II.7 Chaînes de Markov

Une chaîne de Markov est une suite de variables aléatoires $(X_n, n \in \mathbb{N})$ qui permet de modéliser l'évolution dynamique d'un système aléatoire : X_n représente l'état du système à l'instant n. La propriété fondamentale des chaînes de Markov, dite propriété de Markov, est que son évolution future ne dépend du passé qu'au travers de sa valeur actuelle. Autrement dit, conditionnellement à X_n, $(X_0, \ldots, X_n)$ et $(X_{n+k}, k \in \mathbb{N})$ sont indépendants. Les applications des chaînes de Markov sont très nombreuses (réseaux, génétique des populations, mathématiques financières, gestion de stock, algorithmes stochastiques d'optimisation, simulation, ...).

Nous donnons au paragraphe II.7.1 la définition et des propriétés élémentaires des chaînes de Markov. Nous considérons les régimes stationnaires ou probabilité invariante des chaînes de Markov au paragraphe II.7.2. Nous caractérisons les propriétés des états d'une chaîne de Markov, et introduisons la notion de chaîne irréductible au paragraphe II.7.3. Intuitivement une chaîne de Markov irréductible partant d'un état donné peut visiter un autre état au bout d'un certain temps avec probabilité strictement positive. Nous présentons les théorèmes asymptotiques fondamentaux pour les chaînes de Markov irréductibles dans le paragraphe II.7.4. Leur démonstration est reportée au paragraphe II.7.5. Le résultat principal est que pour les chaînes de Markov, par exemple à valeurs dans un espace fini, irréductibles, la moyenne en temps $\displaystyle\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(X_k)$ converge p.s. vers la moyenne de f par rapport à l'unique probabilité invariante π : (π, f). Ce résultat est l'analogue de la loi forte des grands nombres. Nous donnons des exemples importants d'utilisation des chaînes de Markov au paragraphe II.7.6.

II.7.1 Définition et propriétés

Soit E un espace discret, i.e. E est un espace au plus dénombrable muni de la topologie discrète, où tous les éléments de E sont isolés, et donc de la tribu $\mathcal{E} = \mathcal{P}(E)$.

Définition II.7.1. *Une matrice $P = (P(x,y), x, y \in E)$ est dite matrice stochastique si ses coefficients sont positifs et la somme sur une ligne des coefficients est égale à 1 :*

$$P(x,y) \geq 0 \quad \textit{et} \quad \sum_{z \in E} P(x,z) = 1, \quad \textit{pour tous } x, y \in E. \tag{II.32}$$

On renvoie au paragraphe I.6.2 pour la définition et les propriétés de l'espérance conditionnelle.

Définition II.7.2. *Soit P une matrice stochastique sur E. Une suite de variables aléatoires $(X_n, n \in \mathbb{N})$ à valeurs dans E est appelée chaîne de Markov de matrice de transition P si pour tous $n \in \mathbb{N}$, $x \in E$, on a :*

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_n, \ldots, X_0) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_n) = P(X_n, x). \tag{II.33}$$

On dit que la chaîne de Markov est issue de μ_0 si la loi de X_0 est μ_0.

Comme l'espace d'état est discret l'équation (II.33) est équivalente à : pour tous $x_0, \ldots, x_n \in E$, tels que $\mathbb{P}(X_n = x_n, \ldots, X_0 = x_0) > 0$:

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_n = x_n, \ldots, X_0 = x_0) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_n = x_n) = P(x_n, x).$$

Si $\mathbb{P}(X_0 = x) = 1$, autrement dit μ_0 est la masse de Dirac en x, on dira plus simplement que la chaîne de Markov est issue de x.

La proposition suivante assure que la matrice de transition et la loi initiale caractérisent la loi de la chaîne de Markov.

Proposition II.7.3. *La loi d'une chaîne de Markov $(X_n, n \in \mathbb{N})$ est entièrement caractérisée par sa matrice de transition, P, et la loi μ_0 de X_0. De plus, on a, pour tous $n \in \mathbb{N}^*$, $x_0, \ldots, x_n \in E$:*

$$\mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_n = x_n) = \mu_0(x_0) \prod_{k=1}^{n} P(x_{k-1}, x_k). \tag{II.34}$$

Démonstration. Soient $n \in \mathbb{N}^*$, $x_0, \ldots, x_n \in E$. Si $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_{n-1} = x_{n-1}) > 0$, une utilisation successive de la formule des probabilités conditionnelles donne :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_n = x_n) \\
&\qquad = \mathbb{P}(X_0 = x_0)\mathbb{P}(X_1 = x_1 | X_0 = x_0) \cdots \mathbb{P}(X_n = x_n | X_0 = x_0, \ldots, X_{n-1} = x_{n-1}) \\
&\qquad = \mu_0(x_0) \prod_{k=1}^{n} P(x_{k-1}, x_k).
\end{aligned}$$

Si $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_{n-1} = x_{n-1}) = 0$, soit $\mathbb{P}(X_0 = x_0) = 0$ i.e. $\mu_0(x_0) = 0$ et donc (II.34) reste vrai ; soit il existe $m \in \{1, \ldots, n-1\}$ tel que $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_{m-1} = x_{m-1}) > 0$ et $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_m = x_m) = 0$. Dans ce dernier cas, on peut utiliser (II.34) avec $n = m$ et obtenir que :

$$0 = \mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_m = x_m) = \mu_0(x_0) \prod_{k=1}^{m} P(x_{k-1}, x_k).$$

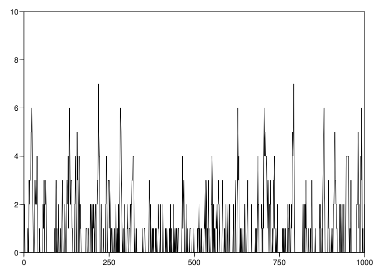
On en déduit que (II.34) reste vrai avec les deux membres nuls. En conclusion (II.34) est toujours vérifié.

L'espace produit $E^{\mathbb{N}}$ est l'espace d'état de la chaîne de Markov. Il est muni de la tribu produit. En particulier comme la tribu sur E est engendrée par les singletons, la tribu produit sur $\mathbb{E}^{\mathbb{N}}$ est, grâce à la définition I.1.5, engendrée par la collection $\mathcal{C} = \{(x_0, \ldots, x_n); n \in \mathbb{N}, x_0, \ldots, x_n \in E\}$. Le théorème de classe monotone et plus particulièrement le corollaire I.1.18 assurent que deux probabilités qui coïncident sur $\mathcal{C}$ sont égales. On déduit donc de (II.34) que la loi de la chaîne de Markov $(X_n, n \in \mathbb{N})$ est caractérisée par P et μ_0. $\square$

Remarquons qu'une suite de variables aléatoires à valeurs dans E, indépendantes et de même loi est une chaîne de Markov dont toutes les lignes de sa matrice de transition sont égales. Nous donnons deux autres exemples de chaînes de Markov.

Exemple II.7.4. La marche aléatoire symétrique simple sur $\mathbb{Z}$, $S = (S_n, n \geq 0)$, est définie par $S_n = S_0 + \sum_{k=1}^{n} Z_k$, où $Z = (Z_n, n \geq 1)$ est une suite de variables aléatoires indépendantes et de même loi, $\mathbb{P}(Z_n = 1) = \mathbb{P}(Z_n = -1) = 1/2$, et S_0 est une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{Z}$ indépendante de Z. On vérifie facilement que la marche aléatoire simple est une chaîne de Markov à valeurs dans $\mathbb{Z}$ de matrice de transition : $P(x, y) = 0$ si $|x - y| \neq 1$ et $P(x, y) = 1/2$ si $|x - y| = 1$ pour $x, y \in \mathbb{Z}$. $\lozenge$

Exemple II.7.5. On note X_n l'état d'un stock de pièces détachées à l'instant n, D_{n+1} la demande (aléatoire) formulée par des clients, et $q \in \mathbb{N}^*$ la quantité (déterministe) de pièces détachées fabriquées entre les instants n et $n + 1$. Alors à l'instant $n + 1$, l'état du stock est $X_{n+1} = (X_n + q - D_{n+1})^+$, où x^+ désigne la partie positive de $x \in \mathbb{R}$. Si la demande $D = (D_n, n \in \mathbb{N}^*)$ est constituée de variables aléatoires à valeurs dans $\mathbb{N}$ indépendantes et de même loi, et si X_0 est une variable aléatoire indépendante de D à valeurs dans $\mathbb{N}$, alors $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ est une chaîne de Markov à valeurs dans $\mathbb{N}$ de matrice de transition : $P(x, y) = \mathbb{P}(D = k)$ si $y = x + q - k > 0$, et $P(x, 0) = \mathbb{P}(D \geq x + q)$. On donne quelques simulations de la chaîne de Markov X pour différentes lois de D_1 dans le graphique II.15. $\lozenge$



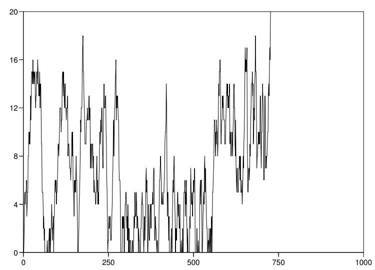


FIGURE II.15 – Plusieurs réalisations de l'évolution aléatoire d'un stock de dynamique $X_{n+1} = (X_n + q - D_{n+1})^+$, avec $X_0 = 0$, $q = 3$ et où les variables aléatoires $(D_n, n \in \mathbb{N}^*)$ sont indépendantes de loi de Poisson de paramètre θ ($\theta = 4$ à gauche et $\theta = 3$ à droite).

Les deux exemples précédents sont des cas particuliers du lemme suivant. Sa démonstration est immédiate.

Lemme II.7.6. *Soit $U = (U_n, n \in \mathbb{N}^*)$ une suite de variables aléatoires indépendantes et de même loi à valeurs dans un espace mesurable F. Soit X_0 une variable aléatoire à valeurs dans E indépendante de U et de loi μ_0. Soit f une fonction mesurable définie sur $E \times F$ à valeurs dans E. La suite $(X_n, n \in \mathbb{N})$ définie par $X_{n+1} = f(X_n, , U_{n+1})$ pour $n \in \mathbb{N}$ est une chaîne de Markov issue de μ_0 et de matrice de transition P définie par $P(x, y) = \mathbb{P}\Big(f(x, U_1) = y\Big)$ pour tous $x, y \in E$.*

Pour un choix judicieux de suite U et de fonction f dans le lemme précédent, il est aisé de vérifier que pour toute matrice stochastique P sur E et toute probabilité μ_0 sur E, on peut construire une chaîne de Markov issue de μ_0 et de matrice de transition P.

Il est facile de calculer des espérances ou des lois conditionnelles pour une chaîne de Markov à l'aide des puissances de sa matrice de transition. Nous introduisons d'abord quelques notations.

Soient P et Q deux matrices définies sur E. On note PQ la matrice définie sur E par $PQ(x, y) = \sum_{z \in E} P(x, z)Q(z, y)$. On pose P^0 la matrice identité et pour $k \geq 1$, $P^k = P^{k-1}P$ (on a aussi $P = PP^{k-1}$). Il est immédiat de vérifier que si P et Q sont des matrices stochastiques alors PQ est une matrice stochastique.

On identifie une probabilité μ sur E au vecteur $(\mu(x) = \mu(\{x\}), x \in E)$ de $\mathbb{R}^E$, et une fonction f définie sur E à valeurs dans $\mathbb{R}$ au vecteur $(f(x), x \in E)$. Pour une probabilité μ et une matrice stochastique P, on définit le vecteur μP par $\mu P(y) = \sum_{x \in E} \mu(x)P(x, y)$ pour tout $y \in E$. Il est évident de vérifier, en utilisant (II.32), que μP est également une probabilité. Pour une fonction f positive ou bornée et une matrice stochastique P, on définit la fonction Pf par $Pf(x) = \sum_{y \in E} P(x, y)f(y)$.

