

Temps de mélange des chaînes de Markov

Justin Salez

Résumé

Combien de fois faut-il battre un paquet de 52 cartes pour que la permutation aléatoire obtenue soit à peu près uniformément distribuée ? Ce cours de M2 constitue une introduction sans pré-requis à la théorie moderne des temps de mélange des chaînes de Markov. Un intérêt particulier sera porté au célèbre phénomène de cutoff, qui est une transition de phase remarquable dans la convergence de certaines chaînes vers leur distribution stationnaire. Parmi les outils abordés figureront les techniques de couplage, l'analyse spectrale, le profil isopérimétrique, et les inégalités fonctionnelles. En guise d'illustration, ces méthodes seront appliquées à divers exemples classiques issus de contextes variés : mélange de cartes, marches aléatoires sur les groupes, systèmes de particules en interaction, algorithmes de Metropolis-Hastings, etc. Une place importante sera accordée aux marches sur graphes et réseaux, qui sont aujourd'hui au coeur des algorithmes d'exploration d'Internet et sont massivement utilisées pour la collecte de données et la hiérarchisation des pages par les moteurs de recherche.

Table des matières

1	Cadre de travail	4
1.1	Rappels sur les chaînes de Markov	4
1.2	Distance à l'équilibre	7
1.3	Temps de relaxation et temps de mélange	9
1.4	Phénomène de cutoff	11
1.5	Marches aléatoires	14
2	Aspects probabilistes	15
2.1	Couplages et temps de coalescence	15
2.2	Couplage pour la marche aléatoire sur le cycle	18
2.3	Couplage pour la marche sur l'hypercube	20
2.4	Cutoff pour le mélange "random-to-top"	22
3	Aspects spectraux	24
3.1	Rayon spectral	25
3.2	Diagonalisation des noyaux réversibles	27
3.3	Profil limite pour la marche aléatoire sur le cycle	29
3.4	Cutoff pour la marche aléatoire sur l'hypercube	31
4	Aspects géométriques	34
4.1	Graphe induit, degrés et diamètre	34
4.2	Conductance	36
4.3	Distance de transport et couplages contractants	37
5	Aspects variationnels	40
5.1	Forme de Dirichlet et constante de Poincaré	40
5.2	Inégalité de Cheeger	43
5.3	Congestion et chemins canoniques	44
6	Aspects cinétiques	46
6.1	Majoration cinétique de Carne-Varopoulos et conséquences	46
6.2	Minoration cinétique de Lee-Peres et conséquences	48
7	Exemples approfondis	49
7.1	Transition de phase pour le modèle d'Ising dynamique	49
7.2	Profil limite pour l'hypercube	51

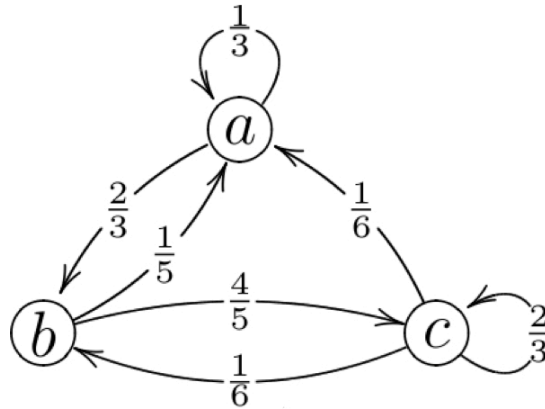


FIGURE 1 – Exemple de noyau de transition sur $S = \{a, b, c\}$.

1 Cadre de travail

Ce premier chapitre pose le cadre dans lequel nous allons travailler. Nous commençons par quelques rappels élémentaires sur les chaînes de Markov ergodiques et la convergence vers la loi stationnaire. Pour mesurer l'écart à l'équilibre, nous introduisons la distance en variation totale et collectons quelques-unes de ses propriétés élémentaires. Enfin, nous introduisons les deux quantités fondamentales qui gouverneront la vitesse de convergence à l'équilibre : le temps de relaxation et le temps de mélange. En guise d'illustration, nous calculons exactement ces quantités et établissons le phénomène de cutoff sur un premier exemple simple de chaîne ergodique, la fenêtre coulissante.

1.1 Rappels sur les chaînes de Markov

Dans tout le cours, nous nous donnerons

- Un ensemble fini non-vide S (l'espace d'états).
- Une application $P: S^2 \rightarrow [0, 1]$ (le noyau de transition) vérifiant :

$$\forall x \in S, \quad \sum_{y \in S} P(x, y) = 1. \quad (1)$$

- Une mesure de probabilité ν sur S (la loi initiale).

Nous appellerons *chaîne de Markov* avec paramètres (S, P, ν) une suite $\mathbf{X} = (X_0, X_1, \dots)$ de variables aléatoires réelles définies sur un même espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ et vérifiant

$$\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_t = x_t) = \nu(x_0)P(x_0, x_1) \cdots P(x_{t-1}, x_t),$$

pour tout $t \geq 0$ et tout $(x_0, \dots, x_t) \in S^{t+1}$. Notons que ces marginales fini-dimensionnelles caractérisent la loi de \mathbf{X} en tant que *processus*, c'est-à-dire ici variable aléatoire à valeurs dans l'es-

pace produit $S^{\mathbb{N}}$. La forme produit du membre droit est fondamentale : elle assure l'indépendance conditionnelle entre le *passé* (X_0, \dots, X_{t-1}) et le *futur* $(X_{t+1}, X_{t+2}, \dots)$ sachant le *présent* X_t .

En notant μ_t la loi de X_t , il découle de la définition que l'on a $\mu_0 = \nu$ et pour tout $t \geq 0$,

$$\mu_{t+1} = \mu_t P,$$

au sens de la multiplication algébrique usuelle : nous assimilerons systématiquement une loi sur S à un vecteur ligne, une fonction $f: S \rightarrow \mathbb{R}$ à un vecteur-colonne, et un noyau de transition $P: S^2 \rightarrow [0, 1]$ à une matrice. Si l'on cherche à comprendre le comportement de X_t lorsque $t \rightarrow \infty$, il est donc naturel d'étudier les *lois stationnaires*, solutions de l'équation

$$\pi = \pi P. \tag{2}$$

L'unicité (et même un peu plus) est garantie dès que le noyau P est *irréductible* au sens suivant :

$$\forall (x, y) \in S^2, \quad \exists t \in \mathbb{N}, \quad P^t(x, y) > 0. \tag{3}$$

Lemme 1 (Lois stationnaires). *Tout noyau P sur S admet une loi stationnaire π . Si P est irréductible, alors π est unique et charge tous les états ($\pi(y) > 0$ pour tout $y \in S$).*

Démonstration. Pour $t \geq 1$, on considère la moyenne des lois de la chaîne sur les t premiers instants :

$$\pi_t := \frac{1}{t} \sum_{s=0}^{t-1} \mu_s.$$

Par compacité, on peut extraire de la suite $(\pi_t)_{t \geq 1}$ une sous-suite qui converge vers une loi limite π . Celle-ci est aussitôt stationnaire, puisque pour tout $t \geq 1$, on a

$$\pi_t P - \pi_t = \frac{\mu_{t+1} - \mu_0}{t} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} 0.$$

Pour la stricte positivité, il suffit d'observer que le support de π est non-vide et clos par la relation d'accessibilité $(x \rightarrow y) \Leftrightarrow (P(x, y) > 0)$ puisque $\pi(x)P(x, y) \leq \pi(y)$. Pour l'unicité enfin, on note que si π et π' sont deux lois stationnaires distinctes, alors par continuité, on peut trouver $\theta \in (0, 1)$ tel que $\min\{\pi(x) - \theta\pi'(x) : x \in S\} = 0$. Mais alors $(\pi - \theta\pi')/(1 - \theta)$ est une loi stationnaire qui ne charge pas tous les états, ce qui est contradictoire. \square

Remarque 1 (Mélange en moyenne de Césarro). *Par compacité-unicité, l'argument ci-dessus montre que dès que P est irréductible, on a pour toute la loi initiale ν la convergence*

$$\frac{1}{t} \sum_{s=0}^{t-1} \mathbb{P}(X_s = \cdot) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \pi.$$

La convergente plus forte $\mathbb{P}(X_t = \cdot) \rightarrow \pi$ n'a pas forcément lieu, comme le montre l'exemple suivant.

Exemple 1 (Chaîne périodique). Sur $S = \{0, 1\}$, on considère le noyau irréductible

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Comme $P^2 = I$, on a pour tout $t \in \mathbb{N}$, $P^{2t} = I$ et $P^{2t+1} = P$, donc $(P^t)_{t \geq 0}$ ne converge pas.

Pour régler ces problèmes de périodicité, il faut imposer une condition plus forte que l'irréductibilité, appelée *ergodicité* et obtenue en échangeant l'ordre des quantificateurs dans (3) :

$$\exists t \in \mathbb{N}, \quad \forall (x, y) \in S^2, \quad P^t(x, y) > 0. \quad (5)$$

Une façon simple de rendre ergodique un noyau irréductible P consiste à le remplacer par

$$\hat{P} := \frac{P + I}{2}. \quad (6)$$

Autrement dit, on tire à pile-ou-face avant chaque itération, et on reste sur place si la pièce tombe sur pile. Cette transformation n'affecte ni l'irréductibilité, ni la loi invariante. Un noyau de la forme (6) – c'est-à-dire dont les entrées diagonales sont minorées par $\frac{1}{2}$ – est dit *paresseux*. Le point de départ de la théorie du mélange est le résultat fondamental suivant, qui affirme que la chaîne oublie progressivement sa condition initiale pour atteindre un équilibre global.

Théorème 1 (Mélange). Si P est ergodique, on a, indépendamment du choix de la loi initiale ν ,

$$\forall y \in S, \quad \mathbb{P}(X_t = y) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \pi(y).$$

Nous verrons dans la suite plusieurs preuves de ce résultat et de ses nombreux raffinements. Le phénomène de mélange a une conséquence pratique remarquable : pour simuler une loi cible π compliquée, il suffit de construire une chaîne de Markov ergodique simple qui admet π comme loi stationnaire, et de la laisser tourner assez longtemps ! Cette observation est à la base de véritables révolutions technologiques, comme les méthodes *MCMC/Metropolis-Hastings* ou le célèbre algorithme *Page Rank* de *Google*, sur lesquels nous reviendrons plus loin. Ces applications motivent tout particulièrement la question fondamentale suivante :

Question 1. À quelle vitesse se produit la convergence promise par le Théorème 1 ?

Pour répondre à cette question, il faut d'abord s'entendre sur une manière de mesurer l'écart entre une loi μ sur S et l'équilibre π . Plusieurs candidats naturels se présentent selon la culture scientifique : distance en variation totale pour le probabiliste et le statisticien, distance induite par la norme $\ell^p(S, \pi)$ pour l'analyste, entropie relative pour le physicien, l'ergodicien ou le théoricien du signal, etc. Tous ces choix sont pertinents, et donnent lieu à des théories différentes, basée sur des outils mathématiques spécifiques. Nous concentrerons notre attention sur la distance en variation totale, mais nous verrons qu'elle entretient des relations étroites avec d'autres distances et qu'un détour judicieux par l'une ou l'autre est souvent la meilleure façon d'obtenir une estimation efficace.

1.2 Distance à l'équilibre

La *distance en variation totale* entre deux lois μ et ν sur S est définie par la formule

$$d_{\text{TV}}(\mu, \nu) := \max_{A \subseteq S} |\mu(A) - \nu(A)|. \quad (7)$$

Il est clair que d_{TV} définit une distance sur l'ensemble des lois sur S . Notons que $d_{\text{TV}}(\mu, \nu) \leq 1$, avec égalité si et seulement si μ et ν sont *étrangères* l'une à l'autre, au sens où leurs supports sont disjoints. Nous commençons par énumérer quelques formulations alternatives de cette quantité. Nous en verrons une autre, plus fondamentale, dans le chapitre suivant.

Lemme 2 (La distance en variation totale sous toutes ses formes). *On a les identités :*

$$\begin{aligned} d_{\text{TV}}(\mu, \nu) &= \max_{A \subseteq S} (\mu(A) - \nu(A)) \\ &= \sum_{x \in S} (\mu(x) - \nu(x))_+ \\ &= 1 - \sum_{x \in S} \mu(x) \wedge \nu(x) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x \in S} |\mu(x) - \nu(x)| \\ &= \frac{1}{2} \max \{ |\mu f - \nu f| : \|f\|_\infty \leq 1 \}. \end{aligned}$$

Démonstration. Pour la première égalité, il suffit de remarquer que changer A en son complémentaire change $\mu(A) - \nu(A)$ en son opposé. Pour la seconde, on note que pour tout $A \subseteq \Omega$,

$$\begin{aligned} \mu(A) - \nu(A) &= \sum_{x \in A} (\mu(x) - \nu(x)) \\ &\leq \sum_{x \in A} (\mu(x) - \nu(x))_+ \\ &\leq \sum_{x \in S} (\mu(x) - \nu(x))_+, \end{aligned}$$

et que ces égalités sont atteintes dans le cas $A := \{x \in S : \mu(x) \geq \nu(x)\}$. Les troisièmes et quatrièmes identités en découlent aussitôt, si l'on applique à $a = \mu(x)$ et $b = \nu(x)$ les égalités triviales suivantes :

$$(a - b)_+ = a - a \wedge b = \frac{1}{2} (|a - b| + a - b).$$

Pour la dernière enfin, on remarque que toute observable $f: S \rightarrow [-1, 1]$ vérifie

$$\frac{1}{2} |\mu f - \nu f| = \frac{1}{2} \left| \sum_{x \in S} (\mu(x) - \nu(x)) f(x) \right| \leq \frac{1}{2} \sum_{x \in S} |\mu(x) - \nu(x)| = d_{\text{TV}}(\mu, \nu),$$

et que l'inégalité est atteinte lorsque $f(x) = \text{sgn}(\mu(x) - \nu(x))$ (avec $\text{sgn} = \mathbf{1}_{\mathbb{R}_+} - \mathbf{1}_{\mathbb{R}_-}$). \square

Nous faisons maintenant deux remarques élémentaires qui se révéleront fort utiles.

Remarque 2 (Convexité). *La fonction $d_{\text{TV}}(\cdot, \cdot)$ est convexe en chacun de ses arguments. En particulier, si μ s'écrit comme combinaison convexe de lois μ_1, \dots, μ_n , alors*

$$d_{\text{TV}}(\mu, \nu) \leq \max_{1 \leq i \leq n} d_{\text{TV}}(\mu_i, \nu).$$

Lemme 3 (Les transitions rapprochent les lois). *Pour tout noyau de transition P sur S ,*

$$d_{\text{TV}}(\mu P, \nu P) \leq d_{\text{TV}}(\mu, \nu).$$

En particulier, si π est une loi stationnaire pour P , on a $d_{\text{TV}}(\mu P, \pi) \leq d_{\text{TV}}(\mu, \pi)$.

Démonstration. Pour tout $A \subseteq S$, nous avons par définition

$$\begin{aligned} \mu P(A) - \nu P(A) &= \sum_{x \in S} \sum_{y \in A} P(x, y) (\mu(x) - \nu(x)) \\ &\leq \sum_{x \in S} \sum_{y \in A} P(x, y) (\mu(x) - \nu(x))_+ \\ &\leq \sum_{x \in S} (\mu(x) - \nu(x))_+. \end{aligned}$$

Le membre droit n'est rien d'autre que $d_{\text{TV}}(\mu, \nu)$, et le résultat en découle aussitôt. \square

Maintenant que nous nous sommes mis d'accord sur la manière de mesurer l'écart entre deux lois, nous pouvons définir la *distance à l'équilibre* de la chaîne au temps $t \in \mathbb{N}$ par la formule

$$\mathfrak{D}(t) := \max_{\nu \in \mathcal{P}(S)} d_{\text{TV}}(\nu P^t, \pi).$$

Nous étendons cette définition à $t \in \mathbb{R}_+$ en posant $\mathfrak{D}(t) = \mathfrak{D}(\lfloor t \rfloor)$. La maximisation sur ν permet de s'affranchir des conditions initiales : si $\mathfrak{D}(t)$ est petite, alors la chaîne sera assurément proche de l'équilibre, indépendamment de la loi initiale. Comme toute loi ν sur S est combinaison convexe des masses de Dirac $\delta_x, x \in S$, la Remarque 2 montre que l'on a

$$\mathfrak{D}(t) = \max_{x \in S} d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi). \quad (8)$$

En particulier, lorsque l'espace d'états est grand, $\mathfrak{D}(0)$ est très proche de 1 :

$$\mathfrak{D}(0) = 1 - \pi_*, \quad \text{où} \quad \pi_* := \min_{x \in S} \pi(x) \leq \frac{1}{|S|}.$$

Enfin, le Lemme 3 assure que $t \mapsto \mathfrak{D}(t)$ est décroissante. Pour une chaîne ergodique, nous allons voir que la décroissance vers zéro est en fait asymptotiquement exponentielle.

1.3 Temps de relaxation et temps de mélange

Nous commençons notre étude de $\mathfrak{D}(t)$ en établissant la propriété fondamentale suivante, qui signifie qu'une fois commencé, le mélange se poursuit au moins aussi vite : si s itérations suffisent pour réduire la distance à l'équilibre à disons, $\frac{1}{4}$, alors ks itérations suffisent pour la réduire à 2^{-k} !

Lemme 4 (Sous-multiplicativité). *Pour tout $s, t \geq 0$, on a*

$$\mathfrak{D}(t+s) \leq 2\mathfrak{D}(t)\mathfrak{D}(s). \quad (9)$$

Démonstration. Soit Π la matrice dont toutes les lignes sont égales à π , i.e. pour tout $(x, y) \in S \times S$,

$$\Pi(x, y) = \pi(y). \quad (10)$$

Alors on vérifie immédiatement que $\Pi^2 = P\Pi = \Pi P = \Pi$, de sorte que pour tout $t \geq 1$,

$$(P - \Pi)^t = \sum_{s=0}^t \binom{t}{s} (-1)^s \Pi^s P^{t-s} = P^t - \Pi.$$

En notant $\|A\| := \max_{x \in S} \sum_{y \in S} |A(x, y)|$, on obtient la représentation importante suivante :

$$\mathfrak{D}(t) = \frac{1}{2} \|(P - \Pi)^t\|, \quad (11)$$

pour tout $t \geq 1$. Le résultat annoncé découle alors immédiatement de la sous-multiplicativité $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$, valable pour toutes matrices $A, B \in \mathbb{R}^{S \times S}$, et que l'on vérifie aisément. \square

Cette propriété a pour conséquence un raffinement remarquable du Théorème 1.

