

UNIVERSITÉ DE LILLE 1

SCIENCES ET TECHNOLOGIES

MASTER 1 ISN

Chaînes de Markov cachées

Auteurs :

Amélie GUILBAUT

Axel BELOTTI

Encadrant :

Mme SCHMISSER

11 mai 2018



Remerciements

Nous voudrions présenter nos remerciements à notre encadrante Mme Schmisser. Nous voudrions également lui témoigner notre gratitude pour son soutien et ses conseils qui nous ont été précieux afin de mener à bien notre travail et pour nous avoir donné l'occasion de nous intéresser aux chaînes de Markov cachées.

Table des matières

Introduction	5
1 Chaînes de Markov	6
1.1 Chaînes de Markov homogènes	6
1.1.1 Définitions	6
1.1.2 Condition nécessaire et suffisante	7
1.1.3 Propriétés	8
1.2 Propriété de Markov forte	10
1.3 Récurrence, irréductibilité	11
1.3.1 Retours à l'état x	11
1.3.2 États récurrents	12
1.3.3 Irréductibilité	14
1.3.4 Excursions	14
1.4 Probabilité invariante	16
1.4.1 Mesure invariante	16
1.4.2 États récurrents positifs et probabilité invariante	19
2 Théorèmes de convergence	22
2.1 Théorèmes ergodiques	22
2.1.1 Théorème ergodique à une variable	22
2.1.2 Théorème ergodique à deux variables	25
2.2 Théorème central limite	26
3 Statistiques des chaînes de Markov	33
3.1 Simulation de chaînes de Markov	33
3.1.1 Simulation	33
3.1.2 Calcul de la loi stationnaire	33
3.1.3 Exemple : cas d'une chaîne de Markov à 2 états	34
3.1.4 Application 1 : vérification du théorème ergodique	36
3.1.5 Application 2 : vérification du théorème central limite	38
3.2 Estimation de matrice de transition	39
3.2.1 Estimation par maximum de vraisemblance	39
3.2.2 Propriétés de l'estimateur	41

3.2.3	Exemple : cas d'une chaîne de Markov à 2 états	43
4	Chaînes de Markov cachées	45
4.1	Définition	45
4.2	Modélisation de la structure d'un brin d'ADN	45
4.2.1	Le modèle	45
4.2.2	Propriétés	46
4.3	Algorithme progressif-rétrograde	46
4.3.1	Équations de prédiction, de filtrage et de lissage	46
4.3.2	L'algorithme	49
4.3.3	Simulations	50
4.4	Estimation de matrice de transition pour une chaîne de Markov cachée	53
4.4.1	Estimation par maximum de vraisemblance	54
4.4.2	Estimation par l'algorithme EM	55
4.4.3	Application à des données simulées	59
	Conclusion	62
	Les Fonctions R	64
	Chaînes de Markov	64
	Modèle de Markov caché : structure de l'ADN	65
	Bibliographie	71

Introduction

Le but de ce TER est d'étudier un modèle aléatoire basé sur les chaînes de Markov. Les chaînes de Markov sont des suites de variables aléatoires qui ne sont pas indépendantes et identiquement distribuées mais qui présentent une structure particulière. En effet, dans une chaîne de Markov, le passé n'apporte pas plus d'information que le présent dans la détermination du futur. Les chaînes de Markov sont utilisées pour modéliser l'évolution dynamique de systèmes aléatoires : on peut voir les réalisations d'une chaîne de Markov comme des trajectoires au cours du temps.

Le modèle qu'on va étudier s'appelle une chaîne de Markov cachée, aussi appelé modèle de Markov caché (MMC) dans la littérature. C'est une chaîne de Markov à deux composantes qui a la particularité de n'avoir qu'une seule de ses deux composantes qui est observable, l'autre étant inconnue (ou cachée).

Les chaînes de Markov cachées ont été décrites pour la première fois dans des publications de statistiques dans les années 60. Dans la fin des années 70, elles ont été appliquées à la reconnaissance vocale. Elles ont aussi été utilisées dans d'autres domaines comme la reconnaissance de l'écriture manuscrite, l'intelligence artificielle et la bio-informatique (par exemple pour la prédiction de gènes). On s'intéressera ici à cette dernière application.

La séquence de l'ADN est une suite de caractères (A,C,G,T) qui correspondent aux différents nucléotides qui le compose. Certaines suites de caractères correspondent à un gène et sont dites codantes : elles sont destinées à être traduites en protéines. Les autres parties sont dites non codantes. La prédiction de gène consiste à déterminer quelles sont les parties codantes de l'ADN. Pour déterminer ces parties, il y a deux approches. La première consiste à utiliser une base de données contenant des séquences connues. La deuxième consiste à travailler uniquement sur la séquence inconnue.

Avant de parler de chaînes de Markov cachées, il faut définir ce qu'est une chaîne de Markov et voir différentes propriétés utiles pour la suite. Ensuite, pour pouvoir faire des statistiques sur les chaînes de Markov, on va établir les théorèmes de convergence habituels. On verra aussi comment simuler des chaînes de Markov sur \mathbb{R} . Enfin, on verra comment, à partir des chaînes de Markov, on peut modéliser la structure de l'ADN et utiliser ce modèle pour faire de la prédiction de gènes.

Partie 1

Chaînes de Markov

Dans cette première partie, on va définir formellement les chaînes de Markov. On verra aussi les différentes notions et propriétés qui nous serviront pour la suite.

Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé. Soit E un ensemble fini ou infini dénombrable.

1.1 Chaînes de Markov homogènes

1.1.1 Définitions

Définition 1.1. Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une suite de variables aléatoires sur $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ à valeurs dans E . $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov si pour tout $n \in \mathbb{N}$ et pour tous $(x_0, \dots, x_{n+1}) \in E^{n+1}$ on a

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n)$$

E est appelé l'espace des états. Pour $n \in \mathbb{N}$, X_n est l'état de la chaîne à l'instant n . En particulier, X_0 est l'état initial de la chaîne.

Remarque. Une réalisation du vecteur aléatoire (X_0, \dots, X_n) est parfois appelée trajectoire de la chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$.

Remarque. La propriété ci-dessus s'appelle la propriété de Markov. On peut aussi l'énoncer de cette façon : conditionnellement au présent, le futur et le passé sont indépendants.

Définition 1.2. Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov d'espace d'états E . $\{X_n, n \geq 0\}$ est dite homogène si $\mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_n = x)$ ne dépend que de x et de y .

Dans toute la suite, on ne considèrera que des chaînes de Markov homogènes d'espace d'états E .

Définition 1.3. Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov telle que pour tous $x, y \in E$, $\mathbb{P}(X_1 = y | X_0 = x) = P(x, y)$ et $\mathbb{P}(X_0 = x) = \mu(x)$. Alors :

- (a) la matrice P définie par $P = (P(x, y))_{x, y \in E}$ est la matrice de transition de la chaîne de Markov.
- (b) le vecteur μ défini par $\mu = (\mu(x))_{x \in E}$ est la loi initiale de la chaîne de Markov.

On dit que $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P et de loi initiale μ .

1.1.2 Condition nécessaire et suffisante

Pour simplifier les notations on notera $X_{0:n}$ au lieu de (X_0, \dots, X_n) et $x_{0:n}$ au lieu de (x_0, \dots, x_n) .

Proposition 1.4. Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une suite de variables aléatoires. $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P et de loi initiale μ si et seulement si pour tout $n \in \mathbb{N}$ la loi du vecteur aléatoire (X_0, \dots, X_n) est donnée par :

$$\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = \mu(x_0)P(x_0, x_1) \dots P(x_{n-1}, x_n).$$

Démonstration.

\Rightarrow Supposons que $\{X_n, n \geq 0\}$ soit une chaîne de Markov de matrice de transition P et de loi initiale μ . Soit $n \in \mathbb{N}$. On a :

$$\mathbb{P}(X_{0:n} = x_{0:n}) = \mathbb{P}(X_n = x_n | X_{0:n-1} = x_{0:n-1}) \mathbb{P}(X_{0:n-1} = x_{0:n-1}).$$

Puis par définition d'une chaîne de Markov,

$$\mathbb{P}(X_{0:n} = x_{0:n}) = \mathbb{P}(X_n = x_n | X_{n-1} = x_{n-1}) \mathbb{P}(X_{0:n-1} = x_{0:n-1}).$$

Comme P est la matrice de transition de $\{X_n, n \geq 0\}$,

$$\mathbb{P}(X_{0:n} = x_{0:n}) = P(x_{n-1}, x_n) \mathbb{P}(X_{0:n-1} = x_{0:n-1}).$$

On obtient par itérations :

$$\mathbb{P}(X_{0:n} = x_{0:n}) = P(x_{n-1}, x_n) \dots P(x_0, x_1) \mathbb{P}(X_0 = x_0).$$

Enfin, on conclut en utilisant le fait que μ est la loi initiale de $\{X_n, n \geq 0\}$:

$$\mathbb{P}(X_{0:n} = x_{0:n}) = P(x_{n-1}, x_n) \dots P(x_0, x_1) \mu(x_0).$$

⊞ Supposons maintenant que pour tout $n \in \mathbb{N}$ la loi de (X_0, \dots, X_n) est donnée par :

$$\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = \mu(x_0)P(x_0, x_1) \dots P(x_{n-1}, x_n).$$

Soient $k \in \mathbb{N}$ et $(x_0, \dots, x_{k-1}, x, y) \in E^{k+2}$.

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{k+1} = y | X_{0:k} = (x_{0:k-1}, x)) &= \frac{\mathbb{P}(X_{0:k+1} = (x_{0:k-1}, x, y))}{\mathbb{P}(X_{0:k} = (x_{0:k-1}, x))} \\ &= \frac{\mu(x_0)P(x_0, x_1) \dots P(x_{k-1}, x)P(x, y)}{\mu(x_0)P(x_0, x_1) \dots P(x_{k-1}, x)} \\ &= P(x, y). \end{aligned}$$

Donc $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov homogène de matrice de transition P .

L'hypothèse nous donne aussi avec $n = 0$ et $x \in E$, $\mathbb{P}(X_0 = x) = \mu(x)$. Donc $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P et de loi initiale μ .

□

1.1.3 Propriétés

Proposition 1.5. Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov de matrice de transition P . La matrice P est dite stochastique, c'est à dire qu'elle vérifie les deux propriétés suivantes :

- (a) $\forall x, y \in E, P(x, y) \geq 0$
- (b) $\forall x \in E, \sum_{y \in E} P(x, y) = 1$.

Démonstration.

(a) Soient $x, y \in E$. $P(x, y) \geq 0$ car $P(x, y)$ est une probabilité.

(b) Soit $x \in E$

$$\begin{aligned} \sum_{y \in E} P(x, y) &= \sum_{y \in E} \mathbb{P}(X_1 = y | X_0 = x) \\ &= \mathbb{P}\left(X_1 \in \bigcup_{y \in E} \{y\} \mid X_0 = x\right) \\ &= \mathbb{P}(X_1 \in E | X_0 = x) \\ &= 1. \quad \square \end{aligned}$$

On considérera une probabilité (et plus généralement une mesure) μ sur E comme un vecteur ligne et une fonction g de E dans \mathbb{R} comme un vecteur colonne. On peut donc définir les notations suivantes :

$$\begin{aligned} (\mu P)(y) &= \sum_{x \in E} \mu(x)P(x, y) \\ (Pg)(y) &= \sum_{x \in E} P(x, y)g(x) \end{aligned}$$

Proposition 1.6. Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov de loi initiale μ et de matrice de transition P . Alors :

- (a) $\mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x) = \mathbb{P}(X_{n+p} = y | X_p = x) = P^n(x, y)$
- (b) $\mathbb{P}(X_n = y) = (\mu P^n)(y)$
- (c) $\mathbb{E}[g(X_n) | X_0 = x] = (P^n g)(x)$.

Démonstration.

$$\begin{aligned}
\text{(a)} \quad & \mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x) \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} \mathbb{P}(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_1 = x_1 | X_0 = x) \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} \mathbb{P}(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_2 = x_2 | X_1 = x_1, X_0 = x) \mathbb{P}(X_1 = x_1 | X_0 = x) \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} \mathbb{P}(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_2 = x_2 | X_1 = x_1) \times P(x, x_1) \\
&= \dots \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} \mathbb{P}(X_n = y | X_{n-1} = x_{n-1}) \times P(x_{n-2}, x_{n-1}) \dots \times P(x, x_1) \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} P(x, x_1) \times \dots \times P(x_{n-1}, y) = P^n(x, y).
\end{aligned}$$

De même,

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_{n+p} = y | X_p = x) &= \sum_{x_{p+1}, \dots, x_{n+p-1}} P(x, x_{p+1}) \times \dots \times P(x_{n+p-1}, y) \\
&= P^n(x, y).
\end{aligned}$$

(b) On remarque que

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_n = y) &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(X_n = y, X_0 = x) \\
&= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x) \times \mu(x) \\
&= \sum_{x \in E} P^n(x, y) \times \mu(x) \\
&= (\mu P^n)(y).
\end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[g(X_n) | X_0 = x] &= \sum_{y \in E} g(y) \times \mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x) \\
&= \sum_{y \in E} P^n(x, y) \times g(y) \\
&= (P^n g)(x). \quad \square
\end{aligned}$$

1.2 Propriété de Markov forte

Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov.

Pour simplifier les notations nous allons noter \mathbb{P}_x la probabilité conditionnelle sachant $X_0 = x$, c'est-à-dire $\mathbb{P}_x(A) = \mathbb{P}(A|X_0 = x)$.

$\mathcal{F}_n = \{\{w; (X_0(w), \dots, X_n(w)) \in B_n\}, B_n \in \mathcal{P}(E^{n+1})\}$.

Théorème 1.7. *Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov de loi initiale μ et de matrice de transition P . Alors pour tout $A \in \mathcal{F}_n$ et pour tout $m \geq 1$, $x_1, \dots, x_m \in E$,*

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(A \cap \{X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+m} = x_m\} | X_n = x) \\ &= \mathbb{P}(A | X_n = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m). \end{aligned}$$

Démonstration. Il suffit de faire la preuve dans le cas $A = \{X_0 = y_0, X_1 = y_1, \dots, X_n = y_n\}$ car A est une réunion au plus dénombrable d'éléments disjoints de cette forme, grâce à la σ -additivité de \mathbb{P} on en déduit le cas général.

Si $y_n \neq x$ alors $\mathbb{P}(A \cap \{X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+m} = x_m\} | X_n = x) = 0$

et $\mathbb{P}(A | X_n = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m) = 0$.

Dans le cas $y_n = x$

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(A \cap \{X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+m} = x_m\} | X_n = x) \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_0 = y_0, \dots, X_n = x, X_{n+1} = x_1 \dots X_{n+m} = x_m)}{\mathbb{P}(X_n = x)} \end{aligned}$$

ce qui vaut, d'après la proposition 1.6

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(X_n = x)} P(x, x_1) P(x_1, x_2) \dots P(x_{m-1}, x_m) \\ &= \mathbb{P}(A | X_n = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m). \end{aligned}$$

□

Définition 1.8. Soit T une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{N} \cup \{+\infty\}$. On dira que T est un temps d'arrêt si pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\{T = n\} \subset \mathcal{F}_n$.

Théorème 1.9 (Propriété de Markov forte). *Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov de loi initiale μ et de matrice de transition P et T un temps d'arrêt. Alors pour tout $A \in \mathcal{F}_T$ et pour tout $m \geq 1$, $x_1, \dots, x_m \in E$,*

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(A \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\} | X_T = x, T < \infty) \\ &= \mathbb{P}(A | X_T = x, T < \infty) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m). \end{aligned}$$

où $\mathcal{F}_T = \sigma(X_0, \dots, X_T)$.

Démonstration. $\forall n \in \mathbb{N}$ on obtient d'après le théorème 1.7 que

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(A \cap \{T = n\} \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\} | X_T = x) \\ &= \mathbb{P}(A \cap \{T = n\} \cap \{X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+m} = x_m\} | X_n = x) \\ &= \mathbb{P}(A \cap \{T = n\} | X_T = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m). \end{aligned}$$

De plus,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(A \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\} | X_T = x, T < \infty) \\ &= \frac{\mathbb{P}(A \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\}, X_T = x, T < \infty)}{\mathbb{P}(X_T = x, T < \infty)} \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} \mathbb{P}(A \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\}, X_T = x, \{T = n\})}{\mathbb{P}(X_T = x, T < \infty)} \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} \mathbb{P}(A \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\}, \{T = n\} | X_T = x) \mathbb{P}(X_T = x)}{\mathbb{P}(X_T = x, T < \infty)} \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} \mathbb{P}(A \cap \{T = n\} | X_T = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m) \mathbb{P}(X_T = x)}{\mathbb{P}(X_T = x, T < \infty)} \\ &= \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m) \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} \mathbb{P}(A \cap \{T = n\}, X_T = x)}{\mathbb{P}(X_T = x, T < \infty)} \\ &= \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m) \frac{\mathbb{P}(A \cap T < \infty, X_T = x)}{\mathbb{P}(X_T = x, T < \infty)} \\ &= \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m) \mathbb{P}(A | X_T = x, T < \infty). \end{aligned}$$

□

1.3 Récurrence, irréductibilité

Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov et soit $x \in E$ fixé.

1.3.1 Retours à l'état x

Définition 1.10. On définit la variable aléatoire $S_n(x)$ pour tout $n \in \mathbb{N}^*$ par :

$$\begin{cases} S_1(x) = \inf\{k > 0, X_k = x\} \\ S_n(x) = \inf\{k > S_{n-1}(x), X_k = x\} \text{ pour } n > 2 \end{cases}$$

$S_1(x)$ est l'instant du premier retour à l'état x .

$S_n(x)$ est l'instant du n -ième retour à l'état x .

Remarque. Si il n'y a pas d'ambiguïté, on notera simplement S_n au lieu de $S_n(x)$ pour tout $n \in \mathbb{N}^*$.

Proposition 1.11. *Soit $n \in \mathbb{N}^*$. Alors $S_n(x)$ est un temps d'arrêt.*

Démonstration. On rappelle que pour tout entier naturel j , $\mathcal{F}_j = \sigma(X_0, \dots, X_j)$ est la tribu engendrée par $(X_l)_{0 \leq l \leq j}$, c'est à dire la plus petite tribu qui rend mesurable X_l pour tout $0 \leq l \leq j$. Montrons que S_1 est un temps d'arrêt. Soit $m \in \mathbb{N}^*$.

— Si $m = 1$, alors

$$\{S_1 = m\} = \{X_0 = x, X_1 = x\} \in \mathcal{F}_1.$$

— Si $m > 1$, alors

$$\{S_1 = m\} = \{X_0 = x, X_1 \neq x, \dots, X_{m-1} \neq x, X_m = x\} \in \mathcal{F}_m.$$

Donc S_1 est un temps d'arrêt. On montre de même que S_n est un temps d'arrêt, pour $n > 2$. \square

Définition 1.12. On pose $N_n(x) = \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_k=x\}}$ et $N_x = \lim_{n \rightarrow +\infty} N_n(x)$.

$N_n(x)$ est le nombre de retours à l'état x avant l'instant n et N_x est le nombre de retours à l'état x .

1.3.2 États récurrents

Définition 1.13. L'état x est dit récurrent si, partant de l'état x , la probabilité que la chaîne de Markov retourne à l'état x en un temps fini est égale à 1 : $\mathbb{P}_x(S_1 < +\infty) = 1$. L'état x est dit transitoire s'il n'est pas récurrent.

