMC

Considérons le cas d'un espace probabilisé discret  $(\mathcal{X}, \mathcal{P}(\mathcal{X}), \mu)$ , où  $\mathcal{X}$  est un ensemble dénombrable, mais très grand. Par exemple, dans le cas du modèle d'Ising (cf. Exemple 1.1.5),  $\mathcal{X} = \{-1, 1\}^N$  est de cardinal  $2^N$ , et on s'intéresse à des  $N$  d'ordre 1000 au moins. La mesure de probabilité  $\mu$  est dans ce cas une application de  $\mathcal{X}$  vers  $[0, 1]$  telle que la somme des  $\mu(i)$  vaut 1.

On voudrait estimer l'espérance d'une variable aléatoire  $Y : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ , comme par exemple l'aimantation dans le cas du modèle d'Ising :

$$\mathbb{E}(Y) = \sum_{i \in \mathcal{X}} Y(i) \mu(i). \quad (3.2.1)$$

La méthode de Monte Carlo usuelle consiste alors à générer une suite de variables aléatoires  $X_0, X_1, \dots$  sur  $\mathcal{X}$ , indépendantes et de distribution  $\mu$ , puis de calculer la moyenne des  $Y(X_j)$ .

Pour générer ces  $X_j$ , on peut envisager de procéder comme suit : on définit un ordre total sur  $\mathcal{X}$ , et on détermine la fonction de répartition

$$F_\mu(j) = \sum_{k=1}^j \mu(k). \quad (3.2.2)$$

Si  $U$  est une variable de loi uniforme sur  $[0, 1]$ , alors  $F_\mu^{-1}(U)$  suit la loi  $\mu$ . Toutefois, en procédant de cette manière, on ne gagne rien, car le calcul des sommes (3.2.2) est aussi long que le calcul de la somme (3.2.1), que l'on voulait précisément éviter!

Les méthodes MCMC (pour *Monte Carlo Markov Chain*) évitent cet inconvénient. L'idée est de simuler *en même temps* la loi  $\mu$  et la variable aléatoire  $Y$ , à l'aide d'une chaîne de Markov sur  $\mathcal{X}$ , de distribution invariante  $\mu$ .

Soit donc  $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  une telle chaîne, supposée irréductible, et de distribution initiale  $\nu$  arbitraire. On lui associe une suite  $Y_n = Y(X_n)$  de variables aléatoires. Celles-ci peuvent se décomposer comme suit :

$$Y_n = \sum_{i \in \mathcal{X}} Y(i) 1_{\{X_n=i\}}. \quad (3.2.3)$$



Considérons les moyennes

$$S_n = \frac{1}{n} \sum_{m=0}^{n-1} Y_m . \quad (3.2.4)$$

Le Théorème 1.4.12 permet d'écrire

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}_\nu(S_n) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \mathbb{E}_\nu \left( \sum_{m=0}^{n-1} Y_m \right) \\ &= \sum_{i \in \mathcal{X}} Y(i) \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \mathbb{E}_\nu \left( \sum_{m=0}^{n-1} 1_{\{X_m=i\}} \right) \\ &= \sum_{i \in \mathcal{X}} Y(i) \mu(i) \\ &= \mathbb{E}(Y) . \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

L'espérance de  $S_n$  converge bien vers l'espérance cherchée. Pour pouvoir appliquer l'idée de la méthode Monte Carlo, il nous faut plus, à savoir la convergence (au moins) en probabilité de  $S_n$  vers  $\mathbb{E}(Y)$ . On ne peut pas invoquer directement la loi des grands nombres, ni le théorème de la limite centrale, car les  $Y_n$  ne sont plus indépendants. Mais il s'avère que des résultats analogues restent vrais dans le cas de chaînes de Markov.