La proposition suivante permet d'exprimer des espérances et des lois conditionnelles pour une chaîne de Markov en fonction de sa matrice de transition.

Proposition II.7.7. *Soit $(X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov de matrice de transition P. On note μ_n la loi de X_n. Soit f une fonction bornée. On a pour $n \in \mathbb{N}^*$*

1. *$\mu_n = \mu_0 P^n$,*
2. *$\mathbb{E}[f(X_n)|X_0] = P^n f(X_0)$,*

3. $\mathbb{E}[f(X_n)|X_0, \dots X_{n-1}] = Pf(X_{n-1})$,
4. $\mathbb{E}[f(X_n)] = (\mu_n, f) = (\mu_0 P^n, f) = (\mu_0, P^n f)$.

On utilise les notations $\mathbb{P}_x$ et $\mathbb{E}_x$ quand X_0 est p.s. égale à x (i.e. la loi de X_0 est la masse de Dirac en x). Ainsi on a $\mathbb{P}_x(A) = \mathbb{P}(A|X_0 = x)$ et $\mathbb{E}_x[Z] = \mathbb{E}[Z|X_0 = x]$. Avec ces notations, on peut réécrire la propriété 2 de la proposition : $\mathbb{E}_x[f(X_n)] = P^n f(x)$ pour tout $x \in E$.

Démonstration. La propriété 1 découle de (II.34) en sommant sur $x_0, \dots, x_{n-1} \in E$. En sommant (II.34) sur $x_1, \dots, x_{n-1} \in E$, on obtient $\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_n = x_n) = \mu_0(x_0) P^n(x_0, x_n)$. En multipliant par $f(x_n)$ et en sommant sur $x_n \in E$, on obtient $\mathbb{E}[f(X_n)\mathbf{1}_{\{X_0=x_0\}}] = \mu_0(x_0) P^n f(x_0)$. La propriété 2 est une conséquence de la définition de l'espérance conditionnelle (voir le corollaire I.6.14). En multipliant (II.34) par $f(x_n)$ et en sommant sur $x_n \in E$, on obtient :

$$\mathbb{E}[f(X_n)\mathbf{1}_{\{X_0=x_0,\dots,X_{n-1}=x_{n-1}\}}] = Pf(x_{n-1})\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}).$$

La propriété 3 découle alors de la définition de l'espérance conditionnelle (voir le corollaire I.6.14). La propriété 4 découle de la propriété 1 pour la deuxième égalité et de la propriété 2 pour la dernière. □

Exemple II.7.8. Soit $(U_n, n \in \mathbb{N}^*)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de loi de Bernoulli de paramètre $p \in]0, 1[$. On désire calculer la probabilité $p_{\ell,n}$ d'observer une séquence de 1 consécutifs de longueur au moins ℓ dans la suite $(U_1, \dots, U_n)$. Pour cela, on introduit la chaîne de Markov définie par $X_0 = 0$ et $X_{n+1} = (X_n + 1)\mathbf{1}_{\{U_{n+1}=1, X_n<\ell\}} + \ell\mathbf{1}_{\{X_n=\ell\}}$ pour $n \in \mathbb{N}$. Remarquons que dès que l'on observe une séquence de 1 consécutifs de longueur ℓ la chaîne X devient constante égale à ℓ. En particulier, on a $p_{\ell,n} = \mathbb{P}(X_n = \ell) = P^n(0, \ell)$, où P est la matrice de transition de la chaîne de Markov $(X_n, n \in \mathbb{N})$. On a $P(x, 0) = 1 - p$ et $P(x, x + 1) = p$ pour $x \in \{0, \dots, \ell - 1\}$, $P(\ell, \ell) = 1$ et tous les autres termes de la matrice sont nuls. On représente les valeurs de $p_{\ell,n}$ pour $n = 100$ et $p = 1/2$ dans le graphique II.16. On observe qu'avec une probabilité supérieure à $1/2$ on a une séquence de 1 consécutifs de longueur au moins 6 ($p_{6,100} \simeq 0.55$). ♢

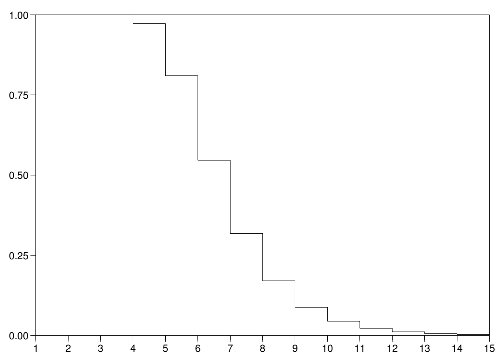


FIGURE II.16 – Graphe de la fonction $x \mapsto \mathbb{P}(L_n \geq \lfloor x \rfloor)$, où L_n est la longueur maximale des séquences de 1 consécutifs dans une suite de $n = 100$ variables aléatoires de Bernoulli indépendantes de paramètre $p = 1/2$.

Le théorème suivant assure que l'évolution future d'une chaîne de Markov ne dépend du passé qu'au travers de sa valeur présente. Cette propriété est appelée propriété de Markov.

Théorème II.7.9 (Propriété de Markov des chaînes de Markov)**.** *Soit* $(X_n, n \in \mathbb{N})$ *une chaîne de Markov de matrice de transition* P *issue de* μ_0*. Soit* $n_0 \in \mathbb{N}$*. La loi de* $(X_{n+n_0}, n \in \mathbb{N})$ *sachant* $(X_0, \ldots, X_{n_0})$ *est une chaîne de Markov de matrice de transition* P *issue de* X_{n_0}*.*

Démonstration. On déduit de (II.34) que pour tous $n \geq 1$, $x_0, \ldots, x_{n_0+n} \in E$ tels que $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \ldots, X_{n_0} = x_{n_0}) > 0$, on a :

$$\mathbb{P}(X_{n_0} = x_{n_0}, \ldots, X_{n_0+n} = x_{n_0+n} | X_0 = x_0, \ldots, X_{n_0} = x_{n_0}) = \prod_{k=n_0+1}^{n_0+n} P(x_{k-1}, x_k).$$

Autrement dit, on a $\mathbb{P}(X_{n_0} = x_{n_0}, \ldots, X_{n_0+n} = x_{n_0+n} | X_0, \ldots, X_{n_0}) = F(X_{n_0})$ où $F(x) = \mathbb{P}(X_0 = x_{n_0}, \ldots, X_n = x_{n_0+n} | X_0 = x)$. On déduit donc de la proposition II.7.3 que conditionnellement à $(X_0, \ldots, X_{n_0})$, $(X_{n_0}, \ldots, X_{n_0+n})$ a même loi que $(X_0, \ldots, X_n)$ issu de X_{n_0}. Ceci étant vrai pour tout $n \geq 1$, on en déduit le résultat en utilisant la caractérisation de la loi d'une chaîne de Markov par sa matrice de transition et sa loi initiale. □

II.7.2 Probabilités invariantes, réversibilité

Les probabilités invariantes jouent un rôle important dans l'étude des comportements asymptotiques des chaînes de Markov.

Définition II.7.10. *Une probabilité* π *sur* E *est appelée probabilité invariante, ou probabilité stationnaire, d'une chaîne de Markov de matrice de transition* P *si* $\pi = \pi P$*.*

On considère $(X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov de matrice de transition P issue d'une probabilité invariante π. On note μ_n la loi de X_n. On a $\mu_1 = \pi P = \pi$ et, en itérant, on obtient que $\mu_n = \pi$. Pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, X_n a même loi que X_0 : la loi de X_n est donc constante ou stationnaire au cours du temps.

Supposons de plus que $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$. Pour $x, y \in E$, on pose :

$$Q(x, y) = \frac{\pi(y) P(y, x)}{\pi(x)} \cdot \tag{II.35}$$

Comme π est une probabilité invariante, on a $\sum_{y \in E} \pi(y) P(y, x) = \pi P(x) = \pi(x)$ pour tout $x \in E$. En particulier la matrice Q est une matrice stochastique. Pour tous $x, y \in E$, $n \geq 0$, on a :

$$\mathbb{P}(X_n = y | X_{n+1} = x) = \frac{\mathbb{P}(X_n = y, X_{n+1} = x)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x)} = Q(x, y).$$

Autrement dit $\mathbb{P}(X_n = y | X_{n+1}) = Q(X_{n+1}, y)$ pour tout $y \in E$. Plus généralement, il est facile de vérifier que pour tous $k \in \mathbb{N}^*$, $y \in E$, on a $\mathbb{P}(X_n = y | X_{n+1}, \ldots, X_{n+k}) = Q(X_{n+1}, y)$. La matrice Q s'interprète comme la matrice de transition de la chaîne de Markov X après retournement du temps.

Définition II.7.11. *On dit qu'une chaîne de Markov de matrice de transition* P*, ou plus simplement la matrice* P*, est réversible par rapport à la probabilité* π *si on a pour tous* $x, y \in E$ *:*

$$\pi(x) P(x, y) = \pi(y) P(y, x). \tag{II.36}$$

En sommant (II.36) sur x, on en déduit le lemme suivant.

Lemme II.7.12. *Si une chaîne de Markov est réversible par rapport à la probabilité π, alors π est une probabilité invariante.*

Les exemples page 182 et page 179 permettent d'illustrer le concept de chaînes de Markov réversibles.

Si P est réversible par rapport à π, alors Q définie par (II.35) est égal à P. Donc si une chaîne de Markov est réversible par rapport à une probabilité invariante, alors si elle est issue de cette probabilité invariante la chaîne et la chaîne après retournement du temps ont même loi. Plus précisément, si $(X_n, n \in \mathbb{N})$ est une chaîne de Markov réversible par rapport à π et si la loi de X_0 est π, alors les vecteurs $(X_0, \ldots, X_{n-1}, X_n)$ et $(X_n, X_{n-1}, \ldots, X_0)$ ont même loi pour tout $n \in \mathbb{N}^*$.

II.7.3 Irréductibilité, récurrence, transience, périodicité

Définition II.7.13. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov de matrice de transition P. On dit que x est un état absorbant de la chaîne X si $P(x,x) = 1$.*

En particulier si la chaîne de Markov atteint un de ses états absorbants, elle ne peut plus s'en échapper. Dans l'exemple page 180 sur le modèle de Wright-Fisher, on s'intéresse au temps d'atteinte des états absorbants.

Définition II.7.14. *On dit qu'une chaîne de Markov, ou sa matrice de transition, est irréductible si pour tous $x, y \in E$, la probabilité partant de x d'atteindre y est strictement positive, autrement dit : si pour tous $x, y \in E$, il existe $n = n_{x,y} \geq 1$ (dépendant a priori de x et y) tel que $P^n(x,y) > 0$.*

Remarquons que la condition $P^n(x,y) > 0$ est équivalente à l'existence de $n \geq 1$, $x_0 = x$, x_1, ..., $x_n = y$ tels que $\mathbb{P}(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n | X_0 = x_0) = \prod_{k=1}^{n} P(x_{k-1}, x_k) > 0$.

Par exemple, la marche aléatoire symétrique simple sur $\mathbb{Z}$ de l'exemple page 166 et la chaîne de Markov de l'urne d'Ehrenfest de l'exemple page 182 sont irréductibles. Une chaîne possédant des états absorbants n'est pas irréductible (sauf si l'espace d'état est réduit à un seul élément). Ainsi la chaîne de Markov du modèle de Wright-Fisher de l'exemple page 180 n'est pas irréductible.