Théorème 2 (Convergence géométrique). *Si P est ergodique, alors il existe $\lambda_\star < 1$ tel que*

$$(\mathfrak{D}(t))^{\frac{1}{t}} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \lambda_\star.$$

Démonstration. La propriété (9) signifie que la suite positive $(u_t)_{t \geq 0}$ définie par $u_t := 2\mathfrak{D}(t)$ est sous-multiplicative, i.e. $u_{t+s} \leq u_t u_s$ pour tout $t, s \in \mathbb{N}$. Le Lemme de Fekete entraîne aussitôt que

$$(u_t)^{\frac{1}{t}} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \inf \left\{ (u_t)^{\frac{1}{t}} : t \geq 1 \right\}.$$

La limite est strictement plus petite que 1, puisque par ergodicité, on a $\mathfrak{D}(t) < 1/2$ pour t grand. \square

Remarque 3 (Rayon spectral). *La quantité λ_\star est un paramètre fondamental, appelé rayon spectral de la chaîne. La preuve ci-dessus n'en fournit qu'une caractérisation peu effective, à savoir*

$$\lambda_\star = \inf \left\{ (2\mathfrak{D}(t))^{\frac{1}{t}} : t \geq 1 \right\}. \quad (12)$$

Nous en fournirons au chapitre 3 une interprétation directe en termes de valeurs propres de P .

001100101100010110010111011...

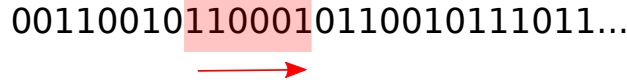


FIGURE 2 – Fenêtre coulissante de longueur $n = 6$.

À première vue, le Théorème 2 semble apporter une réponse définitive à la question 1 : la distance à l'équilibre décroît essentiellement comme λ_\star^t , ce qui conduit à considérer le système comme mélangé lorsque les valeurs de t sont de l'ordre de grandeur du *temps de relaxation* :

$$t_{\text{REL}} := \frac{1}{\log \frac{1}{\lambda_\star}}. \quad (13)$$

En réalité, il faut souvent bien plus que t_{REL} itérations pour que la chaîne ne commence même à mélanger ! Le Théorème 2 est un résultat asymptotique, qui ne décrit la vitesse d'atteinte de l'équilibre que lorsque la chaîne en est déjà infiniment proche. Or, c'est précisément l'opposé qui nous intéresse : combien de temps faut-il attendre *avant* que la distance à l'équilibre ne soit assez petite pour que le régime asymptotique promis par le Théorème 2 n'entre en vigueur ? Ce constat conduit naturellement à la définition suivante. Nous appellerons *temps de mélange* la quantité

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) := \min \{t \geq 0 : \mathfrak{D}(t) \leq \varepsilon\}, \quad (14)$$

où le paramètre $\varepsilon \in (0, 1)$ contrôle la précision voulue, comme illustré sur la figure 3. Cette quantité répond à la question 1, et c'est à son estimation que le présent cours est consacré. Notons que la caractérisation (12) implique que pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$,

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \geq t_{\text{REL}} \log \left(\frac{1}{2\varepsilon} \right). \quad (15)$$

Exemple 2 (Fenêtre coulissante). *Sur $S = \{0, 1\}^n$, on considère le noyau illustré Figure (2), i.e.*

$$P(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } (y_1, \dots, y_{n-1}) = (x_2, \dots, x_n) \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce noyau est ergodique et la loi uniforme est stationnaire. Par symétrie, l'état initial n'importe pas et l'on peut choisir $x = (0, \dots, 0)$. Alors pour tout temps $t \leq n$, $P^t(x, \cdot)$ est la loi uniforme sur

$$S_t := \{x \in \{0, 1\}^n : x_1 = x_2 = \dots = x_{n-t} = 0\}.$$

Comme $|S_t| = 2^t$, on vérifie aisément que $\mathfrak{D}(t) = 1 - (\frac{1}{2})^{n-t}$, de sorte que pour $\varepsilon \in (0, 1)$, on a

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) = \left\lceil n - \log_2 \left(\frac{1}{1 - \varepsilon} \right) \right\rceil.$$

Ainsi, $t_{\text{MIX}}(\varepsilon) = n$ dès que $\varepsilon < \frac{1}{2}$. Cela n'est compatible avec (15) que si $t_{\text{REL}} = 0$. Le temps de relaxation sous-estime donc ici considérablement le temps qu'il faut à la chaîne pour mélanger !

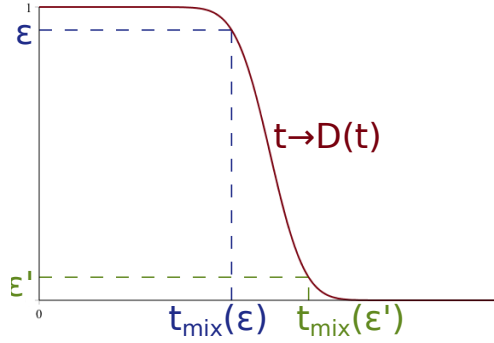


FIGURE 3 – Distance à l'équilibre et temps de mélange associées.

1.4 Phénomène de cutoff

L'étude du temps de mélange prend tout son sens lorsque le nombre d'états devient grand, ce qui conduit à considérer plutôt une suite d'espaces d'états $(S_n)_{n \geq 1}$ sur chacun desquels est définie un noyau ergodique P_n , et à étudier le comportement de la distance \mathfrak{D}_n et du temps de mélange $t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon)$ associés lorsque $n \rightarrow \infty$. Il est courant de choisir $\varepsilon = \frac{1}{4}$ et de noter simplement $t_{\text{MIX}} := t_{\text{MIX}}(\frac{1}{4})$. La valeur choisie importe peu, puisque la sous-multiplicativité (9) assure que pour $0 < \varepsilon < \frac{1}{2}$ fixé,

$$t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon) = \Theta(t_{\text{MIX}}^{(n)}). \quad (16)$$

Pour de nombreuses chaînes, il arrive que la dépendance en ε disparaisse même complètement, i.e.

$$\frac{t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon)}{t_{\text{MIX}}^{(n)}} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 1. \quad (17)$$

pour tout $0 < \varepsilon < 1$ fixé. À bien y regarder, cela signifie qu'une transition de phase remarquable se produit lorsque le nombre d'itérations approche de $t_{\text{MIX}}^{(n)}$, la chaîne passant brutalement d'une loi quasiment étrangère à l'équilibre à un mélange quasiment parfait : pour $\alpha \geq 0$ fixé,

$$\mathfrak{D}_n \left(\alpha t_{\text{MIX}}^{(n)} \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha < 1; \\ 0 & \text{si } \alpha > 1. \end{cases} \quad (18)$$

C'est le célèbre *phénomène de cutoff*, découvert au début des années 80 pour le mélange de cartes, et mis en évidence depuis pour plusieurs familles de chaînes de Markov issues de contextes variés, depuis les marches aléatoires sur certains groupes finis jusqu'aux systèmes de particules en interaction. Cette transition de phase reste mal comprise, et l'établir constitue un problème ouvert pour de nombreuses chaînes classiques. Posée dès les années 80, la question suivante est toujours ouverte aujourd'hui, et constitue sans aucun doute le problème le plus important du domaine.

Question 2. *Quels sont les mécanismes responsables de l'émergence d'un cutoff ?*

Lors d'un congrès sur le sujet en 2004, le critère suivant, baptisé *condition produit*, a été proposé :

$$\frac{t_{\text{REL}}^{(n)}}{t_{\text{MIX}}^{(n)}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \quad (19)$$

La vérification de ce critère est aisée en pratique, puisqu'elle ne nécessite pas d'estimer précisément le temps de mélange : seule une comparaison d'ordres de grandeur est requise. Il est facile de voir que c'est une condition nécessaire à l'émergence du phénomène de cutoff :

Lemme 5 (Pas de cutoff sans la condition produit). *Toute suite de noyaux qui vérifie un cutoff doit satisfaire la condition produit (19).*

Démonstration. Fixons $\varepsilon \in (0, \frac{1}{2})$. Par définition, le phénomène de cutoff affirme que

$$\frac{t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon)}{t_{\text{MIX}}^{(n)}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

D'un autre côté, la borne spectrale (15) assure que

$$t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon) \geq t_{\text{REL}}^{(n)} \ln \left(\frac{1}{2\varepsilon} \right).$$

En combinant ces deux énoncés, on déduit que

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \left\{ \frac{t_{\text{REL}}^{(n)}}{t_{\text{MIX}}^{(n)}} \right\} \leq \frac{1}{\ln \left(\frac{1}{2\varepsilon} \right)},$$

et le membre droit peut être rendu aussi petit que l'on veut en choisissant ε assez petit. \square

Hélas, la réciproque de ce lemme n'est pas vraie en toute généralité. Pire, n'importe quelle suite de noyaux ergodiques satisfaisant un phénomène de cutoff peut être modifiée pour constituer un contre-exemple, comme nous allons le voir maintenant. Donnons-nous un noyau de transition ergodique P sur S et un paramètre $\theta \in (0, 1)$, et considérons le noyau de transition

$$\widehat{P} := (1 - \theta)P + \theta\Pi, \quad (20)$$

où l'on rappelle que Π est la matrice dont toutes les lignes sont égales à la loi stationnaire. Notons que \widehat{P} admet la même loi stationnaire. L'interprétation de ce noyau est la suivante : à chaque itération, on tire à pile-ou-face avec une pièce de biais θ : si c'est pile, on saute conformément à P ; si c'est face, on saute directement vers un état distribué selon la loi stationnaire.

Lemme 6. Soit $(P_n)_{n \geq 1}$ une suite de noyaux ergodiques qui vérifie le phénomène de cutoff, et soit $(\theta_n)_{n \geq 1}$ une suite à valeurs dans $(0, 1)$, tendant vers zéro de telle sorte que lorsque $n \rightarrow \infty$,

$$t_{\text{REL}}(P_n) \ll \frac{1}{\theta_n} \ll t_{\text{MIX}}(P_n).$$

Alors, la suite $(\widehat{P}_n)_{n \geq 1}$ obtenue par la transformation (20) satisfait encore la condition produit (19), mais la distance à l'équilibre associée admet maintenant un profil limite continu : pour tout $\alpha \in \mathbb{R}_+$,

$$\widehat{\mathfrak{D}}_n \left(\frac{\alpha}{\theta_n} \right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} e^{-\alpha}.$$

En particulier, $(\widehat{P}_n)_{n \geq 1}$ ne vérifie pas le phénomène de cutoff.

Démonstration. Pour un noyau \widehat{P} défini par (20), le rayon spectral $\widehat{\lambda}_*$ et la distance à l'équilibre $\widehat{\mathfrak{D}}(t)$ se déduisent de ceux de P : on a $\widehat{P} - \Pi = (1 - \theta)(P - \Pi)$, de sorte que (11) entraîne

$$\widehat{\mathfrak{D}}(t) = (1 - \theta)^t \mathfrak{D}(t), \tag{21}$$

pour tout $t \geq 0$. Au vu du Théorème 2, on en déduit aussitôt que $\widehat{\lambda}_* = (1 - \theta)\lambda_*$, c'est-à-dire

$$t_{\text{REL}}(\widehat{P}) = \frac{t_{\text{REL}}(P)}{1 - t_{\text{REL}}(P) \ln(1 - \theta)}. \tag{22}$$

Appliquons ces observations à $P = P_n$ et $\theta = \theta_n$ et faisons tendre $n \rightarrow \infty$. En prenant $t_n \sim \frac{\alpha}{\theta_n}$, on a clairement $(1 - \theta_n)^{t_n} \rightarrow e^{-\alpha}$ et $\mathfrak{D}_n(t_n) \rightarrow 1$, puisque $(P_n)_{n \geq 1}$ satisfait un cutoff au temps $t_{\text{MIX}}(P_n) \gg t_n$. Ainsi, la formule (21) entraîne bien $\widehat{\mathfrak{D}}_n(t_n) \rightarrow e^{-\alpha}$. Cela montre au passage que $t_{\text{MIX}}(\widehat{P}_n) = \Theta(t_n)$, et donc $t_{\text{MIX}}(\widehat{P}_n) \gg t_{\text{REL}}(P_n)$ vu notre choix de θ_n . Par ailleurs, (22) montre que $t_{\text{REL}}(\widehat{P}_n) \sim t_{\text{REL}}(P_n)$, et l'on conclut que la condition produit $t_{\text{MIX}}(\widehat{P}_n) \gg t_{\text{REL}}(\widehat{P}_n)$ est vérifiée. \square

Malgré le niveau de généralité de ce contre-exemple, on peut lui reprocher son manque de réalisme : on peut passer de n'importe quel état à n'importe quel autre en une seule itération ! D'une manière générale, les chaînes qui vérifient la condition produit sans satisfaire le phénomène de cutoff sont considérés comme *pathologiques* par la communauté, et la conjecture informelle reste que cutoff et condition produit sont équivalents pour les chaînes *raisonnables*. Donner un sens rigoureux à cet énoncé constitue un problème ouvert important :

Question 3. Pour quelles chaînes de Markov y a-t-il équivalence entre condition produit et cutoff ?

L'équivalence a par exemple été récemment établie pour les chaînes de vie et de mort, et plus généralement, pour toutes les marches aléatoires sur des réseaux acycliques. Elle est par ailleurs vraie pour toute chaîne réversible si l'on mesure l'écart à l'équilibre par la norme $\ell^2(\pi)$ plutôt que par la distance en variation totale, ce qui a moins de sens d'un point-de-vue probabiliste.

1.5 Marches aléatoires

Parmi les exemples de chaînes que nous considérerons, une place importante sera accordée aux marches aléatoires, qui sont aujourd’hui au cœur des algorithmes d’exploration des grands réseaux et sont massivement utilisées pour la collecte de données et la hiérarchisation des pages internet par les moteurs de recherche. Le temps qu’il faut à une marche pour atteindre sa mesure d’équilibre constitue en outre une excellente jauge pour une myriade d’aspects géométriques du graphe sous-jacent : distances entre les sommets, pièges locaux, goulots d’étranglement, expansion, etc.

Marche aléatoire sur un groupe. Supposons que notre ensemble d’états S soit muni d’une opération interne $(x, y) \mapsto x \star y$ qui lui donne une structure de *groupe*, i.e.

- (i) L’opération \star est associative : $(x \star y) \star z = x \star (y \star z)$ pour tout $(x, y, z) \in S^3$.
- (ii) Il existe un élément dit neutre, et noté $\text{id} \in S$, tel que $x \star \text{id} = \text{id} \star x = x$ pour tout $x \in S$.
- (iii) Tout élément $x \in S$ admet un *inverse* $x^{-1} \in S$ tel que $x \star x^{-1} = x^{-1} \star x = \text{id}$.

Voici trois exemples classiques de groupes que nous étudierons :

- Le groupe cyclique $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, muni de l’addition modulo n .
- Le groupe binaire $\{0, 1\}^n$, muni de l’addition modulo 2 coordonnée par coordonnée.
- Le groupe des permutations \mathfrak{S}_n , muni de la composition.

Soit μ une loi sur S , et soit $(Z_t)_{t \geq 1}$ une suite de variables aléatoires indépendantes, de loi μ . Le processus \mathbf{X} défini par $X_0 = \text{id}$ et $X_t := Z_1 \star Z_2 \star \dots \star Z_t$, s’appelle *marche aléatoire* de loi d’incrément μ . C’est une chaîne de Markov, de noyau de transition

$$P(x, y) := \mu(x^{-1} \star y).$$

Ce noyau est évidemment bi-stochastique, ce qui signifie que la loi uniforme sur S est stationnaire.

Marche aléatoire sur un graphe. Rappelons qu’un *graphe* (simple et non-orienté) est la donnée

- d’un ensemble fini non-vide S , dont les éléments sont appelés *sommets* ;
- d’un ensemble A de paires de sommets, appelées *arêtes*.

Deux sommets x et y sont dits *voisins* lorsque $\{x, y\} \in A$. Le nombre de voisins de x s’appelle le *degré* du sommet x et est noté $\text{deg}(x)$. On peut définir un noyau de transition P sur S par

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

La chaîne de Markov associée s’appelle la *marche aléatoire simple* sur G . On vérifie aisément que

$$\pi(x) := \frac{\text{deg}(x)}{2|A|}$$

est une loi stationnaire, et même réversible au sens de la définition (38) à venir.

2 Aspects probabilistes

Dans ce chapitre, nous introduisons un outil probabiliste efficace pour estimer la distance en variation totale : le couplage. Nous illustrons ensuite sa puissance sur trois chaînes de Markov classiques : la marche aléatoire sur le cycle, le modèle d'urnes d'Ehrenfest, et un mélange de cartes.

2.1 Couplages et temps de coalescence

Un *couplage* de deux lois μ et ν est un couple aléatoire (X, Y) tel que X a pour loi μ et Y a pour loi ν . Nous verrons qu'un tel couple fournit aussitôt une majoration de $d_{\text{TV}}(\mu, \nu)$, à savoir

$$d_{\text{TV}}(\mu, \nu) \leq \mathbb{P}(X \neq Y). \quad (23)$$

La liberté qui nous est laissée est considérable, puisque seules les lois marginales sont imposées. L'art consistera à construire un couple suffisamment simple pour que le membre droit soit facile à estimer, et suffisamment fin pour que la majoration obtenue soit bonne. À cet égard, il est rassurant de savoir qu'il existe toujours un couplage qui réalise l'égalité. Le lemme suivant résume tout cela.