**Théorème 3.2.1.** *Supposons la chaîne réversible, et de distribution initiale égale à sa distribution stationnaire. Soit  $\lambda_0$  la plus grande (en module) valeur propre différente de 1 de la matrice de transition de la chaîne. Alors*

$$\text{Var } S_n \leq \frac{1}{n} \left( \frac{1 + |\lambda_0|}{1 - |\lambda_0|} \right) \text{Var } Y . \quad (3.2.6)$$

DÉMONSTRATION. Comme la chaîne démarre dans la distribution stationnaire  $\mu$ , tous les  $Y_i$  ont même loi  $\mu Y^{-1}$ , même s'ils ne sont pas indépendants. Il suit que

$$\begin{aligned} \text{Var } S_n &= \frac{1}{n^2} \left[ \sum_{m=0}^{n-1} \text{Var } Y_m + 2 \sum_{0 \leq p < q < n} \text{cov}(Y_p, Y_q) \right] \\ &= \frac{1}{n} \text{Var } Y + \frac{2}{n^2} \sum_{m=1}^{n-1} (n-m) \text{cov}(Y_0, Y_m) , \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

en vertu de la propriété des incréments indépendants. Or si  $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)^T$  on a

$$\begin{aligned} \text{cov}(Y_0, Y_m) &= \mathbb{E}_\mu \left( (Y_0 - \mathbb{E}_\mu(Y_0))(Y_m - \mathbb{E}_\mu(Y_m)) \right) \\ &= \sum_{i \in \mathcal{X}} \sum_{j \in \mathcal{X}} (Y(i) - \mathbb{E}(Y))(Y(j) - \mathbb{E}(Y)) \underbrace{\mathbb{P}_\mu \{X_0 = i, X_m = j\}}_{=\mu(i)(P^m)_{ij}} \\ &= \sum_{i \in \mathcal{X}} \mu_i (Y(i) - \mathbb{E}(Y)) [P^m(Y - \mathbb{E}(Y)\mathbf{1})]_i \\ &= \langle Y - \mathbb{E}(Y)\mathbf{1} | P^m(Y - \mathbb{E}(Y)\mathbf{1}) \rangle_\mu \\ &\leq |\lambda_0|^m \langle Y - \mathbb{E}(Y)\mathbf{1} | Y - \mathbb{E}(Y)\mathbf{1} \rangle_\mu = |\lambda_0|^m \text{Var } Y . \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

Dans l'inégalité, nous avons utilisé le fait que  $Y - \mathbb{E}(Y)\mathbf{1} \in \mathbf{1}_\perp$  puisque la somme des  $\mu_i(Y(i) - \mathbb{E}(Y))$  est nulle, et que par conséquent ce vecteur se trouve dans le sous-espace complémentaire au vecteur propre  $\mathbf{1}$ . Le résultat suit alors en remplaçant dans (3.2.7), en majorant  $n - m$  par  $n$  et en sommant une série géométrique.  $\square$

Il suit de cette estimation et de l'inégalité de Bienaymé–Chebychev que pour calculer  $\mathbb{E}(Y)$  avec une précision  $\delta$  et avec probabilité  $1 - \varepsilon$ , il faut choisir

$$n \geq \frac{\text{Var } Y}{\delta^2 \varepsilon} \left( \frac{1 + |\lambda_0|}{1 - |\lambda_0|} \right). \quad (3.2.9)$$

En pratique, on ne peut pas faire démarrer la chaîne exactement avec la distribution invariante. Ceci conduit à une convergence un peu plus lente, mais du même ordre de grandeur puisque la loi des  $Y_n$  converge exponentiellement vite vers  $\mu Y^{-1}$ . Les résultats sont bien sûr meilleurs si on choisit bien la condition initiale, c'est-à-dire de manière à ce que la loi des  $Y_n$  converge rapidement.