On utilise la convention $\inf \emptyset = +\infty$. On définit le temps d'atteinte de x par :

$$T^x = \inf \{n \geq 1; X_n = x\}.$$

Définition II.7.15. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov. On dit qu'un état $x \in E$ est :*

- *transient si $\mathbb{P}_x(T^x = +\infty) > 0$,*
- *récurrent si $\mathbb{P}_x(T^x = +\infty) = 0$.*

Une chaîne de Markov est dite transiente (resp. récurrente) si tous les états sont transients (resp. récurrents).

On pose $N^x = \sum_{n \in \mathbb{N}} \mathbf{1}_{\{X_n = x\}}$ le nombre de visites de l'état x. La proposition suivante permet de caractériser les états récurrents et transients.

Proposition II.7.16. *Soit X une chaîne de Markov de matrice de transition P. On a les propriétés suivantes.*

1. *Si x est transient alors on a $\mathbb{P}_x(N^x < +\infty) = 1$, $\sum_{n\in\mathbb{N}} P^n(x,x) < +\infty$ et conditionnellement à $\{X_0 = x\}$, N^x est de loi géométrique de paramètre $\mathbb{P}_x(T^x = +\infty)$.*
2. *Si x est récurrent alors on a $\mathbb{P}_x(N^x = +\infty) = 1$ et $\sum_{n\in\mathbb{N}} P^n(x,x) = +\infty$.*
3. *Si X est irréductible alors X est soit transiente soit récurrente. Dans le premier cas on a $\mathbb{P}(N^x < +\infty) = 1$ pour tout $x \in E$ et dans le second $\mathbb{P}(N^x = +\infty) = 1$ pour tout $x \in E$.*

Démonstration. On pose $p = \mathbb{P}_x(T^x = +\infty) = \mathbb{P}_x(N^x = 1)$. On note $T_n^x = \inf\{k \geq 0; \sum_{r=0}^{k} \mathbf{1}_{\{X_r = x\}} = n\}$ le n-ième temps de passage en x. (On a $T_2^x = T^x$ quand $X_0 = x$). Remarquons que $\{T_n^x < +\infty\} = \{N^x \geq n\}$. En décomposant suivant les valeurs de T_n^x, il vient pour $n \in \mathbb{N}^*$:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_x(N^x > n) &= \sum_{r\geq n} \mathbb{P}(N^x > n, T_n^x = r) \\
&= \sum_{r\geq n} \mathbb{P}\left(\sum_{i=1}^{r} \mathbf{1}_{\{X_i = x\}} = n, X_r = x, \sum_{\ell\in\mathbb{N}} \mathbf{1}_{\{X_{r+\ell} = x\}} > 1\right) \\
&= \sum_{r\geq n} \mathbb{P}\left(\sum_{i=1}^{r} \mathbf{1}_{\{X_i = x\}} = n, X_r = x\right) \mathbb{P}_x\left(\sum_{\ell\in\mathbb{N}} \mathbf{1}_{\{X_\ell = x\}} > 1\right) \\
&= \mathbb{P}_x(N^x \geq n)\mathbb{P}_x(N^x > 1) \qquad \text{(II.37)} \\
&= \mathbb{P}_x(N^x > n-1)(1-p).
\end{aligned}$$

où l'on a utilisé la propriété de Markov à l'instant r pour la troisième égalité. En itérant et en utilisant que $\mathbb{P}_x(N^x > 0) = 1$, on obtient $\mathbb{P}_x(N^x > n) = (1-p)^n$ pour $n \in \mathbb{N}$, puis $\mathbb{P}_x(N^x = n) = \mathbb{P}_x(N^x > n-1) - \mathbb{P}_x(N^x > n) = p(1-p)^{n-1}$ pour $n \in \mathbb{N}^*$. Remarquons enfin que $\mathbb{E}_x[N^x] = \sum_{n\in\mathbb{N}} \mathbb{P}_x(X_n = x) = \sum_{n\in\mathbb{N}} P^n(x,x)$.

Si x est transient, on a $p > 0$ et, conditionnellement à $\{X_0 = x\}$, N^x est de loi géométrique de paramètre $p > 0$. En particulier son espérance est finie.

Si x est récurrent, on a $p = 0$ et donc $\mathbb{P}(N^x \in \mathbb{N}) = 0$. Ceci implique que $\mathbb{P}(N^x = +\infty) = 1$ et son espérance est infinie.

Il reste la propriété 3 à démontrer. Soient $x, y \in E$. Comme la chaîne est irréductible, il existe n_1 et n_2 tels que $P^{n_1}(y,x) > 0$ et $P^{n_2}(x,y) > 0$. En particulier on a pour tout $n \in \mathbb{N}$:

$$P^{n+n_1+n_2}(y,y) \geq P^{n_1}(y,x)P^n(x,x)P^{n_2}(x,y) \text{ et } P^{n+n_1+n_2}(x,x) \geq P^{n_2}(x,y)P^n(y,y)P^{n_1}(y,x). \qquad \text{(II.38)}$$

Ceci implique que les deux séries $\sum_{n\in\mathbb{N}} P^n(x,x)$ et $\sum_{n\in\mathbb{N}} P^n(y,y)$ sont de même nature. Ainsi les deux états x et y sont soit tous les deux transients soit tous les deux récurrents. On en déduit qu'une chaîne irréductible est soit récurrente soit transiente.

Si la chaîne est transiente, on a en décomposant suivant la valeur de T^x et en utilisant la propriété de Markov :

$$\mathbb{P}(N^x = +\infty) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \mathbb{P}(T^x = n)\mathbb{P}_x(N^x = +\infty) = 0.$$

Si la chaîne est récurrente, on a en décomposant suivant la valeur de T^x et en utilisant la propriété de Markov :

$$\mathbb{P}(N^x < +\infty) = \mathbb{P}(T^x = +\infty) + \sum_{n\in\mathbb{N}} \mathbb{P}(T^x = n)\mathbb{P}_x(N^x < +\infty) = \mathbb{P}(T^x = +\infty). \qquad \text{(II.39)}$$

Soit $y \in E$ distinct de x. On considère $N_x^y = \text{Card}\,(\{n < T^x; X_n = y\})$ le nombre de visites de y avant de visiter x et $p = \mathbb{P}_y(T_x < T_y)$ la probabilité de visiter x avant de retourner en y. Un calcul similaire à (II.37) assure que :

$$\mathbb{P}_y(N_x^y > n) = \mathbb{P}_y(N_x^y \geq n)\mathbb{P}_y(N_x^y > 1) = \mathbb{P}_y(N_x^y > n-1)(1-p).$$

En itérant et en utilisant que $\mathbb{P}_y(N_x^y > 0) = 1$, on obtient $\mathbb{P}_y(N_x^y > n) = (1-p)^n$ pour $n \in \mathbb{N}$ et donc $\mathbb{P}_y(N_x^y = +\infty) = \mathbf{1}_{\{p=0\}}$. La chaîne étant irréductible, il existe $n > 0$ tel que $\mathbb{P}_y(X_n = x) > 0$. Comme $\{X_n = x\} \subset \{T^x < +\infty\}$, on en déduit que $\mathbb{P}_y(T^x = +\infty) < 1$. Comme $\{N_x^y = +\infty\} = \{T^x = +\infty\}$, il vient $\mathbb{P}_y(N_x^y = +\infty) < 1$. Ceci implique $p > 0$ puis $\mathbb{P}_y(N_x^y = +\infty) = 0$ et $\mathbb{P}_y(T^x = +\infty) = 0$. Comme $\mathbb{P}(T^x = +\infty) = \sum_{y \in E} \mathbb{P}(X_0 = y)\mathbb{P}_y(T^x = +\infty) = 0$, on déduit de (II.39) que $\mathbb{P}(N^x < +\infty) = 0$. Ceci termine la démonstration de la propriété 3. □

Dans l'exemple page 166 de la marche aléatoire symétrique, remarquons que, si S_0 est pair, alors S_n est pair si, et seulement si, n est pair. On assiste à un phénomène périodique. En particulier $P^n(0,0)$ est nul si n est impair. Ceci motive la définition suivante.

Définition II.7.17. *Soit X une chaîne de Markov de matrice de transition P. La période d'un état $x \in E$ est le PGCD de $\{n \in \mathbb{N}^*; P^n(x,x) > 0\}$. Un état est dit apériodique si sa période est 1, sinon il est dit périodique. Une chaîne de Markov est dite apériodique si tous ses états sont apériodiques.*

Proposition II.7.18. *Soit X une chaîne de Markov de matrice de transition P. On a les propriétés suivantes.*

1. *Si $x \in E$ est apériodique, alors il existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tel que $P^n(x,x) > 0$ pour tout $n \geq n_0$.*
2. *Si X est irréductible, alors elle est apériodique si au moins un état est apériodique.*

Démonstration. Soit $x \in E$ apériodique. On note $I = \{n \in \mathbb{N}^*; P^n(x,x) > 0\}$. Comme $P^{n+m}(x,x) \geq P^n(x,x)P^m(x,x)$, on en déduit que I est stable par addition. Par hypothèse, il existe $n_1, \ldots, n_K \in I$ premiers entre eux. Le théorème de Bézout assure qu'il existe $a_1, \ldots, a_K \in \mathbb{Z}$ tel que $\sum_{k=1}^{K} a_k n_k = 1$. On pose $n_+ = \sum_{k=1; a_k>0}^{K} a_k n_k$ et $n_- = \sum_{k=1; a_k<0}^{K} |a_k|\, n_k$, de sorte que $n_+, n_- \in I$ et $n_+ - n_- = 1$. Soit $n \geq n_-^2$. On considère la division euclidienne de n par n_-. il existe $r \in \{0, \ldots, n_- - 1\}$ et $q \geq n_-$ entier tels que :

$$n = qn_- + r = qn_- + r(n_+ - n_-) = (q-r)n_- + rn_+.$$

Comme $q - r \geq 0$ et que I est stable par addition, on a $n \in I$. Ceci démontre la propriété 1.

Si $P^n(x,x) > 0$ pour tout $n \geq n_0$, alors par définition x est apériodique. La propriété 2 découle alors de la propriété 1 et de (II.38). □

Le lemme suivant sera utilisé au paragraphe II.7.5.

Lemme II.7.19. *Soient $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ et $Y = (Y_n, n \in \mathbb{N})$ deux chaînes de Markov indépendantes irréductibles à valeurs dans E. Alors $Z = ((X_n, Y_n), n \in \mathbb{N})$ est une chaîne de Markov à valeurs dans E^2. Si π (resp. ν) est une probabilité invariante pour X (resp. Y), alors $\pi \otimes \nu$ est une probabilité invariante pour Z. Si X ou Y est apériodique, alors Z est irréductible.*

Démonstration. Il est élémentaire de vérifier que Z est une chaîne de Markov de matrice de transition $P(z,z') = P_1(z_1,z_1')P_2(z_2,z_2')$ où P_1 (resp. P_2) est la matrice de transition de X (resp. Y) et $z = (z_1,z_2), z' = (z_1',z_2') \in E^2$.

Si π (resp. ν) est une probabilité invariante pour X (resp. Y), alors on a, pour $z = (z_1, z_2) \in E^2$:

$$\pi\otimes\nu P(z') = \sum_{z_1,z_2\in E} \pi(z_1)\nu(z_2)P((z_1,z_2),(z'_1,z'_2)) = \sum_{z_1,z_2\in E} \pi(z_1)P_1(z_1,Z'_1)\nu(z_2)P_2(z_2,z'_2) = \pi\otimes\nu(z).$$

Et donc $\pi \otimes \nu$ est une probabilité invariante pour Z.