Lemme 7 (Distance en variation totale et couplages). *On a*

$$d_{\text{TV}}(\mu, \nu) = \min \{ \mathbb{P}(X \neq Y) : (X, Y) \text{ est un couplage de } \mu \text{ et } \nu \}.$$

Démonstration. Si (X, Y) est un couplage de μ et ν , alors pour tout $A \subseteq S$, on peut écrire

$$\begin{aligned} \mu(A) - \nu(A) &= \mathbb{P}(X \in A) - \mathbb{P}(Y \in A) \\ &\leq \mathbb{P}(X \in A) - \mathbb{P}(X \in A, Y \in A) \\ &\leq \mathbb{P}(X \in A, Y \notin A) \\ &\leq \mathbb{P}(X \neq Y), \end{aligned}$$

ce qui montre (23). Réciproquement, construisons un couplage qui réalise l'égalité, en laissant de côté les cas triviaux $d_{\text{TV}}(\mu, \nu) = 0$ et $d_{\text{TV}}(\mu, \nu) = 1$. D'après le Lemme 2, on a $d_{\text{TV}}(\mu, \nu) = 1 - p$ avec

$$p := \sum_{x \in S} \mu(x) \wedge \nu(x).$$

Il nous faut donc construire un couplage tel que $\mathbb{P}(X = Y) = p$. Posons pour cela

$$(X, Y) := \begin{cases} (Z, Z) & \text{si } B = 1 \\ (\hat{X}, \hat{Y}) & \text{si } B = 0, \end{cases}$$

où B, Z, \hat{X}, \hat{Y} sont indépendantes avec $B \sim \text{Bernoulli}(p)$ et Z, \hat{X}, \hat{Y} à valeurs dans S , de lois

$$\mathbb{P}(Z = x) = \frac{\mu(x) \wedge \nu(x)}{p}, \quad \mathbb{P}(\hat{X} = x) = \frac{(\mu(x) - \nu(x))_+}{1 - p}, \quad \mathbb{P}(\hat{Y} = x) = \frac{(\nu(x) - \mu(x))_+}{1 - p}.$$

On vérifie immédiatement que (X, Y) est bien un couplage de μ et ν , et que $\mathbb{P}(X = Y) = p$. \square

Si l'on veut exploiter le Lemme 7 pour estimer des temps de mélange, il faut pour chaque $x \in S$ et chaque $t \in \mathbb{N}$, construire une variable aléatoire X de loi $P^t(x, \cdot)$ et une variable aléatoire Y de loi π , qui coïncident le plus souvent possible. Cela n'a pas l'air évident du tout, mais nous allons développer quelques idées pour nous faciliter la tâche. Tout d'abord, plutôt que de comparer $P^t(x, \cdot)$ à π pour tout $x \in S$, nous pouvons comparer $P^t(x, \cdot)$ et $P^t(y, \cdot)$ pour tout $(x, y) \in S^2$.

Lemme 8 (Oublier, c'est mélanger). *Pour tout $t \in \mathbb{N}$, on a*

$$\mathfrak{D}(t) \leq \max_{(x,y) \in S^2} d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), P^t(y, \cdot)).$$

Démonstration. Par stationnarité, on a $\pi = \pi P^t = \sum_{y \in S} \pi(y) P^t(y, \cdot)$, de sorte que π est combinaison convexe des lois $P^t(y, \cdot), y \in S$. La Remarque 2 entraîne aussitôt

$$d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi) \leq \max_{y \in S} d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), P^t(y, \cdot)).$$

Le résultat s'obtient en maximisant ensuite sur $x \in S$. □

Pour estimer $d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), P^t(y, \cdot))$, nous pouvons coupler des *trajectoires* et estimer le temps qu'elles mettent à se rencontrer : supposons que soient construites, sur un même espace probabilisé, deux chaînes \mathbf{X} et \mathbf{Y} de noyau P issues de x et y . Alors pour chaque $t \in \mathbb{N}$, le couple (X_t, Y_t) est évidemment un couplage de $P^t(x, \cdot)$ et $P^t(y, \cdot)$, de sorte que

$$d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), P^t(y, \cdot)) \leq \mathbb{P}(X_t \neq Y_t).$$

Afin d'estimer le membre droit, faisons pour l'instant l'hypothèse – dont nous nous débarrasserons par la suite – qu'à partir du moment où les trajectoires \mathbf{X} et \mathbf{Y} se rencontrent, elles coïncident pour toujours. Autrement dit, si l'on définit le *temps de coalescence*

$$T := \inf \{t \geq 0 : X_t = Y_t\}, \tag{24}$$

avec la convention $\inf \emptyset = +\infty$, nous avons

$$\{X_t \neq Y_t\} = \{T > t\}, \tag{25}$$

pour tout $t \in \mathbb{N}$, de sorte que l'inégalité précédente devient simplement

$$d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), P^t(y, \cdot)) \leq \mathbb{P}(T > t). \tag{26}$$

Pour obtenir une bonne majoration, nous voyons donc qu'il faut coupler les transitions des deux chaînes de façon à *favoriser leur rencontre*. Enfin, une recette simple pour coupler des chaînes

de noyau P issues de conditions initiales différentes consiste à se donner un *noyau de couplage*, c'est-à-dire un noyau de transition Q sur l'espace produit $S \times S$ avec les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} \forall (x, y, x') \in S^3, \quad \sum_{y' \in S} Q((x, y), (x', y')) &= P(x, x') \\ \forall (x, y, y') \in S^3, \quad \sum_{x' \in S} Q((x, y), (x', y')) &= P(y, y'). \end{aligned}$$

Ces propriétés assurent que les projections \mathbf{X} et \mathbf{Y} d'une chaîne de Markov de noyau Q sont elles-mêmes des chaînes de Markov de noyau P . De plus, la propriété (25) se réduit à la contrainte

$$\forall x \in S, \quad \sum_{y \in S} Q((x, x), (y, y)) = 1. \quad (27)$$

Lorsqu'elle n'est pas vérifiée, nous pouvons toujours modifier le noyau Q en posant

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

Il est clair que ce nouveau noyau vérifie les propriétés souhaitées. De plus, la loi du temps de coalescence est inchangée puisque les probabilités de transition ne diffèrent que depuis les états diagonaux (x, x) , $x \in S$. Ainsi, l'inégalité (26), valable sous \tilde{Q} , l'est aussi sous Q . Nous résumons tout cela dans le théorème suivant, où l'on utilise la notation standard $\mathbb{P}_{x,y} := \mathbb{P}(\cdot | (X_0, Y_0) = (x, y))$.

Théorème 3 (Distance à l'équilibre et temps de coalescence). *Soit Q un noyau de couplage pour P , et T le temps de coalescence associé. Alors pour tout $t \in \mathbb{N}$, on a*

$$\mathfrak{D}(t) \leq \max_{(x,y) \in S \times S} \mathbb{P}_{x,y}(T > t).$$

Remarque 4 (Noyau produit). *Ce résultat fournit au passage une nouvelle preuve de la convergence des chaînes ergodiques vers leurs loi stationnaire (Théorème 1). En effet, le noyau produit*

$$Q((x, y), (x', y')) := P(x, x') \times P(y, y'), \quad (28)$$

qui correspond à des évolutions indépendantes des deux coordonnées, est évidemment un noyau de couplage. De plus, il est clair que la formule ci-dessus se tensorise, au sens où pour tout $t \in \mathbb{N}$,

$$Q^t((x, y), (x', y')) := P^t(x, x') \times P^t(y, y'). \quad (29)$$

Cette formule montre que si P est ergodique, alors Q aussi. En particulier, pour tout $(x, y) \in S^2$,

$$\mathbb{P}_{x,y}(T < \infty) = 1.$$

Le Théorème 3 entraîne alors que $\mathfrak{D}(t) \rightarrow 0$ lorsque $t \rightarrow \infty$.

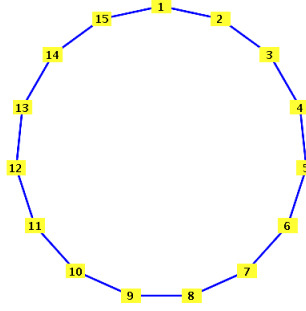


FIGURE 4 – Le cycle d’ordre 15.

Pour gagner un peu d’intuition sur ces couplages trajectoriels, et démontrer leur efficacité pratique, nous allons maintenant en construire un certain nombre sur des chaînes de Markov classiques. Dans chaque cas, la majoration fournie sur le temps de mélange est d’une précision remarquable, comme nous aurons l’occasion de le constater plus tard !

2.2 Couplage pour la marche aléatoire sur le cycle

En guise de première application “pédagogique”, considérons la marche aléatoire paresseuse sur le n -cycle, qui a pour espace d’états $S = \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, et pour noyau de transition

$$P(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } y = x \\ \frac{1}{4} & \text{si } y \in \{x - 1, x + 1\} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (30)$$

Premier couplage. Une manière naturelle de construire une chaîne \mathbf{X} de noyau P , partant d’un état x donné, consiste à poser $X_0 = x$ puis pour tout $t \geq 1$,

$$X_t := X_{t-1} + \xi_t,$$

où les variables aléatoires $(\xi_t)_{t \geq 1}$ sont i.i.d. avec $\mathbb{P}(\xi_1 = 0) = \frac{1}{2}$ et $\mathbb{P}(\xi_1 = 1) = \mathbb{P}(\xi_1 = -1) = \frac{1}{4}$. Cela fournit immédiatement une idée pour coupler \mathbf{X} avec une chaîne \mathbf{Y} issue d’un autre état $y \in S$: utilisons les mêmes incréments pour les deux chaînes, i.e. posons $Y_0 = y$ et pour tout $t \geq 1$,

$$Y_t := Y_{t-1} + \xi_t. \quad (31)$$

Il est alors clair que (\mathbf{X}, \mathbf{Y}) est une chaîne de Markov sur S^2 de noyau :

$$Q((x, y), (x', y')) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } (x', y') = (x, y) \\ \frac{1}{4} & \text{si } (x', y') \in \{(x + 1, y + 1), (x - 1, y - 1)\} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Hélas, ce couplage n'est pas judicieux : la différence $X_t - Y_t$ étant préservée à chaque itération, on a $\mathbb{P}_{x,y}(T = \infty) = 1$ pour tout $x \neq y$, et le Théorème 3 ne donne que la borne triviale $\mathfrak{D}(t) \leq 1$.

Second couplage. Pour "favoriser la rencontre", une seconde idée naturelle consiste à faire tourner les deux coordonnées dans des sens opposés, c'est-à-dire à remplacer (31) par

$$Y_t := Y_{t-1} - \xi_t.$$

Nous exploitons ici le fait que la suite $(-\xi_t)_{t \geq 1}$ a la même loi que $(\xi_t)_{t \geq 1}$. Le noyau de couplage est

$$Q((x, y), (x', y')) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } (x', y') = (x, y) \\ \frac{1}{4} & \text{si } (x', y') \in \{(x+1, y-1), (x-1, y+1)\} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Hélas, ce choix n'est pas non plus judicieux lorsque n est pair, puisqu'alors la différence $X_t - Y_t$ conserve la même parité à chaque itération, de sorte que $\mathbb{P}_{x,y}(T = \infty) = 1$ dès que $x - y$ est impaire.

Troisième couplage. Pour éviter ce problème de parité, une solution consiste à ne faire sauter qu'une des deux trajectoires à chaque itération, selon le noyau de couplage suivant :

$$Q((x, y), (x', y')) = \begin{cases} \frac{1}{4} & \text{si } |x' - x| + |y - y'| = 1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les différences $(X_t - Y_t)_{t \geq 0}$ forment alors une marche aléatoire simple sur $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, et le temps de coalescence T est simplement le temps d'atteinte de 0 par cette marche. Sous $\mathbb{P}_{x,y}$, la loi de T est celle du temps d'atteinte de l'ensemble $\{0, n\}$ par une marche aléatoire simple $(W_t)_{t \geq 0}$ sur \mathbb{Z} issue de $W_0 = |x - y|$. L'espérance de T est facile à calculer, par exemple par le théorème d'arrêt : les processus $(W_t)_{t \geq 0}$ et $(W_t^2 - t)_{t \geq 0}$ sont des martingales, et T est un temps d'arrêt intégrable, donc

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{x,y}[W_T] &= |x - y| \\ \mathbb{E}_{x,y}[W_T^2] &= \mathbb{E}_{x,y}[T] + |x - y|^2 \end{aligned}$$

Comme W_T est à valeurs dans $\{0, n\}$, on a $W_T^2 = nW_T$ et il vient donc

$$\mathbb{E}_{x,y}[T] = (n - |x - y|)|x - y| \leq \frac{n^2}{4}.$$

En appliquant l'inégalité de Markov, le Théorème 3 nous fournit la majoration

$$\mathfrak{D}(t) \leq \frac{n^2}{4t}.$$

Autrement dit, nous avons pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$,

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \leq \left\lceil \frac{n^2}{4\varepsilon} \right\rceil.$$

C'est en fait le bon ordre de grandeur, comme nous le verrons au chapitre suivant.

2.3 Couplage pour la marche sur l'hypercube

Le modèle des *urnes d'Ehrenfest* décrit la diffusion d'un gaz dans une enceinte compartimentée. Selon le mathématicien Mark Kac, c'est "probablement l'un des modèles les plus instructifs de toute la physique". Imaginons n particules numérotées de 1 à n , réparties dans deux compartiments. À chaque pas de temps, une particule choisie au hasard saute dans le compartiment qu'elle n'occupait pas. Si toutes les particules sont initialement dans le même compartiment, combien de temps faut-il pour que le gaz s'homogénéise? Nous décrirons l'état du système par un mot binaire $x = (x_1, \dots, x_n) \in \{0, 1\}^n$, la variable x_i indiquant le compartiment (0 ou 1) dans lequel se trouve la particule i . Le noyau est alors simplement celui de la marche aléatoire sur l'hypercube :

$$P(x, y) := \begin{cases} \frac{1}{n} & \text{si } x, y \text{ diffèrent en exactement une coordonnée} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce noyau étant périodique, nous considérerons sa version paresseuse \widehat{P} , définie en (6) : à chaque fois que nous choisissons une particule, nous tirons à pile ou face pour décider si on la déplace ou non. Mais alors le compartiment dans lequel la particule choisie se retrouve *in fine* est uniforme et indépendant de sa position passée! Ainsi, une façon de construire une chaîne de Markov \mathbf{X} de noyau \widehat{P} issue d'un état x donné consiste à poser $X_0 = x$ puis itérativement, pour tout $t \geq 1$,

$$X_t = f(X_{t-1}, U_t, B_t),$$

où $f(x, i, b) = (x_1, \dots, x_{i-1}, b, x_{i+1}, \dots, x_n)$, et où les variables aléatoires $U_t, B_t, t \geq 1$ sont toutes indépendantes avec U_t uniforme sur $\{1, \dots, n\}$ et B_t Bernoulli(1/2). Ceci donne une idée simple pour coupler deux chaînes issues d'états différents : utilisons les mêmes variables aléatoires $(U_t, B_t)_{t \geq 1}$! Avec ce couplage, une fois qu'une coordonnée a été mise à jour, elle coïncide pour toujours dans les deux chaînes. En particulier, il suffit pour assurer la rencontre que toutes les coordonnées aient été mises à jour au moins une fois. Cette condition est d'ailleurs nécessaire si l'on part d'états opposés comme $(0, \dots, 0)$ et $(1, \dots, 1)$. Aussi sommes-nous amenés à estimer le temps

$$T := \inf \{t \geq 1 : \#\{U_1, \dots, U_t\} = n\}. \quad (32)$$

Il s'agit d'un exercice classique en probabilités : le problème du *collectionneur de coupons*. Le Théorème 4 ci-dessous avec $r = 1$ entraîne que $T \sim n \ln n$, au sens où le ratio tend vers 1 en norme L^2 (et donc en probabilité) lorsque $n \rightarrow \infty$. En appliquant le Théorème 3, nous concluons que

$$t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon) \lesssim n \ln n.$$

pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$. Nous verrons au chapitre suivant qu'à un facteur 2 près, c'est la bonne réponse.

Théorème 4 (Collectionneur de coupons). *Pour tout $1 \leq r \leq n$ on pose*

$$T_{n,r} := \inf \{t \geq 1: \#\{U_1, \dots, U_t\} = n + 1 - r\}, \quad (33)$$

où les $(U_t)_{t \geq 1}$ sont i.i.d. uniformes sur $\{1, \dots, n\}$. Alors $T_{n,r} \approx n \ln \frac{n}{r}$ au sens suivant :

$$\mathbb{E} \left[\left| \frac{T_{n,r}}{n \ln \frac{n}{r}} - 1 \right|^2 \right] \leq \frac{6}{r \left(\ln \frac{n}{r} \right)^2}.$$

Démonstration. Posons $N_t := \#\{U_1, \dots, U_t\}$. Alors $(N_t)_{t \geq 0}$ est une chaîne de Markov sur $\{0, \dots, n\}$ qui commence en 0 puis visite tous les états dans l'ordre, jusqu'à arriver en n , selon le noyau

$$Q(k, \ell) = \begin{cases} \frac{k}{n} & \text{si } \ell = k \\ 1 - \frac{k}{n} & \text{si } \ell = k + 1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

En notant $\tau_k = \sum_{t=0}^{\infty} \mathbf{1}_{(N_t=k)}$ le temps passé dans l'état k , nous avons la décomposition

$$T_{n,r} = \tau_0 + \dots + \tau_{n-r}. \quad (34)$$

La propriété de Markov assure que les variables aléatoires $\tau_0, \dots, \tau_{n-1}$ sont indépendantes, et que τ_k suit la loi géométrique de paramètre d'échec $\frac{k}{n}$. Les conventions n'étant pas unanimes, précisons ici que τ suit la loi géométrique de paramètre d'échec $q \in [0, 1)$ si pour tout $n \geq 1$, on a

$$\mathbb{P}(\tau = n) = q^{n-1}(1 - q).$$

L'espérance et la variance de τ sont $\frac{1}{1-q}$ et $\frac{q}{(1-q)^2}$. Nous en déduisons aussitôt que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[T_{n,r}] &= n \sum_{k=r}^n \frac{1}{k} \\ \text{Var}[T_{n,r}] &= n^2 \sum_{k=r}^n \frac{1}{k^2} - n \sum_{k=r}^n \frac{1}{k}, \end{aligned}$$

En utilisant les estimations classiques suivantes, valables pour tout $1 \leq r \leq n$,

$$\left| \ln \left(\frac{n}{r} \right) - \sum_{k=r}^n \frac{1}{k} \right| \leq \frac{1}{r} \quad \text{et} \quad \sum_{k=r}^n \frac{1}{k^2} \leq \frac{2}{r},$$

on en déduit que $|\mathbb{E}[T_{n,r}] - n \ln \left(\frac{n}{r} \right)| \leq \frac{n}{r}$ et $\mathbb{E} \left[(T_{n,r} - \mathbb{E}[T_{n,r}])^2 \right] \leq \frac{2n^2}{r}$, ce qui suffit à conclure. \square

2.4 Cutoff pour le mélange “random-to-top”

Le mélange “top-to-random” est une méthode extrêmement naïve pour mélanger un paquet de n cartes : à chaque étape, on pioche une carte du paquet uniformément au hasard, et on la place tout en haut du paquet. Combien de fois faut-il répéter ce geste simple pour être sûr que le paquet soit correctement mélangé ? Nous allons voir que la réponse est $n \ln n$, en un sens extrêmement fort. Commençons par formaliser le problème. Nous identifierons chaque carte à une *valeur* entre 1 et n , et décrirons l’état du paquet par une permutation $\sigma \in \mathfrak{S}_n$, où $\sigma(i)$ représente la valeur de la carte située en i -ème position dans le paquet, en partant du haut. Ainsi, si le paquet se trouve dans l’état σ , que l’on pioche la carte située en position i , et qu’on la place tout en haut, le paquet se retrouve dans l’état $\sigma \circ \gamma_i$, où $\gamma_i = (i, i-1, \dots, 1)$ désigne la permutation suivante :

$$\gamma_i(k) = \begin{cases} i & \text{si } k = 1 \\ k-1 & \text{si } 2 \leq k \leq i \\ k & \text{si } i < k \leq n. \end{cases}$$