Proposition 1.14. *L'état x est récurrent si et seulement si le nombre de passages en x en partant de x est presque sûrement infini : $\mathbb{P}_x(N_x = +\infty) = 1$.*

Démonstration. On suppose que l'état x est récurrent. On a :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(S_2 < +\infty) &= \mathbb{P}_x(S_2 < +\infty, S_1 < +\infty) \\ &= \mathbb{P}_x(S_2 < +\infty | S_1 < +\infty) \mathbb{P}_x(S_1 < +\infty) \\ &= \sum_{n \geq 1} \mathbb{P}_x(S_2 = S_1 + n | S_1 < +\infty) \mathbb{P}_x(S_1 < +\infty). \end{aligned}$$

Puis d'après la propriété de Markov forte,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(S_2 = S_1 + n | S_1 < +\infty) &= \mathbb{P}_x((X_{S_1+i} \neq x)_{1 < i < n-1}, X_{S_1+n} = x | S_1 < +\infty) \\ &= \mathbb{P}_x((X_i \neq x)_{1 < i < n-1}, X_n = x) \\ &= \mathbb{P}_x(S_1 = n). \end{aligned}$$

Et donc :

$$\mathbb{P}_x(S_2 < +\infty) = (\mathbb{P}_x(S_1 < +\infty))^2.$$

Et enfin :

$$\mathbb{P}_x(N_x \geq 2) = (\mathbb{P}_x(S_1 < +\infty))^2.$$

Par itérations, on a que pour tout $k \geq 2$,

$$\mathbb{P}_x(N_x \geq k) = (\mathbb{P}_x(S_1 < +\infty))^k = 1.$$

On en déduit finalement que :

$$\mathbb{P}_x(N_x = +\infty) = 1.$$

Réciproquement, si $\mathbb{P}_x(N_x = +\infty) = 1$ alors $\mathbb{P}_x(S_1(x) < +\infty) = 1$, donc x est récurrent. \square

On en déduit une deuxième condition nécessaire et suffisante permettant de caractériser un état récurrent :

Proposition 1.15. *Un état x est récurrent si et seulement si $\mathbb{E}_x[N_x] = +\infty$.*

Démonstration. D'après la proposition 1.14, si x est récurrent alors N_x est infini presque sûrement et donc $\mathbb{E}_x[N_x] = +\infty$. Pour montrer la réciproque, on va raisonner par contraposée. Supposons que x est transitoire et montrons que l'espérance de N_x sous \mathbb{P}_x est finie. Si on montre que N_x suit une loi géométrique alors on aura montré le résultat. Posons :

$$q = 1 - \mathbb{P}_x(S_1 < +\infty) = \mathbb{P}_x(S_1 = +\infty).$$

- $\mathbb{P}_x(N_x = 0) = q$. Si $q = 1$ alors $N_x = 0$ p.s. et alors $\mathbb{E}_x[N_x] < +\infty$ et on a fini. Supposons maintenant que $q \neq 1$.
- Soit $k \geq 1$. Montrons que

$$\mathbb{P}_x(N_x = k) = \mathbb{P}_x(N_x = k - 1)(1 - q).$$

On a : $\{N_x = k\} \subset \{S_1 < \infty\}$ et comme $q \neq 1$, on peut écrire :

$$\mathbb{P}_x(N_x = k) = \mathbb{P}_x(N_x = k | S_1 < \infty) \mathbb{P}_x(S_1 < \infty).$$

Or,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(N_x = k | S_1 < \infty) &= \mathbb{P}_x\left(\sum_{n \geq 1} \mathbf{1}_{\{X_n = x\}} = k \mid S_1 < \infty\right) \\ &= \mathbb{P}_x\left(1 + \sum_{n \geq S_1 + 1} \mathbf{1}_{\{X_n = x\}} = k \mid S_1 < \infty\right) \\ &= \mathbb{P}_x\left(\sum_{n \geq S_1 + 1} \mathbf{1}_{\{X_n = x\}} = k - 1 \mid S_1 < \infty\right) \\ &= \mathbb{P}_x\left(\sum_{n \geq 1} \mathbf{1}_{\{X_{n+S_1} = x\}} = k - 1 \mid S_1 < \infty\right). \end{aligned}$$

Puis en utilisant la propriété de Markov forte, on obtient que

$$\mathbb{P}_x(N_x = k | S_1 < \infty) = \mathbb{P}_x\left(\sum_{n \geq 1} \mathbf{1}_{\{X_n = x\}} = k - 1\right) = \mathbb{P}_x(N_x = k - 1).$$

Ainsi,

$$\mathbb{P}_x(N_x = k) = \mathbb{P}_x(N_x = k - 1) \mathbb{P}_x(S_1 < \infty) = \mathbb{P}_x(N_x = k - 1)(1 - q).$$

On en déduit que N_x suit une loi géométrique de paramètre $(1 - q)$ et donc est d'espérance finie. □

Cette condition peut aussi s'énoncer de la façon suivante :

Proposition 1.16. *Un état x est récurrent si et seulement si la série $\sum_{n \geq 1} P^n(x, x)$ diverge.*

Démonstration. Pour $x \in E$, comme on peut échanger série et espérance pour une série à termes positifs, on a :

$$\mathbb{E}_x[N_x] = \mathbb{E}_x \left[\sum_{n \geq 1} \mathbb{1}_{\{X_n = x\}} \right] = \sum_{n \geq 1} \mathbb{P}_x(X_n = x) = \sum_{n \geq 1} P^n(x, x).$$

La proposition 1.15 nous permet de conclure. □

1.3.3 Irréductibilité

Définition 1.17. La chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$ est dite irréductible si pour tous $y, z \in E$, il existe $n \geq 0$ tel que $\mathbb{P}(X_n = z | X_0 = y) > 0$, c'est-à-dire si tous les états communiquent entre eux. Si de plus tous les états sont récurrents alors la chaîne est dite récurrente irréductible.

1.3.4 Excursions

Définition 1.18. On définit pour $n \geq 0$ les vecteurs aléatoires \mathcal{E}_n par :

$$\begin{cases} \mathcal{E}_0 = (X_0, \dots, X_{S_1-1}) \\ \mathcal{E}_n = (X_{S_n}, \dots, X_{S_{n+1}-1}) \text{ pour } n > 0 \end{cases}$$

Les vecteurs \mathcal{E}_n sont appelés excursions de la chaînes entre deux retours successifs à l'état x . On posera $T_1 = S_1$ la longueur de l'excursion \mathcal{E}_0 et pour $n > 1$, $T_n = S_n - S_{n-1}$ la longueur de l'excursion \mathcal{E}_{n-1} .

Proposition 1.19. *On a les deux propriétés suivantes :*

- (a) *Les vecteurs \mathcal{E}_n sont indépendants et identiquement distribués sous \mathbb{P}_x .*
- (b) *Les variables T_n sont indépendants et identiquement distribués sous \mathbb{P}_x .*
- (c) *Les vecteurs $Y_n = (T_n, X_{S_{n-1}}, \dots, X_{S_n})$ sont indépendants et identiquement distribués sous \mathbb{P}_x .*

Démonstration.

- (a) On note pour tout $k \in \mathbb{N}^*$, $U_x(k) = \{x\} \times (E \setminus \{x\})^{k-1}$ et $U_x = \bigcup_{k \geq 1} U_x(k)$ Alors les excursions $\mathcal{E}_0, \dots, \mathcal{E}_n$ sont à valeurs dans U_x . Soit $(u_0, \dots, u_n) \in U_x$. L'évènement $\{\mathcal{E}_1 = u_1, \dots, \mathcal{E}_n = u_n\}$ est de la forme

$$\{X_{S_1+1} = x_1, \dots, X_{S_1+p} = x_p\}$$

avec $p > 0$. On a alors :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0, \dots, \mathcal{E}_n = u_n) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0, X_{S_1+1} = x_1, \dots, X_{S_1+p} = x_p | S_1 < +\infty) \\ &= \mathbb{P}_x(\{\mathcal{E}_0 = u_0\} \cap \{X_{S_1+1} = x_1, \dots, X_{S_1+p} = x_p\} | S_1 < +\infty). \end{aligned}$$

Puis en appliquant le théorème 1.9,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0, \dots, \mathcal{E}_n = u_n) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_p = x_p) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0) \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1} = u_{n-1}). \end{aligned}$$

On en déduit par itérations que :

$$\mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0, \dots, \mathcal{E}_n = u_n) = \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0) \times \dots \times \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_n).$$

Donc les $\mathcal{E}_0, \dots, \mathcal{E}_n$ sont bien i.i.d. sous \mathbb{P}_x .

- (b) Soient $t_1, \dots, t_n \in \mathbb{N}^*$. On a :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_x(T_1 = t_1, \dots, T_n = t_n) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 \in U_x(t_1), \dots, \mathcal{E}_{n-1} \in U_x(t_n)) \\ &= \sum_{u_1 \in U_x(t_1)} \dots \sum_{u_n \in U_x(t_n)} \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1} = u_n). \end{aligned}$$

Or d'après (a), les $\mathcal{E}_0, \dots, \mathcal{E}_{n-1}$ sont i.i.d. sous \mathbb{P}_x donc :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_x(T_1 = t_1, \dots, T_n = t_n) \\ &= \sum_{u_1 \in U_x(t_1)} \dots \sum_{u_n \in U_x(t_n)} \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1) \times \dots \times \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_n) \\ &= \sum_{u_1 \in U_x(t_1)} \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1) \times \dots \times \sum_{u_n \in U_x(t_n)} \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_n) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 \in U_x(t_1)) \times \dots \times \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 \in U_x(t_n)) \\ &= \mathbb{P}_x(T_1 = t_1) \times \dots \times \mathbb{P}_x(T_1 = t_n). \end{aligned}$$

On en déduit que les T_1, \dots, T_n sont i.i.d. sous \mathbb{P}_x .

- (c) Pour tout $n \geq 1$, on pose

$$Y_n = (T_n, X_{S_{n-1}}, \dots, X_{S_n})$$

avec la convention, $S_0 = 0$. Comme pour tout $n \geq 1$, Z_n est une fonction de Y_n , pour montrer que les Z_1, \dots, Z_n sont i.i.d. sous \mathbb{P}_x , il suffit de le montrer pour les Y_1, \dots, Y_n . On rappelle que $U_x(t)$ avec $t \in \mathbb{N}^*$ désigne l'ensemble des valeurs prises par les excursions de longueur t . Soient $t_1, \dots, t_n \in \mathbb{N}^*$ et u_1, \dots, u_n tels que pour tout

$i \in \{1, \dots, n\}$, $u_i \in U_x(t_i)$. Pour $k \geq 1$, par définition, T_k est la longueur de l'excursion \mathcal{E}_{k-1} , c'est-à-dire que

$$\mathcal{E}_{k-1} = (X_{S_{k-1}}, \dots, X_{S_k}).$$

En posant pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$, $y_i = (t_i, u_i, x)$, on a :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(Y_1 = y_1, \dots, Y_n = y_n) &= \mathbb{P}_x(Y_1 = (t_1, u_1, x), \dots, Y_n = (t_n, u_n, x)) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1} = u_n). \end{aligned}$$

Or d'après la proposition 1.19, les $\mathcal{E}_0, \dots, \mathcal{E}_{n-1}$ sont i.i.d. sous \mathbb{P}_x donc :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(Y_1 = y_1, \dots, Y_n = y_n) &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1) \times \dots \times \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_n) \\ &= \mathbb{P}_x(Y_1 = (t_1, u_1, x)) \times \dots \times \mathbb{P}_x(Y_1 = (t_n, u_n, x)). \end{aligned}$$

Donc :

$$\mathbb{P}_x(Y_1 = y_1, \dots, Y_n = y_n) = \mathbb{P}_x(Y_1 = y_1) \times \dots \times \mathbb{P}_x(Y_1 = y_n)$$

c'est-à-dire que les Y_i sont i.i.d. sous \mathbb{P}_x .

□

1.4 Probabilité invariante

Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov récurrente irréductible de matrice de transition P .

1.4.1 Mesure invariante

Définition 1.20. Soit $\gamma = (\gamma(x))_{x \in E}$ une mesure sur E , c'est-à-dire un vecteur ligne tel que $0 \leq \gamma(x) < +\infty$. On dit que π est une mesure invariante si $\gamma P = \gamma$. Si de plus pour tout $x \in E$, $\gamma(x) > 0$ alors la mesure est dite strictement positive.

Théorème 1.21. *Il existe une mesure invariante strictement positive. De plus, elle est unique à une constante multiplicative près.*

Démonstration.

— Existence :

Soit $x \in E$ fixé. Pour $y \in E$, on note γ_y^x le nombre moyen de visites à l'état y avant le premier retour à l'état x , c'est-à-dire que

$$\gamma_y^x = \mathbb{E}_x \left[\sum_{n=0}^{S_1-1} \mathbb{1}_{\{X_n=y\}} \right].$$

On définit le vecteur γ^x par $\gamma^x(y) = \gamma_y^x$ quelque soit $y \in E$. Montrons que γ^x est invariant pour P . On a :

$$\begin{aligned} \sum_{z \in E} \gamma_z^x P(z, y) &= \sum_{z \in E} \mathbb{E}_x \left[\sum_{n=0}^{S_1-1} \mathbf{1}_{\{X_n=z\}} \right] P(z, y) \\ &= \sum_{z \in E} \mathbb{E}_x \left[\sum_{n \geq 0} \mathbf{1}_{\{n < S_1\}} \mathbf{1}_{\{X_n=z\}} \right] P(z, y). \end{aligned}$$

Puis par Fubini-Tonelli :

$$\begin{aligned} \sum_{z \in E} \gamma_z^x P(z, y) &= \sum_{z \in E} \sum_{n \geq 0} \mathbb{E}_x [\mathbf{1}_{\{n < S_1\}} \mathbf{1}_{\{X_n=z\}}] P(z, y) \\ &= \sum_{z \in E} \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}_x (n < S_1, X_n = z) P(z, y) \\ &= \sum_{z \in E} \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}_x (X_n = z, X_n \neq x, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x) P(z, y) \\ &= \sum_{z \neq x} \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}_x (X_n = z, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x) P(z, y). \end{aligned}$$

Mais $P(z, y) = \mathbb{P}_x (X_{n+1} = y | X_n = z, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x)$ et donc :

$$\sum_{z \in E} \gamma_z^x P(z, y) = \sum_{z \neq x} \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}_x (X_{n+1} = y, X_n = z, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x).$$

Pour $z \neq x$, $\{X_n = z, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x\} = \{X_n = z, n < S_1\}$,

puis $\bigcup_{z \neq x} \{X_n = z, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x\} = \{n < S_1\}$ donc en appliquant encore Fubini-Tonelli :

$$\begin{aligned} \sum_{z \in E} \gamma_z^x P(z, y) &= \sum_{n \geq 0} \sum_{z \neq x} \mathbb{P}_x (X_{n+1} = y, X_n = z, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x) \\ &= \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}_x (X_{n+1} = y, n < S_1) \\ &= \sum_{n \geq 0} \mathbb{E}_x [\mathbf{1}_{\{X_{n+1}=y\}} \mathbf{1}_{\{n < S_1\}}] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{n \geq 0} \mathbf{1}_{\{X_{n+1}=y\}} \mathbf{1}_{\{n < S_1\}} \right] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{n=0}^{S_1-1} \mathbf{1}_{\{X_{n+1}=y\}} \right] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{p=1}^{S_1} \mathbf{1}_{\{X_p=y\}} \right]. \end{aligned}$$

Or la chaîne est récurrente donc S_1 est finie \mathbb{P}_x -ps et comme $X_0 = x$ \mathbb{P}_x -ps et $X_{S_1} = x$ \mathbb{P}_x -ps alors $\mathbf{1}_{\{X_0=y\}} = \mathbf{1}_{\{X_{S_1}=y\}}$ \mathbb{P}_x -ps. Finalement,

$$\sum_{z \in E} \gamma_z^x P(z, y) = \mathbb{E}_x \left[\sum_{p=0}^{S_1-1} \mathbf{1}_{\{X_p=y\}} \right] = \gamma_y^x.$$

Donc γ^x est invariant. Montrons maintenant que c'est une mesure strictement positive.

Comme la chaîne est irréductible, il existe des entiers m et n tels que $P^m(x, y) > 0$ et $P^n(y, x) > 0$. De plus, γ^x est invariant par toutes les puissances de P et par définition, $\gamma_x^x = 1$ donc :

$$1 = \gamma_x^x = \sum_{z \in E} \gamma_z^x P^n(z, x) \geq \gamma_y^x P^n(y, x).$$

Donc γ_y^x est fini. De plus,

$$\gamma_y^x = \sum_{z \in E} \gamma_z^x P^m(z, y) \geq \gamma_x^x P^m(x, y) = P^m(x, y) > 0.$$

Ainsi γ^x est une mesure invariante strictement positive et elle vérifie $\gamma_x^x = 1$.

— Unicité :

Comme on va montrer l'unicité à une constante multiplicative près, on peut considérer une mesure invariante λ telle que $\lambda(x) = 1$. On va montrer que $\lambda \geq \gamma^x$ puis que $\lambda = \gamma^x$.

On a :

$$\begin{aligned} \lambda(y) &= \sum_{z_1 \in E} \lambda(z_1) P(z_1, y) \\ &= P(x, y) + \sum_{z_1 \neq x} \lambda(z_1) P(z_1, y) \\ &= P(x, y) + \sum_{z_1 \neq x} \sum_{z_2 \in E} \lambda(z_2) P(z_2, z_1) P(z_1, y) \\ &= P(x, y) + \sum_{z_1 \neq x} P(x, z_1) P(z_1, y) + \sum_{z_1, z_2 \neq x} \lambda(z_2) P(z_2, z_1) P(z_1, y) \\ &\geq \sum_{n \geq 1} \sum_{z_1, \dots, z_n \neq x} P(x, z_n) P(z_n, z_{n-1}) \dots P(z_1, y) + P(x, y) \\ &= \sum_{n \geq 1} \mathbb{P}_x (X_{n+1} = y, S_1 > n) + \mathbb{P}_x (X_1 = y) \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{n=2}^{S_1} \mathbb{1}_{\{X_n=y\}} \right] + \mathbb{E}_x [\mathbb{1}_{\{X_1=y\}}] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{n=1}^{S_1} \mathbb{1}_{\{X_n=y\}} \right] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{n=0}^{S_1-1} \mathbb{1}_{\{X_n=y\}} \right] = \gamma_y^x. \end{aligned}$$

Donc $\lambda \geq \gamma^x$.

On pose $\mu = \lambda - \gamma^x$. μ est une mesure invariante comme différence de deux mesures invariantes et $\mu(x) = 0$. De plus comme $\lambda \geq \gamma^x$ alors μ est positive. Comme la chaîne est invariante, il existe un entier n tel que $P^n(y, x) > 0$. μ étant invariante pour P alors elle l'est aussi pour les puissances de P . Alors

$$0 = \mu(x) = \sum_{z \in E} \mu(z) P^n(z, x) \geq \mu(y) P^n(y, x).$$

Donc $\mu(y) = 0$. Ceci est vrai pour tout $y \in E$ donc $\mu = 0$ et on en déduit que $\lambda = \gamma_x$. \square

1.4.2 États récurrents positifs et probabilité invariante

Soit $x \in E$ fixé.

Définition 1.22. Soit $\pi = (\pi(y))_{y \in E}$ une mesure sur E . π est une probabilité invariante si :

- $\forall y \in E, \pi(y) \geq 0$.
- $\sum_{y \in E} \pi(y) = 1$.
- $\forall z \in E, \sum_{y \in E} \pi(y)P(y, z) = \pi(z)$.

Remarque. La dernière partie de la définition est équivalente à $\pi P = \pi$. Soit γ une mesure sur E . Si γ est finie, c'est-à-dire si $\sum_{z \in E} \gamma(z) < +\infty$ alors en normalisant, on peut définir une probabilité sur E : $\left(\frac{\gamma(y)}{\sum_{z \in E} \gamma(z)} \right)_{y \in E}$.

On rappelle que $S_1(x) = \inf\{k > 0, X_k = x\}$ est l'instant du premier retour à l'état x .

Définition 1.23. L'état x est dit récurrent positif si $\mathbb{E}_x[S_1] < +\infty$. Dans le cas contraire, l'état est dit récurrent nul. Si tous les états sont récurrents positifs alors la chaîne est dite récurrente positive.