Supposons que X est apériodique et montrons que Z est irréductible. Soient $z = (z_1, z_2), z' = (z'_1, z'_2) \in E^2$. Les chaînes X et Y étant irréductibles, il existe $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}^*$ tels que $P_1^{n_1}(z_1, z'_1) > 0$, $P_2^{n_2}(z_2, z'_2) > 0$ et $P_2^{n_3}(z'_2, z'_2) > 0$. La proposition II.7.18 assure que $P^{kn_3+n_2-n_1}(z'_1, z'_1) > 0$ pour $k \in \mathbb{N}^*$ suffisamment grand. Ainsi, on obtient que, pour k suffisamment grand :

$$\begin{aligned}
P^{kn_3+n_2}(z,z') &= P_1^{kn_3+n_2}(z_1,z'_1)P_2^{kn_3+n_2}(z_2,z'_2)\\
&\geq P_1^{n_1}(z_1,z'_1)P_1^{kn_3+n_2-n_1}(z'_1,z'_1)P_2^{n_2}(z_2,z'_2)P_2^{n_3}(z'_2,z'_2)^k > 0.
\end{aligned}$$

La chaîne Z est donc irréductible. □

II.7.4 Théorèmes asymptotiques

Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov à valeurs dans E. On rappelle la définition du temps d'atteinte de x : $T^x = \inf\{n \geq 1; X_n = x\}$. Notons que, comme $T^x \geq 1$, on a $\mathbb{E}_x[T^x] \geq 1$. On pose :

$$\pi(x) = \frac{1}{\mathbb{E}_x[T^x]} \in [0,1]. \tag{II.40}$$

Pour une chaîne de Markov irréductible transiente on a, pour tout $x \in E$, $\mathbb{P}_x(T^x = +\infty) > 0$ et donc $\pi = 0$.

Définition II.7.20. *Un état x récurrent est dit récurrent positif si $\pi(x) > 0$ et récurrent nul si $\pi(x) = 0$. Une chaîne est dite récurrente positive (resp. nulle) si tous ses états sont récurrents positifs (resp. nuls).*

On dit qu'un évènement A est presque sûr (p.s.) pour une chaîne de Markov X de matrice de transition P si $\mathbb{P}_x(A) = 1$ pour tout $x \in E$ et donc si $\mathbb{P}(A) = 1$ quelle que soit la loi initiale de la chaîne de Markov.

Les deux théorèmes fondamentaux suivants sur le comportement asymptotique d'une chaîne de Markov irréductible seront démontrés au paragraphe II.7.5.

Théorème II.7.21. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans E.*

1. *La chaîne de Markov X est soit transiente soit récurrente nulle soit récurrente positive.*
2. *Si la chaîne de Markov est transiente ou récurrente nulle, elle ne possède pas de probabilité invariante. De plus on a $\pi = 0$.*
3. *Pour tout $x \in E$, on a :*

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k=x\}} \xrightarrow[n\to+\infty]{\text{p.s.}} \pi(x). \tag{II.41}$$

Théorème II.7.22 (Théorème ergodique)**.** *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans E récurrente positive.*

1. *Le vecteur π défini par (II.40) est une probabilité et c'est l'unique probabilité invariante de X. De plus on a $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$.*

2. *Pour toute fonction f définie sur E, telle que $f \geq 0$ ou $(\pi, |f|) < +\infty$, on a :*

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(X_k) \xrightarrow[n\to+\infty]{\text{p.s.}} (\pi, f). \tag{II.42}$$

3. *Si de plus X est apériodique alors on a $X_n \xrightarrow[n\to+\infty]{\text{loi}} \pi$ et donc $\lim_{n\to+\infty} \mathbb{P}(X_n = x) = \pi(x)$ pour tout $x \in E$.*

En particulier pour une chaîne de Markov récurrente positive la moyenne temporelle converge p.s. vers la moyenne spatiale par rapport à la probabilité invariante. Le théorème ergodique indique que le comportement de la chaîne de Markov en régime stationnaire correspond au comportement asymptotique.

Si X est transiente, alors on a $\lim_{n\to+\infty} \mathbb{P}(X_n = x) = 0$ pour tout $x \in E$. On peut aussi montrer que si X est récurrente nulle on a $\lim_{n\to+\infty} \mathbb{P}(X_n = x) = 0$ pour tout $x \in E$.

Nous donnons le corollaire suivant pour le cas E fini.

Corollaire II.7.23. *Une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans un espace E fini est positive récurrente : π défini par (II.40) est son unique probabilité invariante, $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$ et on a (II.42) pour toute fonction f.*

Démonstration. En sommant (II.41) sur x, on obtient que $\sum_{x\in E} \pi(x) = 1$. Ainsi la chaîne est récurrente positive d'après le théorème II.7.21, propriétés 1 et 2. La suite découle du théorème II.7.22. □

La convergence des moyennes empiriques, voir (II.42), pour les chaînes de Markov irréductibles récurrentes positives est à comparer avec la loi forte des grands nombres ; mais ici les variables aléatoires $(X_n, n \in \mathbb{N})$ sont dépendantes. Remarquons également que la probabilité qui apparaît à la limite, dans le membre de droite de (II.42) n'est pas liée à la loi initiale de la chaîne de Markov. Une propriété importante des chaînes de Markov irréductibles est cet oubli de la condition initiale. Tout comme le théorème central limite (TCL) pour la loi forte des grands nombres, on peut estimer la vitesse de convergence dans (II.42) en étudiant la convergence en loi de $\sqrt{n}\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(X_k) - (\pi, f)\right)$. Sous des hypothèses raisonnables, on peut montrer que la limite existe et est gaussienne. Mais la variance de la loi gaussienne limite est en général difficile à calculer, voir la remarque qui suit. Contrairement au TCL, on ne peut pas l'estimer à partir des observations, ni donc construire un intervalle de confiance comme dans la méthode de Monte-Carlo.

Remarque II.7.24. Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible, de matrice de transition P, à valeurs dans E fini. Le corollaire II.7.23 assure qu'il existe une unique probabilité invariante π. Soit f une fonction définie sur E à valeurs dans $\mathbb{R}$. On pose $I_n(f) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(X_k)$. On a donc p.s. $\lim_{n\to+\infty} I_n(f) = (\pi, f)$. Calculons la variance de $\sqrt{n} I_n(f)$. On a :

$$\mathrm{Var}(\sqrt{n} I_n(f)) = \frac{1}{n}\sum_{k,\ell=1}^{n} \mathrm{Cov}(f(X_k), f(X_\ell)) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\mathrm{Var}(f(X_k)) + 2\sum_{j=1}^{n-k} \mathrm{Cov}(f(X_k), f(X_{k+j}))\right).$$

Comme la limite d'une moyenne temporelle revient à intégrer par rapport à la probabilité invariante, intuitivement $\mathrm{Var}(\sqrt{n} I_n(f))$ converge vers $\sigma(f)^2 = \mathrm{Var}_\pi(f(X_0)) + 2\sum_{j\in\mathbb{N}^*} \mathrm{Cov}_\pi(f(X_0), f(X_j))$ où l'indice π signifie que la loi de X_0 est π. Il vient, en utilisant la propriété 3 de la proposition II.7.7 :

$$\sigma(f)^2 = \Big(\pi, \big(f - (\pi, f)\big)^2\Big) + \mathbb{E}_\pi \left[\big(f(X_0) - (\pi, f)\big) P \sum_{j \in \mathbb{N}} P^j \big(f - (\pi, f)\big)(X_0) \right].$$

La fonction $F = \sum_{j \in \mathbb{N}} P^j \big(f - (\pi, f)\big)$ est une solution formelle de l'équation suivante, dite équation de Poisson :

$$F(x) - PF(x) = f(x) - (\pi, f), \quad \text{pour tout } x \in E. \tag{II.43}$$

On obtient alors :

$$\sigma(f)^2 = \big(\pi, (F - PF)^2\big) + 2\big(\pi, (F - PF)PF\big) = (\pi, F^2) - (\pi, (PF)^2). \tag{II.44}$$

En fait, on peut montrer le résultat suivant [14]. Pour toute fonction f il existe, à une constante additive près, une unique solution F de l'équation de Poisson (II.43) et on a la convergence en loi suivante :

$$\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(X_k) - (\pi, f) \right) \xrightarrow[n \to +\infty]{\textbf{loi}} \mathcal{N}(0, \sigma(f)^2),$$

où $\sigma(f)^2$ est donné par (II.44). En général calculer la solution d'une équation de Poisson est aussi difficile que calculer la probabilité invariante. Des résultats similaires existent pour les chaînes irréductibles récurrentes positives à valeurs dans E discret dénombrable. $\lozenge$

II.7.5 Démonstration des théorèmes asymptotiques

Soit $X = (X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov à valeurs dans un espace discret E. On suppose que X est **irréductible**.

On reprend les notations du paragraphe précédent. En particulier π est défini par (II.40). Le lemme suivant assure que s'il existe une probabilité invariante alors elle est égale à π.

Lemme II.7.25. *Si la convergence (II.41) est vérifiée et s'il existe une probabilité invariante ν, alors $\nu = \pi$.*

Démonstration. Supposons qu'il existe une probabilité invariante ν. Après avoir remarqué que le membre de gauche de (II.41) est borné par 1, par convergence dominée, on obtient, en prenant l'espérance dans (II.41) avec la probabilité ν comme loi initiale que :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \nu P^k(x) \xrightarrow[n \to +\infty]{} \pi(x).$$

Comme ν est une probabilité invariante, on a $\nu P^k(x) = \nu(x)$ pour tout $x \in E$. Donc, il vient $\nu = \pi$. $\square$

Le lemme suivant concerne les chaînes transientes.

Lemme II.7.26. *Soit $X = (X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov irréductible transiente. Alors on a $\pi = 0$, (II.41) est vérifiée, et X ne possède pas de probabilité invariante.*

14. S. P. Meyn et R. L. Tweedie. *Markov chains and stochastic stability.* Springer-Verlag, 1993.

Démonstration. La proposition II.7.16 assure que, pour tout $x \in E$, $\mathbb{P}_x(T^x = +\infty) > 0$ et donc $\mathbb{E}_x[T^x] = +\infty$. Ceci implique par définition que $\pi = 0$. La propriété 3 de la proposition II.7.16 assure que la somme $\sum_{k \in \mathbb{N}} \mathbf{1}_{\{X_k = x\}}$ est p.s. finie. On en déduit donc que (II.41) est vérifiée. Comme $\pi = 0$ et que (II.41) est vérifiée, on déduit du lemme II.7.25 qu'il n'existe pas de probabilité invariante. □

On suppose dorénavant que X est **récurrente**.

On pose $N_n^x = \sum_{k=0}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k = x\}}$ le nombre de visites de l'état x jusqu'à l'instant n. La propriété 3 de la proposition II.7.16 assure que p.s. $\lim_{n \to +\infty} N_n^x = +\infty$. On peut donc définir p.s. les temps de passage en x et les inter-temps de passage par : $S_0^x = 0$ et, pour $n \in \mathbb{N}$:

$$S_{n+1}^x = \inf\{k \geq 0; N_k^x = n+1\} \quad \text{et} \quad T_n^x = S_{n+1}^x - S_n^x.$$

On introduit les excursions hors de l'état x, c'est-à-dire les variables aléatoires $(Y_n, n \in \mathbb{N})$ à valeurs dans l'espace des trajectoires de longueur finie $E^{\text{traj}} = \cup_{k \geq 0} \{k\} \times E^{k+1}$ définies par :

$$Y_n = (T_n^x, X_{S_n^x}, X_{S_n^x+1}, \ldots, X_{S_{n+1}^x}). \tag{II.45}$$

L'excursion Y_n décrit la trajectoire de la chaîne de Markov entre la n-ième et la $n+1$-ième visite de l'état x. Remarquons que $\{X_0 = x\} = \{S_1^x = 0\} = \{T_0^x = 0\}$ et que conditionnellement à $\{X_0 = x\}$, on a $Y_1 = (T^x, x, X_1, \ldots, X_{T^x} = x)$.