En particulier, γ_1 est l’identité : piocher la carte située tout en haut et la replacer tout en haut ne change rien ! L’espace d’états de notre chaîne est $S = \mathfrak{S}_n$ et le noyau de transition est

$$P(\sigma, \sigma') := \begin{cases} \frac{1}{n} & \text{s’il existe } i \text{ tel que } \sigma' = \sigma \circ \gamma_i \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce noyau est évidemment ergodique, et la loi uniforme est stationnaire (comme pour toute marche aléatoire sur un groupe fini). On peut aisément construire une telle chaîne à partir d’une suite $(I_t)_{t \geq 1}$ de variables i.i.d. uniformes sur $\{1, \dots, n\}$: on part d’un état $X_0 = \sigma$ donné, puis à chaque itération $t \geq 1$, on pioche la carte située en *position* I_t pour la mettre tout en haut :

$$X_t := X_{t-1} \circ \gamma_{I_t}.$$

Une autre construction, moins naturelle mais mathématiquement plus judicieuse, consiste à piocher plutôt la carte dont la *valeur* est I_t , c’est-à-dire à poser

$$X_t := X_{t-1} \circ \gamma_{J_t} \quad \text{où} \quad J_t = X_{t-1}^{-1}(I_t).$$

Malgré les apparences, c’est parfaitement licite : la variable aléatoire I_t étant uniforme sur $\{1, \dots, n\}$ et indépendante de (X_0, \dots, X_{t-1}) , il en est de même de la variable aléatoire $J_t = X_{t-1}^{-1}(I_t)$! Cela fournit aussitôt une façon de coupler deux chaînes de noyau P issues d’états différents : choisissons de piocher la même *valeur* I_t dans les deux paquets ! Une fois qu’une valeur a été piochée, sa position sera, par construction, la même dans les deux paquets. En particulier, à partir du temps

$$T := \inf \{t \geq 1 : |\{I_1, \dots, I_t\}| = n\},$$

les deux paquets coïncident. Le Théorème 3 combiné avec le Théorème 4 montre que

$$\alpha > 1 \quad \implies \quad \mathfrak{D}_n(\alpha n \ln n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0. \quad (35)$$

Ainsi, $n \ln n$ itérations suffisent pour mélanger, et nous allons voir qu'elles sont également nécessaires. Considérons l'événement “les r cartes du bas du paquet sont rangées par valeurs croissantes” :

$$A_r := \{\sigma \in \mathfrak{S}_n : \sigma(n-r) < \sigma(n-r+1) < \dots < \sigma(n)\}.$$

Si r est grand, cet événement est hautement improbable à l'équilibre, puisque

$$\pi(A_r) = \frac{1}{r!}.$$

En revanche, pour une chaîne \mathbf{X} issue de l'état initial complètement ordonné id , on a

$$\mathbb{P}(X_t \in A_r) \geq \mathbb{P}(T_{n,r} > t),$$

où l'on rappelle que $T_{n,r}$ est le temps nécessaire pour que le nombre de valeurs non piochées passe en dessous de r : avant l'instant $T_{n,r}$, il y a au moins r valeurs qui n'ont jamais été piochées ; celles-ci occupent toujours le bas du paquet, et sont rangées dans leur ordre initial. On déduit des deux inégalités ci-dessus et de la définition de \mathfrak{D} que

$$\mathfrak{D}(t) \geq \mathbb{P}(T_{n,r} > t) - \frac{1}{r!},$$

Ceci est vrai pour tout $t \in \mathbb{N}$ et tout $1 \leq r \leq n$. En prenant $r = r(n) \sim \ln(n)$ et $t = t(n) \sim \alpha n \ln n$, et en faisant tendre $n \rightarrow \infty$, on déduit du Théorème 4 que

$$\alpha < 1 \quad \implies \quad \mathfrak{D}_n(\alpha n \ln n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 1. \quad (36)$$

Au vu de (35)-(36), nous venons de démontrer un phénomène de cutoff :

Théorème 5 (Cutoff pour le mélange “random-to-top”). *Pour $\alpha \geq 0$ fixé, on a*

$$\mathfrak{D}_n(\alpha n \ln n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha < 1; \\ 0 & \text{si } \alpha > 1. \end{cases}$$

Autrement dit, quelle que soit la précision $\varepsilon \in (0, 1)$ choisie, on a $a \frac{t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon)}{n \ln n} \rightarrow 1$.

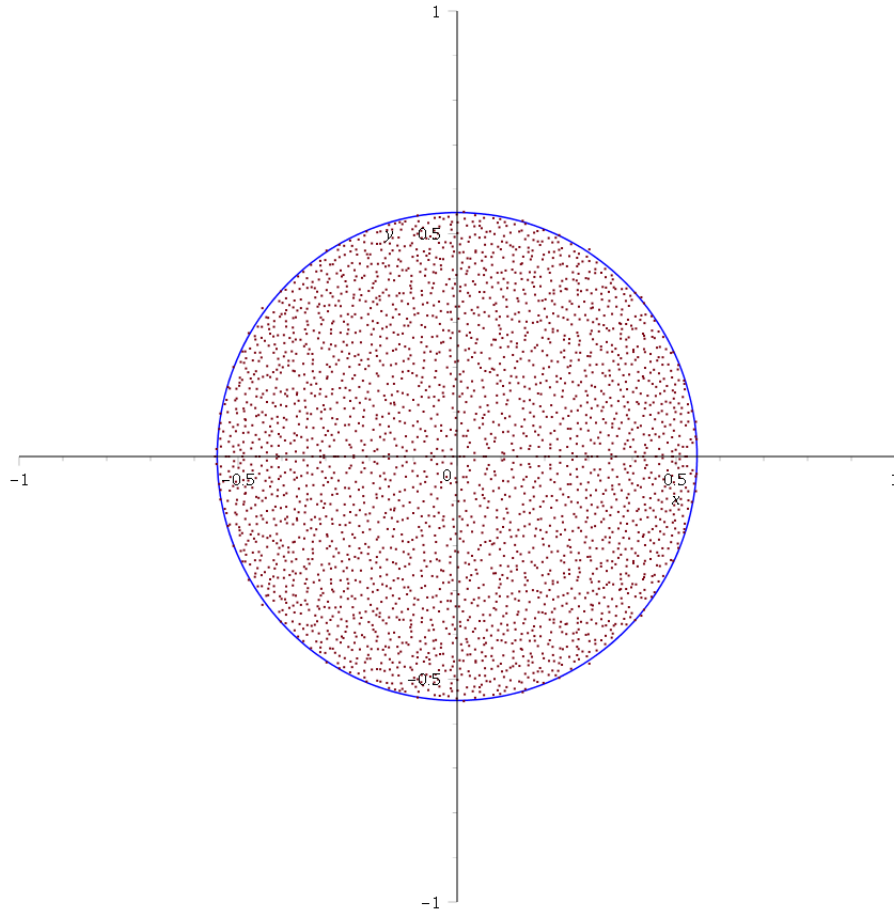


FIGURE 5 – Le spectre d’un noyau de transition typique (rouge), et le cercle de rayon λ_* (bleu).

3 Aspects spectraux

Ce chapitre est consacré aux relations entre le temps de mélange d’une chaîne de Markov et les valeurs et vecteurs propres de son noyau. Ce lien est particulièrement étroit pour les chaînes réversibles, sur lesquelles nous nous attardons plus longuement. Pour illustrer la puissance de cette approche, nous raffinons considérablement deux résultats obtenus par couplage dans le chapitre précédent : d’une part, nous déterminons explicitement le profil limite de la distance à l’équilibre pour la marche sur le cycle, et d’autre part, nous établissons le cutoff pour la marche sur l’hypercube.

3.1 Rayon spectral

Nous avons vu au Chapitre 1 que pour une chaîne de Markov ergodique, le taux limite

$$\lambda_\star := \lim_{t \rightarrow \infty} (\mathfrak{D}(t))^{\frac{1}{t}} \quad (37)$$

existe et vérifie $\lambda_\star < 1$. Nous allons voir maintenant que ce taux limite possède une caractérisation spectrale remarquable. Rappelons qu'une *valeur propre* de P est une racine complexe du polynôme caractéristique $\lambda \mapsto \det(P - \lambda I)$, c'est-à-dire un nombre $\lambda \in \mathbb{C}$ tel que le sous-espace vectoriel

$$\ker(P - \lambda I) = \{f: S \rightarrow \mathbb{C}: Pf = \lambda f\}$$

n'est pas réduit à $\{0\}$. Les éléments de $\ker(P - \lambda I)$ sont appelés *fonctions propres* associées à la valeur propre λ . L'ensemble des valeurs propres constitue le *spectre* de P , noté $\text{Sp}(P)$. La figure 5 fournit une illustration typique du spectre d'un noyau de transition.

Lemme 9 (Propriétés des valeurs propres). *Soit P un noyau de transition sur S . Alors,*

1. *On a toujours $1 \in \text{Sp}(P)$.*
2. *Si $\lambda \in \text{Sp}(P)$, alors $|\lambda| \leq 1$*
3. *Si $\lambda \in \text{Sp}(P)$, on a même $|\lambda|^2 + 2\alpha(1 - \Re(\lambda)) \leq 1$, où $\alpha = \min_x P(x, x)$.*
4. *Si P est ergodique, alors 1 est la seule valeur propre de module 1.*

Démonstration. Les fonctions constantes vérifient trivialement l'équation *harmonique* $Pf = f$, ce qui montre la première assertion. La seconde découle de l'observation que pour tout $f: S \rightarrow \mathbb{C}$,

$$\|Pf\|_\infty \leq \|f\|_\infty.$$

Étant donné $\lambda \in \text{Sp}(P)$, la troisième assertion dit simplement que $\mu := \frac{\lambda - \alpha}{1 - \alpha}$ est de module au plus 1, ce qui découle du second point puisque μ est une valeur propre du noyau de transition

$$Q := \frac{P - \alpha I}{1 - \alpha}.$$

Enfin, le quatrième point découle immédiatement du troisième si $\alpha > 0$. Lorsque ce n'est pas le cas, on s'y ramène en remplaçant simplement P par P^t pour t assez grand. \square

Lemme 10 (Propriétés des fonctions propres). *Soit $\lambda \in \mathbb{C}$ et $f \in \ker(P - \lambda I)$.*

1. *Si $\lambda \neq 1$, alors $\pi f = 0$.*
2. *Si $\lambda = 1$ et si P est irréductible, alors f est constante.*

Démonstration. Pour la première assertion, il suffit de multiplier à gauche par π les deux membres de l'équation $Pf = \lambda f$ pour obtenir $\pi f = \lambda \pi f$. Pour la seconde, on peut écrire pour tout $x \in S$,

$$\sum_y P(x, y) (f(y) - f(x)) = 0.$$

Quitte à passer aux parties réelles et imaginaires, on peut supposer que f est réelle. Soit S_0 l'ensemble des états où f atteint son maximum. Si $x \in S_0$, alors tous les termes de la somme ci-dessus sont négatifs, et doivent donc être nuls. Autrement dit, S_0 est clos par la relation d'accessibilité $(x \rightarrow y) \Leftrightarrow (P(x, y) > 0)$. Par irréductibilité, on conclut que $S_0 = S$, i.e. f est constante. \square

Théorème 6 (Rayon spectral). *Le taux limite λ_* admet la caractérisation suivante :*

$$\lambda_* = \max \{ |\lambda| : \lambda \in \text{Sp}(P) \setminus \{1\} \}.$$

Démonstration. Rappelons la représentation algébrique obtenue en (11) : pour tout $t \geq 1$,

$$\mathfrak{D}(t) = \frac{1}{2} \|(P - \Pi)^t\|.$$

Comme $\|\cdot\|$ est une norme, la formule de Gelfand assure que

$$\|A^t\|^{\frac{1}{t}} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \rho(A) := \max \{ |\lambda| : \lambda \in \text{Sp}(A) \}.$$

pour tout $A \in \mathbb{C}^{S \times S}$. Il s'agit donc de vérifier que $\rho(P - \Pi) = \lambda_*$. En fait, on a même

$$\text{Sp}(P - \Pi) = \{0\} \cup \text{Sp}(P) \setminus \{1\}.$$

Pour montrer \supseteq , on observe que $0 \in \text{Sp}(P - \Pi)$ (prendre f constante), et que si $Pf = \lambda f$ avec $\lambda \neq 1$, alors en multipliant à gauche par π on a $\pi f = 0$ et donc $(P - \Pi)f = \lambda f$. Pour \subseteq , on observe que si $(P - \Pi)f = \lambda f$ pour $\lambda \neq 0$, alors en multipliant à gauche par π on obtient $\pi f = 0$ et donc $Pf = \lambda f$. De plus, dans le cas $\lambda = 1$, l'irréductibilité entraîne $f = 0$. \square

Comme nous l'avons expliqué au Chapitre 1, le rayon spectral est un taux de convergence *asymptotique* : il ne décrit le mélange que dans un régime où la chaîne est, en général, déjà infiniment proche de l'équilibre. Le temps de relaxation qui lui est associé n'a donc pas grand chose à voir a priori avec le temps de mélange. Bien-sûr, l'inégalité (15) fournit une minoration non asymptotique, mais l'exemple 2 montre qu'elle peut être très mauvaise. Cela ne doit pas surprendre : en l'absence d'hypothèses supplémentaires, les relations entre une matrice et son spectre sont *maigres*. Il existe heureusement une vaste classe de chaînes de Markov pour lesquelles nous pouvons aller beaucoup plus loin : ce sont les chaînes dites *réversibles*, auxquelles nous consacrons le reste du chapitre. Comme nous allons le voir, leurs noyaux ont des propriétés spectrales remarquables : les valeurs propres sont réelles, et les fonctions propres associées sont suffisamment riches pour qu'on puisse en extraire une base orthonormée. Le cadre hilbertien nous fournit alors une myriade d'outils puissants pour analyser la convergence vers l'équilibre.

3.2 Diagonalisation des noyaux réversibles

Soit P un noyau de transition irréductible sur S , et π la loi stationnaire associée. Considérons l'espace hermitien $\mathcal{H} := \ell_{\mathbb{C}}^2(S, \pi)$ des fonctions $f: S \rightarrow \mathbb{C}$ muni du produit scalaire

$$\langle f, g \rangle := \sum_{x \in S} \pi(x) f(x) \overline{g(x)}.$$

Comme tout opérateur sur \mathcal{H} , P admet un adjoint P^* , caractérisé par la relation de dualité

$$\langle f, Pg \rangle = \langle P^*f, g \rangle,$$

pour tout $f, g \in \mathcal{H}$. En prenant $f = \delta_x$ et $g = \delta_y$, nous obtenons la définition plus explicite suivante :

$$P^*(x, y) = \frac{\pi(y)P(y, x)}{\pi(x)}.$$

Il est clair que P^* est un noyau irréductible sur S , que la loi stationnaire associée est encore π , et que $P^{**} = P$. La dualité $P \leftrightarrow P^*$ s'interprète comme un *retournement du temps* : si $(X_t)_{t \geq 0}$ et $(X_t^*)_{t \geq 0}$ sont des chaînes de paramètres respectifs (S, P, π) et (S, P^*, π) , on vérifie aisément que

$$(X_0^*, \dots, X_t^*) \stackrel{(loi)}{=} (X_t, \dots, X_0),$$

pour tout $t \in \mathbb{N}$. Pour cette raison, la relation d'auto-dualité $P^* = P$ porte le nom de *réversibilité temporelle*. Elle équivaut aux équations dites de *bilan détaillé* : pour tout $(x, y) \in S^2$,

$$\pi(x)P(x, y) = \pi(y)P(y, x). \quad (38)$$

Bien plus forte que la simple stationnarité de π , cette symétrie a des conséquences remarquables pour la chaîne. En effet, le théorème spectral appliqué à l'opérateur auto-adjoint P stipule que

1. P admet $N = |S|$ valeurs propres réelles, que nous pouvons ordonner comme suit :

$$1 = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N \geq -1.$$

2. \mathcal{H} admet une base orthonormée (ϕ_1, \dots, ϕ_N) de fonctions propres de P : pour $1 \leq i < j \leq N$,

$$P\phi_i = \lambda_i\phi_i, \quad \|\phi_i\| = 1, \quad \langle \phi_i, \phi_j \rangle = 0.$$

Avec ces notations nous avons $\lambda_* = \max(\lambda_2, -\lambda_N)$. Par ailleurs, la fonction constante égale à 1 sur S (notée $\mathbf{1}$) étant harmonique et de norme 1 sur \mathcal{H} , nous pouvons toujours prendre

$$\phi_1 = \mathbf{1}.$$

Une telle décomposition spectrale a plusieurs conséquences remarquables pour le mélange de la chaîne. Le Théorème suivant en est sans aucun doute l'une des plus spectaculaires. La minoration n'est bien-sûr pas nouvelle, et est valable même sans l'hypothèse de réversibilité, c.f. (15). La majoration utilise en revanche cruciallement la symétrie $P^* = P$, comme le montre l'exemple 2.

Théorème 7 (Temps de mélange et temps de relaxation). *Pour une chaîne réversible, on a*

$$\left[t_{\text{REL}} \log \left(\frac{1}{2\varepsilon} \right) \right] \leq t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \leq \left[t_{\text{REL}} \log \left(\frac{1}{2\varepsilon\sqrt{\pi_\star}} \right) \right], \quad (39)$$

où l'on rappelle que $\pi_\star = \min_{x \in S} \pi(x)$.