### 3.3 L'algorithme de Metropolis

Nous avons vu comment estimer l'espérance d'une variable aléatoire  $Y$  à l'aide d'une chaîne de Markov de distribution invariante donnée par la loi de  $Y$ . Pour que cet algorithme soit efficace, il faut encore que l'on puisse trouver facilement, en fonction de cette loi, une matrice de transition donnant la distribution invariante souhaitée.

Une manière simple de résoudre ce problème est de chercher une chaîne de Markov réversible. Nous allons illustrer cette méthode dans le cas du modèle d'Ising, mais on voit facilement comment la généraliser à d'autres systèmes.

Dans le cas du modèle d'Ising (Exemple 1.1.5), l'univers est donné par  $\mathcal{X} = \{-1, 1\}^\Lambda$ , où  $\Lambda$  est un sous-ensemble (supposé ici fini) de  $\mathbb{Z}^d$ . La mesure de probabilité sur  $\mathcal{X}$  est définie par

$$\mu(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z_\beta}, \quad \text{où } Z_\beta = \sum_{\sigma \in \mathcal{X}} e^{-\beta H(\sigma)}. \quad (3.3.1)$$

Le paramètre  $\beta$  désigne la température inverse, et la fonction  $H : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ , associant à toute configuration son énergie, est donnée par

$$H(\sigma) = - \sum_{i,j \in \Lambda: \|i-j\|=1} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i, \quad (3.3.2)$$

où  $h$  est le champ magnétique. L'objectif est de calculer l'espérance de la variable aimantation, donnée par

$$m(\sigma) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i \quad (3.3.3)$$

(nous avons introduit un facteur  $1/|\Lambda|$  pour assurer que  $m$  prenne des valeurs entre  $-1$  et  $1$ ). Afin de satisfaire la condition de réversibilité, on cherche une matrice de transition  $P$  sur  $\mathcal{X}$  dont les éléments satisfont

$$\mu(\sigma) p_{\sigma\sigma'} = \mu(\sigma') p_{\sigma'\sigma} \quad (3.3.4)$$

pour toute paire  $(\sigma, \sigma') \in \mathcal{X} \times \mathcal{X}$ . Cela revient à imposer que

$$\frac{p_{\sigma\sigma'}}{p_{\sigma'\sigma}} = e^{-\beta \Delta H(\sigma, \sigma')}, \quad (3.3.5)$$

où  $\Delta H(\sigma, \sigma') = H(\sigma') - H(\sigma)$ . On notera que cette condition ne fait pas intervenir la constante de normalisation  $Z_\beta$ , ce qui est souhaitable, car le calcul de cette constante est aussi coûteux que celui de  $\mathbb{E}(m)$ .

L'algorithme de Métropolis consiste dans un premier temps à définir un ensemble de transitions permises, c'est-à-dire une relation symétrique  $\sim$  sur  $\mathcal{X}$  (on supposera toujours que  $\sigma \not\sim \sigma$ ). Les plus courantes sont

- la *dynamique de Glauber*, qui consiste à choisir  $\sigma \sim \sigma'$  si et seulement si les deux configurations  $\sigma$  et  $\sigma'$  diffèrent en exactement une composante; on parle de dynamique de renversement de spin;
- la *dynamique de Kawasaki*, qui consiste à choisir  $\sigma \sim \sigma'$  si et seulement si  $\sigma'$  est obtenue en intervertissant deux composantes de  $\sigma$ ; on parle de dynamique d'échange de spin. Dans ce cas, la chaîne n'est pas irréductible sur  $\mathcal{X}$ , car elle conserve le nombre total de spins  $+1$  et  $-1$  : elle est en fait irréductible sur chaque sous-ensemble de configurations à nombre fixé de spins de chaque signe.