Le lemme suivant est la clef de la démonstration que nous avons choisie de présenter des théorèmes asymptotiques pour les chaînes de Markov. Il assure que les excursions sont indépendantes et sa démonstration repose sur la propriété de Markov.

Lemme II.7.27. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible récurrente. Les variables aléatoires $(Y_n, n \in \mathbb{N})$, définies par (II.45) sont indépendantes. Les variables $(Y_n, n \in \mathbb{N}^*)$ ont même loi que Y_1 conditionnellement à $\{X_0 = x\}$.*

Démonstration. Pour $y = (r, x_0, \ldots, x_r) \in E^{\text{traj}}$, on note $t_y = r$ et $y(k) = x_k$ pour $0 \leq k \leq r$. Soit $n \geq 1$. Soient $y_0, \ldots, y_n \in E^{\text{traj}}$. On dit que la suite d'excursions $(y_0, \ldots, y_n)$ est compatible si $y_0(t_{y_0}) = x$ et $y_k(t_{y_k}) = y_k(0) = x$ pour tout $1 \leq k \leq n$ (c'est-à-dire toutes les excursions se terminent en x, et toutes, sauf éventuellement la première, débutent en x). Si la condition de compatibilité n'est pas vérifiée, alors on a $\mathbb{P}(Y_0 = y_0, \ldots, Y_n = y_n) = 0$ ainsi que $\mathbb{P}(Y_0 = y_0) \prod_{k=1}^{n} \mathbb{P}_x(Y_1 = y_k) = 0$.

On suppose que la condition de compatibilité est vérifiée. En utilisant la propriété de Markov à l'instant $s = \sum_{k=0}^{n-1} t_{y_k}$ et en remarquant que sur l'événement $\{Y_0 = y_0, \ldots, Y_n = y_n\}$ on a $S_n^x = s$ et donc $X_s = x$, on obtient :

$$\mathbb{P}(Y_0 = y_0, \ldots, Y_n = y_n) = \mathbb{P}(Y_0 = y_0, \ldots, Y_{n-1} = y_{n-1}) \mathbb{P}_x(Y_1 = y_n).$$

Si la suite $(y_0, \ldots, y_n)$ est compatible, alors il en est de même des suites $(y_0, \ldots, y_k)$ pour $1 \leq k \leq n$. En itérant le calcul précédent, on obtient que :

$$\mathbb{P}(Y_0 = y_0, \ldots, Y_n = y_n) = \mathbb{P}(Y_0 = y_0) \prod_{k=1}^{n} \mathbb{P}_x(Y_1 = y_k). \tag{II.46}$$

On a vu que cette relation est également vraie si la suite $(y_0, \ldots, y_n)$ n'est pas compatible. On a donc obtenu l'égalité (II.46) pour tout $n \geq 1$ et $y_0, \ldots, y_n \in E^{\text{traj}}$. On conclut alors à l'aide des définitions I.1.37 et I.2.18. □

Nous pouvons maintenant démontrer (II.41) pour les chaînes irréductibles récurrentes. Ce résultat et le lemme II.7.26 impliquent la propriété 3 du théorème II.7.21.

Proposition II.7.28. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible récurrente. Alors (II.41) est vérifiée.*

Démonstration. Comme T_0^x est fini et que $S_n^x = \sum_{k=0}^{n-1} T_k^x$, où les variables aléatoires $(T_n^x, n \in \mathbb{N}^*)$ sont positives indépendantes de même loi que T^x conditionnellement à $\{X_0 = x\}$, on déduit de la loi forte des grands nombres, et plus précisément de la proposition II.1.13 que :

$$\frac{S_n^x}{n} \xrightarrow[n\to+\infty]{\textbf{p.s.}} \mathbb{E}_x[T^x]. \tag{II.47}$$

Par construction, on a $S^x_{N_n^x} \leq n < S^x_{N_n^x+1}$. Ainsi on a $\frac{N_n^x}{N_n^x+1}\frac{N_n^x+1}{S^x_{N_n^x+1}} \leq \frac{N_n^x}{n} \leq \frac{N_n^x}{S^x_{N_n^x}}$. Comme p.s. $\lim_{n\to+\infty} N_n^x = +\infty$, on déduit de (II.47) que p.s. :

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{N_n^x}{n} = \frac{1}{\mathbb{E}_x[T^x]} = \pi(x).$$

Ceci termine la démonstration de (II.41). □

Le lemme suivant et la propriété 3 de la proposition II.7.16 impliquent la propriété 1 du théorème II.7.21.

Lemme II.7.29. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible récurrente. Alors elle est soit récurrente positive soit récurrente nulle.*

Démonstration. Après avoir remarqué que le membre de gauche de (II.41) est borné par 1, par convergence dominée, on obtient, en prenant l'espérance dans (II.41) avec la masse de Dirac en x comme loi initiale que pour tout $x \in E$:

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} P^k(x,x) \xrightarrow[n\to+\infty]{} \pi(x).$$

Par ailleurs, comme la chaîne de Markov est irréductible, on déduit de (II.38) que si la limite ci-dessus est nulle pour un x donné, alors elle est nulle pour tout $x \in E$. On en déduit donc que soit $\pi = 0$ soit $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$. □

Le lemme suivant et le lemme II.7.26 impliquent la propriété 2 du théorème II.7.21. Sa démonstration découle du lemme II.7.25 et du fait que $\pi = 0$ pour les chaînes récurrentes nulles.

Lemme II.7.30. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible récurrente nulle. Alors elle ne possède pas de probabilité invariante.*

Le théorème II.7.21 est donc démontré.

On suppose dorénavant que X est **récurrente positive**.

Proposition II.7.31. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible récurrente positive. Le vecteur π défini par (II.40) est une probabilité et pour toute fonction f définie sur E, telle que $f \geq 0$ ou $(\pi, |f|) < +\infty$, on a (II.42).*

Démonstration. On reprend les notations du lemme II.7.27. Soit f une fonction réelle positive finie définie sur E. On pose, pour $y = (r, x_0, \ldots, x_r) \in E^{\text{traj}}$:

$$F(y) = \sum_{k=1}^{r} f(x_k).$$

Le lemme II.7.27 assure que les variables aléatoires $(F(Y_n), n \in \mathbb{N}^*)$ sont positives, indépendantes et de même loi que $F(Y_1)$ conditionnellement à $\{X_0 = x\}$. Comme $F(Y_0)$ est positif et fini, on déduit de la loi forte des grands nombres (voir la proposition II.1.13) que p.s. $\lim_{n\to+\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n} F(Y_k) = \mathbb{E}_x[F(Y_1)]$.

Par construction, on a $\displaystyle\frac{1}{S_n^x} \sum_{i=1}^{S_n^x} f(X_i) = \frac{n}{S_n^x} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} F(Y_k)$ (au moins pour $n \geq 2$). On déduit de (II.47) que p.s. :

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{1}{S_n^x} \sum_{i=1}^{S_n^x} f(X_i) = \pi(x)\mathbb{E}_x[F(Y_1)].$$

Par construction, on a $S_{N_n^x}^x \leq n < S_{N_n^x+1}^x$. Pour $n \geq 2$, on a les inégalités :

$$\frac{S_{N_n^x}^x}{S_{N_n^x+1}^x} \frac{1}{S_{N_n^x}^x} \sum_{i=1}^{S_{N_n^x}^x} f(X_i) \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(X_i) \leq \frac{S_{N_n^x+1}^x}{S_{N_n^x}^x} \frac{1}{S_{N_n^x+1}^x} \sum_{i=1}^{S_{N_n^x+1}^x} f(X_i).$$

Comme p.s. $\lim_{n\to+\infty} N_n^x = +\infty$ et d'après (II.47) $\lim_{n\to+\infty} S_n^x = +\infty$ p.s. ainsi que $\lim_{n\to+\infty} S_n^x / S_{n+1}^x = 1$ p.s., on en déduit que :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(X_i) \xrightarrow[n\to+\infty]{\textbf{p.s.}} \pi(x)\mathbb{E}_x[F(Y_1)]. \tag{II.48}$$

En choisissant $f = \mathbf{1}_{\{y\}}$, on déduit de (II.41) que :

$$\pi(y) = \pi(x)\mathbb{E}_x\Big[\sum_{k=1}^{T^x} \mathbf{1}_{\{X_k=y\}}\Big]. \tag{II.49}$$

En sommant sur $y \in E$, il vient par convergence monotone, $\sum_{y\in E} \pi(y) = \pi(x)\mathbb{E}_x[T^x] = 1$. On en déduit que $\pi = (\pi(x), x \in E)$ est une probabilité. Enfin remarquons que grâce à (II.49), et par convergence monotone :

$$\pi(x)\mathbb{E}_x[F(Y_1)] = \sum_{y\in E} f(y)\pi(x)\mathbb{E}_x\Big[\sum_{k=1}^{T^x} \mathbf{1}_{\{X_k=y\}}\Big] = \sum_{y\in E} f(y)\pi(y) = (\pi, f).$$

On déduit alors (II.42) de (II.48).

Enfin si f est de signe quelconque et $(\pi, |f|)$ est fini, on utilise (II.42) avec $f^+(x) = \max(f(x), 0)$ et $f^-(x) = \max(-f(x), 0)$ et on en fait la différence pour obtenir (II.42). La condition $(\pi, |f|) < +\infty$ assure que $(\pi, f^+) - (\pi, f^-)$ a un sens et est égal à (π, f). □

La proposition suivante et la proposition II.7.31 terminent la démonstration des propriétés 1 et 2 du théorème ergodique II.7.22.

Proposition II.7.32. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible récurrente positive. Le vecteur π défini par (II.40) est l'unique probabilité invariante de X.*

Démonstration. Vérifions que π est une probabilité invariante. Soit ν la loi de X_0. On pose :

$$\bar{\nu}_n(x) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \nu P^k(x).$$

Par convergence dominée, on déduit de (II.41), en prenant l'espérance, que $\lim_{n\to+\infty} \bar{\nu}_n(x) = \pi(x)$ pour tout $x \in E$. Soit f bornée. Par convergence dominée, en prenant l'espérance dans (II.42), il vient :

$$(\bar{\nu}_n, f) \xrightarrow[n\to+\infty]{} (\pi, f).$$

En choisissant $f(\cdot) = P(\cdot, y)$, on a $(\bar{\nu}_n, f) = \bar{\nu}_n P(y) = \frac{n+1}{n}\bar{\nu}_{n+1}(y) - \frac{1}{n}\,\nu P(y)$. Par passage à la limite, il vient :

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

On en déduit donc que π est une probabilité invariante. Le lemme II.7.25 assure que c'est la seule. □

La proposition suivante termine la démonstration du théorème ergodique II.7.22.