Démonstration. N'importe quelle observable $f: S \rightarrow \mathbb{C}$ peut être projetée sur la base (ϕ_1, \dots, ϕ_N) :

$$f = \sum_{i=1}^N \langle f, \phi_i \rangle \phi_i. \quad (40)$$

Comme ϕ_1, \dots, ϕ_N sont des fonctions propres, nous obtenons pour tout entier $t \in \mathbb{N}$,

$$P^t f = \sum_{i=1}^N \lambda_i^t \langle f, \phi_i \rangle \phi_i. \quad (41)$$

En prenant $f = \delta_y$ et en évaluant en x , nous arrivons à la décomposition fondamentale suivante :

$$\frac{P^t(x, y)}{\pi(y)} - 1 = \sum_{i=2}^N \lambda_i^t \phi_i(x) \overline{\phi_i(y)}. \quad (42)$$

Fixons $x \in S$ et voyons le membre gauche comme une fonction de y , i.e. un élément de \mathcal{H} . Sa norme se calcule aisément, puisque le membre droit nous fournit sa décomposition sur (ϕ_1, \dots, ϕ_N) :

$$\left\| \frac{P^t(x, \cdot)}{\pi(\cdot)} - 1 \right\|^2 = \sum_{i=2}^{|S|} \lambda_i^{2t} |\phi_i(x)|^2. \quad (43)$$

D'un autre côté, par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, nous avons

$$\left\| \frac{P^t(x, \cdot)}{\pi(\cdot)} - 1 \right\| \geq \sum_{y \in S} \pi(y) \left| \frac{P^t(x, y)}{\pi(y)} - 1 \right|.$$

Le membre droit est précisément $2d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi)$, et l'on obtient donc

$$d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi) \leq \frac{1}{2} \sqrt{\sum_{i=2}^{|S|} \lambda_i^{2t} |\phi_i(x)|^2} \quad (44)$$

$$\leq \frac{\lambda_\star^t}{2\sqrt{\pi_\star}}, \quad (45)$$

où l'on a utilisé la majoration brutale $|\lambda_i| \leq \lambda_\star$ pour $2 \leq i \leq |S|$, ainsi que l'identité

$$\sum_{i=1}^{|S|} (\phi_i(x))^2 = \frac{1}{\pi(x)},$$

qui s'obtient en prenant $y = x$ et $t = 0$ dans (42). Ainsi $\mathfrak{D}(t) \leq \frac{\lambda_\star^t}{2\sqrt{\pi_\star}}$, et le résultat s'ensuit. \square

3.3 Profil limite pour la marche aléatoire sur le cycle

L'encadrement fourni par le Théorème 7 est remarquablement précis. Par exemple, si π est la loi uniforme, alors $\pi_\star = \frac{1}{|S|}$, de sorte que le temps de relaxation suffit à déterminer le temps de mélange à un facteur logarithmique près ! Ceci est d'autant plus frappant que les majorations (44) et (45) sont brutales : elles négligent complètement la structure des fonctions propres, ainsi que le détail des valeurs propres non-dominantes. C'est d'ailleurs précisément ce qui fait que le Théorème 7 s'applique aisément. Dans les (rares) cas où l'on dispose d'une diagonalisation explicite, il est évidemment préférable de revenir à l'expression exacte (42). Illustrons tout cela en reprenant l'exemple de la marche aléatoire paresseuse sur $S = \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, dont le noyau P a été définie en (30). Par définition, on a pour tout $f: S \rightarrow \mathbb{C}$, et tout $x \in S$,

$$(Pf)(x) = \frac{f(x)}{2} + \frac{f(x+1)}{4} + \frac{f(x-1)}{4}.$$

En particulier, pour tout entier $1 \leq k \leq n$, l'observable $\phi_k: S \rightarrow \mathbb{C}$ définie par

$$\phi_k(x) := \exp\left(\frac{2i\pi kx}{n}\right)$$

est une fonction propre de P associée à la valeur propre $\lambda_k = \frac{1+\cos(\frac{2\pi k}{n})}{2}$. Pour $1 \leq k, \ell \leq n$, on a

$$\frac{1}{n} \sum_{x \in S} e^{\frac{2i\pi(k-\ell)x}{n}} = \begin{cases} 1 & \text{si } k = \ell \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

ce qui montre que (ϕ_1, \dots, ϕ_n) est une base orthonormée. En particulier, $\lambda_\star = \frac{1+\cos(\frac{2\pi}{n})}{2}$. En utilisant $1 - \cos(h) \sim \frac{h^2}{2}$ et $\ln(1+h) \sim h$ pour $h \ll 1$, on voit que lorsque $n \rightarrow \infty$,

$$t_{\text{REL}} \sim \frac{n^2}{\pi^2}. \quad (46)$$

En utilisant cette seule information, l'encadrement fourni par le Théorème 7 nous donne déjà

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) = \Omega(n^2) \quad \text{et} \quad t_{\text{MIX}}(\varepsilon) = O(n^2 \ln n). \quad (47)$$

Au vu du $O(n^2)$ obtenu par couplage au chapitre 2, nous concluons que $t_{\text{MIX}} = \Theta(n^2)$. La condition produit n'étant pas vérifiée, il ne peut y avoir cutoff. Cela est confirmé par le résultat fin suivant, qui tire profit de l'ensemble de la décomposition spectrale de P .

Théorème 8 (Profil limite pour la marche paresseuse sur le cycle). *Pour tout $\alpha > 0$, on a*

$$\mathfrak{D}_n(\alpha n^2) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \Phi(\alpha) := \int_0^1 \left| \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\alpha \pi^2 k^2} \cos(2\pi k u) \right| du.$$

En particulier, le profil limite Φ décroît continûment : il n'y a pas cutoff pour cette chaîne.

Démonstration. D'abord, par symétrie, nous pouvons prendre pour état initial l'origine 0. Ensuite, nous avons la représentation intégrale suivante :

$$\mathfrak{D}_n(\lceil \alpha n^2 \rceil) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left| 1 - nP_n^{\lceil \alpha n^2 \rceil}(0, \lfloor un \rfloor) \right| du. \quad (48)$$

Il reste à estimer l'intégrand. Au vu de la décomposition spectrale de P , l'identité (42) se réécrit

$$nP^t(x, y) = \sum_{k=-\lfloor n/2 \rfloor}^{\lfloor n/2 \rfloor - 1} \left(\frac{1 + \cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)}{2} \right)^t \cos\left(\frac{2\pi k(x-y)}{n}\right).$$

Prenons $x = 0$, $y = \lfloor un \rfloor$ et $t = \lceil \alpha n^2 \rceil$ et faisons tendre n vers l'infinif. Pour tout $k \in \mathbb{Z}$, on a

$$\left(\frac{1 + \cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)}{2} \right)^{\lceil \alpha n^2 \rceil} \cos\left(\frac{2\pi k \lfloor un \rfloor}{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} e^{-\alpha \pi^2 k^2} \cos(2\pi k u).$$

Par ailleurs, en remarquant que $\frac{1 + \cos(a\pi)}{2} \leq 1 - a^2 \leq e^{-a^2}$ pour tout $a \in [-1, 1]$, on a la domination

$$\left| \left(\frac{1 + \cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)}{2} \right)^{\lceil \alpha n^2 \rceil} \cos\left(\frac{2\pi k \lfloor un \rfloor}{n}\right) \right| \leq e^{-4\alpha k^2}.$$

Le membre droit étant sommable en k , on peut intervertir somme et limite pour conclure que

$$nP_n^{\lceil \alpha n^2 \rceil}(0, \lfloor un \rfloor) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{-\alpha \pi^2 k^2} \cos(2\pi k u). \quad (49)$$

De plus, la domination ci-dessus montre que le membre gauche est majoré indépendamment de n et u , et l'on peut donc passer à la limite dans la représentation intégrale (48) pour obtenir

$$\mathfrak{D}_n(\lfloor \alpha n^2 \rfloor) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int_0^1 \left| 1 - \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{-\alpha \pi^2 k^2} \cos(2\pi k u) \right| du.$$

On conclut en notant que le terme $k = 0$ de la somme vaut 1, et que les autres sont pairs en k . \square

Remarque 5 (Théorème Limite Local). *La marche paresseuse sur le cycle admet la représentation*

$$X_t = \xi_1 + \dots + \xi_t \pmod n,$$

où les $(\xi_t)_{t \geq 1}$ sont i.i.d. centrées et de variance $\frac{1}{2}$. Le Théorème Central Limite entraîne donc

$$\mathbb{P}(X_{\lceil \alpha n^2 \rceil} \in [an, bn]) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_a^b f_\alpha(u) du,$$

pour $0 \leq a \leq b \leq 1$, où f_α est la densité de $\mathcal{N}\left(0, \frac{\alpha}{2}\right) \pmod 1$. En comparant avec (49), il vient

$$f_\alpha(u) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{-\alpha \pi^2 k^2} \cos(2\pi k u).$$

La convergence (49) constitue donc un raffinement local remarquablement précis du Théorème Central Limite : elle permet de remplacer l'intervalle $[an, bn]$, qui contient $\Theta(n)$ points, par un singleton !

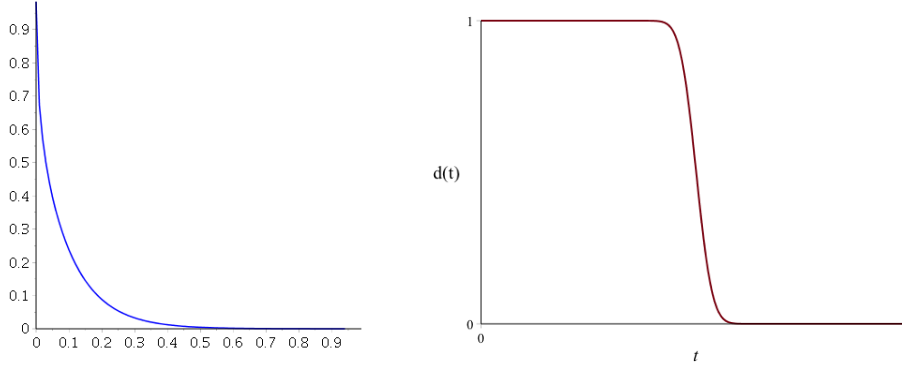


FIGURE 6 – Distance à l'équilibre pour la marche aléatoire sur le cycle (gauche) et l'hypercube (droite). La décroissance est régulière dans le premier cas (pas de cutoff), et abrupte dans le second (cutoff). La condition produit n'est pas vérifiée dans le premier cas, mais l'est dans le second.

3.4 Cutoff pour la marche aléatoire sur l'hypercube

En guise de seconde illustration, revenons au cas de la marche aléatoire paresseuse sur l'hypercube $S = \{0, 1\}^n$. Pour toute observable $f: S \rightarrow \mathbb{C}$ et tout $x = (x_1, \dots, x_n) \in S$, nous avons

$$(Pf)(x) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (f(x_1, \dots, x_{i-1}, 0, x_{i+1}, \dots, x_n) + f(x_1, \dots, x_{i-1}, 1, x_{i+1}, \dots, x_n)).$$

En particulier, pour chaque partie $I \subseteq [n] := \{1, \dots, n\}$, l'observable ϕ_I définie par

$$\phi_I(x) = (-1)^{\sum_{i \in I} x_i}$$

est une fonction propre associée à la valeur propre $1 - \frac{|I|}{n}$. Comme $\phi_I \overline{\phi_J} = \phi_{I \Delta J}$, on a

$$\frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} \phi_I(x) \overline{\phi_J(x)} = \begin{cases} 1 & \text{si } I = J \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

de sorte que les 2^n fonctions $(f_I: I \subseteq [n])$ forment une base orthonormée de fonctions propres. En particulier, le rayon spectral est $\lambda_\star = 1 - \frac{1}{n}$, si bien que lorsque $n \rightarrow \infty$, on a

$$t_{\text{REL}} \sim n.$$

En utilisant cette seule information, l'encadrement fourni par le Théorème 7 nous donne

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) = \Omega(n) \quad \text{et} \quad t_{\text{MIX}}(\varepsilon) = O(n^2).$$

Nous allons voir que ces deux bornes peuvent être considérablement améliorées si l'on prend en considération l'ensemble des valeurs propres, ainsi que la structure d'un vecteur propre bien choisi.

Théorème 9 (Cutoff pour la marche aléatoire sur l'hypercube). *Pour $\alpha \geq 0$ fixé, on a*

$$\mathfrak{D}_n(\alpha n \ln n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha < \frac{1}{2}; \\ 0 & \text{si } \alpha > \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Autrement dit, $t_{\text{MIX}}^{(n)}(\varepsilon) \sim \frac{n \ln n}{2}$ lorsque $n \rightarrow \infty$, indépendamment de la précision $\varepsilon \in (0, 1)$ choisie.

Démonstration. Comme les f_I sont à valeurs dans $\{-1, 1\}$, la majoration plus fine (44) donne

$$\begin{aligned} 4d_{\text{TV}}^2(P^t(x, \cdot), \pi) &\leq \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \left(1 - \frac{k}{n}\right)^{2t} \\ &\leq \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \exp\left(-\frac{2kt}{n}\right) \\ &\leq \left(1 + e^{-\frac{2t}{n}}\right)^n - 1 \\ &\leq e^{ne^{-\frac{2t}{n}}} - 1. \end{aligned}$$

Cela suffit à établir la seconde moitié du Théorème (cas $\alpha > \frac{1}{2}$). Pour minorer le temps de mélange, considérons à présent une chaîne $\mathbf{X} = (X_0, X_1, \dots)$ de noyau P issue de l'état initial $\mathbf{0} = (0, \dots, 0)$, et analysons l'évolution d'une observable $f: S \rightarrow \mathbb{R}$ particulièrement *anormale*, à savoir le nombre total de zéros (dûment recentré) :

$$f(x) := \sum_{i=1}^n (1 - 2x_i).$$

Pour chaque $1 \leq i \leq n$, la fonction $x \mapsto 1 - 2x_i$ n'est rien d'autre que ϕ_I avec $I = \{i\}$, si bien que f est une fonction propre associée à la valeur propre dominante $\lambda_\star = (1 - \frac{1}{n})$. Autrement dit,

$$\mathbb{E}[f(X_{t+1}) | (X_0, \dots, X_t)] = \left(1 - \frac{1}{n}\right) f(X_t), \quad (50)$$

pour tout $t \geq 0$. Comme $f(X_0) = n$, on en déduit immédiatement que

$$\mathbb{E}[f(X_t)] = n \left(1 - \frac{1}{n}\right)^t.$$

Lorsque t est trop petit, cette espérance est anormalement grande en comparaison de ce qui se passe à l'équilibre : pour une variable aléatoire X_\star de loi uniforme sur S , nous avons en effet

$$\mathbb{E}[f(X_\star)] = 0,$$

si bien que la caractérisation variationnelle (8) de la distance en variation totale entraîne

$$\mathfrak{D}(t) \geq \frac{\mathbb{E}[f(X_t)] - \mathbb{E}[f(X_\star)]}{2\|f\|_\infty} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{n}\right)^t.$$

Hélas, on vient simplement de redémontrer la borne (12), qui ne donne que $t_{\text{MIX}} = \Omega(n)$. Pour faire mieux, jetons un oeil à la variance de f : changer une coordonnée de x change $f(x)$ de ± 2 , donc

$$\mathbb{E} \left[(f(X_{t+1}) - f(X_t))^2 \middle| (X_0, \dots, X_t) \right] = 2.$$

En combinant cela avec (50), il vient aisément

$$\mathbb{E} [f^2(X_{t+1})] = \left(1 - \frac{2}{n}\right) \mathbb{E} [f^2(X_t)] + 2.$$

Comme $f(X_0) = n$, une induction immédiate montre que pour tout $t \geq 0$,

$$\mathbb{E} [f^2(X_t)] = n + \left(1 - \frac{2}{n}\right)^t n(n-1).$$

Puisque $(1 - \frac{2}{n}) \leq (1 - \frac{1}{n})^2$, nous concluons que

$$\text{Var}(f(X_t)) \leq n.$$

En faisant $t \rightarrow \infty$, on obtient le même résultat pour $f(X_*)$ (il y a même égalité). Que ressort-il de ces calculs ? Chacune des deux variables aléatoires $f(X_t)$ et $f(X_*)$ fluctue dans une fenêtre de longueur $O(\sqrt{n})$ autour de sa moyenne, qui est $n(1 - \frac{1}{n})^t$ pour la première et 0 pour la seconde. Lorsque $t \sim \alpha n \ln n$ avec $\alpha < \frac{1}{2}$, nous avons $n(1 - \frac{1}{n})^t \gg \sqrt{n}$, de sorte que ces deux fenêtres sont asymptotiquement disjointes. Cela implique que l'on est extrêmement loin de l'équilibre : $\mathfrak{D}(t) \approx 1$. Plus formellement, fixons $t \in \mathbb{N}$, posons $\mu = \mathbb{E}[f(X_t)] = n(1 - \frac{1}{n})^t$ et considérons l'événement

$$A := \left\{ x \in S : f(x) \geq \frac{\mu}{2} \right\}.$$

Alors l'inégalité de Bienaymé-Chebychev nous assure que

$$\mathbb{P}(X_t \in A) \geq 1 - \frac{4n}{\mu^2} \quad \text{et} \quad \mathbb{P}(X_* \in A) \leq \frac{4n}{\mu^2},$$

de sorte que, par définition de la distance en variation totale, nous avons

$$\mathfrak{D}(t) \geq 1 - \frac{8n}{\mu^2} = 1 - \frac{8}{n(1 - \frac{1}{n})^{2t}}.$$

Si l'on fait tendre $n \rightarrow \infty$ avec $t \sim \alpha n \ln n$ et $\alpha < \frac{1}{2}$, le membre droit tend vers 1. □

En fait, le petit calcul d'espérance et de variance de l'observable f ci-dessus se généralise immédiatement à n'importe quel fonction propre d'un noyau P (réversible ou non) :

Théorème 10 (Minoration de Wilson). *Si $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ vérifie $Pf = \lambda f$ avec $\lambda \in (0, 1)$, alors*

$$\mathfrak{D}(t) \geq 1 - \frac{8v}{(1 - \lambda)\lambda^{2t}}, \quad \text{avec} \quad v := \frac{1}{2\|f\|_\infty^2} \max_{x \in S} \left\{ \sum_{y \in S} P(x, y) (f(y) - f(x))^2 \right\}.$$

Ainsi, tant que $\lambda^{2t}(1 - \lambda)/v$ est grand, la chaîne n'est pas mélangée !

4 Aspects géométriques

Bien qu'élégantes et profondes, les méthodes spectrales ont deux inconvénients majeurs : elles ne s'appliquent qu'aux chaînes réversibles, et reposent sur une décomposition spectrale qu'il est souvent impossible de déterminer explicitement. Dans ce chapitre, nous allons développer des méthodes moins fines mais plus robustes pour minorer les temps de mélange, à partir de données géométriques plus accessibles comme le *degré*, le *diamètre* ou la *conductance*.