Une fois la relation  $\sim$  fixée, on choisit des probabilités de transition telles que

$$p_{\sigma\sigma'} = \begin{cases} p_{\sigma'\sigma} e^{-\beta\Delta H(\sigma,\sigma')} & \text{si } \sigma \sim \sigma', \\ 1 - \sum_{\sigma'' \sim \sigma} p_{\sigma\sigma''} & \text{si } \sigma = \sigma', \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \quad (3.3.6)$$

Pour satisfaire la condition lorsque  $\sigma \sim \sigma'$ , une possibilité est de prendre

$$p_{\sigma\sigma'} = \begin{cases} q_{\sigma\sigma'} & \text{si } H(\sigma') \leq H(\sigma), \\ q_{\sigma\sigma'} e^{-\beta\Delta H(\sigma,\sigma')} & \text{si } H(\sigma') > H(\sigma), \end{cases} \quad (3.3.7)$$

où  $q_{\sigma\sigma'} = q_{\sigma'\sigma}$  et  $\sum_{\sigma' \sim \sigma} q_{\sigma\sigma'} = 1$ . On peut par exemple choisir les  $q_{\sigma\sigma'}$  constants, égaux à l'inverse du nombre de transitions permises. Cela revient à toujours effectuer la transition si elle décroît l'énergie, et de ne l'effectuer qu'avec probabilité  $e^{-\beta\Delta H(\sigma,\sigma')}$  si elle fait croître l'énergie. Une autre possibilité est de choisir

$$p_{\sigma\sigma'} = \frac{q_{\sigma\sigma'}}{1 + e^{\beta\Delta H(\sigma,\sigma')}}. \quad (3.3.8)$$

Remarquons que le calcul de la différence d'énergie  $\Delta H$  est particulièrement simple dans le cas de la dynamique de Glauber, car seuls le spin que l'on renverse et ses voisins entrent en compte. Ainsi, si  $\sigma^{(k)}$  dénote la configuration obtenue en renversant le spin numéro  $k$  de  $\sigma$ , on aura

$$\Delta H(\sigma, \sigma^{(k)}) = 2\sigma_k \left[ \sum_{j: \|j-k\|=1} \sigma_j + h \right], \quad (3.3.9)$$

qui est une somme de  $2d + 1$  termes pour un réseau  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ .

Concrètement, l'algorithme de Metropolis avec dynamique de Glauber s'implémente comme suit (avec  $N = |\Lambda|$ ) :

**1. Etape d'initialisation :**

- choisir une configuration initiale  $\sigma(0)$  (si possible telle que  $\delta_{\sigma(0)}$  soit proche de  $\mu$ );
- calculer  $m_0 = m(\sigma(0))$  (nécessite  $N$  calculs);
- calculer  $H(\sigma(0))$  (nécessite de l'ordre de  $dN$  calculs);
- poser  $S = m_0$ .

**2. Etape d'itération :** Pour  $n = 1, 2, \dots, n_{\max}$ ,

- choisir un spin  $k$  au hasard uniformément dans  $\Lambda$ ;

- calculer  $\Delta H(\sigma(n-1), \sigma')$ , où  $\sigma' = \sigma(n-1)^{(k)}$ ;
- si  $\Delta H(\sigma(n-1), \sigma') \leq 0$ , poser  $\sigma(n) = \sigma'$ ;
- si  $\Delta H(\sigma(n-1), \sigma') > 0$ , poser  $\sigma(n) = \sigma'$  avec probabilité  $q_{\sigma\sigma'} e^{-\beta\Delta H(\sigma(n-1), \sigma')}$ , sinon prendre  $\sigma(n+1) = \sigma(n)$ ;
- si on a renversé le spin  $k$ ,  $m_n = m_{n-1} + 2\sigma_k(n-1)/N$ , sinon  $m_n = m_{n-1}$ ;
- ajouter  $m_n$  à  $S$ .

Le quotient  $S/(n+1)$  converge alors vers  $\mathbb{E}(m)$ , avec une vitesse déterminée par (3.2.6). La seule quantité difficile à estimer est le trou spectral  $1 - |\lambda_0|$ . Il s'avère que ce trou est grand sauf pour les températures très basses ou proches de la température critique de la transition de phase. Dans ce dernier cas, il existe des algorithmes alternatifs, tels que l'algorithme dit de Swendsen–Wang, qui convergent beaucoup mieux.