Proposition II.7.33. *Soit $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov irréductible apériodique récurrente positive. On note π son unique probabilité invariante. Alors on a $X_n \xrightarrow[n\to+\infty]{\textbf{loi}} \pi$.*

Démonstration. Soit $Y = (Y_n, n \in \mathbb{N})$ une chaîne de Markov indépendante de X, de même matrice de transition et de loi initiale π. Le lemme II.7.19 assure que la chaîne $Z = ((X_n, Y_n), n \in \mathbb{N})$ est irréductible et que $\pi \otimes \pi$ est une probabilité invariante. En particulier Z est récurrente positive. Soit $x \in E$. On pose $T = \inf\{n \in \mathbb{N}^*; X_n = Y_n = x\}$. On a alors pour $y \in E$:

$$\mathbb{P}(X_n = y) = \mathbb{P}(X_n = y, T \le n) + \mathbb{P}(X_n = y, T > n) \le \mathbb{P}(X_n = y, T \le n) + \mathbb{P}(T > n).$$

En décomposant suivant les événements $\{T = k\}$, en utilisant que sur $\{T = k\}$ on a $X_k = x = Y_k$, la propriété de Markov à l'instant k et le fait que X et Y ont même matrice de transition, il vient $\mathbb{P}(X_n = y, T \le n) = \mathbb{P}(Y_n = y, T \le n)$. On a donc obtenu :

$$\mathbb{P}(X_n = y) \le \mathbb{P}(Y_n = y, T \le n) + \mathbb{P}(T > n) \le \mathbb{P}(Y_n = y) + \mathbb{P}(T > n).$$

En intervertissant le rôle de X_n et Y_n dans les inégalités précédentes, on en déduit que :

$$|\mathbb{P}(X_n = y) - \mathbb{P}(Y_n = y)| \le \mathbb{P}(T > n).$$

Comme Z est récurrente, p.s. T est fini et donc on a $\lim_{n\to+\infty} |\mathbb{P}(X_n = y) - \mathbb{P}(Y_n = y)| = 0$. Comme Y est de loi initiale π, on constate que $\mathbb{P}(Y_n = y) = \pi(y)$ et donc $\lim_{n\to+\infty} |\mathbb{P}(X_n = y) - \pi(y)| = 0$. On conclut à l'aide de la proposition II.4.5. □

II.7.6 Applications

Exemple II.7.34. **Algorithme de Metropolis-Hastings**

Soit E un espace discret et π une probabilité donnée sur E. Le but de l'algorithme de Metropolis-Hastings[15] est de simuler une variable aléatoire de loi π, ou tout du moins ayant une loi proche de π. Quitte à réduire l'espace d'états, on peut supposer que $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$.

15. W. Hastings : Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57 :97–109, 1970.

Pour cela on considère une matrice de transition irréductible Q sur E telle que pour tous $x, y \in E$, si $Q(x,y) = 0$ alors $Q(y,x) = 0$. Cette matrice est appelée matrice de sélection.

Pour $x, y \in E$ tels que $Q(x,y) > 0$, soit $(\rho(x,y), \rho(y,x)) \in]0,1]^2$ tels que :

$$\rho(x,y)\pi(x)Q(x,y) = \rho(y,x)\pi(y)Q(y,x). \tag{II.50}$$

La fonction ρ est considérée comme étant une probabilité d'acceptation. On peut construire une telle fonction ρ en posant :

$$\rho(x,y) = \gamma\left(\frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)}\right), \quad \text{pour tous} \quad x, y \in E \quad \text{tels que} \quad Q(x,y) > 0, \tag{II.51}$$

où γ est une fonction à valeurs dans $]0,1]$ telle que $\gamma(u) = u\gamma(1/u)$. En général, pour des raisons de vitesse de convergence, on choisit $\gamma(u) = \min(1,u)$ pour l'algorithme de Metropolis. Le cas $\gamma(u) = u/(1+u)$ correspond à l'algorithme de Boltzmann ou de Barker.

Soit X_0 une variable aléatoire à valeurs dans E de loi μ_0. À l'étape n, les variables aléatoires $X_0, \ldots, X_n$ sont construites. On génère alors une variable aléatoire Y_{n+1} de loi $Q(X_n, \cdot)$. Avec probabilité $\rho(X_n, Y_{n+1})$, on accepte cette transition et on pose $X_{n+1} = Y_{n+1}$. Si on rejette cette transition, on pose $X_{n+1} = X_n$. Il est immédiat de vérifier que $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P définie pour $x, y \in E$ par :

$$P(x,y) = \begin{cases} Q(x,y)\rho(x,y) & \text{si } x \neq y, \\ 1 - \sum_{z \neq x} P(x,z) & \text{si } x = y. \end{cases}$$

La condition (II.50) implique que la chaîne de Markov X est réversible par rapport à la probabilité π. De plus elle est irréductible car Q est irréductible. En particulier X est récurrente positive de probabilité invariante π.

S'il existe $x, y \in E$ tels que $Q(x,y) > 0$ et $\rho(x,y) < 1$, alors on a $P(x,x) > 0$ et la chaîne X est apériodique. La propriété 3 du théorème II.7.22 assure alors que X converge en loi vers π.

Supposons que π soit connue à une constante près. (C'est souvent le cas en physique statistique où E désigne l'ensemble des états d'un système et la probabilité que le système soit dans l'état x est proportionnelle à $\exp(-H(x)/T)$, où $H(x)$ est l'énergie de l'état x et T la température. Dans ce cadre, les probabilités sont appelées loi de Boltzmann, et souvent la constante de normalisation n'est pas calculable.) Si on utilise une probabilité d'acceptation donnée par (II.51), c'est le cas des algorithmes de Metropolis et de Boltzmann, alors seul le rapport $\pi(x)/\pi(y)$ intervient. En particulier, pour la simulation de X, il n'est pas nécessaire de calculer la constante de normalisation de π. Si les probabilités données par $Q(x, \cdot)$ sont facilement simulables, cet algorithme permet de simuler la chaîne de Markov X. Pour estimer (π, f), on peut utiliser l'approximation $\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(X_k)$ qui d'après la propriété 2 du théorème II.7.22 converge p.s. vers (π, f). L'inconvénient de cette méthode, au demeurant très utilisée, est que l'on ne peut pas en général donner d'intervalle de confiance pour (π, f). ◊

Exemple II.7.35. **Le modèle de Wright Fisher.**

Le modèle d'évolution de population de Wright-Fisher a été introduit par Fisher en 1922 [16] et par Wright [17] en 1931. On considère une population de taille N constante au cours du temps. On suppose qu'à l'instant n les N individus donnent naissance à N enfants puis meurent. On suppose que la reproduction est asexuée et aléatoire : si on note $a_i^{n+1} \in \{1, \ldots, N\}$ le parent de l'individu i de la génération $n+1$, vivant à la génération n, alors les variables aléatoires $(a_i^{n+1}, i \in \{1, \ldots, N\}, n \in \mathbb{N})$ sont indépendantes et de même loi uniforme sur $\{1, \ldots, N\}$. Tout se passe comme si chaque individu choisissait de manière indépendante son parent dans la génération précédente.

16. R. A. Fisher : On the dominance ratio. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh*, 42 :321–341, 1922.
17. S. Wright : Evolution in Mendelian populations. *Genetics*, 16 :97–159, 1931.

On suppose que la population est divisée en deux, une partie possédant le gène A et l'autre le gène a. On note X_n le nombre d'individus portant le gène A dans la population à l'instant N. Comme l'évolution de la population à l'instant $n+1$ ne dépend des générations passées qu'au travers de la génération n, il est clair que $(X_n, n \in \mathbb{N})$ est une chaîne de Markov. Si $X_n = i$, chaque enfant de la génération $n+1$ a une probabilité i/N d'avoir un parent possédant le gène A et donc d'avoir le gène A. Chaque enfant choisissant son parent de manière indépendante, on en déduit que conditionnellement à $X_n = i$, la loi de X_{n+1} est une loi binomiale de paramètre $(N, i/N)$. La matrice de transition, P, est donc :

$$P(i,j) = \binom{N}{j} \left(\frac{i}{N}\right)^j \left(1 - \frac{i}{N}\right)^{N-j}, \quad i,j \in \{0, \dots, N\}.$$

Les états 0 et N sont des états absorbants. On note τ le premier instant de disparition de la diversité :

$$\tau = \inf\{n; X_n \in \{0, N\}\},$$

avec la convention $\inf \emptyset = +\infty$. On a le résultat suivant concernant ce modèle qui assure que l'un des deux gènes disparaît p.s. en temps fini et que la probabilité que toute la population finisse par posséder le gène A est égale à la proportion initiale du gène A.

Lemme II.7.36. *La variable aléatoire τ est p.s. finie. De plus, on a $\mathbb{P}(X_\tau = N | X_0) = X_0/N$.*

Démonstration. Si on pose $p = \min_{x \in [0,1]} x^N + (1-x)^N = 2^{-N+1}$, il vient pour tout $i \in \{1, \dots, N-1\}$:

$$\mathbb{P}_i(\tau = 1) = \mathbb{P}_i(X_1 \in \{0, N\}) = \left(\frac{i}{N}\right)^N + \left(1 - \frac{i}{N}\right)^N \geq p.$$

On pose $q = 1 - p$. Pour tout $i \in \{1, \dots, N-1\}$, on a $\mathbb{P}_i(\tau > 1) \leq q$. En utilisant la propriété de Markov pour X, il vient pour $k \geq 2$:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_i(\tau > k) &= \sum_{j=1}^{N-1} \mathbb{P}_i(X_k \notin \{0, N\}, X_{k-1} = j) \\
&= \sum_{j=1}^{N-1} \mathbb{P}(X_k \notin \{0, N\} | X_{k-1} = j, X_0 = i) \mathbb{P}_i(X_{k-1} = j) \\
&= \sum_{j=1}^{N-1} \mathbb{P}_j(X_1 \notin \{0, N\}) \mathbb{P}_i(X_{k-1} = j) \\
&\leq q \sum_{j=1}^{N-1} \mathbb{P}_i(X_{k-1} = j) = q \mathbb{P}_i(\tau > k-1).
\end{aligned}$$

En itérant, on en déduit que $\mathbb{P}_i(\tau > k) \leq q^{k-1} \mathbb{P}_i(\tau > 1) \leq q^k$ et donc $\mathbb{P}_i(\tau = +\infty) = 0$ car $q < 1$. Ceci implique que p.s. τ est fini.

On remarque que :

$$X_n = X_\tau \mathbf{1}_{\{\tau \leq n\}} + X_n \mathbf{1}_{\{\tau > n\}}.$$

Comme τ est fini p.s., on a donc p.s. $\lim_{n \to +\infty} X_n = X_\tau$. Comme $0 \leq X_n \leq N$ pour tout $n \in \mathbb{N}$, il vient par convergence dominée :

$$\lim_{n \to +\infty} \mathbb{E}[X_n | X_0] = \mathbb{E}[X_\tau | X_0].$$

Comme, conditionnellement à X_{n-1}, X_n suit la loi de Bernoulli de paramètre $(N, X_{n-1}/N)$, on a :

$$\mathbb{E}[X_n | X_{n-1}, X_0] = \mathbb{E}[X_n | X_{n-1}] = N \frac{X_{n-1}}{N} = X_{n-1}.$$

On en déduit que $\mathbb{E}[X_n|X_0] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[X_n|X_{n-1}, X_0]|X_0] = \mathbb{E}[X_{n-1}|X_0]$. En itérant, il vient $\mathbb{E}[X_n|X_0] = \mathbb{E}[X_0|X_0] = X_0$. On obtient donc $\mathbb{E}[X_\tau|X_0] = X_0$. De plus comme $X_\tau \in \{0, N\}$, on a $\mathbb{E}[X_\tau|X_0] = N\mathbb{P}(X_\tau = N|X_0)$. On en déduit donc que $\mathbb{P}(X_\tau = N|X_0) = X_0/N$. □