4.1 Graphe induit, degrés et diamètre

Sous l'action d'un noyau de transition irréductible P , l'espace d'états S se voit naturellement muni d'une structure de graphe dirigé avec pour ensemble d'*arêtes*

$$\mathcal{A} := \{(x, y) \in S \times S : P(x, y) > 0\}.$$

Nous allons voir que la géométrie de ce graphe est intimement liée au temps de mélange de la chaîne. Rappelons qu'un *chemin* est une suite finie d'états $\sigma = (\sigma_0, \dots, \sigma_t)$ telle que $(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \in \mathcal{A}$ pour tout $0 \leq i < t$. Précisons que ce chemin va de σ_0 à σ_t , et que sa *longueur* est $|\sigma| = t$. Nous appellerons *distance* de x à y la longueur minimale d'un chemin de x à y :

$$\text{dist}(x, y) := \min \{t \geq 0 : P^t(x, y) > 0\}.$$

Cette fonction n'est pas nécessairement symétrique, mais satisfait toujours l'inégalité triangulaire et l'axiome de séparation. Le *degré* de x est le nombre d'états accessibles en une transition :

$$\text{deg}(x) := \text{card}\{y \in S : P(x, y) > 0\}.$$

En particuliers, deux statistiques importantes sont le *degré maximal* et le *diamètre* :

$$\begin{aligned} \Delta &:= \max \{\text{deg}(x) : x \in S\}; \\ \text{DIAM} &:= \max \{\text{dist}(x, y) : (x, y) \in S \times S\}. \end{aligned}$$

Il est important de noter que ces paramètres dépendent seulement du support de P : ils ne peuvent mesurer la connectivité que d'une façon *rudimentaire*. C'est précisément ce qui les rend accessibles : là où les méthodes sophistiquées se révèlent inapplicables, nous verrons qu'ils peuvent fournir des estimations étonnamment bonnes du temps de mélange, sans aucun effort. Nous commençons par deux minoration élémentaires qui reposent sur la même idée : tant que la chaîne se trouve confinée dans une boule de trop petit volume autour de son point de départ, elle ne peut avoir mélangé.

Lemme 11 (Minorations volumiques rudimentaires). *Pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$, on a*

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \geq \frac{\log\left(\frac{1-\varepsilon}{\max \pi}\right)}{\log \Delta}. \quad (51)$$

Si le support de P est symétrique, on a aussi pour $\varepsilon < \frac{1}{2}$,

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \geq \frac{\text{DIAM}}{2}. \quad (52)$$

Démonstration. Par définition, on a $\mathfrak{D}(t) \geq P^t(x, A) - \pi(A)$ pour tout choix de $x \in S$ et $A \subseteq S$. Choisissons pour A l'ensemble $S_x(t) := \{y \in S : P^t(x, y) > 0\}$. Comme $P^t(x, A) = 1$, il vient

$$\mathfrak{D}(t) \geq 1 - \pi(S_x(t)).$$

La majoration brutale $\pi(S_x(t)) \leq (\max \pi)\Delta^t$ fournit exactement la première inégalité. On voit aussi que pour avoir $\mathfrak{D}(t) < \frac{1}{2}$, il faut que $\pi(S_x(t)) > \frac{1}{2}$ pour tout $x \in S$, de sorte que toutes les sphères de rayon t s'intersectent deux-à-deux. Lorsque dist est symétrique, cela implique $\text{DIAM} \leq 2t$. \square

Exemple 3 (Riffle-shuffle). *La méthode la plus répandue pour mélanger un paquet de n cartes consiste à couper le paquet en une partie supérieure et une partie inférieure, puis à réunir les deux parties en les entrelaçant au hasard. Combien de fois faut-il répéter ce geste simple pour être sûr que le paquet soit correctement mélangé ? Une transition $\sigma \mapsto \sigma'$ est entièrement décrite par l'ensemble $I \subseteq [n]$ des positions qui se retrouveront occupées par la moitié supérieure. En effet, les restrictions de σ' à I et I^c seront alors respectivement $(\sigma(i) : 1 \leq i \leq |I|)$ et $(\sigma(i) : |I| < i \leq n)$, dans cet ordre. Comme il y a 2^n façons de choisir l'ensemble $I \subseteq [n]$, nous concluons que $\Delta = 2^n$. Le Lemme 11 et l'équivalent $\log(n!) \sim n \log n$ donnent alors, pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$,*

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \gtrsim \log_2(n), \quad (53)$$

Nous verrons plus loin que cette borne naïve, qui ne tient d'ailleurs même pas compte des lois utilisées pour la coupe et l'entrelacement, fournit la bonne réponse à un facteur $3/2$ près !

L'exemple suivant illustre l'importance de la symétrie du support de P pour la borne (52).

Exemple 4 (Échelle glissante). *Sur l'espace d'états $S = \{1, \dots, n\}$, on considère le noyau*

$$P(x, y) := \begin{cases} 1 & \text{si } x = n \text{ et } y = 1; \\ \frac{1}{2} & \text{si } x < n \text{ et } y \in \{1, x+1\}; \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On vérifie immédiatement que la loi stationnaire est $\pi(x) = \frac{2^{-x}}{1-2^{-n}}$. Depuis chaque état, il y a une chance au moins $1/2$ d'aller dans l'état 1 : on peut donc coupler des chaînes issues d'états initiaux quelconques, de telle sorte que le temps de coalescence soit géométrique de paramètre $\frac{1}{2}$. Le Théorème 3 montre donc que $\mathfrak{D}(t) \leq 2^{-t}$, indépendamment de n ! Pourtant $\text{DIAM}(P) = n - 1$.

4.2 Conductance

Le graphe induit par la chaîne est un objet trop rudimentaire, puisqu'il ne prend en compte que le support de la matrice P . Une manière de remédier à cela est de pondérer ses arêtes comme suit :

$$\vec{\pi}(x, y) := \pi(x)P(x, y). \quad (54)$$

D'après le théorème ergodique, cette quantité représente la proportion asymptotique du temps que la marche passe à traverser l'arête (x, y) . Notons que $\vec{\pi}$ est une mesure de probabilité sur $S \times S$ dont le support est \mathcal{A} et dont les deux marginales sont π . Nous allons prendre en compte cette loi naturelle sur les arêtes pour affiner les relations entre géométrie et mélange. La *conductance* d'un ensemble $\emptyset \subsetneq A \subseteq S$ mesure la facilité avec laquelle la chaîne s'en échappe :

$$\Phi(A) := \frac{\vec{\pi}(A \times A^c)}{\pi(A)}.$$

Intuitivement, une conductance faible signifie que A constitue un piège, un goulet d'étranglement dans lequel la chaîne va devoir s'attarder. Il est donc naturel d'espérer que la *conductance minimale*

$$\Phi_\star := \min \left\{ \Phi(A) : \emptyset \subsetneq A \subseteq S, \pi(A) \leq \frac{1}{2} \right\}, \quad (55)$$

affecte la vitesse de mélange. Cette intuition est confirmée par le résultat suivant.

Lemme 12 (Conductance et temps de mélange). *On a toujours*

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \geq \left\lceil \frac{1 - 2\varepsilon}{2\Phi_\star} \right\rceil.$$

Démonstration. Soit $\mathbf{X} = (X_0, X_1, \dots)$ une chaîne de noyau P et de loi initiale π . Alors clairement,

$$\{X_0 \in A, X_t \notin A\} \subseteq \bigcup_{s=0}^{t-1} \{X_s \in A, X_{s+1} \notin A\},$$

pour tout $A \subseteq S$ et tout $t \in \mathbb{N}$. En passant aux probabilités, on en déduit que

$$\sum_{x \in A} \pi(x)P^t(x, A^c) \leq t\vec{\pi}(A \times A^c).$$

Mais par définition, on a $P^t(x, A^c) \geq \pi(A^c) - \mathfrak{D}(t)$, et il vient donc

$$\pi(A)(\pi(A^c) - \mathfrak{D}(t)) \leq t\vec{\pi}(A \times A^c).$$

On en déduit que $t\Phi_\star \geq \frac{1}{2} - \mathfrak{D}(t)$. Il suffit alors de prendre $t = t_{\text{MIX}}(\varepsilon)$ pour conclure. \square

Exemple 5 (Marche sur l'hypercube). Dans le cas de l'hypercube, l'ensemble $A := \{x \in \{0, 1\}^n : x_1 = 0\}$ vérifie $\pi(A) = \frac{1}{2}$ et $\bar{\pi}(A \times A^c) = \frac{1}{4n}$, de sorte que $\Phi(A) = \frac{1}{2n}$. On en déduit que $\Phi_\star \leq \frac{1}{2n}$, donc

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \geq \lceil n(1 - 2\varepsilon) \rceil.$$

Exemple 6 (Marche sur le cycle). Sur $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, il est clair que toute partie A de taille $k \leq n/2$ contient au moins deux états "au bord", c'est-à-dire ayant un voisin hors de A . Ainsi, $\bar{\pi}(A \times A^c) \geq 1/(2n)$ et donc $\Phi(A) \geq \frac{1}{2k}$. Il y a d'ailleurs égalité pour $A = \{1, \dots, k\}$. Ainsi,

$$\Phi_\star = \frac{1}{2\lfloor n/2 \rfloor}.$$

On en déduit que $t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \geq \lceil \frac{n(1-2\varepsilon)}{2} \rceil$, ce qui n'est pas terrible.

Remarque 6 (Symétrie). On a toujours $\bar{\pi}(A \times A^c) = \bar{\pi}(A^c \times A)$, les deux membres étant égaux à $\pi(A) - \bar{\pi}(A \times A)$. Ainsi, la conductance Φ_\star est la même pour les noyaux P , P^\star , et $\frac{P+P^\star}{2}$.

4.3 Distance de transport et couplages contractants

L'efficacité des couplages a été démontrée au Chapitre 2 : si T désigne le temps de coalescence associé à un noyau de couplage Q quelconque pour P , alors pour tout $t \in \mathbb{N}$,

$$\mathfrak{D}(t) \leq \max_{(x,y) \in S^2} \mathbb{P}_{x,y}(T > t). \quad (56)$$

Nous allons apporter une touche géométrique à cette méthode en analysant la distance moyenne entre les trajectoires. Pour $\rho \in (0, 1)$, nous dirons que le noyau de couplage Q est ρ -contractant si

$$\sum_{(x',y') \in S^2} Q((x,y), (x',y')) \text{dist}(x',y') \leq \rho \text{dist}(x,y), \quad (57)$$

pour tout $(x,y) \in S^2$: en clair, le noyau Q rapproche les trajectoires d'un facteur ρ en moyenne.

Lemme 13 (Noyaux contractants). Si P admet un noyau de couplage ρ -contractant, alors

$$t_{\text{REL}} \leq \frac{1}{\log \frac{1}{\rho}} \quad (58)$$

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \leq \left\lceil \frac{\log \left(\frac{\text{DIAM}}{\varepsilon} \right)}{\log \left(\frac{1}{\rho} \right)} \right\rceil. \quad (59)$$

Démonstration. Avec les notations du Chapitre 2, la propriété de contraction (57) se réécrit :

$$\mathbb{E}_{x,y} [\text{dist}(X_1, Y_1)] \leq \rho \text{dist}(x,y).$$

En itérant, on obtient pour tout $t \geq 0$,

$$\mathbb{E}_{x,y} [\text{dist}(X_t, Y_t)] \leq \rho^t \text{dist}(x, y),$$

Le membre gauche vaut au moins $\mathbb{P}_{x,y}(T > t)$, et (56) nous donne donc $\mathfrak{D}(t) \leq \rho^t \text{DIAM}(P)$. \square

Exemple 7 (Marche sur l'hypercube). *Le noyau de couplage utilisé dans la section 2.3 est ρ -contractant avec $\rho = 1 - \frac{1}{n}$. Comme $\text{DIAM}(P) = n$, on retrouve aussitôt sans aucun calcul que*

$$t_{\text{REL}} \leq n, \quad t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \lesssim n \ln n.$$

L'exemple ci-dessus illustre déjà bien combien la propriété géométrique (57) nous simplifie la tâche. L'autre avantage majeur de cette notion est qu'il suffit de la vérifier lorsque $\text{dist}(x, y) = 1$:

Théorème 11 (Contraction locale). *Supposons que pour chaque arête $(x, y) \in \mathcal{A}$, il existe un couplage (X, Y) des lois $P(x, \cdot)$ et $P(y, \cdot)$ tel que $\mathbb{E}[\text{dist}(X, Y)] \leq \rho$. Alors P admet un noyau de couplage ρ -contractant. En particulier, l'inégalité (58) s'applique.*

Pour démontrer ce théorème, introduisons la *distance de transport* entre deux lois μ, ν sur S :

$$d_{\text{T}}(\mu, \nu) := \min \{ \mathbb{E}[\text{dist}(X, Y)] : (X, Y) \text{ est un couplage de } \mu \text{ et } \nu \}.$$

Commençons par noter que le minimum est bien atteint, puisque l'ensemble des lois de couplage

$$\mathcal{C}(\mu, \nu) := \left\{ c \in [0, 1]^{S \times S} : \sum_{y \in S} c(\cdot, y) = \mu, \sum_{x \in S} c(x, \cdot) = \nu \right\}$$

est un compact de $\mathbb{R}^{S \times S}$, sur lequel la fonctionnelle “distance moyenne”

$$c \longmapsto \sum_{(x,y) \in S^2} c(x, y) \text{dist}(x, y)$$

est continue. La propriété suivante va s'avérer cruciale pour relier contraction locale et globale.

Lemme 14 (Inégalité triangulaire). *Pour toutes lois λ, μ, ν sur S , on a*

$$d_{\text{T}}(\lambda, \nu) \leq d_{\text{T}}(\lambda, \mu) + d_{\text{T}}(\mu, \nu).$$

Démonstration. Soient $c \in \mathcal{C}(\lambda, \mu)$ et $c' \in \mathcal{C}(\mu, \nu)$ des lois de couplages qui réalisent le minimum dans les définitions de $d_{\text{T}}(\lambda, \mu)$ et $d_{\text{T}}(\mu, \nu)$. Considérons un triplet aléatoire (X, Y, Z) de loi

$$\mathbb{P}((X, Y, Z) = (x, y, z)) = \frac{c(x, y)c'(y, z)}{\mu(y)} \mathbf{1}_{(\mu(y) > 0)}.$$

On vérifie aisément que les couples (X, Y) et (Y, Z) ont pour lois c et c' , respectivement. En particulier, $\mathbb{E}[\text{dist}(X, Y)] = d_T(\lambda, \mu)$ et $\mathbb{E}[\text{dist}(Y, Z)] = d_T(\mu, \nu)$. Comme (X, Z) est un couplage de λ et ν , on a également $\mathbb{E}[\text{dist}(X, Z)] \geq d_T(\lambda, \nu)$. Le résultat découle alors de l'observation

$$\mathbb{E}[\text{dist}(X, Z)] \leq \mathbb{E}[\text{dist}(X, Y) + \text{dist}(Y, Z)],$$

qui découle simplement de l'inégalité triangulaire pour $\text{dist}(\cdot, \cdot)$. \square

Démonstration du Théorème 11. Soit $(x, y) \in S \times S$, et σ un chemin de longueur minimale de x à y , i.e. $|\sigma| = \text{dist}(x, y)$. Alors, l'inégalité triangulaire pour d_T permet d'écrire

$$d_T(P(x, \cdot), P(y, \cdot)) \leq \sum_{i=1}^{|\sigma|} d_T(P(\sigma_{i-1}, \cdot), P(\sigma_i, \cdot)).$$

Par hypothèse, chacun des termes de la somme est majoré par ρ , de sorte que

$$d_T(P(x, \cdot), P(y, \cdot)) \leq \rho \text{dist}(x, y).$$

Par définition de d_T , cela signifie qu'il existe un couplage $c_{x,y} \in \mathcal{C}(P(x, \cdot), P(y, \cdot))$ tel que

$$\sum_{(x', y') \in S^2} c_{x,y}(x', y') \text{dist}(x', y') \leq \rho \text{dist}(x, y).$$

Ainsi, le noyau de couplage $Q((x, y), (x', y')) := c_{x,y}(x', y')$ est ρ -contractant. \square

5 Aspects variationnels

Le théorème de mélange peut s'énoncer, de manière équivalente, comme la convergence

$$\forall x \in S, \quad (P^t f)(x) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \pi f,$$

pour toute observable $f: S \rightarrow \mathbb{R}$. Ainsi, sous l'action répétée du noyau P , les fonctions finissent par devenir constantes sur l'espace d'états. Puisque $\pi P^t f = \pi f$ pour tout $t \geq 0$, cela se réécrit

$$\text{Var}(P^t f) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} 0, \quad (60)$$

où $\text{Var}(f) = \pi(f^2) - \pi^2(f)$ désigne la variance de f sur l'espace probabilisé (S, π) . Cela conduit naturellement aux deux questions suivantes :

1. À quelle vitesse la convergence (60) a-t-elle lieu ?
2. Quelles sont les conséquences sur le temps de mélange ?

Dans le présent chapitre, nous allons répondre à ces deux questions à l'aide d'un objet central (la forme de Dirichlet) et d'une quantité variationnelle fondamentale (la constante de Poincaré).

5.1 Forme de Dirichlet et constante de Poincaré

L'étude des variations des observables de notre chaîne se fait au travers de la *forme de Dirichlet*. Il s'agit d'une forme quadratique sur $L^2(S, \pi)$, définie pour toute observable $f: S \rightarrow \mathbb{R}$ par

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(f) &:= \frac{1}{2} \sum_{a \in \mathcal{A}} \bar{\pi}(a) (\nabla f(a))^2 \\ &= \langle (I - P)f, f \rangle, \end{aligned}$$

où l'on a noté $\nabla f(x, y) = f(y) - f(x)$ le *gradient discret* de f le long de l'arête $(x, y) \in \mathcal{A}$. La quantité $\mathcal{E}(f)$ mesure les fluctuations *locales* de f le long des arêtes. Cela la distingue de la *variance*

$$\text{Var}(f) = \pi(f^2) - (\pi f)^2 = \frac{1}{2} \sum_{(x, y) \in S \times S} \pi(x)\pi(y) (f(y) - f(x))^2, \quad (61)$$

qui mesure les fluctuations *globales* de f . C'est le rapport entre ces deux statistiques qui va nous intéresser : intuitivement, un mélange rapide signifie que peu d'arêtes suffisent à traverser l'espace d'états, de sorte que les fluctuations globales ne sont pas beaucoup plus grandes que les fluctuations locales. Cette idée conduit à mesurer la *connectivité* de la chaîne par la *constante de Poincaré* :

$$\gamma_\star := \min \left\{ \frac{\mathcal{E}(f)}{\text{Var}(f)} : f \text{ n'est pas constante} \right\}. \quad (62)$$

Comme $f \mapsto \frac{\mathcal{E}(f)}{\text{Var}(f)}$ est invariante par recentrage et renormalisation, on a aussi

$$\gamma_\star = \min \{ \mathcal{E}(f) : \|f\| = 1, \pi f = 0 \}, \quad (63)$$

ce qui montre que le minimum est bien atteint.

Remarque 7 (Symétrie). *Il découle de la définition (61) que la forme de Dirichlet \mathcal{E} et donc la constante de Poincaré γ_\star , sont les mêmes pour P , son adjoint P^\star et le noyau réversible $\frac{P+P^\star}{2}$.*

Notons que l'irréductibilité de P signifie exactement que $\gamma_\star > 0$. Le résultat fondamental suivant montre que la constante de Poincaré répond à la question 1 posée au tout début de ce chapitre.