### 3.4 Le recuit simulé

Pour terminer, nous allons illustrer l'idée de l'algorithme du recuit simulé dans le cas du problème du voyageur de commerce (Exemple 1.1.6). Rappelons que pour  $N$  villes, on se donne une fonction  $(i, j) \mapsto d(i, j)$  donnant la distance (ou le temps de voyage) entre les villes  $i$  et  $j$ . Le but est de trouver une permutation  $\sigma$  de  $\{1, 2, \dots, N\}$  qui minimise la longueur totale d'un circuit fermé,

$$H(\sigma) = \sum_{i=1}^{N-1} d(\sigma(i), \sigma(i+1)) + d(\sigma(N), \sigma(1)). \quad (3.4.1)$$

La difficulté est que l'ensemble  $\mathcal{S}_N$  des permutations possibles est de cardinal  $N!$  (en fait  $(N-1)!/2$  si l'on fixe la ville de départ et le sens de parcours), et croît donc encore plus vite qu'exponentiellement en  $N$ . Le tableau suivant donne quelques valeurs de temps de calcul, en supposant que la longueur d'un chemin se calcule en une microseconde.

$N$	Nombre de chemins	Temps de calcul
5	12	12 $\mu$ s
10	181440	0.18 s
15	$43.6 \cdot 10^6$	12 heures
20	$60 \cdot 10^{15}$	1928 ans
25	$310 \cdot 10^{21}$	9.8 milliards d'années

D'où l'idée d'explorer  $\mathcal{S}_N$  à l'aide d'une chaîne de Markov. On commence par se donner à nouveau une relation symétrique  $\sim$  sur  $\mathcal{S}_N$ , par exemple  $\sigma \sim \sigma'$  si les deux permutations diffèrent d'une transposition. Un simple algorithme de descente du gradient, consistant à choisir à chaque étape l'une des transitions permises au hasard, et à les accepter si elles décroissent  $H$ , ne donne pas de bons résultats, car la chaîne peut rester bloquée dans des minima locaux.

Si l'on choisit les probabilités de transition comme dans (3.3.7), on évite cet inconvénient. Toutefois, la chaîne ne converge alors pas vers le minimum de  $H$ , mais vers la mesure de Gibbs  $e^{-\beta H(\sigma)} / Z_\beta$ . Lorsque  $\beta$  tend vers  $+\infty$ , cette mesure converge effectivement vers une mesure concentrée sur le ou les minima globaux de  $H$ . Mais si l'on choisit d'entrée un  $\beta$  trop élevé (c'est-à-dire une température trop faible), la chaîne de Markov risque d'être piégée très longtemps au voisinage de minima locaux.

L'algorithme du recuit simulé consiste à choisir une chaîne de Markov inhomogène dans le temps. Cela veut dire qu'au lieu de choisir un  $\beta$  fixe dans (3.3.7), on prend un  $\beta_n$  dépendant du temps, typiquement  $\beta_n = \beta_0 K^n$  avec  $K > 1$ . Si  $K$  est suffisamment proche de 1, c'est-à-dire si l'on refroidit le système suffisamment lentement, la chaîne converge vers une bonne approximation du minimum global de  $H$  — c'est du moins ce que l'on observe numériquement dans beaucoup de cas.



# Bibliographie et sources d'inspiration

- E. Bolthausen, *Einführung in die Stochastik*, notes de cours, Université de Zurich (2007)
- C.M. Grinstead, J.L. Snell, *Introduction to Probability*, web book,  
<http://www.dartmouth.edu/~chance>
- J. Lacroix, *Chaînes de Markov et Processus de Poisson*, notes de cours, Université Pierre et Marie Curie (2002)