Théorème 1.24. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (a) il existe un état récurrent positif ;
- (b) tous les états sont récurrents positifs ;
- (c) il existe une unique probabilité invariante.

Dans ce cas, la probabilité invariante est donnée par : $\pi = (\pi(x))_{x \in E}$ où $\pi(x) = \frac{1}{\mathbb{E}_x[S_1]}$ pour tout $x \in E$.

Démonstration. On a montré dans la preuve du théorème 1.21 que pour un état $x \in E$ donné, l'unique mesure invariante strictement positive λ vérifiant $\lambda(x) = 1$ est γ^x définie pour tout $y \in E$ par

$$\gamma^x(y) = \gamma_y^x = \text{nombre moyen de visites à l'état } y \text{ avant le premier retour à l'état } x.$$

$$\boxed{(b) \Rightarrow (a)}$$

Évident.

$$\boxed{(a) \Rightarrow (c)}$$

Soit x un état récurrent positif. On remarque que $\mathbb{E}_x[S_1] = \sum_{y \in E} \gamma_y^x < \infty$ par hypothèse. On peut donc définir π par

$$\forall y \in E, \pi(y) = \frac{\gamma_y^x}{\mathbb{E}_x[S_1]}.$$

Comme γ^x est une mesure strictement positive invariante alors π l'est aussi. C'est une probabilité car $\sum_{y \in E} \pi(y) = \frac{\sum_{y \in E} \gamma_y^x}{\mathbb{E}_x[S_1]} = \frac{\mathbb{E}_x[S_1]}{\mathbb{E}_x[S_1]} = 1$. L'unicité de π vient de l'unicité de γ^x à une constante multiplicative près (théorème 1.21). De plus, comme $\gamma_x^x = 1$, alors

$$\frac{1}{\pi(x)} = \frac{\mathbb{E}_x[S_1]}{\gamma_x^x} = \mathbb{E}_x[S_1].$$

(c) \Rightarrow (b)

Soit π une probabilité invariante. Soit $x \in E$. Comme $\sum_{y \in E} \pi(y) = 1$, il existe $y_0 \in E$ tel que $\pi(y_0) > 0$. Puis par irréductibilité, il existe un entier n tel que $P^n(y_0, x) > 0$. De plus, π est invariante pour P donc aussi pour toute puissance de P donc :

$$\pi(x) = \sum_{y \in E} \pi(y) P^n(y, x) \geq \pi(y_0) P^n(y_0, x) > 0.$$

On pose pour tout $y \in E$, $\delta(y) = \frac{\pi(y)}{\pi(x)}$. On a $\delta(x) = 1$ et comme π est une probabilité invariante alors δ est une mesure invariante. On va maintenant montrer qu'elle est strictement positive pour pouvoir utiliser l'unicité du théorème 1.21. Par l'irréductibilité, pour tout $y \in E$, il existe un entier n_y tel que $P^{n_y}(x, y) > 0$ et comme δ est invariante pour P alors elle l'est aussi pour toute puissance de P . On a donc pour tout $y \in E$:

$$\delta(y) = \sum_{z \in E} \delta(z) P^{n_y}(z, y) \geq \delta(x) P^{n_y}(x, y) = P^{n_y}(x, y) > 0$$

et donc δ est strictement positive. Puis en utilisant l'unicité dans le théorème 1.21, on a $\delta = \gamma^x$. On a alors

$$\mathbb{E}_x[S_1(x)] = \sum_{y \in E} \gamma_y^x = \sum_{y \in E} \delta(y) = \sum_{y \in E} \frac{\pi(y)}{\pi(x)} = \frac{1}{\pi(x)} < \infty$$

donc x est récurrent positif et comme il a été choisi arbitrairement alors tous les états sont récurrents positifs. □

On a la proposition suivante pour caractériser les états d'une chaîne de Markov irréductible d'espace d'états fini.

Proposition 1.25. *Une chaîne de Markov irréductible d'espace d'états fini est irréductible et récurrente positive.*

Démonstration. Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov irréductible d'espace d'états fini E et de matrice de transition P . Commençons par montrer que la chaîne est récurrente. Comme E est fini, la chaîne $\{X_n, n \geq 0\}$ admet au moins un état récurrent. De plus comme la chaîne est irréductible, tous les états communiquent. Il reste à montrer qu'un état communiquant avec un état récurrent est lui-même récurrent. Soit x un état récurrent et y un

état communiquant avec x . Par définition, il existe des entiers r et s tels que $P^r(x, y) > 0$ et $P^s(y, x) > 0$. On a :

$$\sum_n P^{s+n+r}(y, y) \geq \sum_n P^s(y, x) P^n(x, x) P^r(x, y) = P^s(y, x) P^r(x, y) \sum_n P^n(x, x).$$

Comme x est récurrent, alors d'après la proposition 1.15, $\sum_n P^n(x, x) = +\infty$ donc $\sum_n P^{s+n+r}(y, y) = +\infty$ puis $\sum_n P^n(y, y) = +\infty$. Ainsi, encore par la proposition 1.15, y est récurrent. On en déduit que la chaîne est récurrente. On va maintenant montrer qu'elle est récurrente positive. D'après le théorème 1.24, pour le montrer, il faut et il suffit de montrer que la chaîne admet une unique probabilité invariante. La matrice de transition P étant une matrice stochastique, on a que 1 est valeur propre de la transposée de P . Donc il existe un vecteur $\mu \neq 0$ tel que $\mu P = \mu$. On pose $\pi = |\mu|$. Comme μ admet une composante non nulle alors π admet une composante strictement positive. Par l'irréductibilité, on en déduit que toutes les composantes de π sont strictement positives. De plus, μ est invariant pour P donc π est une mesure invariante strictement positive. Elle est unique par le théorème 1.21. Finalement, $\frac{\pi}{\sum_{x \in E} \pi(x)}$ définit une unique probabilité invariante pour P . On en déduit par le théorème 1.24 que la chaîne $\{X_n, n \geq 0\}$ est récurrente positive. \square

Remarque. Si $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P admettant une probabilité invariante π et que π est également sa loi initiale alors pour tout $n \geq 0$, π est la loi de X_n . On peut le montrer par récurrence sur n . Par hypothèse, π est la loi de X_0 . Soit $n \geq 0$ tel que π soit la loi de X_n . Soit $x \in E$. On a :

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x) = \sum_{y \in E} \mathbb{P}(X_{n+1} = x | X_n = y) \mathbb{P}(X_n = y) = \sum_{y \in E} \pi(y) P(y, x).$$

Or comme π est invariante pour P , $\mathbb{P}(X_{n+1} = x) = \pi(x)$. Comme x a été choisi arbitrairement, on en déduit que π est la loi de X_{n+1} , ce qui montre le résultat.

Dans les deux paragraphes suivants, on va beaucoup utiliser les différentes notations définies dans les 1.3.1 et 1.3.4, notamment pour les démonstrations.

Partie 2

Théorèmes de convergence

Le but de cette partie est d'établir une loi des grands nombres et un théorème central limite pour les chaînes de Markov.

2.1 Théorèmes ergodiques

Dans ce paragraphe, on considère une chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$ irréductible et récurrente positive, de matrice de transition P et de probabilité invariante π .

2.1.1 Théorème ergodique à une variable

Lemme 2.1. *Pour tout $x \in E$, on a*

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_k=x\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(x).$$

Démonstration. On utilise les notations précédentes pour T_n et S_n .

On a montré que les variables T_1, \dots, T_n sont indépendantes et que les variables T_2, \dots, T_n ont même loi que T_1 conditionnellement à $X_0 = x$.

D'après la loi des grands nombres, on en déduit que $\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{S_n}{n} = \mu(x)$ p.s

où $\mu(x) = \mathbb{E}_x[S_1]$

On utilise la définition 1.12, c'est-à-dire $N_n(x) = \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_k=x\}}$ et $N_x = \lim_{n \rightarrow +\infty} N_n(x)$ de plus d'après la proposition 1.14 $N_x = \infty$ p.s. On remarque que $S_{N_n} \leq n < S_{N_n+1}$.

Ainsi on a $\frac{N_n}{N_n+1} \frac{N_n+1}{S_{N_n+1}} < \frac{N_n}{n} \leq \frac{N_n}{S_{N_n}}$.

Il vient que p.s $\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{N_n}{n} = \frac{1}{\mu(x)} = \pi(x)$.

On en déduit que p.s $\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_k=x\}} = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{N_n}{n} = \pi(x)$.

□

Si f est une fonction définie sur E soit positive, soit intégrable par rapport à π (c'est-à-dire $\sum_{x \in E} \pi(x) |f(x)| < \infty$), alors on note

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

Lemme 2.2. Soient X_n une chaîne de Markov sur E et une fonction f définie sur E . Si

$$\frac{1}{S_n} \sum_{i=1}^{S_n} f(X_i) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} a \text{ où } a < \infty.$$

Alors

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} a.$$

Le résultat reste valable pour la convergence en probabilité et la convergence en loi.

Démonstration. On montre le résultat pour la convergence presque sûre. Comme $S_{N_n(x)}$ désigne l'instant du dernier retour à l'état x avant l'instant n , on a $S_{N_n(x)} \leq n < S_{N_n(x)+1}$, puis on obtient :

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

De plus,

$$\frac{S_{N_n}}{S_{N_n+1}} = \frac{S_{N_n}}{n} \frac{n+1}{S_{N_n+1}} \frac{n}{n+1} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \frac{1}{\pi(x)} \times \pi(x) \times 1.$$

De même,

$$\frac{S_{N_n+1}}{S_{N_n}} = \frac{S_{N_n+1}}{n+1} \frac{n}{S_{N_n}} \frac{n+1}{n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \frac{1}{\pi(x)} \times \pi(x) \times 1.$$

Grâce au lemme de Slutsky

$$\frac{S_{N_n}}{S_{N_n+1}} \frac{1}{S_{N_n}} \sum_{i=1}^{S_{N_n}} f(X_i) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} a$$

et

$$\frac{S_{N_n+1}}{S_{N_n}} \frac{1}{S_{N_n+1}} \sum_{i=1}^{S_{N_n+1}} f(X_i) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} a$$

D'après le théorème des gendarmes,

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} a. \quad \square$$

Théorème 2.3 (Théorème ergodique). Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov sur E , irréductible et récurrente positive, de matrice de transition P et de probabilité invariante π . Alors pour toute fonction f définie sur E , telle que $f \geq 0$ où $(\pi, |f|) < \infty$, on a

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

Démonstration. Pour tout $n \geq 1$, on pose

$$Y_n = (T_n, X_{S_{n-1}}, \dots, X_{S_n})$$

avec la convention $S_0 = 0$. Les variables Y_n pour $n \geq 2$ sont indépendantes et de même loi que Y_1 conditionnellement à X_0 d'après le lemme 1.19. On pose

$$F(Y_n) = \sum_{i=1}^{T_n} f(X_{S_{n-1}+i}).$$

Les variables aléatoires $F(Y_n), n \geq 2$ sont indépendantes et de même loi. D'après la loi forte des grands nombres

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n F(Y_k) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \mathbb{E}_x [F(Y_1)].$$

De plus,

$$\sum_{k=1}^n F(Y_k) = \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^{T_k} f(X_{S_{k-1}+i}) = \sum_{i=1}^{S_n} f(X_i).$$

Donc,

$$\frac{1}{S_n} \sum_{i=1}^{S_n} f(X_i) = \frac{n}{S_n} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n F(Y_k).$$

Or on a vu dans le lemme 2.1 que $\frac{S_n}{n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \frac{1}{\pi(x)}$, on en déduit que p.s.

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

D'après le lemme 2.2,

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

Calculons maintenant $\mathbb{E}_x [F(Y_1)] = \mathbb{E}_x \left[\sum_{i=1}^{T_1} f(X_i) \right]$.

Si on choisit $f(z) = \mathbb{1}_{\{z=y\}}$ alors d'après le lemme 2.1

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{X_i=y\}} = \pi(y) = \pi(x) \mathbb{E}_x \left[\sum_{i=1}^{T_1} \mathbb{1}_{\{X_i=y\}} \right].$$

D'où,

$$\begin{aligned}
\pi(x)\mathbb{E}_x [F(Y_1)] &= \sum_{y \in E} \pi(x)\mathbb{E}_x \left[\sum_{i=1}^{T_1} f(y)\mathbb{1}_{\{X_i=y\}} \right] \\
&= \sum_{y \in E} f(y)\pi(x)\mathbb{E}_x \left[\sum_{i=1}^{T_1} \mathbb{1}_{\{X_i=y\}} \right] \\
&= \sum_{y \in E} \pi(y)f(y) \\
&= (\pi, f).
\end{aligned}$$

□

2.1.2 Théorème ergodique à deux variables

On pose pour tout $n \geq 0$, $U_n = (X_n, X_{n+1})$.

Proposition 2.4. *La suite de vecteurs aléatoires $\{U_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov d'espace d'états E^2 homogène, irréductible et récurrente positive. Sa matrice de transition Q est définie pour deux états $u = (x, y)$ et $v = (z, t)$ par :*

$$Q(u, v) = \mathbb{1}_{\{z=y\}}P(z, t).$$

Sa loi invariante ψ est définie pour tout $u = (x, y) \in E^2$ par :

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

Démonstration.

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(U_{k+1} = v | U_k = u, U_{k-1} = u_{k-1}, \dots, U_0 = u_0) \\
&= \mathbb{P}(X_{k+1} = z, X_{k+2} = t | X_k = x, X_{k+1} = y, \dots, X_0 = x_0, X_1 = x_1) \\
&= \mathbb{P}(X_{k+1} = z, X_{k+2} = t | X_k = x_k, X_{k+1} = x_{k+1}) \text{ car } X_n \text{ chaîne de Markov} \\
&= \mathbb{P}(U_{k+1} = v | U_k = u).
\end{aligned}$$

Donc U_n est une chaîne de Markov homogène nous allons maintenant chercher sa matrice de transition.

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(U_{k+1} = v | U_k = u) &= \mathbb{P}(X_{k+1} = z, X_{k+2} = t | X_k = x, X_{k+1} = y) \\
&= \mathbb{1}_{\{z=y\}}\mathbb{P}(X_{k+2} = t | X_k = x, X_{k+1} = y) \\
&= \mathbb{1}_{\{z=y\}}\mathbb{P}(X_{k+2} = t | X_{k+1} = y) \\
&= \mathbb{1}_{\{z=y\}}P(y, t) \\
&= \mathbb{1}_{\{z=y\}}P(z, t) \\
&= Q(u, v).
\end{aligned}$$

On en déduit que Q est la matrice de transition de U_n , il s'en suit que U_n est irréductible car

pour tout $u, v \in E^2$, il existe un entier n tel que $Q^n(u, v) = \mathbb{1}_{\{z=y\}}^n P^n(z, t) = \mathbb{1}_{\{z=y\}} P^n(z, t) > 0$ car X_n est une chaîne de Markov irréductible. On montre maintenant que $\psi(u) = \pi(x)P(x, y)$ est sa probabilité invariante.

En effet,

$$\begin{aligned} \sum_{u \in E^2} \psi(u)Q(u, v) &= \sum_{(x,y) \in E^2} \pi(x)P(x, y)\mathbb{1}_{\{z=y\}}P(z, t) \\ &= \sum_{(x,y) \in E^2} \mathbb{1}_{\{z=y\}}\pi(x)P(x, y)P(z, t) \\ &= \sum_{x \in E} \pi(x)P(x, z)P(z, t) \\ &= \pi(z)P(z, t) \\ &= \psi(v). \quad \square \end{aligned}$$

Soit g une fonction définie sur E^2 à valeurs dans \mathbb{R} telle que $(\pi, Pg) = \sum_{x,y \in E} \pi(x)P(x, y)g(x, y) < \infty$. On a le théorème suivant :

Théorème 2.5 (Théorème ergodique pour une fonction de deux variables). *On a :*

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_{k-1}, X_k) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} (\pi, Pg).$$

Démonstration. D'après la proposition 2.4, on peut appliquer le théorème ergodique à la chaîne de Markov $\{(X_n, X_{n+1}), n \geq 0\}$, En effet

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_{k-1}, X_k) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} (\pi P, g).$$

or $(\pi P, g) = \sum_{(x,y) \in E^2} \pi(x)P(x, y)g(x, y) = (\pi, Pg)$ d'où le résultat. □

2.2 Théorème central limite

Sous certaines hypothèses, on va pouvoir énoncer un théorème central limite pour les chaînes de Markov.

Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov irréductible et récurrente positive de matrice de transition P et de mesure invariante π . On rappelle que d'après le théorème 1.24, π est définie pour tout $x \in E$ par $\pi(x) = \frac{1}{\mathbb{E}_x[S_1(x)]}$. Soit g une fonction définie sur E^2 à valeurs dans \mathbb{R} telle que $(\pi, Pg) = \sum_{x,y \in E} \pi(x)P(x, y)g(x, y) < \infty$. On posera aussi pour tout $x \in E$,

$$s^2(x) = \mathbb{E}_x \left[\left(\sum_{k=1}^{T_1} g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg) \right)^2 \right].$$

Théorème 2.6 (Théorème central limite). *Si il existe $x \in E$ tel que $s^2(x) < +\infty$ alors*

$$\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg) \right) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \pi(x)s^2(x)) \text{ sous } \mathbb{P}_x.$$

Pour que la démonstration du théorème central limite soit plus lisible, on va d'abord énoncer puis démontrer le lemme suivant. Pour ce lemme, on se placera dans les hypothèses du théorème central limite et on posera pour $n \geq 1$:

$$Z_n = \sum_{k=1}^{T_n} (g(X_{S_{n-1}+k-1}, X_{S_{n-1}+k}) - (\pi, Pg)).$$

Lemme 2.7. *On a les propriétés suivantes :*

- (a) *Les variables Z_1, \dots, Z_n sont indépendantes et identiquement distribuées sous \mathbb{P}_x ;*
- (b) $\mathbb{E}_x [Z_1] = 0$;
- (c) $\text{Var}_x [Z_1] = s^2(x)$.

Démonstration.