Remarque II.7.37. Il est intéressant d'étudier le temps moyen où disparaît la diversité : $t_i = \mathbb{E}_i[\tau]$, pour $i \in \{0, \dots, N\}$. Bien sûr, on a $t_0 = t_N = 0$. Pour $1 \le i \le N-1$, on a :

$$\begin{aligned} t_i &= \sum_{j\in\{0,\dots,N\}} \mathbb{E}_i[\tau \mathbf{1}_{\{X_1=j\}}] \\ &= 1 + \sum_{j\in\{0,\dots,N\}} \mathbb{E}[\inf\{k \ge 0; X_{k+1} \in \{0, N\}\}\mathbf{1}_{\{X_1=j\}}] \\ &= 1 + \sum_{j\in\{0,\dots,N\}} \mathbb{E}_j[\tau]\mathbb{P}_i(X_1 = j) \\ &= 1 + PT(i), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé la propriété de Markov à l'instant 1 pour la troisième égalité et T est la fonction définie par $T(i) = t_i$. Comme 0 et N sont des états absorbants, on a $t_i = \sum_{j\in\{0,\dots,N\}} P(i, j)t_j = 0$ pour $i \in \{0, N\}$. Si on note e_0 (resp. e_N) le vecteur de $\mathbb{R}^{N+1}$ ne comportant que des 0 sauf un 1 en première (resp. dernière) position, et $\mathbf{1} = (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^{N+1}$, on a :

$$T = PT + \mathbf{1} - e_0 - e_N.$$

Le calcul des temps moyens où disparaît la diversité se fait donc en résolvant un système linéaire. Pour N grand, on a l'approximation suivante [18] pour $x \in [0, 1]$:

$$\mathbb{E}_{\lfloor Nx \rfloor}[\tau] \sim -2N\left(x\log(x) + (1 - x)\log(1 - x)\right).$$

où $\lfloor z \rfloor$ désigne la partie entière de z. Cette approximation est illustrée par le graphique II.17. ♢

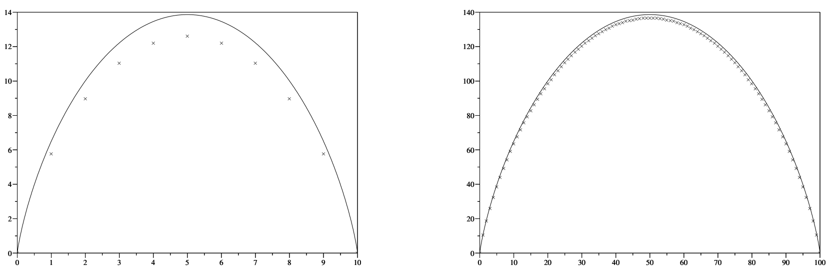


FIGURE II.17 – Temps moyen de disparition de la diversité ($k \mapsto \mathbb{E}_k[\tau]$) et son approximation continue, $Nx \mapsto 2N\left(x\log(x) + (1 - x)\log(1 - x)\right)$, pour $N = 10$ (à gauche) et $N = 100$ (à droite).

♢

Exemple II.7.38. **L'urne d'Ehrenfest**

Le modèle d'urne d'Ehrenfest [19] a été introduit en 1907 pour décrire la diffusion d'un gaz placé dans deux récipients mis en communication.

18. voir par exemple le livre de W. J. Ewens. *Mathematical population genetics.*, Springer-Verlag, second edition, 2004.

19. T. Ehrenfest et P. Ehrenfest : The conceptual foundations of the statistical approach in mechanics, *Ithaca, NY, Cornell Univ. Press* (1959)

On considère un système de N molécules de gaz qui sont réparties dans deux récipients A et B identiques. À chaque instant on choisit au hasard une particule et on la change de récipient. On note X_n le nombre de particules dans le récipient A à l'instant n et X_0 est la configuration initiale. La suite $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ représente l'évolution du nombre de molécules de gaz dans le récipient A. L'état d'équilibre correspond à N_0 molécules dans A, avec $N_0 = N/2$ si N est pair et, par convention, $N_0 = (N-1)/2$ sinon. Les états extrêmes, où presque toutes les particules sont soit dans le récipient A soit dans le récipient B sont possibles dans ce modèle. Pourtant, ils sont improbables dans la réalité. Pour expliquer ce paradoxe, nous étudions, à l'aide des résultats sur les chaînes de Markov, les quantités suivantes : le temps moyen passé au voisinage de l'état d'équilibre, la moyenne du temps de retour à l'équilibre et du temps de retour à un état extrême, ainsi les temps de transition d'un état extrême à l'état d'équilibre et vice-versa.

Remarquons que la suite X est une chaîne de Markov irréductible. Sa matrice de transition P est définie par $P(x,y) = 0$ si $|x-y| \neq 1$ et $P(x, x+1) = (N-x)/N$, $P(x, x-1) = x/N$ pour $x \in \{0, \dots, N\}$. Vérifions que P est réversible par rapport à la loi binomiale de paramètre $(N, 1/2)$, que l'on note π_N. Comme $P(x,y) = 0$ si $|x-y| \neq 1$, il suffit de vérifier que $\pi(x)P(x, x+1) = \pi(x+1)P(x+1, x)$ pour $x \in \{0, \dots, N-1\}$. Pour $x \in \{0, \dots, N-1\}$, on a :

$$\pi(x+1)P(x+1,x) = \binom{N}{x+1} 2^{-N} \frac{x+1}{N} = \binom{N}{x} 2^{-N} \frac{N-x}{N} = \pi(x)P(x, x+1).$$

En particulier, d'après le lemme II.7.12 et le corollaire II.7.23, on en déduit que π_N est l'unique probabilité invariante de X.

Le temps moyen passé par le système dans $I \subset \{0, \dots, N\}$, $\displaystyle\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k \in I\}}$ converge vers $\pi_N(I)$ quand n tend vers l'infini, d'après le corollaire II.7.23. Après avoir remarqué que π_N est la loi de la somme de N variables aléatoires indépendantes de même loi de Bernoulli de paramètre $1/2$, on déduit du théorème central limite que pour N grand, $\pi_N(I_{a,N})$, avec $I_{a,N} = [N_0 \pm \frac{1}{2} a\sqrt{N}]$ et $a > 0$, converge, quand N tend vers l'infini, vers $\mathbb{P}(G \in [-a, a])$ où G est une gaussienne de loi $\mathcal{N}(0,1)$. Pour a de l'ordre de quelques unités, cette probabilité est très proche de 1, voir les tableaux du paragraphe III.3.2. En particulier, le temps moyen passé par le système dans le voisinage de l'état d'équilibre $I_{a,N}$ est très proche de 1, pour a de l'ordre de quelques unités. Ainsi, on observe très rarement des états loin de l'équilibre N_0 à plus de quelques unités fois $\sqrt{N}$. Toujours après avoir remarqué que π_N est la loi de la somme de N variables aléatoires indépendantes de même loi de Bernoulli de paramètre $1/2$, on déduit du théorème de grande déviation II.4.20 et de (II.19) avec $p = 1/2$ que pour $\varepsilon \in [0,1]$, quand N tend vers l'infini, on a $\frac{2}{N}\log(\pi_N([0, N(1-\varepsilon)/2])) \sim -(1+\varepsilon)\log(1+\varepsilon) - (1-\varepsilon)\log(1-\varepsilon)$. Ainsi la probabilité d'observer des états loin de l'équilibre N_0 à plus de quelques unités fois N décroît exponentiellement vite vers 0 avec N.

Le temps moyen de retour à l'état d'équilibre N_0 est donné, d'après (II.40), par $1/\pi_N(N_0)$. Un calcul élémentaire, utilisant la formule de Stirling (voir le lemme I.4.8), donne l'équivalent suivant du temps moyen de retour à l'état d'équilibre $1/\pi_N(N_0) \sim \sqrt{\pi N/2}$. En revanche le temps moyen de retour dans l'état extrême 0 est $1/\pi_N(0) = 2^N$. En particulier, le temps moyen de retour dans l'état extrême 0 n'est pas du tout du même ordre de grandeur que le temps moyen de retour dans l'état d'équilibre.

Dans le même état d'esprit, le lemme qui suit montre que le temps moyen de transition d'un état extrême vers l'état d'équilibre est bien plus faible que le temps moyen de transition de l'état d'équilibre vers un état extrême. On rappelle la définition du temps d'atteinte de l'état m : $T^m = \inf\{n \geq 1; X_n = m\}$. On note $t_{k,m} = \mathbb{E}_k[T^m]$ le temps moyen d'atteinte de l'état m partant de l'état k. Remarquons que $t_{m,m} = 1/\pi_N(m)$. Par symétrie, on a $t_{N-k,N-m} = t_{k,m}$. Il suffit donc de calculer $t_{k,m}$ pour $k < m$.

Lemme II.7.39. *Pour $k, m \in \{0, \dots, N\}$ et $k < m$, on a :*

$$t_{k,m} = \frac{N}{2} \int_0^1 \frac{du}{u} \, (1-u)^{N-m}(1+u)^k \left[(1+u)^{m-k} - (1-u)^{m-k}\right], \tag{II.52}$$

ainsi que les équivalents suivants quand N tend vers l'infini :

$$t_{0,N_0} \sim \frac{N}{4}\log(N) \quad \textit{et} \quad t_{N_0,0} \sim 2^N.$$

Démonstration. En décomposant suivant la valeur de X_1 (voir aussi les calculs de la remarque page 182) il est immédiat d'obtenir $t_{0,m} = 1 + t_{1,m}$, $t_{m-1,m} = 1 + \frac{m-1}{N} t_{m-2,m}$ et pour $1 \leq k < m-1$, on a :

$$t_{k,m} = 1 + \frac{k}{N} t_{k-1,m} + \frac{N-k}{N} t_{k+1,m}.$$

On pose $b_k = N \int_0^1 (1+u)^k (1-u)^{N-k-1}\, du$. Il est élémentaire de vérifier que $t_{k,m} = \sum_{i=k}^{m-1} b_i$ et d'obtenir ainsi (II.52).

On suppose N pair, de sorte que $N = 2N_0$. Pour $r \in \mathbb{N}^*$, on pose :

$$I_r = \int_0^1 \frac{du}{u} \left(1 - (1-u)^r\right).$$

Un changement de variable élémentaire permet d'obtenir :

$$t_{0,N_0} = N_0 I_{2N_0} - N_0 \int_0^1 \frac{du}{u} \left(1 - (1-u^2)^{N_0}\right) = N_0 I_{2N_0} - \frac{N_0}{2} I_{N_0}.$$

Pour étudier I_r, on écrit :

$$I_r = \int_0^1 \frac{du}{u} \left(1 - \mathrm{e}^{-ru}\right) + \int_0^1 \frac{du}{u} \left(\mathrm{e}^{-ru} - (1-u)^r\right).$$

Il est immédiat de vérifier que, pour $u \in [0,1]$, $1 - u \leq \mathrm{e}^{-u} \leq 1 - u + u^2/2$. En particulier on a pour $u \in [0,1]$:

$$0 \leq \mathrm{e}^u (1-u) \leq 1 \quad \text{et} \quad 0 \leq 1 - \mathrm{e}^u(1-u) \leq \mathrm{e}^u \frac{u^2}{2}.$$

On déduit du lemme I.5.13 que, pour $r \geq 2$:

$$\begin{aligned}\int_0^1 \frac{du}{u} \left|\mathrm{e}^{-ru} - (1-u)^r\right| = \int_0^1 \frac{du}{u} \mathrm{e}^{-ru} \left|1 - (\mathrm{e}^u(1-u))^r\right| &\leq r \int_0^1 \frac{du}{u} \mathrm{e}^{-ru} \left|1 - \mathrm{e}^u(1-u)\right| \\ &\leq \frac{r}{2} \int_0^1 du\; u\, \mathrm{e}^{-(r-1)u} \\ &\leq \frac{r}{2(r-1)^2} \int_0^{r-1} u\, \mathrm{e}^{-u} \; du \leq 1.\end{aligned}$$

Par ailleurs, on a :

$$\int_0^1 \frac{du}{u} \left(1 - \mathrm{e}^{-ru}\right) = \int_0^r \frac{du}{u} \left(1 - \mathrm{e}^{-u}\right) = \int_0^1 \frac{du}{u} \left(1 - \mathrm{e}^{-u}\right) + \log(r) - \int_1^r \frac{du}{u} \mathrm{e}^{-u} = \log(r) + O(1).$$

On en déduit que $I_r = \log(r) + O(1)$ et donc :

$$t_{0,N_0} = N_0 I_{2N_0} - \frac{N_0}{2} I_{N_0} = \frac{N}{4}\log(N) + O(N).$$

Pour N impair, le calcul est similaire.