Lemme 15 (Décroissance exponentielle des fluctuations). *Pour toute chaîne paresseuse, on a*

$$\text{Var}(Pf) \leq (1 - \gamma_\star)\text{Var}(f)$$

Démonstration. En utilisant l'égalité $\pi f = \pi Pf$, et la définition de l'adjoint P_\star , on a

$$\text{Var}(f) - \text{Var}(Pf) = \langle f, f \rangle - \langle Pf, Pf \rangle = \langle (I - P_\star P)f, f \rangle.$$

Pour conclure, il suffit donc de voir que $\langle (I - PP^\star)f, f \rangle \geq \mathcal{E}(f)$. Or pour $(x, y) \in S \times S$, on a

$$\begin{aligned} \pi(x)P_\star P(x, y) &= \pi(x) \sum_{z \in S} P_\star(x, z)P(z, y) \\ &\geq \pi(x) (P(x, x)P(x, y) + P_\star(x, y)P(y, y)) \\ &\geq \frac{1}{2} (\pi(x)P(x, y) + \pi(y)P(y, x)), \end{aligned}$$

puisque la chaîne est paresseuse. En multipliant par $\frac{1}{2}(f(x) - f(y))^2$ et en sommant sur tous les couples $(x, y) \in S \times S$, on obtient exactement l'inégalité cherchée. \square

Le lemme ci-dessus montre que, sous l'action répétée d'un noyau paresseux, la variance d'une observable décroît exponentiellement vite, avec un taux donné par $1 - \gamma_\star$, ce qui répond à la première question posée au début de ce chapitre. Le résultat suivant répond à la seconde question.

Théorème 12 (Constante de Poincaré et mélange). *Pour une chaîne paresseuse, on a toujours*

$$t_{\text{REL}} \leq \frac{2}{\gamma_\star} \quad \text{et} \quad t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \leq \left\lceil \frac{2}{\gamma_\star} \ln \frac{1}{2\varepsilon\sqrt{\pi_\star}} \right\rceil.$$

Démonstration. Rappelons que par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a

$$d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi) \leq \frac{1}{2} \left\| \frac{P^t(x, \cdot)}{\pi(\cdot)} - 1 \right\|.$$

Dans le cas réversible, l'existence d'une base orthonormée de fonctions propres de P nous avait permis de majorer la norme apparaissant dans le membre droit ainsi :

$$\left\| \frac{P^t(x, \cdot)}{\pi(\cdot)} - 1 \right\|^2 \leq \lambda_\star^{2t} \left(\frac{1}{\pi(x)} - 1 \right). \quad (64)$$

Pour que l'inégalité reste valable sans la réversibilité $P^\star = P$, nous allons voir qu'il suffit de remplacer λ_\star^2 par $1 - \gamma_\star$. Nous n'avons plus de base de fonctions propres, mais nous pouvons écrire

$$\frac{P^t(x, y)}{\pi(y)} = \frac{P_\star^t(y, x)}{\pi(x)} = P_\star^t f_x(y),$$

où l'on a posé $f_x(y) = \frac{\delta_x(y)}{\pi(x)}$. Ainsi, le membre de gauche de (64) n'est rien d'autre que $\text{Var}(P_\star^t f_x)$, et le lemme ci-dessus appliqué à l'adjoint P_\star (qui a la même constante de Poincaré que P) donne

$$\left\| \frac{P^t(x, \cdot)}{\pi(\cdot)} - 1 \right\|^2 \leq (1 - \gamma_\star)^t \left(\frac{1}{\pi(x)} - 1 \right), \quad (65)$$

ce qui conduit immédiatement au résultat énoncé. \square

Le théorème ci-dessus montre que la constante de Poincaré est une quantité fondamentale pour l'étude du mélange. Dans le cas réversible, elle coïncide en réalité avec le trou spectral :

Lemme 16 (Constante de Poincaré et trou spectral). *Pour une chaîne réversible, on a $\gamma_\star = 1 - \lambda_2$.*

Démonstration. En décomposant l'observable f dans la base orthonormée (ϕ_1, \dots, ϕ_N) , on a

$$\langle (I - P)f, f \rangle = \sum_{k=2}^N (1 - \lambda_k) |\langle f, \phi_k \rangle|^2.$$

Par ailleurs, puisque $\phi_1 \equiv 1$, on a $\langle f, \phi_1 \rangle = \pi(f)$, de sorte que

$$\text{Var}(f) = \sum_{k=2}^N |\langle f, \phi_k \rangle|^2.$$

Ainsi, $\mathcal{E}(f, f) \geq (1 - \lambda_2) \text{Var}(f)$. De plus, il y a égalité lorsque $f = \phi_2$. \square

Remarque 8 (Retour sur le Théorème 12). *Dans le cas réversible est paresseux, on a $t_{\text{REL}} = 1 / \log \frac{1}{1 - \gamma_\star} \leq \frac{1}{\gamma_\star}$, de sorte que la conclusion du Théorème 12 peut s'obtenir directement à partir du Théorème 7, avec même un facteur 2 en moins. Cependant, la force du Théorème 12 réside dans le fait qu'il ne nécessite pas la réversibilité.*

Remarque 9 (Cas non-réversible). *Dans le cas général, on a toujours $\gamma_\star(P) = \gamma_\star(\frac{P+P^\star}{2})$, et comme $(P + P^\star)/2$ est réversible, le lemme ci-dessus entraîne que*

$$\gamma_\star = 1 - \lambda_2 \left(\frac{P + P^\star}{2} \right).$$

En particulier, cette identité montre que $\gamma_\star \in [0, 2]$, et que $\gamma_\star \in [0, 1]$ dans le cas paresseux.

5.2 Inégalité de Cheeger

Dans un chapitre précédent, nous avons introduit la notion de *conductance* Φ_* , qui détecte les goulets d'étranglement et fournit ainsi une minoration du temps de mélange. Nous allons maintenant voir que cette quantité permet en fait de minorer et de majorer la constante de Poincaré, et qu'elle fournit donc également une majoration sur le temps de mélange. Il s'agit d'un résultat remarquable, car il fait le lien entre une quantité géométrique et une quantité spectrale.

Théorème 13 (Inégalité de Cheeger). *On a toujours*

$$\frac{\Phi_*^2}{2} \leq \gamma_* \leq 2\Phi_*.$$

Démonstration. Au vu des remarques 7 et 6, nous pouvons supposer P réversible. Soit $A \subseteq S$. Alors l'observable $f = \mathbf{1}_A$ vérifie $\text{Var}(f) = \pi(A)\pi(A^c)$ et $\mathcal{E}(f) = \bar{\pi}(A \times A^c)$. Autrement dit,

$$\Phi(A) = \pi(A^c) \frac{\mathcal{E}(f)}{\text{Var}(f)}.$$

La majoration en découle. Pour la minoration, on peut supposer $\lambda_2 \geq 0$, car $\Phi_* \leq 1$. Soit $f: S \rightarrow \mathbb{R}_+$ telle que $\pi(f = 0) \geq \frac{1}{2}$. Alors pour $t \geq 0$, on peut prendre $A = \{f > t\}$ dans la définition de Φ_* :

$$\Phi_* \pi(f > t) \leq \sum_{(x,y) \in \mathcal{A}} \bar{\pi}(x,y) \mathbf{1}_{(f(y) \leq t < f(x))}.$$

En intégrant par rapport à t et en intervertissant somme et intégrale, il vient

$$\Phi_* \pi f \leq \frac{1}{2} \sum_{(x,y) \in \mathcal{A}} \bar{\pi}(x,y) |f(y) - f(x)|.$$

Remplaçons maintenant f par f^2 , et appliquons l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\Phi_*^2 \|f\|^4 \leq \frac{1}{4} \left(\sum_{(x,y) \in \mathcal{A}} \bar{\pi}(x,y) (f(y) - f(x))^2 \right) \left(\sum_{(x,y) \in \mathcal{A}} \bar{\pi}(x,y) (f(y) + f(x))^2 \right).$$

En développant les carrés, le membre droit se simplifie en $\|f\|^4 - \langle f, Pf \rangle^2$, de sorte que

$$\Phi_*^2 \|f\|^4 \leq \|f\|^4 - \langle f, Pf \rangle^2. \quad (66)$$

Nous voudrions prendre $f = \phi_2$, mais l'hypothèse $\pi(f = 0) \geq \frac{1}{2}$ n'est pas vérifiée. Prenons plutôt $f = \max(\phi_2, 0)$, qui vérifie l'hypothèse quitte à changer ϕ_2 en $-\phi_2$. Comme $f \geq 0$ et $f \geq \phi_2$, on a $Pf \geq 0$ et $Pf \geq \lambda_2 \phi_2$, i.e. $Pf \geq \lambda_2 f$. Ainsi, $\langle f, Pf \rangle \geq \lambda_2 \|f\|^2$, et (66) conclut. \square

Exemple 8 (Marche sur l'hypercube). *L'ensemble $A := \{x \in \{0, 1\}^n : x_1 = 0\}$ vérifie $\pi(A) = \frac{1}{2}$ et $\bar{\pi}(A \times A^c) = \frac{1}{4n}$, de sorte que $\Phi(A) = \frac{1}{2n}$. On en déduit que $\Phi_* \leq \frac{1}{2n}$. On sait par ailleurs que $\gamma_* = 1 - \lambda_2 = \frac{1}{n}$, de sorte qu'il y a égalité dans la majoration de Cheeger. En particulier,*

$$\Phi_* = \frac{1}{2n}.$$

Exemple 9 (Marche sur le cycle). Sur $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, il est clair que toute partie A de taille $k \leq n/2$ contient au moins deux états “au bord”, c’est-à-dire ayant un voisin hors de A . Ainsi, $\bar{\pi}(A \times A^c) \geq 1/(2n)$ et donc $\Phi(A) \geq \frac{1}{2k}$. Il y a d’ailleurs égalité pour $A = \{1, \dots, k\}$. Ainsi,

$$\Phi_\star = \frac{1}{2\lfloor n/2 \rfloor}.$$

On sait par ailleurs que $\gamma_\star = 1 - \lambda_2 \sim \frac{\pi^2}{n^2}$, de sorte que la minoration de Cheeger est du bon ordre.

En combinant les Théorèmes 12 et 13, on obtient la majoration importante suivante :

Corollaire 17 (Majoration par conductance). *Pour une chaîne paresseuse, on a toujours*

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \leq \left\lceil \frac{4}{\phi_\star^2} \ln \frac{1}{2\varepsilon\sqrt{\pi_\star}} \right\rceil$$

Exemple 10 (Graphes expansifs). Une suite de graphes $(G_n)_{n \geq 1}$ est dite expansive si

1. le nombre de sommets diverge : $|G_n| \rightarrow \infty$ lorsque $n \rightarrow \infty$;
2. les degrés sont uniformément majorés : $\sup_{n \geq 1} \Delta(G_n) < \infty$;
3. les conductances sont uniformément minorées : $\inf_{n \geq 1} \Phi_\star(G_n) > 0$.

La majoration de Cheeger et le Lemme 11 montrent que le temps de mélange de la marche sur ces graphes est logarithmique : pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$, $t_{\text{MIX}}(\varepsilon) = \Theta(\log |G_n|)$. Cette connectivité remarquable a de nombreuses applications : communication, dérandomisation, cryptographie...

5.3 Congestion et chemins canoniques

Pour illustrer l’intérêt de la constante de Poincaré, nous présentons ici une méthode simple et efficace pour majorer le temps de mélange d’une chaîne quelconque, à partir des propriétés de congestion d’un ensemble arbitraire de chemins reliant entre eux les différents états.

Théorème 14 (Méthode des chemins canoniques). *Pour chaque $(x, y) \in S \times S$, choisissons un chemin particulier $\sigma_{x,y}$ de x à y , puis définissons la congestion d’une arête $a \in \mathcal{A}$ comme*

$$\kappa(a) := \frac{1}{\bar{\pi}(a)} \sum_{(x,y) \in S \times S} |\sigma_{x,y}| \pi(x) \pi(y) \mathbf{1}_{(a \in \sigma_{x,y})},$$

où la notation $a \in \sigma$ signifie que $a = (\sigma_i, \sigma_{i+1})$ pour un certain $0 \leq i < |\sigma|$. Alors,

$$\frac{1}{\gamma_\star} \leq \max_{a \in \mathcal{A}} \kappa(a).$$

Démonstration. Pour $f: S \rightarrow \mathbb{R}$, nous avons déjà vu que

$$\text{Var}(f) = \frac{1}{2} \sum_{(x,y) \in S \times S} \pi(x)\pi(y) |f(x) - f(y)|^2.$$

Mais, pour tout $(x, y) \in S \times S$, puisque $\sigma_{x,y}$ est un chemin de x à y , on a

$$|f(x) - f(y)|^2 = \left| \sum_{a \in \sigma_{x,y}} \nabla f(a) \right|^2 \leq |\sigma_{x,y}| \sum_{a \in \sigma_{x,y}} |\nabla f(a)|^2,$$

par Cauchy-Schwarz. En réinjectant ci-dessus, et en ré-arrangeant les deux sommes, on obtient

$$\text{Var}(f) \leq \frac{1}{2} \sum_{a \in \mathcal{A}} \pi(a) |\nabla f(a)| \kappa(a).$$

Le résultat en découle aussitôt. □

Exemple 11 (Marche sur une grille $n \times n$). *On considère la marche paresseuse sur la grille $n \times n$: l'ensemble des sommets est $S = \{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, n\}$, et deux sommets $x = (x_1, x_2)$ et $y = (y_1, y_2)$ sont déclarés voisins si $|x_1 - y_1| + |x_2 - y_2| = 1$. Choisissons pour $\sigma_{x,y}$ le chemin qui va de x à y horizontalement puis verticalement. On vérifie aisément que $\max_a \kappa(a) \sim n^2$. Ainsi,*

$$t_{\text{REL}} \lesssim n^2, \tag{67}$$

ce qui est en réalité le bon ordre de grandeur.

Exemple 12 (Borne universelle). *On peut toujours prendre pour $\sigma_{x \rightarrow y}$ un chemin de longueur minimale entre x et y , de sorte que $|\sigma_{x \rightarrow y}| \leq \text{DIAM}$ et donc $\kappa(a) \leq \frac{\text{DIAM}}{\pi_\star}$. On obtient ainsi*

$$\frac{1}{\gamma_\star} \leq \frac{\text{DIAM}}{\pi_\star}. \tag{68}$$

En particulier, pour la marche aléatoire paresseuse sur un graphe connexe $G = (S, A)$, on a

$$t_{\text{MIX}} = O(\text{DIAM}(G) |A| \log |A|) = O(|S|^3 \log |S|).$$

6 Aspects cinétiques

Les minoration du Lemme 11 reposent sur une observation triviale : la distance depuis le point de départ croît d'au plus 1 à chaque itération, de sorte qu'il faut un temps au moins $t = \Omega(\text{DIAM})$ pour traverser l'espace d'états. Cette estimation *ballistique* est très mauvaise si on l'applique à l'exemple de la marche simple sur $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, pour lequel nous savons que $t_{\text{MIX}} = \Theta(\text{DIAM}^2)$: n'ayant aucune dérive dans une direction privilégiée, le marcheur fait des allers-retours incessants qui annulent sa vitesse moyenne et laissent les fluctuations gouverner ; après t itérations, il se trouvera *typiquement* à distance $\Theta(\sqrt{t})$ de son point de départ et non $\Theta(t)$, de sorte qu'il lui faudra plutôt un temps $t = \Theta(\text{DIAM}^2)$ pour traverser l'espace d'états. Dans cette section, nous allons tirer parti de ce comportement *diffusif* pour affiner l'estimation du temps de mélange des chaînes réversibles.

6.1 Majoration cinétique de Carne-Varopoulos et conséquences

Le résultat suivant est remarquable : parmi toutes les chaînes réversibles, la marche simple sur \mathbb{Z} maximise la probabilité d'atteindre un état donné en un temps donné.

Théorème 15 (Majoration diffusive de Carne-Varopoulos). *Pour une chaîne réversible, on a*

$$P^t(x, y) \leq \sqrt{\frac{\pi(y)}{\pi(x)}} \mathbb{P}(|S_t| \geq \text{dist}(x, y)),$$

où $(S_t)_{t \geq 0}$ désigne la marche aléatoire simple sur \mathbb{Z} . En particulier,

$$P^t(x, y) \leq 2\sqrt{\frac{\pi(y)}{\pi(x)}} \exp\left\{-\frac{(\text{dist}(x, y))^2}{2t}\right\}. \quad (69)$$

Démonstration. Rappelons que les polynômes de Chebychev sont définis par la relation de récurrence

$$Q_{k+1}(z) := 2zQ_k(z) - Q_{k-1}(z),$$

avec pour conditions initiales $Q_0(z) = 1$ et $Q_1(z) = z$. L'identité trigonométrique classique

$$2 \cos(k\theta) \cos(\theta) = \cos((k+1)\theta) + \cos((k-1)\theta),$$

montre que l'on a $Q_k(\cos \theta) = \cos(k\theta)$. Après ces rappels, remarquons que

$$(\cos \theta)^t = \left(\frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}\right)^t = \mathbb{E}\left[e^{i\theta S_t}\right] = \mathbb{E}[\cos(\theta|S_t|)] = \sum_{k=0}^t \mathbb{P}(|S_t| = k) Q_k(\cos \theta).$$

Comme cela est vrai pour tout θ , on en déduit l'identité polynomiale

$$z^t = \sum_{k=0}^t \mathbb{P}(|S_t| = k) Q_k(z).$$

Appliquons cette identité polynômiale à la matrice P , puis évaluons l'entrée (x, y) :

$$\begin{aligned} P^t(x, y) &= \sum_{k=0}^t \mathbb{P}(|S_t| = k) Q_k(P)(x, y) \\ &= \sum_{k=\text{dist}(x, y)}^t \mathbb{P}(|S_t| = k) Q_k(P)(x, y), \end{aligned}$$

où l'on a remarqué que pour $k < \text{dist}(x, y)$, on a $I(x, y) = P(x, y) = \dots = P^k(x, y) = 0$ et donc $Q_k(P)(x, y) = 0$ (puisque Q_k est de degré k). Pour conclure, il ne reste plus qu'à montrer que

$$Q_k(P)(x, y) \leq \sqrt{\frac{\pi(y)}{\pi(x)}}, \quad (70)$$

pour tout $k \geq 0$. Pour cela, remarquons que $Q_k(P)$ est un opérateur auto-adjoint de spectre $\{Q_k(\lambda) : \lambda \in \text{Sp}(P)\} \subseteq Q_k([-1, 1]) \subseteq [-1, 1]$, où la dernière égalité découle de la représentation $Q_k(\cos \theta) = \cos(k\theta)$. Ainsi, $Q_k(P)$ est une contraction, i.e. $|\langle Q_k(P)f, g \rangle| \leq \|f\| \|g\|$ pour tout $f, g \in \mathcal{H}$. Il suffit de prendre $f = \delta_x$ et $g = \delta_y$ pour obtenir exactement (70). Enfin, la majoration (69) s'obtient par une application classique de l'inégalité de Markov dûe à Chernov : pour $d, \lambda > 0$,

$$\mathbb{P}(S_t \geq d) = \mathbb{P}\left(e^{\lambda S_t} \geq e^{\lambda d}\right) \leq e^{-\lambda d} \mathbb{E}\left[e^{\lambda S_t}\right] = e^{-\lambda d} \left(\frac{e^\lambda + e^{-\lambda}}{2}\right)^t \leq e^{-\lambda d + \frac{\lambda^2 t}{2}}.$$

Le membre droit est minimal si $\lambda = \frac{d}{t}$, et vaut alors $e^{-\frac{d^2}{2t}}$. Cela s'applique bien-sûr aussi à $-S_t$. \square

Corollaire 18. *Pour la marche aléatoire simple sur un graphe à n sommets, on a*

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \geq \frac{(\text{DIAM})^2}{16 \ln n}.$$

pour tout $\varepsilon \in (0, \frac{1}{2})$, du moment que n est assez grand.