- (a) Comme pour tout $n \geq 1$, Z_n est une fonction de Y_n et que les Y_1, \dots, Y_n sont i.i.d. sous \mathbb{P}_x d'après le lemme 1.19 alors les Z_1, \dots, Z_n le sont aussi.
- (b) On a :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_x [Z_1] &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} (g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg)) \right] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} g(X_{k-1}, X_k) \right] - \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} (\pi, Pg) \right] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} g(X_{k-1}, X_k) \right] - (\pi, Pg) \mathbb{E}_x [T_1] \\ &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} \sum_{y, z \in E} g(y, z) \mathbf{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \right] - (\pi, Pg) \mathbb{E}_x [S_1]. \end{aligned}$$

On obtient finalement :

$$\mathbb{E}_x [Z_1] = \sum_{y, z \in E} \left(g(y, z) \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} \mathbf{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \right] \right) - \frac{(\pi, Pg)}{\pi(x)}. \quad (2.1)$$

On va montrer que :

$$\mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} \mathbf{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \right] = \frac{\pi(y)P(y, z)}{\pi(x)}. \quad (2.2)$$

D'après le théorème 2.5 avec la fonction $(\alpha, \beta) \mapsto \mathbb{1}_{\{(\alpha, \beta) = (y, z)\}}$ on a :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(y)P(y, z). \quad (2.3)$$

Soit $Z'_n = \sum_{k=1}^{T_n} g(X_{S_{n-1}+k-1}, X_{S_{n-1}+k})$. En reprenant les mêmes notations que dans le lemme 2.7, les Z'_1, \dots, Z'_n sont i.i.d. sous \mathbb{P}_x . On a alors en appliquant la loi forte des grands nombres à la suite $(Z'_n)_{n \geq 1}$:

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Z'_k \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \mathbb{E}_x [Z'_1] \text{ sous } \mathbb{P}_x. \quad (2.4)$$

Comme $\sum_{k=1}^n Z'_k = \sum_{k=1}^{S_n} g(X_{k-1}, X_k)$, alors :

$$\frac{1}{S_n} \sum_{k=1}^{S_n} g(X_{k-1}, X_k) = \frac{n}{S_n} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Z'_k \right). \quad (2.5)$$

On a déjà vu dans la démonstration du lemme 2.1 que

$$\frac{S_n}{n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \mathbb{E}_x [S_1] = \frac{1}{\pi(x)} \text{ sous } \mathbb{P}_x. \quad (2.6)$$

En utilisant (2.4) et (2.6) dans (2.5) on obtient que :

$$\frac{1}{S_n} \sum_{k=1}^{S_n} g(X_{k-1}, X_k) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(x) \mathbb{E}_x [Z'_1] \text{ sous } \mathbb{P}_x. \quad (2.7)$$

D'après le lemme 2.2,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_{k-1}, X_k) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(x) \mathbb{E}_x [Z'_1] \text{ sous } \mathbb{P}_x.$$

En prenant $(\alpha, \beta) \mapsto \mathbb{1}_{\{(\alpha, \beta) = (y, z)\}}$ pour g :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(x) \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} \mathbb{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \right] \text{ sous } \mathbb{P}_x.$$

Or

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(y)P(y, z).$$

Par unicité de la limite, on obtient

$$\mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} \mathbb{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \right] = \frac{\pi(y)P(y, z)}{\pi(x)}.$$

Donc finalement,

$$\mathbb{E}_x [Z_1] = \frac{1}{\pi(x)} \sum_{y,z \in E} \pi(y) P(y, z) g(y, z) - \frac{(\pi, Pg)}{\pi(x)}.$$

Ainsi,

$$\mathbb{E}_x [Z_1] = 0.$$

- (c) On va maintenant calculer $\text{Var}_x [Z_1]$. Comme $\mathbb{E}_x [Z_1] = 0$, il vient que $\text{Var}_x [Z_1] = \mathbb{E}_x [Z_1^2]$. On a par définition,

$$s^2(x) = \mathbb{E}_x \left[\left(\sum_{k=1}^{T_1} g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg) \right)^2 \right].$$

ce qui est par définition l'espérance sachant $X_0 = x$ de Z_1^2 . Donc :

$$\text{Var}_x [Z_1] = s^2(x).$$

□

On peut maintenant démontrer le théorème central limite.

Démonstration. On suppose qu'il existe $x \in E$ tel que $s^2(x) < +\infty$. On notera à nouveau pour tout $n \geq 1$,

$$Z_n = \sum_{k=1}^{T_n} (g(X_{S_{n-1}+k-1}, X_{S_{n-1}+k}) - (\pi, Pg)).$$

D'après le lemme 2.7, on peut appliquer le théorème central limite « réel » à la suite $(Z_n)_{n \geq 1}$, ce qui donne :

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n Z_k \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, s^2(x)) \text{ sous } \mathbb{P}_x. \quad (2.8)$$

Or $\sum_{k=1}^n Z_k = \sum_{k=1}^{S_n} (g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg))$ donc

$$\frac{1}{\sqrt{S_n}} \sum_{k=1}^{S_n} (g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg)) = \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{S_n}} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n Z_k \right).$$

D'après (2.6), (2.8) et le théorème de Slutsky on a :

$$\frac{1}{\sqrt{S_n}} \sum_{k=1}^{S_n} (g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \pi(x)s^2(x)) \text{ sous } \mathbb{P}_x$$

puis d'après le lemme 2.2 on en déduit que

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n (g(X_{k-1}, X_k) - (\pi, Pg)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \pi(x)s^2(x)) \text{ sous } \mathbb{P}_x.$$

□

On va maintenant voir comment calculer $s^2(x)$ en ajoutant une hypothèse sur la fonction g . On suppose que g peut s'écrire sous la forme

$$g(x, y) = h(x, y) - \sum_{z \in E} P(x, z)h(x, z).$$

On a alors le résultat suivant :

Corollaire 2.8.

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

avec $\sigma^2 = (\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2)$.

Démonstration.

$$\begin{aligned} (\pi, Pg) &= \sum_{x, y \in E} \pi(x)P(x, y)g(x, y) \\ &= \sum_{x, y \in E} \pi(x)P(x, y)(h(x, y) - \sum_{z \in E} P(x, z)h(x, z)) \\ &= \sum_{x, y \in E} \pi(x)P(x, y)h(x, y) - \sum_{x, y, z \in E} \pi(x)P(x, y)P(x, z)h(x, z) \\ &= (\pi, Ph) - \sum_{x, z \in E} \pi(x)P(x, z)h(x, z) \sum_{y \in E} P(x, y) \\ &= (\pi, Ph) - \sum_{x, z \in E} \pi(x)P(x, z)h(x, z) \times 1 \text{ car } P \text{ est une matrice de transition} \\ &= (\pi, Ph) - (\pi, Ph) \\ &= 0. \end{aligned}$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \sqrt{n} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_{k-1}, X_k) &\xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \pi(x)s^2(x)) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) &\xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2) \\ \text{où } \sigma^2 = \pi(x)s^2(x) &= \mathbb{E}_x \left[\sum_{k=1}^{T_1} (h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}))^2 \right]. \end{aligned}$$

On pose

$$H_k = h(X_{k-1}, X_k) - \sum_{z \in E} P(X_{k-1}, z)h(X_{k-1}, z).$$

$$\begin{aligned}
\mathbb{E} [H_k | X_{k-1} = x] &= \mathbb{E} \left[h(X_{k-1}, X_k) - \sum_{z \in E} P(X_{k-1}, z) h(X_{k-1}, z) \middle| X_{k-1} = x \right] \\
&= \mathbb{E} [h(x, X_k) | X_{k-1} = x] - \sum_{z \in E} P(x, z) h(x, z) \\
&= \sum_{y \in E} h(x, y) \mathbb{P}(X_k = y | X_{k-1} = x) - \sum_{z \in E} P(x, z) h(x, z) \\
&= \sum_{y \in E} h(x, y) P(x, y) - \sum_{z \in E} P(x, z) h(x, z) \\
&= \sum_{y \in E} h(x, y) P(x, y) - \sum_{z \in E} P(x, z) h(x, z) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Soit $k < l$,

$$\begin{aligned}
\mathbb{E} [H_k H_l \mathbf{1}_{\{l \neq k\}} | X_{0:l-1} = x_{0:l-1}] &= H_k \mathbb{E} [H_l \mathbf{1}_{\{l \neq k\}} | X_{0:l-1} = x_{0:l-1}] \\
&= H_k \mathbb{E} [H_l \mathbf{1}_{\{l \neq k\}} | X_{l-1} = x_{l-1}] \text{ propriété de Markov} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

De plus,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E} [H_k H_l \mathbf{1}_{\{l \neq k\}} | X_0 = x] \\
&= \sum_{x_{1:l-1}} \mathbb{E} [H_k H_l \mathbf{1}_{\{l \neq k\}}, X_{1:l-1} = x_{1:l-1} | X_0 = x] \\
&= \sum_{x_{1:l-1}} \mathbb{E} [H_k H_l \mathbf{1}_{\{l \neq k\}} | X_{0:l-1} = x_{0:l-1}] \mathbb{P}(X_{1:l-1} = x_{1:l-1} | X_0 = x) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

On pose $M = \sum_{k=1}^{T_1} H_k$. Alors,

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E} [M^2 | X_0 = x_0] \\
&= \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{T_1} H_k^2 \middle| X_0 = x \right] + 2 \times \mathbb{E} [H_k H_l \mathbf{1}_{\{l \neq k\}} | X_0 = x] \\
&= \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{T_1} H_k^2 \middle| X_0 = x \right] \\
&= \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{T_1} \left(h(X_{k-1}, X_k) - \sum_{z \in E} P(X_{k-1}, z) h(X_{k-1}, z) \right)^2 \middle| X_0 = x \right] \\
&= \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{T_1} \left(h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) \right)^2 \middle| X_0 = x \right] \\
&= \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{T_1} \sum_{y, z \in E} \left(h(y, z) - Ph(y) \right)^2 \mathbf{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \middle| X_0 = x \right] \\
&= \sum_{y, z \in E} \left((h(y, z) - Ph(y))^2 \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{T_1} \mathbf{1}_{\{(X_{k-1}, X_k) = (y, z)\}} \middle| X_0 = x \right] \right) \\
&= \sum_{y, z \in E} \left(h(y, z) - Ph(y) \right)^2 \frac{\pi(y) P(y, z)}{\pi(x)} \text{ d'après l'équation (2.2)} \\
&= \frac{\sum_{y, z \in E} \pi(y) P(y, z) h(y, z)^2 + \sum_{y \in E} \pi(y) (Ph(y))^2 \sum_{z \in E} P(y, z)}{\pi(x)} \\
&\quad - \frac{2 \sum_{y \in E} \pi(y) \sum_{z \in E} P(y, z) h(y, z) Ph(y)}{\pi(x)} \\
&= \frac{(\pi, Ph^2) + \sum_{y \in E} \pi(y) (Ph(y))^2 \times 1 - 2 \sum_{y \in E} \pi(y) (Ph(y))^2}{\pi(x)} \\
&= \frac{(\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2)}{\pi(x)}.
\end{aligned}$$

On obtient,

$$\begin{aligned}
\sigma^2 &= s(x)^2 \pi(x) = \mathbb{E} [M^2 | X_0 = x] \pi(x) \\
&= (\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2)
\end{aligned}$$

ce qui nous donne

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

avec $\sigma^2 = (\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2)$. □

Partie 3

Statistiques des chaînes de Markov

Maintenant qu'on a établi des théorèmes de convergence pour les chaînes de Markov, on va voir comment simuler des chaînes de Markov puis comment estimer des matrices de transition. En application, on vérifiera numériquement le théorème ergodique et le théorème central limite.

3.1 Simulation de chaînes de Markov

Soit $\{X_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov irréductible à valeur dans E discret de loi initiale μ et de matrice de transition P .

3.1.1 Simulation

On sait, grâce à la méthode d'inversion simuler des variables aléatoires suivant une loi discrète quand elles sont indépendantes et identiquement distribuées. Or ici, la suite de variables aléatoires $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov. Il n'y a donc pas indépendance des X_n . On va donc devoir en tenir compte dans la simulation. On connaît la loi de X_0 (la loi initiale μ) mais on ne connaît pas la loi de X_n pour $n \geq 1$. En revanche, on connaît la loi de X_n sachant X_{n-1} via la matrice de transition P . Pour simuler (X_0, \dots, X_l) avec $l \geq 1$, on procède donc de la façon suivante :

- On simule $X_0 = x_0$ de loi discrète μ ;
- Pour $n = 1, \dots, l$, on a à disposition la réalisation x_{n-1} de X_{n-1} obtenue à l'itération précédente. On simule donc $X_n = x_n$ dont la loi est la ligne de P donnant les probabilités de transitions à partir de l'état x_{n-1} .

3.1.2 Calcul de la loi stationnaire

On suppose maintenant que la chaîne $\{X_n, n \geq 0\}$ est d'espace d'états fini de cardinal m . Comme la chaîne est supposée irréductible d'espace d'états fini, elle est donc récurrente

positive ce qui implique qu'elle admet une unique probabilité invariante ou loi stationnaire que nous allons noter $\pi \in \mathbb{R}^{1 \times m}$.

Par définition, elle vérifie $\pi P = \pi$ et $\sum_{k=1}^m \pi(k) = 1$. Elle vérifie donc le système suivant :

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \pi P = \pi \\ \sum_{k=1}^m \pi(k) = 1 \end{cases} \\ \Leftrightarrow & \begin{cases} P^t \pi^t - \pi^t = 0 \\ (1, \dots, 1) \pi^t = 1 \end{cases} \\ \Leftrightarrow & \begin{pmatrix} P^t - I_m \\ e \end{pmatrix} \pi^t = \begin{pmatrix} 0_m \\ 1 \end{pmatrix} \\ & \text{où } e = (1, \dots, 1). \end{aligned}$$

On a un système linéaire non carré à résoudre. On peut résoudre ce système grâce à une décomposition QR. Sous R, on peut résoudre un tel système grâce à la fonction `qr.solve()`. On a implémenté une fonction `loi_stationnaire()` qui calcule la loi stationnaire π d'une chaîne de Markov homogène irréductible d'espace d'états fini et de matrice de transition P de la façon suivante :

- On stocke la taille m de la matrice P ;
- On crée la matrice $\begin{pmatrix} P^t - I_m \\ e \end{pmatrix}$ et le vecteur $\begin{pmatrix} 0_m \\ 1 \end{pmatrix}$;
- On détermine π en résolvant le système $\begin{pmatrix} P^t - I_m \\ e \end{pmatrix} \pi^t = \begin{pmatrix} 0_m \\ 1 \end{pmatrix}$ avec la fonction `qr.solve()`;
- On retourne π .

3.1.3 Exemple : cas d'une chaîne de Markov à 2 états

Pour cette partie, on considère des chaînes de Markov à deux états.

On a implémenté sous R la fonction `CM2()` qui simule une chaîne de Markov à 2 états 0 et 1 de longueur l , de loi initiale μ et de matrice de transition P données en procédant comme décrit dans la section 3.1.1 :

- On crée un vecteur de taille l dans lequel on va stocker les X_1, \dots, X_l simulés ;
- On tire U suivant $\mathcal{U}([0, 1])$; si $U \leq \mu(0)$ alors X_0 prend la valeur 0, sinon X_0 prend la valeur 1 ;
- Pour tout $i = 2, \dots, l$, on tire U suivant $\mathcal{U}([0, 1])$; si $U \leq P(X_{i-1}, 0)$ alors X_i prend la valeur 0, sinon X_i prend la valeur 1 ;
- On retourne X .

On va maintenant utiliser la fonction `CM2()` pour simuler des chaînes de Markov de longueur $l = 50$, de loi initiale $\mu = (0.5, 0.5)$ pour plusieurs choix de matrices de transitions P :

$$P_1 = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.9 \\ 0.8 & 0.2 \end{pmatrix}, P_2 = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}, P_3 = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.3 & 0.7 \end{pmatrix}.$$

Pour représenter la chaîne simulée dans chacun des cas, on trace la trajectoire de la chaîne, c'est-à-dire qu'on construit le nuage de points $(i, X_i)_{1 \leq i \leq l}$. On appelle changement de régime la transition vers un état différent de l'état précédent. Pour mieux observer les changements de régime des chaînes simulées, on relie les points (i, X_i) .

Les figures 3.1, 3.2 et 3.3 donnent les trajectoires obtenus pour les trois cas. On remarque que plus les coefficients diagonaux de la matrice de transition P sont grands, moins les changements de régimes sont fréquents. Cette observation s'explique simplement par le fait que les coefficients diagonaux de la matrice sont les probabilités de rester au même état.

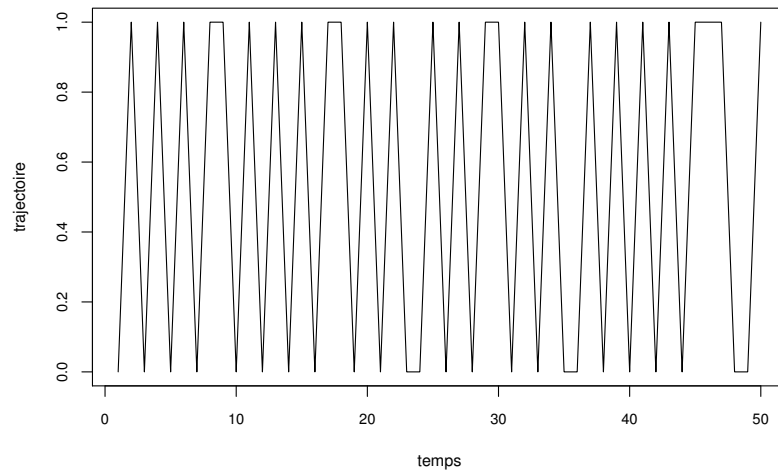


FIGURE 3.1 – Trajectoire de X pour $P = P_1$

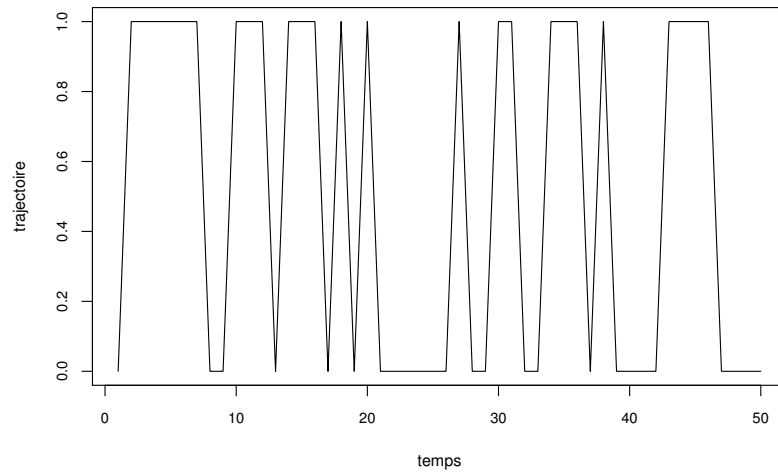


FIGURE 3.2 – Trajectoire de X pour $P = P_2$

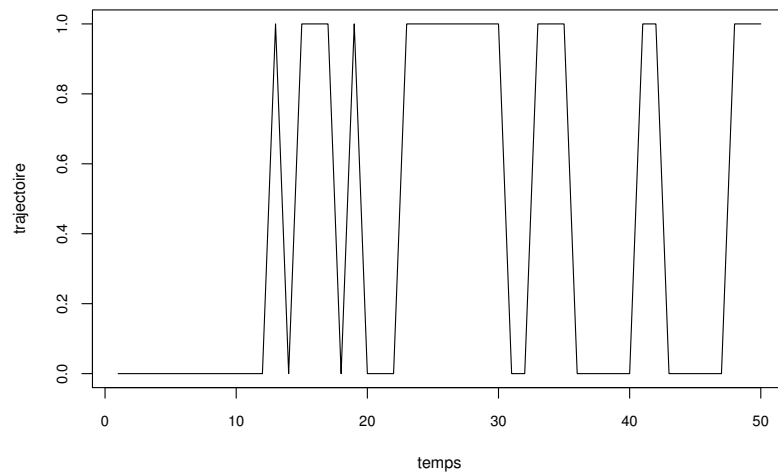


FIGURE 3.3 – Trajectoire de X pour $P = P_3$

3.1.4 Application 1 : vérification du théorème ergodique

Maintenant qu'on a vu comment simuler des chaînes de Markov, on va vérifier numériquement le théorème ergodique.

On se place à nouveau dans le cas d'une chaîne de Markov à 2 états 0 et 1. On prend pour loi initiale μ et pour matrice de transition $P = P_3$ où μ et P_3 sont définies dans la section

3.1.3. On note π la loi stationnaire de cette chaîne. En utilisant la fonction `loi_stationnaire()`, on trouve $\pi = (0.6, 0.4)$.

On veut montrer que pour tout $k \in \{0, 1\}$, on a

$$\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \mathbb{1}_{\{X_i=k\}} \xrightarrow[l \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(k).$$

Comme on a considéré une chaîne de Markov à deux états, par définition d'une loi de probabilité, il suffit de montrer que :

$$\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \mathbb{1}_{\{X_i=0\}} \xrightarrow[l \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(0).$$

On a posé $l = 10000$. Pour $n = 100, 200, \dots, l$ on a simulé une chaîne de Markov de longueur n puis calculé le nombre moyen de passage par l'état 0 entre les instants 1 et n . On les stocke dans un vecteur t . On a donc calculé le nombre moyen de passages par l'état 0 pour des chaînes de plus en plus grandes. On trace ensuite le nuage de points $(n, t(\frac{n}{100}))_{n=100, 200, \dots, l}$ puis on superpose la droite d'équation $y = \pi(0) = 0.6$ au graphique obtenu. La figure 3.4 présente le résultat obtenu. Pour une chaîne de longueur assez grande, le nombre moyen de visites à l'état 0 est proche de 0.6, c'est-à-dire de $\pi(0)$.