On étudie maintenant $t_{N_0,0}$. On suppose N pair. Il vient :

$$\begin{aligned} t_{N_0,0} &= N_0 \int_0^1 \frac{du}{u} \, \left((1+u)^N - 1\right) + N_0 \int_0^1 \frac{du}{u} \, \left(1-(1-u)^N\right) \\ &= N_0 \int_0^1 \frac{du}{u} \, \left((1+\frac{u}{N})^N - 1\right) + N_0 \int_1^N \frac{du}{u} \, (1+\frac{u}{N})^N - N_0 \log(N) + N_0 I_N. \end{aligned}$$

Comme $(1+\frac{u}{N})^N \leq \mathrm{e}^u$, le théorème de convergence dominée assure que $\int_0^1 \frac{du}{u} \, \left((1+\frac{u}{N})^N - 1\right)$ converge quand N tend vers l'infini vers $\int_0^1 \frac{du}{u} \, (\mathrm{e}^u - 1)$ qui est fini. À l'aide d'une intégration par partie, on obtient que quand N tend vers l'infini :

$$\int_1^N \frac{du}{u} \, (1+\frac{u}{N})^N \sim 2^{N+1}/N.$$

On a vu que $I_r = \log(r) + O(1)$ et donc, il vient :

$$t_{N_0,0} \sim N_0 2^{N+1}/N = 2^N.$$

Pour N impair, le calcul est similaire. □

◊

Exemple II.7.40. **Modèle de file d'attente, modèle d'évolution d'un stock.** On considère une file d'attente $Y = (Y_n, n \in \mathbb{N})$, où Y_0 est le nombre initial de personnes dans la file d'attente et Y_n est le nombre de personnes dans la file d'attente quand le service du n-ième client se termine. On a $Y_{n+1} = (Y_n - 1 + E_{n+1})^+$, où E_{n+1} est le nombre de personnes arrivant durant le service du n-ième client.

Si l'on considère la chaîne de Markov $(X_n, n \in \mathbb{N})$ qui décrit le nombre de personnes dans la file d'attente aux instants où arrive un nouveau client, on obtient l'équation $X_{n+1} = (X_n + 1 - D_{n+1})^+$, avec D_{n+1} le nombre de personnes servies entre l'arrivée des n-ième et $n+1$-ième clients. On retrouve alors la même équation d'évolution que dans le modèle de l'exemple page 166 d'évolution d'un stock.

Ces exemples sont des cas particuliers du modèle plus général suivant. On considère la chaîne de Markov $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ définie pour $n \in \mathbb{N}$ par :

$$X_{n+1} = (X_n + Z_{n+1})^+, \tag{II.53}$$

où les variables aléatoires $(Z_n, n \in, \mathbb{N})$ à valeurs dans $\mathbb{N}$ sont indépendantes, de même loi, intégrables et indépendantes de X_0.

Le lemme suivant assure, sous quelques hypothèses techniques supplémentaires, que si $\mathbb{E}[Z_1] > 0$ alors X est transiente, si $\mathbb{E}[Z_1] = 0$ alors X est récurrente nulle, et si $\mathbb{E}[Z_1] < 0$ alors X est récurrente positive. Le graphique de droite (resp. gauche) de la figure II.15 donne un exemple de simulation dans le cas $\mathbb{E}[Z_1] = 0$ (resp. $\mathbb{E}[Z_1] < 0$).

Lemme II.7.41. *On considère la chaîne de Markov $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ définie par (II.53). On suppose que $\mathbb{P}(Z_1 > 0) > 0$, $\mathbb{P}(Z_1 < 0) > 0$ et le PGCD de $\{|x|; x > 0$ et $\mathbb{P}(Z_1 = x) > 0\}$ est 1. Alors X est irréductible.*

On suppose de plus que Z_1 est intégrable. On a alors les propriétés suivantes.

1. *Si $\mathbb{E}[Z_1] > 0$, alors X est transiente.*
2. *Si $\mathbb{E}[Z_1] = 0$ et Z_1 de carré intégrable, alors X est récurrente nulle.*
3. *Si $\mathbb{E}[Z_1] < 0$ et s'il existe $\lambda > 0$ tel que $\mathbb{E}[\mathrm{e}^{\lambda Z_1}] < +\infty$, alors X est récurrente positive.*

Démonstration. Comme $\mathbb{P}(Z_1 < 0) > 0$, on en déduit que pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, la chaîne X issue de n peut atteindre 0 avec probabilité strictement positive. Pour montrer que X est irréductible, il suffit donc de montrer que la chaîne X issue de 0 peut atteindre tout $n \in \mathbb{N}^*$ avec une probabilité strictement positive.

Soient n_+ le PGCD de $J_+ = \{x > 0; \mathbb{P}(Z_1 = x) > 0\}$ et n_- le PGCD de $J_- = \{x > 0; \mathbb{P}(Z_1 = -x) > 0\}$. On note $I = \{n; \text{il existe } k \text{ tel que } P^k(0, n) > 0\}$. Il est immédiat de vérifier que I est un sous-groupe de $\mathbb{N}^*$ stable par addition qui contient J_+ et tel que pour tous $n \in I$, $k \in J_-$ et $k < n$, on a $n - k \in I$.

On déduit de la démonstration de la propriété 1 de la proposition II.7.18 que pour n_0 suffisamment grand, pour tout $n \geq n_0$, on a $nn_+ \in J_+$ et $nn_- \in J_-$. Par hypothèse n_+ et n_- sont premiers entre eux. Donc, en prenant des nombres premiers $m_+ \geq n_0$ et $m_- \geq n_0$ et premiers avec n_+ et n_-, on a m_+n_+ et m_-n_- premiers entre eux, et donc d'après le théorème de Bézout, il existe $a, b \in \mathbb{Z}$ tels que $am_+n_+ + bm_-n_- = -1$. Remarquons que $m_+n_+ \in J_+$ et $m_-n_- \in J_-$. Si $a < 0$ et $b > 0$, on a $|a|m_+n_+ - bm_-n_- = 1$ et donc $1 \in I$ puis $I = \mathbb{N}^*$. Si $a > 0$ et $b < 0$, pour tout n, on a pour $m \geq \max(n, n_0)$, $n = mn_+ + (an_+m_+ - |b|n_-m_-)(mn_+ - n)$ et donc $n \in I$. On a donc obtenu $I = \mathbb{N}^*$. Ceci assure que X est irréductible.

On considère la marche aléatoire auxiliaire définie par $S_0 = X_0$ et $S_n = S_0 + \sum_{k=1}^{n} Z_k$. Il est immédiat de vérifier que $X_n \geq S_n$ et que sur $\{T^0 > n\}$ on a $X_n = S_n$.

On suppose $\mathbb{E}[Z_1] > 0$. La loi forte des grands nombres assure que p.s. $\lim_{n \to +\infty} S_n/n = \mathbb{E}[X_1]$ et donc p.s. $\lim_{n \to +\infty} S_n = +\infty$. On en déduit que p.s. $\lim_{n \to +\infty} X_n = +\infty$ et donc X est transiente.

On suppose $\mathbb{E}[Z_1] < 0$ et qu'il existe $\lambda_0 > 0$ tel que $\mathbb{E}[\mathrm{e}^{\lambda_0 Z_1}] < +\infty$. On considère Λ la log-Laplace de Z_1 : $\Lambda(\lambda) = \log(\mathbb{E}[\mathrm{e}^{\lambda Z_1}])$. En particulier Λ est bornée sur $[0, \lambda_0]$. La propriété 4 du lemme II.4.18 assure que la log-Laplace Λ de Z_1 est dérivable sur $]0, \lambda[$. On déduit de (II.18) que $\Lambda'(0+) = \mathbb{E}[Z_1] < 0$. Comme $\Lambda(0) = 0$, il existe $\lambda_1 > 0$ tel que $\Lambda(\lambda_1) < 0$. On déduit de (II.20) avec $x = 0$ que :

$$\mathbb{P}_0(T^0 > n) \leq \mathbb{P}_0(S_n > 0) \leq \mathrm{e}^{n\Lambda(\lambda_1)}.$$

Comme $\Lambda(\lambda_1) < 0$, on obtient que $\sum_{n \in \mathbb{N}} \mathbb{P}_0(T^0 > n) < +\infty$. On déduit du théorème de Fubini que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \mathbb{P}_0(T^0 > n) = \mathbb{E}_0[T^0]$. Ainsi $\mathbb{E}_0[T^0]$ est fini, ce qui assure que la chaîne est récurrente positive.

Il reste le cas le plus délicat. On suppose $\mathbb{E}[Z_1] = 0$ et Z_1 de carré intégrable. Montrons par l'absurde que la chaîne est récurrente. On suppose la chaîne X transiente. Comme sur $\{T^0 > n\}$ on a $X_n = S_n$, il vient :

$$\{T^0 = +\infty\} \overset{\text{p.s.}}{=} \{T^0 = +\infty, \lim_{n \to +\infty} X_n = +\infty\} \subset \{\lim_{n \to +\infty} S_n = +\infty\}.$$

La loi du 0-1 de Kolmogorov assure que l'événement $\{\lim_{n \to +\infty} S_n = +\infty\}$, qui est dans la tribu asymptotique engendrée par $(Z_n, n \in \mathbb{N}^*)$, est de probabilité égale à 0 ou 1. Remarquons que $\mathbb{P}(S_n \geq 0) = \mathbb{P}(S_n/\sqrt{n} \geq 0)$ et que le théorème de la limite centrale assure que cette quantité converge vers $\mathbb{P}(G \geq 0)$ où G est de loi gaussienne $\mathcal{N}(0, \mathrm{Var}(Z_1))$. On en déduit que :

$$\mathbb{P}(\lim_{n \to +\infty} S_n = +\infty) \leq \lim_{n \to +\infty} \mathbb{P}(S_n \geq 0) = 1/2,$$

puis que $\mathbb{P}(\lim_{n \to +\infty} S_n = +\infty) = 0$ et donc $\mathbb{P}(T^0 = +\infty) = 0$. Ceci est absurde, donc X est récurrente.

Montrons que X est récurrente nulle. Soient $K > 0$ et $\varepsilon > 0$. On a pour $n \geq K^2/\varepsilon^2$:

$$\mathbb{P}(X_n \geq K) \geq \mathbb{P}(\frac{S_n}{\sqrt{n}} \geq \frac{K}{\sqrt{n}}) \geq \mathbb{P}(\frac{S_n}{\sqrt{n}} \geq \varepsilon).$$

On déduit du théorème central limite que $\liminf_{n \to +\infty} \mathbb{P}(X_n \geq K) \geq \mathbb{P}(G \geq \varepsilon)$. Comme $\varepsilon > 0$ est arbitraire, on obtient $\liminf_{n \to +\infty} \mathbb{P}(X_n \geq K) \geq 1/2$ pour tout K. Supposons que la chaîne soit récurrente positive.

On déduit de (II.42) que p.s. $\lim_{n\to+\infty} \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k\geq x\}} = \sum_{x\geq K} \pi(x)$. Le théorème de convergence dominée assure alors que :

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbb{P}(X_k \geq x) = \sum_{x\geq K} \pi(x).$$

On obtient donc que $\sum_{x\geq K} \pi(x) \geq 1/2$ pour tout $K > 0$. Ceci est absurde. On en déduit que X est récurrente nulle. □

◊