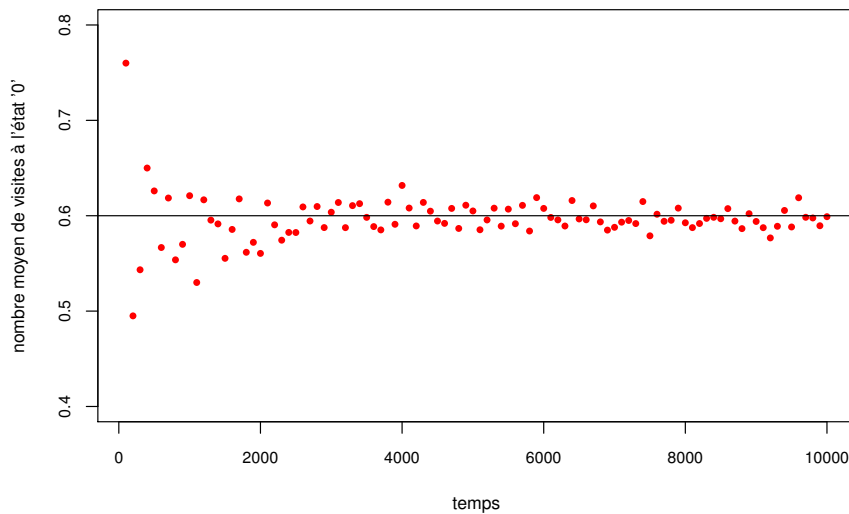


FIGURE 3.4 – Nombre moyen de visites à l'état 0 en fonction de la longueur de la chaîne simulée

3.1.5 Application 2 : vérification du théorème central limite

Maintenant qu'on a simulé des chaînes de Markov, on vérifie numériquement le théorème central limite 2.8. On se place à nouveau dans le cas d'une chaîne de Markov à 2 états 0 et 1. On prend pour loi initiale μ et pour matrice de transition $P = P_3$ où μ et P_3 sont définies dans la section 3.1.3. On note π la loi stationnaire de cette chaîne. On sait que

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

avec $\sigma^2 = (\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2)$.

On choisit $h(x, y) = \mathbb{1}_{\{x=0, y=1\}}$, σ devient :

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= (\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2) \\ &= \sum_{x, y \in \{0, 1\}} \pi(x) P(x, y) \mathbb{1}_{\{x=0, y=1\}} - \pi(x) P(x, y) P(x, y) \mathbb{1}_{\{x=0, y=1\}} \\ &= \pi(0) P(0, 1) - \pi(0) P(0, 1) P(0, 1) \\ &= \pi(0) P(0, 1) (1 - P(0, 1)) \\ &\simeq 0.096. \end{aligned}$$

De plus,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=0, X_k=1\}} - \sum_{z \in \{0, 1\}} P(X_{k-1}, z) \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=0, z=1\}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=0, X_k=1\}} - P(0, 1) \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=0\}}. \end{aligned}$$

Pour vérifier le théorème central limite nous avons calculé un grand nombre de fois (5000 fois) $\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=0, X_k=1\}} - P(0, 1) \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=0\}}$ pour $(X_n)_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov de longueur 1000. Nous avons ensuite tracé l'histogramme de ces valeurs que nous avons superposé avec la densité de la loi normal $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

Nous obtenons le graphique 3.5 on remarque bien qu'il fait une courbe en cloche centrée en zéro ce qui équivaut au comportement d'une loi normal centrée. En le superposant avec la densité de la loi normal $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ (en rouge sur le graphique) on voit que l'histogramme est très proche de celle-ci ce qui est en accord avec le théorème central limite.

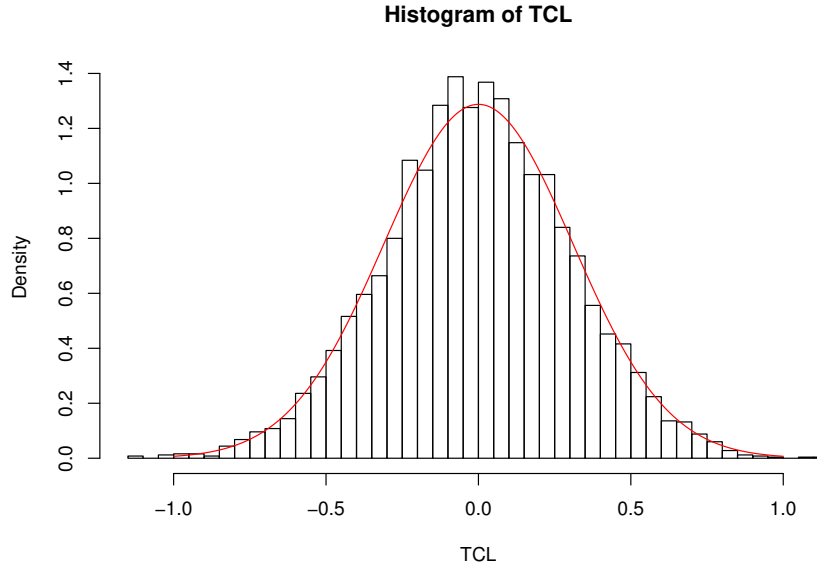


FIGURE 3.5 – théorème central limite

3.2 Estimation de matrice de transition

Maintenant qu'on sait simuler une chaîne de Markov à partir de sa matrice de transition, on va voir comment estimer la matrice de transition d'une chaîne de Markov à partir d'une de ses réalisations. On calcule l'estimateur par maximum de vraisemblance, on étudie ses propriétés puis on fait des simulations sur un cas simple. On se place dans le cas des chaînes de Markov sur un espace d'états fini.

3.2.1 Estimation par maximum de vraisemblance

On considère une chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$ sur l'espace d'états fini E de matrice de transition $P = (P(x, y))_{x, y \in E}$.

On suppose que la chaîne est irréductible, on note π sa loi invariante. On suppose sa mesure initiale μ connue mais pas sa matrice de transition P .

On note \mathbf{P} l'ensemble des matrices de transition sur E . Soit λ la mesure de comptage sur E . Supposons que l'on dispose d'une réalisation du vecteur aléatoire (X_0, \dots, X_n) .

La loi de (X_0, \dots, X_n) a pour densité par rapport à $\lambda^{\otimes n+1}$ la fonction

$$\begin{aligned} (x_0, \dots, x_n) \in E^{n+1} &\mapsto f_P(x_0, \dots, x_n) \\ f_P(x_0, \dots, x_n) &= \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \mu(x_0)P(x_0, x_1) \dots P(x_{n-1}, x_n). \end{aligned}$$

Pour tous $P \in \mathbf{P}$ et $x = (x_0, \dots, x_n) \in E^{n+1}$ on note

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

Nous voulons estimer la matrice de transition P par la méthode du maximum de vraisemblance. Pour ce faire nous devons introduire la quantité aléatoire $L_{X_0, \dots, X_n}(P) = f_P(X_0, \dots, X_n)$ qui est la vraisemblance de P pour l'échantillon (X_0, \dots, X_n) . L'estimateur de maximum de vraisemblance \hat{P}_n de P est par définition l'élément de \mathbf{P} qui maximise la vraisemblance c'est-à-dire la fonction aléatoire $P \in \mathbf{P} \mapsto L_{X_0, \dots, X_n}(P)$.

Or P est une matrice de transition, il ne faut donc pas oublier les contraintes suivantes : pour tous $x, y \in E$, $P(x, y) \geq 0$ et pour tous $x \in E$, $\sum_{y \in E} P(x, y) = 1$.

Pour tous $(x, y) \in E^2$ nous noterons

$$\begin{cases} N_n^x = \sum_{p=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x\}} \\ N_n^{xy} = \sum_{p=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=y\}}. \end{cases}$$

Lemme 3.1 (Maximum de vraisemblance). *L'estimateur du maximum de vraisemblance \hat{P}_n de P est donné pour tous $x, y \in E$ par*

$$\hat{P}_n(x, y) = \begin{cases} \frac{N_n^{xy}}{N_n^x} & \text{si } N_n^x > 0, \\ \frac{1}{\text{Card}(E)} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Remarque. Si $P(x, y) = 0$ alors $\hat{P}_n(x, y) = 0$, mais la réciproque est fautive.

Démonstration. Notons

$$\begin{aligned} L(P) &= L_{X_0, \dots, X_n}(P) \\ &= f_P(X_0, \dots, X_n) \\ &= \prod_{x, y \in E} \mu(x)^{\mathbb{1}_{\{X_0=x\}}} P(x, y)^{\mathbb{1}_{\{X_1=x, X_2=y\}}} \dots P(x, y)^{\mathbb{1}_{\{X_{n-1}=x, X_n=y\}}} \\ &= \prod_{x, y \in E} \mu(x)^{\mathbb{1}_{\{X_0=x\}}} P(x, y)^{\sum_{p=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=y\}}} \\ &= \prod_{x, y \in E} \mu(x)^{\mathbb{1}_{\{X_0=x\}}} P(x, y)^{N_n^{xy}}. \end{aligned}$$

Il est plus commode de maximiser $\log(L)$ qui est la log-vraisemblance plutôt que la vraisemblance L .

La log-vraisemblance s'écrit :

$$l(P) = \log(L(P)) = \sum_{x \in E} \mathbb{1}_{\{X_0=x\}} \log(\mu(x)) + \sum_{x, y \in E} N_n^{xy} \log(P(x, y)).$$

On souhaite maximiser $\log(L)$ sous les contraintes $\sum_{y \in E} P(x, y) = 1$ pour tout $x \in E$

$$\begin{aligned} \frac{\partial l(P)}{\partial P(x, y)} + \nu \frac{\partial \sum_{y \in E} P(x, y) - 1}{\partial P(x, y)} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{N_n^{xy}}{P(x, y)} + \nu &= 0 \\ \Leftrightarrow N_n^{xy} &= -\nu P(x, y). \end{aligned}$$

Or $\sum_{y \in E} P(x, y) = 1$, ce qui implique,

$$\begin{aligned} -\nu P(x, y) &= N_n^{xy} \\ \Leftrightarrow -\nu \sum_{y \in E} P(x, y) &= \sum_{y \in E} N_n^{xy} \\ \Leftrightarrow -\nu &= \sum_{y \in E} \sum_{p=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=y\}} \\ \Leftrightarrow -\nu &= N_n^x. \end{aligned}$$

On obtient donc que $\hat{P}_n(x, y) = \frac{N_n^{xy}}{N_n^x}$ si $N_n^x > 0$. Si $N_n^x = 0$, on n'a pas d'informations supplémentaires sur $\hat{P}_n(x, y)$. On sait seulement que $\sum_{y \in E} P(x, y) = 1$, on fait le choix suivant : si $N_n^x = 0$ alors $\hat{P}_n(x, y) = \frac{1}{\text{card}(E)}$ pour tout $y \in E$. \square

Remarque. L'estimateur \hat{P}_n est intuitif puisqu'il estime $P(x, y)$ par la proportion de transitions de l'état x vers l'état y parmi les n sauts observés.

3.2.2 Propriétés de l'estimateur

Les propriétés asymptotiques de cet estimateur se déduisent du comportement des suites $(N_n^{xy})_n$ et $(N_n^x)_n$.

Théorème 3.2 (Convergence et normalité asymptotique). *Pour tout $x \in E$, sachant $X_0 = x$, l'estimateur \hat{P}_n est convergent et asymptotiquement normal : pour tous $x, y \in E$,*

$$\hat{P}_n(x, y) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} P(x, y)$$

et

$$\sqrt{n\pi(x)}(\hat{P}_n(x, y) - P(x, y)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, P(x, y)(1 - P(x, y))).$$

Démonstration. D'après le lemme ergodique 2.3, on a pour tout $x \in E$

$$\frac{1}{n} N_n^x = \frac{1}{n} \sum_{p=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(x).$$

Et d'après le théorème ergodique à deux variables, théorème 2.5 avec $g(w, z) = \mathbb{1}_{\{w=x, z=y\}}$ on obtient pour tous $x, y \in E$

$$\frac{1}{n} N_n^{ij} = \frac{1}{n} \sum_{p=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=y\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \sum_{w, z \in E} \pi(w) P(w, z) \mathbb{1}_{\{w=x, z=y\}} = \pi(x) P(x, y).$$

Ce qui implique que

$$\hat{P}_n(x, y) = \frac{N_n^{xy}}{N_n^x} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \frac{\pi(x) P(x, y)}{\pi(x)} = P(x, y).$$

En utilisant le théorème central limite c'est-à-dire

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

avec $\sigma^2 = (\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2)$. On l'utilise avec la fonction $h(w, z) = \mathbb{1}_{\{w=x, z=y\}}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h(X_{k-1}, X_k) - Ph(X_{k-1}) &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=x, X_k=y\}} - \sum_{z \in E} P(X_{k-1}, z) \mathbb{1}_{\{X_{k-1}=x, z=y\}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} (N_n^{xy} - P(x, y) N_n^x). \end{aligned}$$

De plus,

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= (\pi, Ph^2) - (\pi, (Ph)^2) \\ &= \sum_{w, z \in E} \pi(w) P(w, z) h^2(w, z) - \sum_{w, z \in E} \pi(w) P(w, z) h(w, z) P(w, z) h(w, z) \\ &= \sum_{w, z \in E} \pi(w) P(w, z) \mathbb{1}_{\{w=x, z=y\}} - \sum_{w, z \in E} \pi(w) P(w, z) \mathbb{1}_{\{w=x, z=y\}} P(w, z) \mathbb{1}_{\{w=x, z=y\}} \\ &= \pi(x) P(x, y) - \pi(x) P(x, y) P(x, y) \\ &= \pi(x) P(x, y) (1 - P(x, y)). \end{aligned}$$

Ce qui donne :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{n}} (N_n^{xy} - P(x, y) N_n^x) &\xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \pi(x) P(x, y) (1 - P(x, y))) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{n \pi(x)}} N_n^x (\hat{P}_n(x, y) - P(x, y)) &\xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, P(x, y) (1 - P(x, y))). \end{aligned}$$

Or

$$\frac{1}{n} N_n^x \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi(x).$$

et

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{n\pi(x)}} N_n^x(\hat{P}_n(x, y) - P(x, y)) &= \frac{\sqrt{n}}{n\sqrt{\pi(x)}} N_n^x(\hat{P}_n(x, y) - P(x, y)) \\ &= \frac{N_n^x}{n} \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{\pi(x)}} (\hat{P}_n(x, y) - P(x, y)). \end{aligned}$$

D'après slutzky ,

$$\begin{aligned} \pi(x) \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{\pi(x)}} (\hat{P}_n(x, y) - P(x, y)) &\xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, P(x, y)(1 - P(x, y))) \\ \Leftrightarrow \sqrt{n\pi(x)} (\hat{P}_n(x, y) - P(x, y)) &\xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, P(x, y)(1 - P(x, y))). \end{aligned}$$

□

3.2.3 Exemple : cas d'une chaîne de Markov à 2 états

On a implémenté une fonction `estimation()` qui estime la matrice de transition d'une chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$, à valeurs dans E fini à partir d'une de ses réalisations et de son espace d'états en utilisant les formules établies dans le lemme 3.1. Comme illustration, on estime des matrices de transitions pour des chaînes de Markov à 2 états. On va utiliser pour matrice de transition P les matrices de la sous-section 3.1.3.

Pour chacune de ces trois matrices, on calcule les estimations obtenues avec des réalisations de longueur $n = 10000$ (simulées grâce à la fonction `CM2()`).

On obtient les résultats suivants :

	[,1]	[,2]
[1,]	0.09989282	0.9001072
[2,]	0.78706654	0.2127460
	[,1]	[,2]
[1,]	0.4961678	0.5036305
[2,]	0.4954383	0.5045617
	[,1]	[,2]
[1,]	0.7876091	0.2122198
[2,]	0.2982920	0.7017080

On s'intéresse en particulier à la matrice P_3 . Pour mieux visualiser la convergence de l'estimateur de P_3 , on trace pour ses quatre coefficients, la valeur estimée en fonction de la longueur n de la réalisation de la chaîne correspondante. On obtient les graphiques suivants :

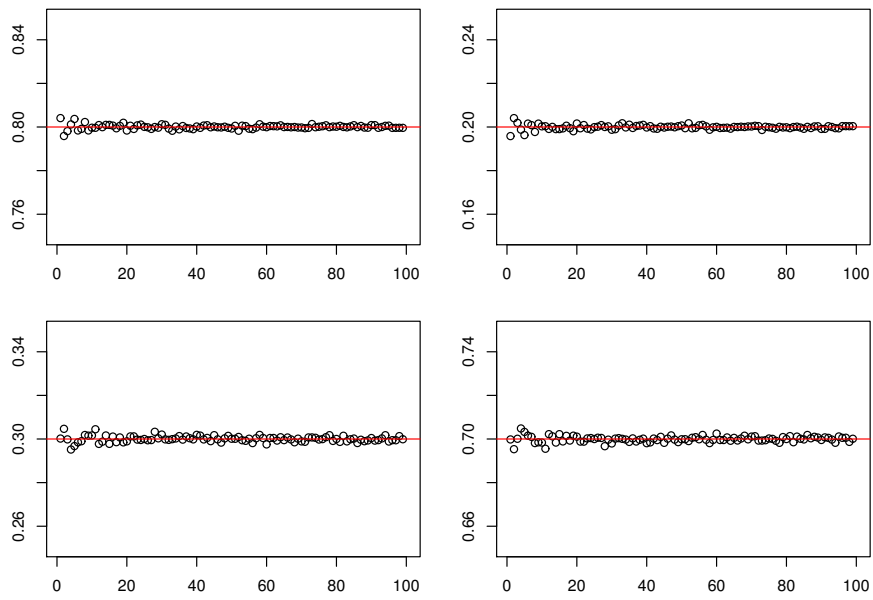


FIGURE 3.6 – convergence de l'estimateur de P_3

Grâce au graphique 3.6 on remarque que plus la chaîne est longue, plus l'estimateur est proche de la vrai valeur.

Partie 4

Chaînes de Markov cachées

On s'intéresse maintenant à la modélisation de la structure de l'ADN grâce à un modèle de chaîne de Markov cachée.

4.1 Définition

En pratique de nombreux processus réels bien que suivant un modèle de Markov ne sont observés que partiellement, on dit donc que ces processus sont des chaînes de Markov cachées. Dans cette partie nous allons présenter un exemple de chaîne de Markov cachée. Nous voulons à partir des observations partielles obtenir le plus d'information possible sur la partie cachée de la chaîne.

4.2 Modélisation de la structure d'un brin d'ADN

4.2.1 Le modèle

On modélise la structure d'un brin d'ADN par une chaîne de caractères écrite dans un alphabet fini $\mathcal{A} = \{A, C, G, T\}$. Certaines parties de la chaîne correspondent à la suite des codes des acides aminés nécessaires à la fabrication d'une protéine, et on dit que ces parties sont codantes, tandis que d'autres parties de la chaîne ne le sont pas. Pour tenir compte de cette structure segmentée, on modélise la chaîne par une trajectoire de chaîne de Markov possédant deux variables.

À un brin d'ADN de longueur l , noté (X_1, \dots, X_l) , et à valeurs dans \mathcal{A} , on adjoint le l -uplet (U_1, \dots, U_l) , à valeurs dans $\mathcal{U} = \{0, 1\}$. Si la position n est codante (respectivement non codante) alors $U_n = 1$ (respectivement $U_n = 0$).

On modélise la loi de $(X, U) = ((X_n, U_n))_{n \geq 1}$ par une chaîne de Markov homogène sur $\mathcal{A} \times \mathcal{U}$ de matrice de transition donnée par :

$$\begin{aligned} P((x, u), (x', u')) &= \mathbb{P}(X_{n+1} = x', U_{n+1} = u' | X_n = x, U_n = u) \\ &= \rho(u, u') \pi_{u'}(x, x'), \end{aligned}$$

où ρ est une matrice de transition sur \mathcal{U} et π_0 et π_1 sont des matrices de transition sur \mathcal{A} .

4.2.2 Propriétés

Notre modèle est une chaîne de Markov cachée car seule la composante X est observée. Les deux propriétés suivantes sont aussi vérifiées :

Proposition 4.1. *La chaîne (X, U) est irréductible, récurrente positive.*

Démonstration. L'irréductibilité vient du fait que par hypothèse, les coefficients de la matrice de transition P de la chaîne (X, U) sont strictement positifs. De plus c'est une chaîne de Markov finie, donc l'irréductibilité entraîne que la chaîne est aussi récurrente positive. \square

Remarque. Le résultat précédent entraîne que la chaîne (X, U) admet une unique loi stationnaire. De plus, la composante U de la chaîne (X, U) est elle-même une chaîne de Markov irréductible et récurrente positive donc elle admet aussi une unique loi stationnaire. En revanche, la composante X n'est pas une chaîne de Markov, mais en est une sachant $U = u$ pour $u \in \mathcal{U}$.

Proposition 4.2. *La longueur d'un segment de la catégorie $u \in \mathcal{U}$ suit une loi géométrique de paramètre $1 - \rho(u, u)$.*

Démonstration. On fixe $u \in \mathcal{U}$. Soient k et p des entiers supérieurs ou égaux à 1. On va calculer $\mathbb{P}(U_{k+1} = u, \dots, U_{k+p} \neq u | U_k = u)$. On a :

$$\mathbb{P}(U_{k+1} = u, \dots, U_{k+p} \neq u | U_k = u) = \rho(u, u)^{p-1}(1 - \rho(u, u))$$

ce qui prouve le résultat. \square

4.3 Algorithme progressif-rétrograde

4.3.1 Équations de prédiction, de filtrage et de lissage

On adopte la notation vectorielle $X_{1:i}$ et $x_{1:i}$ pour désigner les i -uplets (X_1, \dots, X_i) et (x_1, \dots, x_i) .

Définition 4.3. On définit les probabilités suivantes, pour tous $1 \leq i \leq l$, $x \in \mathcal{A}$, et $v \in \mathcal{U}$.

— probabilité de prédiction :

$$P^i(v) = \mathbb{P}(U_i = v | X_{1:i-1} = x_{1:i-1}).$$

C'est la probabilité que l'état caché U_i soit en position v connaissant les observations $X_{1:i-1}$.

— probabilité de filtrage :

$$F^i(v) = \mathbb{P}(U_i = v | X_{1:i} = x_{1:i}).$$

C'est la probabilité que l'état caché U_i soit en position v connaissant les observations $X_{1:i}$.

— probabilité de lissage :

$$L^i(v) = \mathbb{P}(U_i = v | X_{1:l} = x_{1:l}).$$

C'est la probabilité que l'état caché U_i soit en position v connaissant les observations $X_{1:l}$.

Ce qui nous intéresse c'est de trouver les probabilités de lissage pour tout i de 1 jusqu'à l , or il existe un lien entre les différentes probabilités que l'on retrouve dans le théorème suivant.

Théorème 4.4 (prédiction, filtrage, lissage). *Pour tous $2 \leq i \leq l$ et $v \in U$,*

$$\begin{aligned} P^i(v) &= \sum_{u \in U} p(u, v) F^{i-1}(u), \\ F^i(v) &= \frac{\pi_v(X_{i-1}, X_i) P^i(v)}{\sum_{u \in U} \pi_u(X_{i-1}, X_i) P^i(u)}, \\ L^{i-1}(v) &= F^{i-1}(v) \sum_{u \in U} p(v, u) \frac{L^i(u)}{P^i(u)}. \end{aligned}$$

Démonstration. Pour l'équation de prédiction, on utilise le fait que les lois de $(U_i | U_{i-1}, X_{1:i-1})$ et de $(U_i | U_{i-1})$ coïncident :

$$\begin{aligned} P^i(v) &= \mathbb{P}(U_i = v | X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \\ &= \sum_{u \in U} \mathbb{P}(U_i = v, U_{i-1} = u | X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \\ &= \sum_{u \in U} \mathbb{P}(U_i = v | U_{i-1} = u, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \mathbb{P}(U_{i-1} = u | X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \\ &= \sum_{u \in U} \mathbb{P}(U_i = v | U_{i-1} = u) \mathbb{P}(U_{i-1} = u | X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \\ &= \sum_{u \in U} p(u, v) F^{i-1}(u). \end{aligned}$$

Pour l'équation de filtrage, on rappelle la relation $\mathbb{P}(A|B \cap C) \mathbb{P}(B|C) = \mathbb{P}(A \cap B|C)$.

$$\begin{aligned}
F^i(v) &= \mathbb{P}(U_i = v | X_{1:i} = x_{1:i}) \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_i = v, X_i = x_i | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})}{\mathbb{P}(X_i = x_i | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})} \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_i = x_i | U_i = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \mathbb{P}(U_i = v | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})}{\sum_{u \in U} \mathbb{P}(X_i = x_i, U_i = u | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})} \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_i = x_i | U_i = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \mathbb{P}(U_i = v | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})}{\sum_{u \in U} \mathbb{P}(X_i = x_i | U_i = u, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \mathbb{P}(U_i = u | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})} \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_i = x_i | U_i = v, X_{i-1} = x_{i-1}) P^i(v)}{\sum_{u \in U} \mathbb{P}(X_i = x_i | U_i = u, X_{i-1} = x_{i-1}) P^i(u)} \\
&= \frac{\pi_v(X_{i-1}, X_i) P^i(v)}{\sum_{u \in U} \pi_u(X_{i-1}, X_i) P^i(u)}.
\end{aligned}$$

Pour l'équation de lissage,

$$\begin{aligned}
L^{i-1}(v) &= \mathbb{P}(U_{i-1} = v | X_{1:l} = x_{1:l}) \\
&= \sum_{u \in U} \mathbb{P}(U_{i-1} = v, U_i = u | X_{1:l} = x_{1:l}) \\
&= \sum_{u \in U} \mathbb{P}(U_{i-1} = v | U_i = u, X_{1:l} = x_{1:l}) \mathbb{P}(U_i = u | X_{1:l} = x_{1:l}) \\
&= \sum_{u \in U} \mathbb{P}(U_{i-1} = v | U_i = u, X_{1:l} = x_{1:l}) L^i(u).
\end{aligned}$$

Or,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(U_{i-1} = v | U_i = u, X_{1:l} = x_{1:l}) \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_{i-1} = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}, X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i)}{\mathbb{P}(X_{1:i-1} = x_{1:i-1}, X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_{i-1} = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1} | U_i = u, X_i = x_i, X_{i+1:l} = x_{i+1:l})}{\mathbb{P}(X_{1:i-1} = x_{1:i-1}, X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i)} \\
&\times \mathbb{P}(X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i) \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_{i-1} = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1} | U_i = u, X_i = x_i)}{\mathbb{P}(X_{1:i-1} = x_{1:i-1}, X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i)} \\
&\times \mathbb{P}(X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i)
\end{aligned}$$

La propriété de Markov assure que conditionnellement au présent, le passé et le futur sont indépendants.

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(X_{1:i-1} = x_{1:i-1}, X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i) \\
&= \mathbb{P}(X_{1:i-1} = x_{1:i-1} | U_i = u, X_i = x_i) \mathbb{P}(X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i).
\end{aligned}$$

On obtient,

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(U_{i-1} = v | U_i = u, X_{1:l} = x_{1:l}) \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_{i-1} = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1} | U_i = u, X_i = x_i) \mathbb{P}(X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i)}{\mathbb{P}(X_{1:i-1} = x_{1:i-1} | U_i = u, X_i = x_i) \mathbb{P}(X_{i+1:l} = x_{i+1:l} | U_i = u, X_i = x_i)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_{i-1} = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1} | U_i = u, X_i = x_i)}{\mathbb{P}(X_{1:i-1} = x_{1:i-1} | U_i = u, X_i = x_i)} \\
&= \mathbb{P}(U_{i-1} = v | U_i = u, X_i = x_i, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \\
&= \mathbb{P}(U_{i-1} = v | U_i = u, X_{1:i} = x_{1:i}) \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_{i-1} = v, U_i = u, X_i = x_i | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})}{\mathbb{P}(U_i = u, X_i = x_i | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})} \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_i = u, X_i = x_i | U_{i-1} = v, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \mathbb{P}(U_{i-1} = v | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})}{\mathbb{P}(X_i = x_i | U_i = u, X_{1:i-1} = x_{1:i-1}) \mathbb{P}(U_i = u, | X_{1:i-1} = x_{1:i-1})} \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_i = u, X_i = x_i | U_{i-1} = v, X_{i-1} = x_{i-1}) F^{i-1}(v)}{\mathbb{P}(X_i = x_i | U_i = u, X_{i-1} = x_{i-1}) P^i(u)} \\
&= \frac{p(v, u) \pi_u(x_{i-1}, x_i) F^{i-1}(v)}{\pi_u(x_{i-1}, x_i) P^i(u)} \\
&= \frac{p(v, u) F^{i-1}(v)}{P^i(u)}.
\end{aligned}$$

Ce qui nous donne,

$$\begin{aligned}
L^{i-1}(v) &= \sum_{u \in U} \mathbb{P}(U_{i-1} = v | U_i = u, X_{1:l} = x_{1:l}) L^i(u) \\
&= \sum_{u \in U} \frac{p(v, u) F^{i-1}(v)}{P^i(u)} L^i(u) \\
&= F^{i-1}(v) \sum_{u \in U} p(v, u) \frac{L^i(u)}{P^i(u)}.
\end{aligned}$$

□

4.3.2 L'algorithme

Pour calculer les probabilités de lissage, on utilise un algorithme progressif-rétrograde. C'est-à-dire dans un premier temps on détermine par récurrence, dans le sens croissant des indices, les probabilités de prédiction et de filtrage. Puis on en déduit par récurrence mais dans le sens décroissant les probabilités de lissage. Les relations de récurrence nécessaires à cet algorithme sont rassemblées dans le théorème 4.4.

Cependant, il nous manque l'initialisation de notre algorithme c'est-à-dire $P^1(u)$, $F^1(u)$ et $L^l(u)$.

Or,

$$\begin{aligned}
L^l(u) &= \mathbb{P}(U_l = u | X_{1:l} = x_{1:l}) = F^l(u), \\
P^1(u) &= \mathbb{P}(U_1 = u) = \text{la loi initiale de } U, \\
F^1(u) &= \mathbb{P}(U_1 = u | X_1 = x_1) \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_1 = u, X_1 = x_1)}{\mathbb{P}(X_1 = x_1)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(U_1 = u, X_1 = x_1)}{\sum_{v \in U} \mathbb{P}(U_1 = v, X_1 = x_1)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_1 = x_1 | U_1 = u) \mathbb{P}(U_1 = u)}{\sum_{v \in U} \mathbb{P}(X_1 = x_1 | U_1 = v) \mathbb{P}(U_1 = v)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_1 = x_1 | U_1 = u) P^1(u)}{\sum_{v \in U} \mathbb{P}(X_1 = x_1 | U_1 = v) P^1(v)} \\
&= \frac{(\text{la loi initiale de } X \text{ sachant } U_1 = u) P^1(u)}{\sum_{v \in U} (\text{la loi initiale de } X \text{ sachant } U_1 = v) P^1(v)}.
\end{aligned}$$

4.3.3 Simulations

On supposera les matrices de transitions connues pour les simulations suivantes. On verra par la suite comment estimer ces matrices.

Simulation d'un brin d'ADN

Avant de pouvoir appliquer l'algorithme progressif-rétrograde, on doit simuler des données sur lesquelles on va pouvoir l'appliquer. Pour cela, on crée une fonction `simulation_adn()` basée sur le procédé décrit dans la section 3.1.1 qui à partir de ρ , π_0 et π_1 simule une chaîne de longueur l correspondant à notre modèle en prenant pour lois initiales les lois stationnaires. Notre algorithme procède de la façon suivante :

- On simule $U_1 = u_1$ de loi la loi stationnaire de ρ ;
- On simule $X_1 = x_1$ de loi la loi stationnaire de π_{u_1} ;
- Pour $i = 2, \dots, l$, on dispose de la réalisation (x_{i-1}, u_{i-1}) de (X_{i-1}, U_{i-1}) simulée à l'itération précédente. On commence par simuler $U_i = u_i$ de loi la ligne de ρ donnant les probabilités de transition à partir de l'état u_{i-1} . Puis on simule $X_i = x_i$ de loi la ligne de π_{u_i} donnant les probabilités de transition à partir de l'état x_{i-1} .

L'algorithme retourne une liste contenant deux vecteurs, un pour chaque composante de la chaîne.

Calcul des probabilités de lissage

Nous avons ensuite implémenté l'algorithme progressif-rétrograde `PR()` sur R en choisissant pour P^1 la loi stationnaire. De même comme loi initiale sachant $U_1 = u$ nous avons choisi la loi stationnaire associée à la matrice π_u . Les relations de prédiction et de filtrage du

théorème 4.4 permettent de calculer toutes les probabilités P^i et F^i par récurrence progressive. On en déduit par récurrence rétrograde les probabilités L^i . Notre algorithme prend en argument les matrices ρ , π_0 et π_1 et retourne les probabilités de lissage dans un vecteur L , les probabilités de prédiction dans un vecteur P et les probabilités de filtrage dans un vecteur f .

On se donne des matrices de transitions ρ , π_0 et π_1 . À partir de ces matrices, on simule une séquence d'ADN (X, U) de longueur $l = 200$ dont le caractère codant ou non est connu (la composante U) et on utilise la fonction $\text{PR}()$ sur X pour retrouver U . On obtient alors les différentes probabilités associées (prédiction, filtrage et lissage), qui sont stockées dans trois vecteurs P , f et L .

Nous avons ensuite tracé la trajectoire de U ainsi que les différentes probabilités sur un même graphe pour comparer leur efficacité. Le graphe obtenu est visible sur la figure 4.1. La probabilité de lissage est en rouge, celle de prédiction en bleu et la probabilité de filtrage en vert. Lorsque $U_i = 0$ nos probabilités doivent être proche de 1 puisque celles-ci représente la chance que $U_i = 0$ avec plus ou moins d'information sur les X .

On remarque sur le graphique 4.1 qu'à plusieurs reprises les probabilités de prédiction et de filtration sont en dessous du seuil de 0.5 alors que la variable U_i est égal à 0 notamment pour $i = 140$. On remarque aussi que la probabilité de lissage est meilleure lors des changements de régimes que les deux autres probabilités.

On peut également voir ces résultats lorsque l'on reconstruit la variable U à partir d'une de ces probabilités. En effet, en se donnant un seuil (égal à 0.5), on donne à U_i la valeur 0 si la probabilité associée est supérieure à ce seuil et la valeur 1 sinon. La probabilité de prédiction est la moins bonnes car 159 des 200 variables sont bien prédites contre 169 pour la probabilité de filtration et 173 pour la probabilité de lissage.

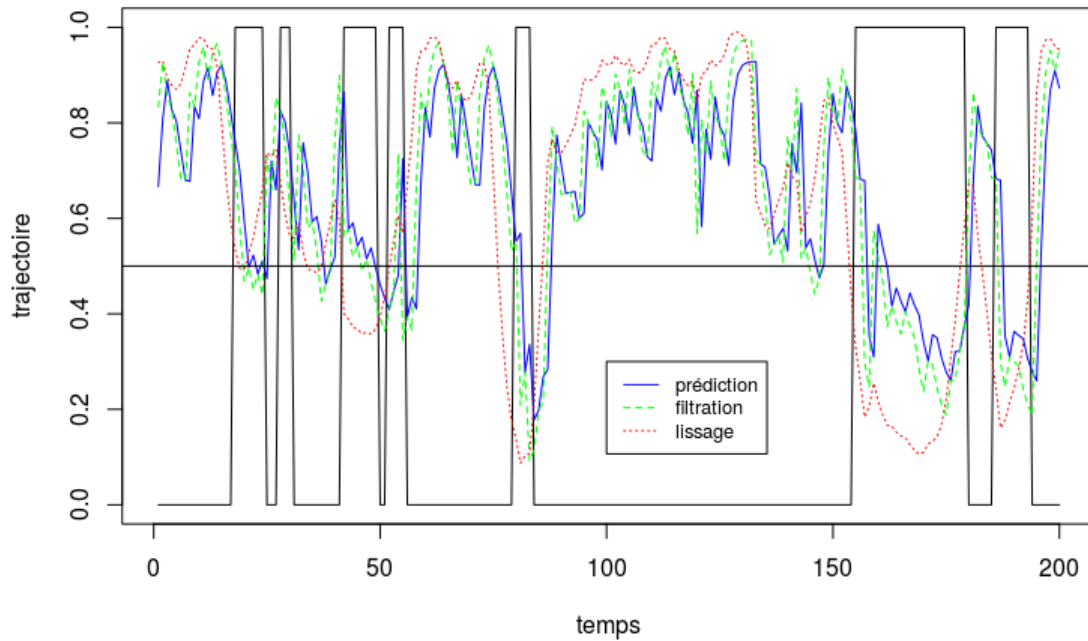


FIGURE 4.1 – Trajectoire de U (noir) en fonction des différentes probabilités

Dans la suite on n'utilisera que la probabilité de lissage car c'est la plus efficace des trois ce qui est cohérent puisque qu'elle construit U à partir de toutes les informations disponibles sur X .

Sur la figure 4.2 nous avons représenté en noir la trajectoire de U et en rouge la probabilité de lissage pour $v = 0$.

La probabilité de lissage est la plupart du temps supérieure à 0.5 lorsque $U_i = 0$ ce qui montre l'efficacité de notre algorithme. En effet la probabilité de lissage représente la probabilité d'avoir $U_i = 0$ sachant X donc il faut que celle-ci soit proche de 1 lorsque U_i est effectivement égale à 0.

Néanmoins on remarque que celle-ci ne descend pas en dessous de 0.5 à plusieurs reprises lorsque les "pics" sont petits et que la probabilité de lissage est un peu en retard lors des changements de régimes de U .

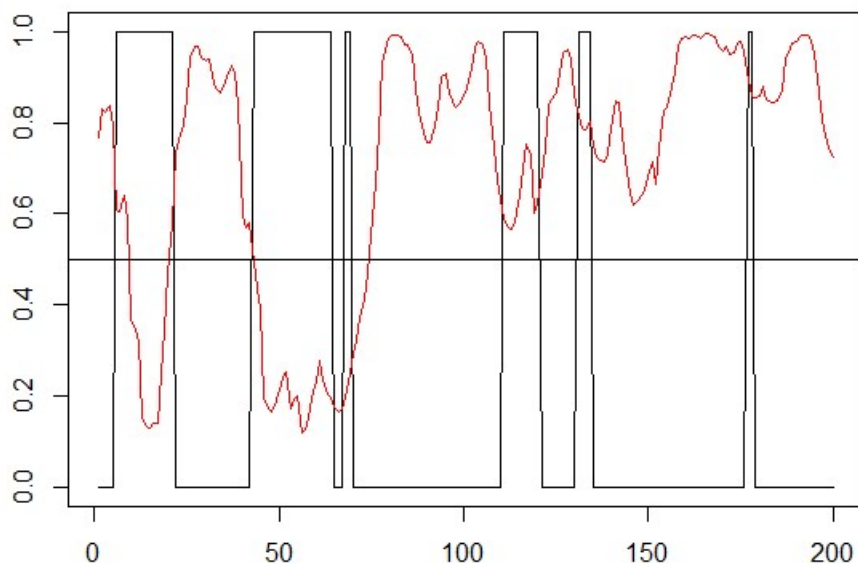


FIGURE 4.2 – Trajectoire de U (noir) et probabilité de lissage pour $v = 0$ (rouge)

Comme l’algorithme rétrograde-progressif a des difficultés lors des changements de régimes si la matrice de transition ρ a des petits coefficients sur la diagonale (il y a des changements de régimes plus fréquents) alors l’algorithme progressif-rétrograde est moins efficace.

De même lorsque les matrices π_0 et π_1 sont proches les deux régimes ont des comportements similaires il est donc difficile pour l’algorithme de différencier les deux comportements. De plus si $\pi_0 = \pi_1$ alors $F^i(u) = P^i(u)$ ce qui explique la moins bonne performance de l’algorithme puisque la probabilité de filtration n’apporte pas plus d’information que probabilité de prédiction.

4.4 Estimation de matrice de transition pour une chaîne de Markov cachée

L’étude précédente suppose connues les matrices de transition, cependant dans de nombreux cas celles-ci sont inconnues. Il est donc important de savoir estimer la matrice de transition d’une chaîne de Markov à partir d’une de ses trajectoires.

Nous allons procéder par étapes pour trouver les estimateurs des matrices de transitions de notre modèle : ρ , π_0 et π_1 .

On considère une chaîne de Markov cachée $(X, U) = ((X_n, U_n))_{n \geq 1}$ homogène sur $\mathcal{A} \times \mathcal{U}$ où X est visible et U est cachée.

La matrice de transition de cette chaîne est donnée par :

$$\begin{aligned} P((x, u), (x', u')) &= \mathbb{P}(X_{n+1} = x', U_{n+1} = u' | X_n = x, U_n = u) \\ &= \rho(u, u') \pi_{u'}(x, x'). \end{aligned}$$

On note $\theta = (\rho, (\pi_u)_{u \in \mathcal{U}})$. On suppose que la chaîne est irréductible et récurrente. On suppose que la mesure initiale de U notée ν est connue mais pas θ .

On note Θ l'ensemble des paramètres de la chaînes. Soit λ la mesure de comptage sur $\mathcal{A} \times \mathcal{U}$. La loi de $((X_1, U_1), \dots, (X_n, U_n))$ a pour densité par rapport à $\lambda^{\otimes n+1}$ la fonction :

$$\begin{aligned} f_\theta((x_1, u_1), \dots, (x_n, u_n)) &= \mathbb{P}(X_1 = x_1, U_1 = u_1, \dots, X_n = x_n, U_n = u_n) \\ &= \nu(u_1) \rho(u_1, u_2) \pi_{u_2}(x_1, x_2) \dots \rho(u_{n-1}, u_n) \pi_{u_n}(x_{n-1}, x_n). \end{aligned}$$

On obtient la vraisemblance de θ :

$$f_\theta((X_1, U_1), \dots, (X_n, U_n)) = \nu(U_1) \prod_{t=2}^n \rho(U_{t-1}, U_t) \prod_{t=2}^n \pi_{U_t}(X_{t-1}, X_t).$$

L'estimation des paramètres suit deux stratégies : soit la partie cachée de la chaîne est connue, alors les matrices de transitions des émissions sont estimées séparément par maximum de vraisemblance (MV) ; soit la partie cachée de la chaîne est inconnue, dans ce cas il est nécessaire d'employer la méthode EM (Expectation-Maximisation), celle-ci utilisant également le maximum de vraisemblance. Ces deux méthodes sont décrites dans les deux paragraphes suivants.

4.4.1 Estimation par maximum de vraisemblance

Comme dit précédemment pour utiliser le maximum de vraisemblance il faut que la partie cachée d'une réalisation de la chaîne soit connue. On pourra utiliser l'estimation des paramètres obtenue grâce à cette réalisation pour pouvoir trouver les parties cachées d'autres réalisations.

Pour tous $(u, v) \in \mathcal{U}^2$ et $(x, w) \in \mathcal{A}^2$ nous noterons

$$\left\{ \begin{array}{l} N_n^u = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{1}_{\{U_p=u\}}, \\ N_n^{uv} = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{1}_{\{U_p=u, U_{p+1}=v\}}. \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} N_n^{x,u} = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x, U_{p+1}=u\}}, \\ N_n^{xw,u} = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=w, U_{p+1}=u\}}. \end{array} \right.$$

Lemme 4.5 (Maximum de vraisemblance). *L'estimateur du maximum de vraisemblance $\hat{\theta}_n$ de θ est donnée pour tous $i, j \in E$ par*

$$\hat{\rho}_n(u, v) = \begin{cases} \frac{N_n^{uv}}{N_n^u} & \text{si } N_n^u > 0, \\ \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{U})} & \text{sinon} . \end{cases} \quad \text{et} \quad \hat{\pi}_{u_n}(w, x) = \begin{cases} \frac{N_n^{xw,u}}{N_n^{x,u}} & \text{si } N_n^{x,u} > 0, \\ \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{A})} & \text{sinon} . \end{cases}$$

Théorème 4.6 (Convergence et normalité asymptotique). *Les estimateurs $\hat{\rho}_n$ et $\hat{\pi}_u$ sont convergent et asymptotiquement normal :*

pour tous $u, v \in \mathcal{U}$,

$$\hat{\rho}_n(u, v) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \rho(u, v)$$

et

$$\sqrt{n\mu(u)}(\hat{\rho}_n(u, v) - \rho(u, v)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \rho(u, v)(1 - \rho(u, v))).$$

pour tous $x, w \in \mathcal{A}$ et $u \in \mathcal{U}$,

$$\hat{\pi}_{u_n}(x, w) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} \pi_u(x, w)$$

et

$$\sqrt{n\nu_u(x)}(\hat{\pi}_{u_n}(x, w) - \pi_u(x, w)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \pi_u(x, w)(1 - \pi_u(x, w))).$$

où μ est la loi stationnaire associée à la matrice de transition ρ et ν_u est la loi stationnaire associée à la matrice de transition π_u

Démonstration. Les preuves du Lemme 4.5 et du théorème 4.6 sont déjà faites. En effet U et X sachant U sont des chaînes de Markov on est donc dans le même cas que dans la section 3.2. \square

Remarque. Il s'agit d'un estimateur très intuitif puisque, par exemple, la probabilité de transition de l'état u à l'état v ($\rho(u, v)$) est estimée par la fréquence empirique de v parmi les états apparaissant juste après u .

4.4.2 Estimation par l'algorithme EM

L'algorithme EM est un algorithme itératif de maximisation locale de la vraisemblance des données incomplètes ($f_\theta(x_{1:n})$) dans les modèles à données manquantes ($u_{1:n}$). Il est aussi appelé algorithme de Baum-Welch dans le cadre des chaînes de Markov cachées.

À partir d'un jeu initial de paramètres θ^0 , chaque itération permet de remplacer le jeu de paramètres θ^m par un jeu de paramètres θ^{m+1} qui augmente la vraisemblance :

$$f_{\theta^{m+1}}(x_{1:n}) \geq f_{\theta^m}(x_{1:n}).$$

Définissons la log-vraisemblance conditionnelle du modèle θ par rapport au modèle θ^m pour tous $u_{1:n} \in \mathcal{U}^n$

$$L(\theta|\theta^m) = \mathbb{E}_{\theta^m}[\log(f_\theta(x_{1:n}, u_{1:n}))|x_{1:n}].$$

L'étape E de l'algorithme basée sur la valeur θ^m consiste à calculer $L(\theta|\theta^m)$. L'étape M de l'algorithme consiste à trouver θ^{m+1} tel que :

$$\theta^{m+1} = \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} L(\theta|\theta^m)$$

Théorème 4.7. *pour tout $m \geq 0$, $f_{\theta^{m+1}}(x_{1:n}) \geq f_{\theta^m}(x_{1:n})$.*

Démonstration. La vraisemblance des données incomplètes est

$$\begin{aligned} f_\theta(x_{1:n}) &= \mathbb{P}_\theta (X_{1:n} = x_{1:n}) \\ &= \frac{\mathbb{P}_\theta (X_{1:n} = x_{1:n}, U_{1:n} = u_{1:n})}{\mathbb{P}_\theta (U_{1:n} = u_{1:n} | X_{1:n} = x_{1:n})} \text{ pour tout } u_{1:n} \in \mathcal{U}^n \\ &= \frac{f_\theta(x_{1:n}, u_{1:n})}{f_\theta(u_{1:n} | x_{1:n})}. \end{aligned}$$

Ce qui donne :

$$\begin{aligned} \log(f_\theta(x_{1:n})) &= \mathbb{P}_\theta (X_{1:n} = x_{1:n}) \\ &= \log(f_\theta(x_{1:n}, u_{1:n})) - \log(f_\theta(u_{1:n} | x_{1:n})). \end{aligned}$$

En prenant l'espérance de chacun des termes sous la loi conditionnelle $\mathbb{P}_{\theta^m}(U_{1:n} = u_{1:n} | X_{1:n} = x_{1:n})$ on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\theta^m} [\log(f_\theta(x_{1:n})) | x_{1:n}] &= \mathbb{E}_{\theta^m} [\log(f_\theta(x_{1:n}, u_{1:n})) | x_{1:n}] - \mathbb{E}_{\theta^m} [\log(f_\theta(u_{1:n} | x_{1:n})) | x_{1:n}] \\ \log(f_\theta(x_{1:n})) &= L(\theta | \theta^m) - H(\theta | \theta^m). \end{aligned}$$

où $H(\theta | \theta^m) = \mathbb{E}_{\theta^m} [\log(f_\theta(u_{1:n} | x_{1:n})) | x_{1:n}]$ est un terme d'entropie relative conditionnelle.

$$\begin{aligned} \log(f_{\theta^{m+1}}(x_{1:n})) - \log(f_{\theta^m}(x_{1:n})) &= L(\theta^{m+1} | \theta^m) - L(\theta^m | \theta^m) - H(\theta^{m+1} | \theta^m) + H(\theta^m | \theta^m) \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

Car θ^{m+1} maximise $L(\theta | \theta^m)$ donc $L(\theta^{m+1} | \theta^m) - L(\theta^m | \theta^m) \geq 0$.

De plus $H(\theta | \theta^m)$ est une entropie relative donc $H(\theta^{m+1} | \theta^m) - H(\theta^m | \theta^m) \leq 0$. □

On note

$$\begin{cases} n(u, \theta^m) = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_p = u | X_{1:n} = x_{1:n}) \\ n(uv, \theta^m) = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_p = u, U_{p+1} = v | X_{1:n} = x_{1:n}). \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} n(x, u, \theta^m) = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x\}} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_{p+1} = u | X_{1:n} = x_{1:n}) \\ n(xw, u, \theta^m) = \sum_{p=1}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=w\}} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_{p+1} = u | X_{1:n} = x_{1:n}). \end{cases}$$

Lemme 4.8 (Algorithme EM).

$$\rho^{m+1}(u, v) = \begin{cases} \frac{n(uv, \theta^m)}{n(u, \theta^m)} & \text{si } n(u, \theta^m) > 0, \\ \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{U})} & \text{sinon.} \end{cases} \quad \text{et } \pi_u^{m+1}(x, w) = \begin{cases} \frac{n(xw, u, \theta^m)}{n(x, u, \theta^m)} & \text{si } n(x, u, \theta^m) > 0, \\ \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{A})} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Grâce à l'algorithme progressif-rétrograde on connaît $n(u, \theta^m), n(uv, \theta^m), n(x, u, \theta^m)$ et $n(x, u, \theta^m)$.

En effet, connaissant θ^m on sait que

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(U_p = u | X_{1:n} = x_{1:n}) &= L^p(u) \\ \mathbb{P}(U_{p+1} = u | X_{1:n} = x_{1:n}) &= L^{p+1}(u) \\ \mathbb{P}(U_p = u, U_{p+1} = v | X_{1:n} = x_{1:n}) &= \mathbb{P}(U_p = u | U_{p+1} = v, X_{1:n} = x_{1:n}) \mathbb{P}(U_{p+1} = v | X_{1:n} = x_{1:n}) \\ &= \frac{\rho(u, v) F^p(u)}{P^{p+1}(v)} L^{p+1}(v) \text{ d'après la preuve du théorème 4.4.}\end{aligned}$$

Il est donc possible de calculer θ^{m+1} à partir de θ^m .

Démonstration. Nous devons dans un premier temps calculer $L(\theta | \theta^m)$.

Or la vraisemblance de θ est

$$\begin{aligned}L(\theta) &= f_{\theta_*}((X_1, U_1), \dots, (X_n, U_n)) \\ &= \nu(U_1) \prod_{t=2}^n \rho(U_{t-1}, U_t) \prod_{t=2}^n \pi_{U_t}(X_{t-1}, X_t) \\ &= \prod_{u \in \mathcal{U}} \nu(u)^{\mathbb{1}_{\{U_i=u\}}} \prod_{u, v \in \mathcal{U}} \rho(u, v)^{\mathbb{1}_{\{U_{t-1}=u, U_t=v\}}} \prod_{u \in \mathcal{U}} \prod_{x, w \in \mathcal{A}} \pi_u(x, w)^{\mathbb{1}_{\{X_{t-1}=x, X_t=w, U_t=u\}}} \\ &= \prod_{u \in \mathcal{U}} \nu(u)^{\mathbb{1}_{\{U_i=u\}}} \prod_{u, v \in \mathcal{U}} \rho(u, v)^{N_n^{uv}} \prod_{u \in \mathcal{U}} \prod_{x, w \in \mathcal{A}} \pi_u(x, w)^{N_n^{xw, u}}.\end{aligned}$$

Ce qui donne la log-vraisemblance suivante

$$\begin{aligned}l(\theta) &= \log(L(\theta)) \\ &= \sum_{u \in \mathcal{U}} \mathbb{1}_{\{U_1=u\}} \log(\nu(u)) + \sum_{u, v \in \mathcal{U}} N_n^{uv} \log(\rho(u, v)) + \sum_{u \in \mathcal{U}} \sum_{x, w \in \mathcal{A}} N_n^{xw, u} \log(\pi_u(x, w)).\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L(\theta|\theta^m) &= \mathbb{E}_{\theta^m} [\log(f_\theta(x_{1:n}, u_{1:n}))|x_{1:n}] \\
&= \mathbb{E}_{\theta^m} \left[\sum_{u \in \mathcal{U}} \mathbf{1}_{\{U_1=u\}} \log(\nu(u)) \middle| x_{1:n} \right] \\
&+ \mathbb{E}_{\theta^m} \left[\sum_{u,v \in \mathcal{U}} N_n^{uv} \log(\rho(u,v)) + \sum_{u \in \mathcal{U}} \sum_{x,w \in \mathcal{A}} N_n^{xw,u} \log(\pi_u(x,w)) \middle| x_{1:n} \right] \\
&= \sum_{u \in \mathcal{U}} \mathbb{E}_{\theta^m} [\mathbf{1}_{\{U_1=u\}} | x_{1:n}] \log(\nu(u)) \\
&+ \sum_{u,v \in \mathcal{U}} \mathbb{E}_{\theta^m} \left[\sum_{p=1}^{n-1} \mathbf{1}_{\{U_p=u, U_{p+1}=v\}} \middle| x_{1:n} \right] \log(\rho(u,v)) \\
&+ \sum_{u \in \mathcal{U}} \sum_{x,w \in \mathcal{A}} \mathbb{E}_{\theta^m} \left[\sum_{p=1}^{n-1} \mathbf{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=w, U_{p+1}=u\}} \middle| x_{1:n} \right] \log(\pi_u(x,w)) \\
&= \sum_{u \in \mathcal{U}} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_1 = u | X_{1:n} = x_{1:n}) \log(\nu(x)) \\
&+ \sum_{p=1}^{n-1} \sum_{u,v \in \mathcal{U}} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_p = u, U_{p+1} = v | X_{1:n} = x_{1:n}) \log(\rho(u,v)) \\
&+ \sum_{p=1}^{n-1} \sum_{u \in \mathcal{U}} \sum_{x,w \in \mathcal{A}} \mathbf{1}_{\{X_p=x, X_{p+1}=w\}} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_{p+1} = u | X_{1:n} = x_{1:n}) \log(\pi_u(x,w)) \\
&= \sum_{u \in \mathcal{U}} \mathbb{P}_{\theta^m} (U_1 = u | X_{1:n} = x_{1:n}) \log(\nu(x)) \\
&+ \sum_{u,v \in \mathcal{U}} n(uv, \theta^m) \log(\rho(u,v)) + \sum_{u \in \mathcal{U}} \sum_{x,w \in \mathcal{A}} n(xw, u, \theta^m) \log(\pi_u(x,w)).
\end{aligned}$$

Pour obtenir $\rho^{m+1}(u, v)$ on maximise $L(\theta|\theta^m)$ sous la contrainte $\sum_{v \in \mathcal{U}} \rho^{m+1}(u, v) = 1$.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L(\theta|\theta^m)}{\partial \rho(u, v)} + \lambda \frac{(\sum_{v \in \mathcal{U}} \rho(u, v) - 1)}{\partial \rho(u, v)} &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{n(uv, \theta^m)}{\rho(u, v)} + \lambda &= 0 \\
\Leftrightarrow n(uv, \theta^m) &= -\lambda \rho(u, v).
\end{aligned}$$

Or $\sum_{v \in \mathcal{U}} \rho^{m+1}(u, v) = 1$, ce qui implique,

$$\begin{aligned}
-\lambda \sum_{v \in \mathcal{U}} \rho(u, v) &= \sum_{v \in \mathcal{U}} n(uv, \theta^m) \\
\Leftrightarrow -\lambda &= n(u, \theta^m).
\end{aligned}$$

On obtient donc que

$$\rho^{m+1}(u, v) = \frac{n(uv, \theta^m)}{n(u, \theta^m)} \text{ si } n(u, \theta^m) > 0.$$

Si $n(u, \theta^m) = 0$, on n'a pas d'informations supplémentaires sur $\rho^{m+1}(u, v)$. On sait seulement que $\sum_{v \in \mathcal{U}} \rho(u, v) = 1$, on fait le choix suivant si : $n(uv, \theta^m) = 0$ alors $\rho^{m+1}(u, v) = \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{U})}$ pour tout $v \in \mathcal{U}$.

Pour obtenir $\pi_u^{m+1}(x, w)$ on maximise $L(\theta|\theta^m)$ sous la contrainte $\sum_{w \in \mathcal{A}} \pi_u^{m+1}(x, w) = 1$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(\theta|\theta^m)}{\partial \pi_u(x, w)} + \lambda \frac{(\sum_{w \in \mathcal{A}} \pi_u(x, w) - 1)}{\partial \pi_u(x, w)} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{n(xw, u, \theta^m)}{\pi_u(x, w)} + \lambda &= 0 \\ \Leftrightarrow n(xw, u, \theta^m) &= -\lambda \pi_u(x, w). \end{aligned}$$

Or $\sum_{w \in \mathcal{A}} \pi_u^{m+1}(x, w) = 1$, ce qui implique,

$$\begin{aligned} -\lambda \sum_{w \in \mathcal{A}} \pi_u^{m+1}(x, w) &= \sum_{w \in \mathcal{A}} n(xw, u, \theta^m) \\ \Leftrightarrow -\lambda &= n(x, u, \theta^m). \end{aligned}$$

On obtient donc que pour tout $u \in \mathcal{U}$

$$\pi_u^{m+1}(x, w) = \frac{n(xw, u, \theta^m)}{n(x, u, \theta^m)} \text{ si } n(x, u, \theta^m) > 0.$$

Si $n(x, u, \theta^m) = 0$, on n'a pas d'informations supplémentaires sur $\pi_u^{m+1}(x, w)$. On sait seulement que $\sum_{w \in \mathcal{A}} \pi_u(x, w) = 1$, on fait le choix suivant si : $n(xw, u, \theta^m) = 0$ alors $\pi_u^{m+1}(x, w) = \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{A})}$ pour tout $w \in \mathcal{A}$.

□

L'algorithme EM alterne une reconstruction du chemin caché grâce à l'algorithme rétrograde-progressif et une mise à jour des paramètres selon les formules trouvées dans le lemme 4.8. Il permet d'obtenir une suite $\theta^0, \dots, \theta^m, \dots$ assurant la croissance de la vraisemblance. Cette suite converge vers un maximum local. Toutefois, si le point de départ θ^0 de l'algorithme est proche du maximum global de la vraisemblance alors la suite converge vers le maximum global. Le choix de θ^0 est donc très important pour cette algorithme. Un autre problème se pose c'est de savoir quand arrêter l'algorithme c'est-à-dire choisir un critère d'arrêt.

4.4.3 Application à des données simulées

On va maintenant utiliser les méthodes définies précédemment pour prédire le caractère de plusieurs séquences d'ADN simulées grâce à notre fonction `simulation_adn()`.

Première méthode : avec un échantillon de référence

Ici, on a à disposition une séquence X_{ref} de longueur l_{ref} dont on connaît le caractère U_{ref} . Notre but est d'utiliser cette information pour déterminer le caractère U d'une autre séquence X . Pour cela, on a implémenté une fonction `estimation_ADN_REAL()` qui prend en entrée X et $(X_{\text{ref}}, U_{\text{ref}})$ et qui retourne U ainsi que les matrices de transition estimées associées à $(X_{\text{ref}}, U_{\text{ref}})$. L'algorithme commence par calculer ces matrices puis utilise la fonction `PR()` pour calculer la probabilité de lissage L associée et reconstruire U à l'aide de cette probabilité de lissage en fixant un seuil (on le prendra ici encore égal à 0.5).

Deuxième méthode : avec l'algorithme EM

On a implémenté l'algorithme EM sur R. On prend en entrée une séquence X dont on veut prévoir le caractère U et on fixe un nombre d'itérations M à effectuer. On prend pour matrices initiales ρ , π_0 et π_1 avec pour coefficients respectifs $\frac{1}{\text{Card}(U)}$ et $\frac{1}{\text{Card}(\mathcal{A})}$. En effet, on sait que les coefficients doivent être compris entre 0 et 1 et que la somme de chaque ligne vaut 1 donc ce choix est pertinent. Puis à chaque itération, on calcule les probabilités de prédiction, de filtrage et de lissage grâce à la fonction `PR()` puis on calcule les nouvelles valeurs de ρ , π_0 et π_1 grâce aux formules établies dans le lemme 4.8. On arrêtera aussi les itérations lorsque la norme infinie de la différence entre deux itérations de la matrice ρ est inférieure à un certain seuil (on le prendra égal à 0.0001). Il reste à utiliser à nouveau la fonction `PR()` pour calculer la probabilité de lissage L pour ces matrices de transition et reconstruire U à l'aide de cette probabilité de lissage en fixant un seuil (on le prendra ici encore égal à 0.5). L'algorithme retourne les dernières valeurs obtenues pour ρ , π_0 et π_1 ainsi que le caractère U correspondant à la séquence X .

Application

Maintenant que nos deux méthodes sont implémentées, on les teste sur des données simulées et on compare les résultats obtenus. Pour la première méthode, nous avons utilisé deux tailles d'échantillon de référence : 200 puis 5000. Pour plusieurs longueurs d'échantillons, nous avons simulé une séquence et testé nos deux méthodes dessus.

Méthode \ Longueur	200	500	1000	2000	5000
Échantillon (200)	0.59	0.76	0.77	0.75	0.77
Échantillon (5000)	0.6	0.78	0.81	0.79	0.79
Algorithme EM	0.52	0.6	0.83	0.77	0.79

TABLE 4.1 – Taux de réussite dans la prédiction pour les deux méthodes.

On remarque que pour les deux méthodes, plus l'échantillon dont on cherche à déterminer la partie cachée est grand, plus la prédiction est efficace. De plus, l'efficacité des

algorithmes dépend des échantillons, pour plusieurs échantillons de même taille, la prédiction peut être plus ou moins bonne. Pour se débarrasser de cette dépendance à l'échantillon, on aurait pu, pour chaque longueur, tester les méthodes sur plusieurs échantillons et faire une moyenne des taux de réussites. Pour que la première méthode soit performante, l'important est d'avoir un échantillon de référence suffisamment grand. En effet on voit dans le tableau 4.1 qu'à partir d'un échantillon de longueur 500, les prédictions sont meilleures avec un échantillon de référence de longueur 5000 que celles obtenues avec un échantillon de référence de longueur 200.

La deuxième méthode est efficace sur un échantillon de grande taille et ne nécessite pas la connaissance d'un autre échantillon dont on connaît les parties codantes et non codantes. La première méthode est souvent meilleure que l'algorithme EM mais nécessite de connaître un échantillon de référence de préférence de grande taille. De plus elle nécessite moins de temps de calcul que l'algorithme EM car on ne calcule les matrices de transitions qu'une seule fois alors que dans l'algorithme, on les calcule à chaque itération. De même, dans l'algorithme EM, on doit appliquer l'algorithme progressif-rétrograde à chaque itération contrairement à la première méthode.

Conclusion

Dans les premières parties de notre travail encadré de recherche, nous avons étudié les chaînes de Markov et établi les deux principaux théorèmes de convergence : le théorème ergodique qui est une "version" de la loi des grands nombres pour le chaîne de Markov ainsi que le théorème limite central. Ces outils nous ont permis, après avoir construit l'estimateur d'une matrice de transition, d'étudier ses propriétés.

Une fois cette partie théorique de notre travail effectuée, nous avons besoin pour la suite de savoir simuler des chaînes de Markov. On a implémenté sur R des fonctions permettant de faire cette simulation. Nous avons ensuite appliqué ces fonctions dans le cas des chaînes à deux états dans le but de vérifier les théorèmes de convergence et la convergence de l'estimateur.

On s'est ensuite intéressé à une application des chaînes de Markov à la génétique : on a modélisé la structure de l'ADN. Une séquence d'ADN est une suite de lettres (A,C,G,T), mais il n'y a aucune raison pour qu'elles soient indépendantes. On ne peut donc pas utiliser les lois de probabilités usuelles pour la modélisation : on a besoin des chaînes de Markov. On peut donc modéliser une séquence d'ADN comme une chaîne de Markov à quatre états. Mais on s'intéresse à un problème plus compliqué : on veut savoir en plus quelles parties de la séquence sont codantes (déterminantes dans la création des protéines) ou non. Comme le caractère codant ou non codant de la séquence n'est pas directement observable, on a introduit la notion de chaînes de Markov cachées.

Notre but était maintenant, à partir d'une séquence d'ADN donnée, de trouver les parties codantes de la séquence.

Dans un premier temps, on a supposé les matrices de transition du modèle connues. On a établi des formules permettant de relier les différentes matrices de transitions. Ces formules nous ont permis de calculer la probabilité qu'un caractère de la séquence appartient à une partie codante, sachant toutes les informations dont on dispose sur la séquence. On a implémenté l'algorithme progressif-rétrograde qui permet de calculer cette probabilité, à partir de laquelle on a pu reconstruire la partie cachée de la chaîne.

Pour finir, on s'est intéressé au problème plus général où les matrices de transition sont inconnues. On a étudié deux approches différentes. Pour la première on suppose qu'on dispose d'une séquence dont on connaît les parties codantes. On utilise cette séquence pour déterminer des estimateurs des matrices de transitions. Nous n'avons plus qu'à appliquer l'algorithme progressif-rétrograde avec ces estimateurs pour déterminer les parties codantes d'autres séquences. Dans une autre approche du problème, on ne dispose plus de séquence au caractère codant ou non connu. Nous avons utilisé l'algorithme EM pour déterminer des esti-

mateurs des matrices de transitions puis on a reconstruit la partie cachée grâce à l'algorithme progressif-rétrograde.

Nous avons utilisé ces deux méthodes sur des données simulées afin de les tester et de les confronter. On aurait également aimé pouvoir appliquer nos algorithmes sur des données plus concrètes mais les seules séquences que nous avons trouvé correspondaient à des gènes et donc à des parties codantes de l'ADN.

Les fonctions R

Chaînes de Markov

```
# Fonction qui simule une chaîne de Markov a 2 états (0 et 1) de longueur n
# et de loi initiale mu et de matrice de transition P
CM2<-function(n,mu,P){
  X<-vector(length=n)
  U<-runif(1)
  X[1]<-1*(U>mu[1])
  for (i in 2:n){
    U<-runif(1)
    X[i]<-1*(U>P[X[i-1]+1,1])
  }
  return(X)
}

# Fonction qui calcule la loi stationnaire d'une matrice de permutation
loi_stationnaire<-function(P){
  n<-dim(P)[1]
  Q<-t(P)-diag(rep(1,n),n,n)
  A<-matrix(nrow=(n+1),ncol=n)
  A[1,]<-rep(1,n)
  A[2:(n+1),]<-Q
  b<-c(1,rep(0,n))
  return(qr.solve(A,b))
}

# Fonction qui estime la matrice de transition d'une chaîne de Markov fini
# d'espace d'états E, #E=nb_etats par la methode du maximim de
# vraisemblance.
estimation<-function(X,E){
  n=length(X) # longueur de la chaîne
  nb_etats=length(E) # nombre d'etats
  # vecteur contenant les Nx (nb de visite à l'état x avant l'instant n)
```

```

Nx=vector(length=nb_etats)
for (ind_etat in 1:nb_etats){
  Nx[ind_etat]=sum(1*(X==E[ind_etat]))
}
# matrice contenant les Nxy (nb de fois où on passe de x à y)
Nxy=matrix(nrow=nb_etats,ncol=nb_etats)
# estimation de la matrice de transition de X
P=matrix(nrow=nb_etats,ncol=nb_etats)
for(indL_etat in 1:nb_etats){
  for(indC_etat in 1:nb_etats){
    Nxy[indL_etat,indC_etat]=sum(1*(X==E[indL_etat])[-n]
                                *(X==E[indC_etat])[-1])
    # calcul de la proba de transition entre x et y
    P[indL_etat,indC_etat]=Nxy[indL_etat,indC_etat]/Nx[indL_etat]
  }
}
return(P)
}

```

Modèle de Markov caché : structure de l'ADN

```

# Simulation d'une séquence d'ADN de longueur l
simulation_adn<-function(rho,pi0,pi1,l){
  #dans ce vecteur on stock le brin d'ADN de longueur l
  X<-vector(length=l)
  #dans ce vecteur on stock le l-uplet (U1,...,Ul) si la position
  #i est codante Ui=1 sinon Ui=0
  U<-vector(length=l)
  #simulation de U1
  loi_init_U<-loi_stationnaire(rho) # loi initiale pour U
  alea<-runif(1,0,1)
  if (alea<loi_init_U[1]){U[1]<-0}else{U[1]<-1}
  #simulation de X1
  pi<-(1-U[1])*pi0+U[1]*pi1 #choix de la matrice de transition sachant U1
  loi_init_X<-loi_stationnaire(pi) #loi initiale de X sachant U1
  alea<-runif(1,0,1)
  if (alea<loi_init_X[1]){X[1]<- "A"}
  else if (alea<loi_init_X[1]+loi_init_X[2]){X[1]<- "C"}
  else if (alea<loi_init_X[1]+loi_init_X[2]+loi_init_X[3]){X[1]<- "G"}
  else{X[1]<- "T"}
  # simulations de (X2,U2),..., (Xl,Ul)
  for (i in 2:l){

```

```

#on simule d'abord Ui sachant Ui-1 grace a la matrice de permutation
#rho
alea<-runif(1,0,1)
if(alea<rho[U[i-1]+1,1]){U[i]<-0}
else{U[i]<-1}
#on simule Xi
alea<-runif(1,0,1)
# on choisit la matrice de permutation m grace a Ui (m0 si Ui=0 et
#m1 si Ui=1)
pi<-(1-U[i])*pi0+U[i]*pi1
#on simule Xi grace a la matrice de permutation pi et Xi-1
if (alea<pi[num(X[i-1]),1]){X[i]<-"A"}
else if (alea<pi[num(X[i-1]),1]+pi[num(X[i-1]),2]){X[i]<-"C"}
else if (alea<pi[num(X[i-1]),1]+pi[num(X[i-1]),2]+
        pi[num(X[i-1]),3]){X[i]<-"G"}
else{X[i]<-"T"}
}
return(list(X=X,U=U)) # on retourne X et U
}

# Transformation des lettres de L'ADN en chiffres :
# A->1 ; C->2 ; G->3 ; T->4
num<-function(cha){
  conv<-0
  if (cha=="A"){conv<-1}
  if (cha=="C"){conv<-2}
  if (cha=="G"){conv<-3}
  if (cha=="T"){conv<-4}
  return(conv)
}

# Algorithme progressif-retrograde :
# fonction qui prend en entree le brin d'ADN sa longueur et les 3 matrices
# de transitions et retourne le caractère de la séquence (partie codantes
# ou non)
PR<-function(X,p,mo,m1){
  #longueur de X
  l=length(X)
  #matrice pour stocker
  P=matrix(ncol = 2,nrow =l ) #prédiction
  f=matrix(ncol = 2,nrow =l ) #filtrage
  L=matrix(ncol = 2,nrow =l ) #lissage

```

```

#i=1
P[1,]=loi_stationnaire(p)
for(v in 1:2){
  m=m0*(2-v)+m1*(v-1)
  A=loi_stationnaire(m)
  B=loi_stationnaire(m0)
  C=loi_stationnaire(m1)
  f[1,v]=A[num(X[1])]*P[1,v]/(B[num(X[1])]*P[1,1]+C[num(X[1])]*P[1,2])
}
#i=2...l
for(i in 2:l){
  #prediction
  for(v in 1:2){
    P[i,v]=p[1,v]*f[i-1,1]+p[2,v]*f[i-1,2]}
  #filtration
  for(v in 1:2){
    m=m0*(2-v)+m1*(v-1)
    f[i,v]=m[num(X[i-1]),num(X[i])]*P[i,v]
    f[i,v]=f[i,v]/(m0[num(X[i-1]),num(X[i])]*P[i,1]+
                    m1[num(X[i-1]),num(X[i])]*P[i,2])}
  }
  #lissage
  L[1,]=f[1,] #i=1
  for(i in 1:2){ #i=1-1 ... 1
    for(u in 1:2){
      L[i-1,u]=f[i-1,u]*(p[u,1]*L[i,1]/P[i,1]+p[u,2]*L[i,2]/P[i,2])
    }
  }
  return(list(L=L,P=P,f=f))
}

```

```

# A partir d'une probabilité de lissage L et d'un seuil alpha,
# on reconstruit la partie cachée U de (X,U)
reconstruction<-function(L,alpha){
  U=1*(L[,1]<=alpha)
  #si la probabilité est supérieur a alpha alors U=0 sinon U=1
  return(U)
}

```

```

# Fonction qui estime pi0 et pi1 qu'on utilisera dans la fonction
# estimation_ADN
estimation_pi<-function(X,U,E,u){

```

```

n=length(X) # longueur de la chaîne
nb_etats=length(E)
#vecteur contenant les Nx (nb de visite à l'état x avant l'instant n)
Nx=vector(length=nb_etats)
for (ind_etat in 1:nb_etats){
  Nx[ind_etat]=sum(1*(X==E[ind_etat]))[-n]*(U==u)[-1])
}
#matrice contenant les Nxy (nb de fois où on passe de x à y)
Nxy=matrix(nrow=nb_etats,ncol=nb_etats)
#estimation de la matrice de transition de X
P=matrix(nrow=nb_etats,ncol=nb_etats)
for(indL_etat in 1:nb_etats){
  for(indC_etat in 1:nb_etats){
    Nxy[indL_etat,indC_etat]=Nxy[indL_etat,indC_etat]=
      sum(1*(X==E[indL_etat]))[-n]*(X==E[indC_etat]))[-1]*(U==u)[-1])
    #calcul de la proba de transition entre x et y
    P[indL_etat,indC_etat]=Nxy[indL_etat,indC_etat]/Nx[indL_etat]
  }
}
return(P)
}

# Fonction qui étant donnée une réalisation de (X,U)
# estime les matrices rho, pi0 et pi1 par maximum de vraisemblance
estimation_ADN<-function(adn){
  # longueur de la séquence
  l=length(adn$X)
  # espaces des états de X et U
  E_X=c("A","C","G","T")
  E_U=c(0,1)
  # calcul de rho
  rho=estimation(adn$U,E_U)
  # calcul de pi0 et pi1
  pi0=estimation_pi(adn$X,adn$U,E_X,0)
  pi1=estimation_pi(adn$X,adn$U,E_X,1)
  return(list(rho=rho,pi0=pi0,pi1=pi1))
}

# On utilise une réalisation "real" de (X,U) pour déterminer les parties
# codantes et non codantes d'une autre séquence
estimation_ADN_REAL<-function(X,real){
  #calcul des matrices de transition pour la réalisation connue real

```

```

matrices_real=estimation_ADN(real)
rho=matrices_real$rho
pi0=matrices_real$pi0
pi1=matrices_real$pi1
#longueur de la séquence X dont on veut prédire les parties codantes
l=length(X)
#calcul de la probabilité de lissage
proba_lissage=PR(X,rho,pi0,pi1)$L
#choix d'un seuil
seuil=0.5
#reconstruction du caractère de la séquence X
U=reconstruction(proba_lissage,seuil)
#on retourne les matrices de transitions et la partie cachée associée à X
return(list(rho=rho,pi0=pi0,pi1=pi1,U=U))
}

# On détermine les parties codantes et non codantes d'une séquence par
# l'algorithme EM
estimation_ADN_EM<-function(X,nbit){
  # matrices de transition initiales
  rho=matrix(c(0.5,0.5,0.5,0.5),nrow = 2)
  pi0=matrix(rep(0.25,16),nrow = 4);pi1=pi0
  l=length(X)
  n0=vector();n1=vector()
  theta=list(rho=rho,pi0=pi0,pi1=pi1)
  err=1
  m=0
  while((m<nbit)&&(err>0.0001)){
    L=PR(X,theta$rho,theta$pi0,theta$pi1)
    for(i in 1:2){
      for(j in 1:2){
        rho[i,j]=0
        for(p in 1:(l-1)){
          rho[i,j]=rho[i,j]+theta$rho[i,j]*L$f[p,i]*L$L[p+1,j]/L$P[p+1,j]
        }
        rho[i,j]=rho[i,j]/sum(L$L[-1,][,i])
      }
    }
    err=norm(theta$rho-rho,"M")
    theta$rho=rho
    for(i in 1:4){
      for(j in 1:4){

```

```

pi0[i,j]=0; pi1[i,j]=0; n0[i]=0; n1[i]=0
for (p in i:(l-1)){
  pi0[i,j]=pi0[i,j]+(num(X[p])==i)*(num(X[p+1])==j)*L$L[p+1,1]
  n0[i]=n0[i]+(num(X[p])==i)*L$L[p+1,1]
  pi1[i,j]=pi1[i,j]+(num(X[p])==i)*(num(X[p+1])==j)*L$L[p+1,2]
  n1[i]=n1[i]+(num(X[p])==i)*L$L[p+1,2]
}
pi0[i,j]=pi0[i,j]/n0[i]
pi1[i,j]=pi1[i,j]/n1[i]
}
}
theta$pi0=pi0;theta$pi1=pi1
m=m+1
}
U=reconstruction(PR(X,theta$rho,theta$pi0,theta$pi1)$L,0.5)
return(list(theta=theta,iterations=m,U=U))
}

```

Bibliographie

- [1] Christelle Melo de Lima. *Développement d'une approche markovienne pour l'analyse de l'organisation spatiale des génomes*. PhD thesis, Université Lyon 1, 2006.
- [2] Florent Malrieu Djalil Chafai. *Recueil de Modèles Aléatoires*. Mathématiques & applications 78. Springer, 2016.
- [3] Delmas Jean-François. *Modèles aléatoires : applications aux sciences de l'ingénieur et du vivant*. Mathématiques & applications 57. Springer, Berlin Heidelberg New York, 2006.
- [4] Geoffrey J. McLachlan and David Peel. *Finite mixture models*, volume 299 of *Probability and Statistics – Applied Probability and Statistics Section*. Wiley, New York, 2000.
- [5] Pardoux Étienne. *Processus de Markov et applications : algorithmes, réseaux, génome et finance cours et exercices corrigés*. Sciences sup Mathématiques appliquées pour le Master-SMAI. Dunod, Paris, 2007.