Démonstration. Posons $d = \lceil \text{DIAM}/2 \rceil$. Comme $\text{DIAM} > 2(d-1)$, on peut trouver deux boules disjointes de rayon $d-1$, si bien qu'il existe un $x \in S$ tel que la boule $A = \mathcal{B}_x(d-1)$ vérifie

$$\pi(A) \leq \frac{1}{2}.$$

Mais les éléments de A^c étant à distance au moins $d \geq \text{DIAM}/2$ de x , le Théorème 15 assure que

$$P^t(x, A^c) \leq 2n^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\text{DIAM}^2}{8t}},$$

où l'on a utilisé les majorations crues $|A^c| \leq n$ et $\frac{\pi(y)}{\pi(x)} = \frac{\text{deg}(y)}{\text{deg}(x)} \leq n$. On conclut que

$$\mathfrak{D}(t) \geq \frac{1}{2} - 2n^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\text{DIAM}^2}{8t}}.$$

Tant que $t \leq \frac{(\text{DIAM})^2}{16 \ln n}$, on voit que $\mathfrak{D}(t) \geq \frac{1}{2} - \frac{2}{\sqrt{n}}$, ce qui termine la preuve. \square

6.2 Minoration cinétique de Lee-Peres et conséquences

Pour des chaîne réversibles plus symétriques, on peut compléter la majoration précédente par une minoration diffusive : ainsi, le résultat récent suivant montre que pour une marche sur un groupe, la distance à l'origine croît initialement comme la racine carré du temps t , au moins :

Théorème 16 (Minoration diffusive de Lee-Peres). *Soit (S, \star) un groupe fini et μ une loi symétrique sur S . Alors la marche aléatoire stationnaire \mathbf{X} associée vérifie*

$$\mathbb{E} \left[(\text{dist}(X_0, X_t))^2 \right] \geq \frac{\mu_\star t}{2},$$

tant que $t \leq \gamma_\star^{-1}$, où $\mu_\star = \min\{\mu(z) : z \in \text{supp}(\mu)\}$. En particulier, $\gamma_\star^{-1} \leq \frac{2\text{DIAM}^2}{\mu_\star}$.

Démonstration. Fixons une observable $f : S \rightarrow \mathbb{R}$, et commençons par rappeler que

$$\mathcal{E}(f, f) = \frac{1}{2|S|} \sum_{(x,z) \in S \times S} \mu(z) (f(x \star z) - f(x))^2.$$

Par ailleurs, en notant $f_y : x \mapsto f(x \star y)$ la translatée de f par y , on a pour tout $(y, z) \in S \times S$,

$$\begin{aligned} \|f_{y \star z} - f_y\|^2 &= \frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} (f(x \star y \star z) - f(x \star y))^2 \\ &= \frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} (f(x \star z) - f(x))^2, \end{aligned}$$

où l'on a effectué le changement de variable $x \mapsto x \star y^{-1}$. En comparant ces deux identités, on a

$$\|f_{y \star z} - f_y\|^2 \leq \kappa := \frac{2\mathcal{E}(f, f)}{\mu_\star},$$

pour tout $y \in S$ et tout $z \in \text{supp}(\mu)$. Par inégalité triangulaire, on en déduit aussitôt que

$$\|f_y - f_x\|^2 \leq \kappa (\text{dist}(x, y))^2,$$

pour tout $(x, y) \in S \times S$. Choisissons $x = X_0$ et $y = X_t$, puis prenons l'espérance : il vient

$$\kappa \mathbb{E} \left[(\text{dist}(X_0, X_t))^2 \right] \geq \frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} \mathbb{E} \left[|f(x \star X_t) - f(x \star X_0)|^2 \right].$$

Par réversibilité, le membre droit se simplifie en $\mathbb{E} \left[|f(X_t) - f(X_0)|^2 \right] = 2\langle (I - P^t)f, f \rangle$, et donc

$$\frac{1}{\mu_\star} \langle (I - P)f, f \rangle \mathbb{E} \left[(\text{dist}(X_0, X_t))^2 \right] \geq \langle (I - P^t)f, f \rangle.$$

En prenant $f = f_2$, une fonction propre associée à la valeur propre $\lambda_2 = 1 - \gamma_\star$, il vient

$$\frac{1}{\mu_\star} \mathbb{E} \left[(\text{dist}(X_0, X_t))^2 \right] \geq \frac{1 - (1 - \gamma_\star)^t}{\gamma_\star} = \sum_{s=0}^{t-1} (1 - \gamma_\star)^s \geq \sum_{s=0}^{t-1} (1 - s\gamma_\star) = t \left(1 - \frac{\gamma_\star(t-1)}{2} \right).$$

Le résultat en découle aussitôt. \square

7 Exemples approfondis

7.1 Transition de phase pour le modèle d'Ising dynamique

Illustrons ces méthodes géométriques sur une chaîne de Markov absolument fondamentale : le modèle d'Ising en champs moyen. Ce modèle met en jeu n particules pouvant se trouver dans deux états possibles, $+1$ ou -1 . Chaque particule a tendance à aligner son état sur celui des autres, avec une force quantifiée par un paramètre $\beta \geq 0$. Nous décrirons le système par un vecteur $x = (x_1, \dots, x_n) \in \{-1, +1\}^n$, où x_i représente l'état de la particule i . À chaque itération, on choisit une particule i au hasard, et on remplace son état par ± 1 avec probabilités respectives

$$\psi \left(\pm \frac{\beta}{n} \sum_{j \neq i} x_j \right) \quad \text{où} \quad \psi(s) := \frac{e^s}{e^s + e^{-s}}. \quad (71)$$

Autrement dit, sur l'ensemble $S = \{-1, +1\}^n$, on considère le noyau

$$P(x, y) := \begin{cases} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \psi \left(\frac{\beta}{n} x_i \sum_{j \neq i} x_j \right) & \text{si } y = x \\ \frac{1}{n} \psi \left(-\frac{\beta}{n} x_i \sum_{j \neq i} x_j \right) & \text{si } y = (x_1, \dots, x_{i-1}, -x_i, x_{i+1}, \dots, x_n) \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce noyau est clairement ergodique, et il est facile de vérifier que la formule

$$\pi(x) := \frac{e^{\frac{\beta}{2n} (\sum_i x_i)^2}}{Z(\beta)}, \quad \text{avec} \quad Z(\beta) := \sum_{x \in S} e^{\frac{\beta}{2n} (\sum_i x_i)^2} \quad (72)$$

définit une loi réversible. Si $\beta = 0$, les particules n'interagissent pas, et l'on retrouve la marche sur l'hypercube, qui mélange en un temps $n \ln n$. Au contraire, dans la limite $\beta \rightarrow +\infty$, la particule choisie s'alignera systématiquement sur l'état majoritaire, et la chaîne mettra un temps infini à passer de l'état $(+1, +1, \dots, +1)$ à l'état $(-1, -1, \dots, -1)$. Le résultat suivant montre que la transition entre mélange lent et mélange rapide se produit en fait brutalement lorsque β franchit 1.

Théorème 17 (Transition de phase). *Dans le régime où β est fixé tandis que $n \rightarrow \infty$, on a*

1. Si $\beta < 1$, alors le mélange est extrêmement rapide : $t_{\text{MIX}}^{(n)} \lesssim \frac{n \ln n}{1 - \beta}$.
2. Si $\beta > 1$, alors le mélange est exponentiellement lent : $\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log t_{\text{MIX}}^{(n)} > 0$.

Démonstration du mélange rapide pour $\beta < 1$. Nous allons appliquer le Théorème 11. Soient I et U deux variables aléatoires indépendantes et uniformes sur $\{1, \dots, n\}$ et $[0, 1]$ respectivement. Étant donné $x \in S$, on peut construire une variable $X = (X_1, \dots, X_n)$ de loi $P(x, \cdot)$ en posant

$$X_i := \begin{cases} x_i & \text{si } I \neq i; \\ +1 & \text{si } I = i \text{ et } U \leq \psi \left(\frac{\beta}{n} \sum_{j \neq i} x_j \right) \\ -1 & \text{si } I = i \text{ et } U > \psi \left(\frac{\beta}{n} \sum_{j \neq i} x_j \right). \end{cases}$$

Soit y un autre état ne différant de x qu'en une seule coordonnée, disons $x_k = -1$ et $y_k = +1$. Alors le couplage (X, Y) de $P(x, \cdot)$ et $P(y, \cdot)$ obtenu en utilisant le même couple (I, U) satisfait

$$\text{dist}(X, Y) = \begin{cases} 0 & \text{si } I = k; \\ 2 & \text{si } I \neq k \text{ et } \psi\left(\frac{\beta}{n} \sum_{j \neq I} x_j\right) < U \leq \psi\left(\frac{\beta}{n} \sum_{j \neq I} y_j\right) \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Mais $\sum_{j \neq I} y_j - \sum_{j \neq I} x_j = 2$ et $\|\psi'\|_\infty = \frac{1}{2}$, donc $\psi\left(\frac{\beta}{n} \sum_{j \neq I} y_j\right) - \psi\left(\frac{\beta}{n} \sum_{j \neq I} x_j\right) \leq \frac{\beta}{n}$. Ainsi,

$$\mathbb{E}[\text{dist}(X, Y)] \leq \left(1 - \frac{1}{n}\right) \left(1 + \frac{\beta}{n}\right) \leq e^{-\frac{1-\beta}{n}}.$$

Le Théorème 11 s'applique donc avec $\rho := e^{-\frac{1-\beta}{n}}$ et $\text{DIAM}(P) = n$, ce qui conclut la preuve. \square

Démonstration du mélange lent pour $\beta > 1$. Nous allons évaluer la conductance de l'ensemble

$$A := \left\{ x \in \{-1, +1\}^n : \sum_{i=1}^n x_i < 0 \right\}.$$

La symétrie $\pi(x) = \pi(-x)$ assure que $\pi(A) \leq \frac{1}{2}$, de sorte que l'on a bien $\Phi_\star \leq \Phi(A)$. En vertu du Corollaire 12, il suffit de montrer que $\Phi(A)$ décroît exponentiellement vite avec n . Pour cela, introduisons l'ensemble A_k des états qui ont exactement k plus et $n - k$ moins ($0 \leq k \leq n$) :

$$A_k := \left\{ x \in \{-1, +1\}^n : \sum_{i=1}^n x_i = 2k - n \right\}.$$

Puisqu'une seule particule est mise à jour à chaque itération, la chaîne ne peut passer de A à A^c que si elle se trouve en réalité dans l'ensemble $A_{\lceil n/2 \rceil - 1}$ et passe dans $A_{\lceil n/2 \rceil}$. Ainsi,

$$\bar{\pi}(A \times A^c) = \bar{\pi}(A_{\lceil n/2 \rceil - 1} \times A_{\lceil n/2 \rceil}) \leq \pi(A_{\lceil n/2 \rceil}). \quad (73)$$

Par ailleurs, on a bien-sûr $\pi(A) = \sum_{k < \lceil \frac{n}{2} \rceil} \pi(A_k)$, et pour tout $0 \leq k \leq n$, $\pi(A_k) = \frac{a_k}{Z(\beta)}$, avec

$$a_k = \binom{n}{k} \exp \left\{ \frac{\beta}{n} \left(\binom{k}{2} + \binom{n-k}{2} - k(n-k) \right) \right\}.$$

Il nous suffit donc de montrer que l'un des $(a_k : k < \frac{n}{2})$ est exponentiellement grand devant $a_{\lceil n/2 \rceil}$ lorsque $n \rightarrow \infty$. Or, pour $k = k(n) \sim \theta n$ avec $\theta \in (0, 1)$ fixé, on a

$$\frac{1}{n} \ln(a_{k(n)}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} f(\theta) := \frac{\beta}{2}(2\theta - 1)^2 + \theta \ln\left(\frac{1}{\theta}\right) + (1 - \theta) \ln\left(\frac{1}{1 - \theta}\right).$$

Il suffit donc de s'assurer qu'il existe $\theta \leq \frac{1}{2}$ tel que $f(\theta) > f(\frac{1}{2})$. En dérivant, on trouve

$$f'(\theta) = 2\beta(2\theta - 1) + \ln(1 - \theta) - \ln(\theta) \quad \text{et} \quad f''(\theta) = 4\beta - \frac{1}{\theta(1 - \theta)}.$$

En particulier, $f'(\frac{1}{2}) = 0$ et $f''(\frac{1}{2}) = 4(\beta - 1)$ donc $\frac{1}{2}$ est un minimum local strict dès que $\beta > 1$. \square

7.2 Profil limite pour l'hypercube

Comme nous l'avons constaté, de nombreuses suites naturelles de noyaux $(P_n)_{n \geq 1}$ satisfont un phénomène de cutoff : il existe une échelle critique $(t_n)_{n \geq 1}$ autour de laquelle la chaîne passe brutalement d'une distribution quasiment étrangère à l'équilibre à un mélange presque parfait, i.e.

$$\mathcal{D}_n(\alpha t_n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha < 1 \\ 0 & \text{si } \alpha > 1. \end{cases} \quad (74)$$

Une fois ce phénomène établi, il est naturel de chercher à *zoomer* autour du point critique t_n jusqu'à ce que le détail de la transition vers l'équilibre devienne visible : on s'attache à trouver une échelle temporelle adaptée $(w_n)_{n \geq 1}$ (avec bien-sûr $w_n \ll t_n$ lorsque $n \rightarrow \infty$), telle que pour chaque $\alpha \in \mathbb{R}$,

$$\mathcal{D}_n(t_n + \alpha w_n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \Phi(\alpha), \quad (75)$$

pour une certaine fonction Φ qui décroît de $\lim_{\alpha \rightarrow -\infty} \Phi(\alpha) = 1$ à $\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \Phi(\alpha) = 0$. Lorsqu'il existe, ce *profil limite* capture, en un sens extrêmement précis, la manière dont la chaîne approche sa loi d'équilibre. Rares sont les exemples pour lesquels on peut établir un tel raffinement "ultime", qui atteste de la compréhension la plus complète possible de la chaîne considérée. La marche aléatoire paresseuse sur l'hypercube en fait partie, comme nous allons le voir.

Théorème 18 (Profil gaussien pour la marche sur l'hypercube). *Pour tout $\alpha \in \mathbb{R}$, on a*

$$\mathfrak{D}_n\left(\frac{n \ln n}{2} + \alpha n\right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \Phi(\alpha) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{e^{-\alpha}}{2}}^{+\frac{e^{-\alpha}}{2}} e^{-\frac{u^2}{2}} du. \quad (76)$$

Démonstration. Par symétrie, le choix de l'état initial n'importe pas pour calculer la distance à l'équilibre, et nous pouvons choisir l'état $1 = (1, \dots, 1)$. Par définition, nous avons

$$\mathfrak{D}(t) = \frac{1}{2|S|} \sum_{y \in S} |1 - 2^n P^t(1, y)| = \frac{1}{2} \mathbb{E} [|1 - 2^n P^t(1, Y_n)|], \quad (77)$$

où Y_n est une variable uniforme sur $\{0, 1\}^n$. Observons que le nombre $\|Y_n\|$ de coordonnées égales à 1 est une Binomiale de paramètre $(n, \frac{1}{2})$: le Théorème Central Limite nous assure que

$$\|Y_n\| = \frac{n + Z\sqrt{n} + o(\sqrt{n})}{2}, \quad (78)$$

avec $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$ et où pour plus de confort, nous avons invoqué le Théorème de Skorokhod pour obtenir une convergence presque-sûre. Nous voulons estimer le membre droit de (77) dans le régime

$$t(n) = \frac{n \ln n}{2} + \alpha n + o(n), \quad (79)$$

avec $\alpha \in \mathbb{R}$ fixé et $n \rightarrow \infty$. Notons que cela se réécrit $t(n) = n \ln \frac{n}{r(n)} + o(n)$ avec

$$r(n) = e^{-\alpha} \sqrt{n} + o(\sqrt{n}). \quad (80)$$

Rappelons la construction de \mathbf{X} à l'aide des variables aléatoires $(I_t, B_t)_{t \geq 1}$ décrite au Chapitre 2 : on part de $X_0 = (1, \dots, 1)$ puis à chaque temps $t \geq 1$, on construit X_t à partir de X_{t-1} en remplaçant la coordonnée I_t par B_t . En notant $R_t := n - \#\{I_1, \dots, I_t\}$ le nombre de coordonnées qui n'ont pas encore été mises à jour, le Théorème 4 nous assure que dans le régime (79)-(80), on a

$$\frac{R_{t(n)}}{r(n)} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 1. \quad (81)$$

D'autre part, la loi conditionnelle de X_t sachant R_t est simple : par construction,

$$\mathbb{P}(X_t = y | R_t) = 2^{-n} g_n(R_t, \|y\|) \quad \text{avec} \quad g_n(r, k) = \frac{2^r \binom{k}{r}}{\binom{n}{r}} = \prod_{i=0}^{r-1} \left(1 - \frac{n-2k+i}{n-i}\right).$$

Au vu de (78)-(81), nous sommes amenés à étudier le comportement de $g_n(r(n), k(n))$ lorsque

$$k(n) = \frac{n + z\sqrt{n} + o(\sqrt{n})}{2}, \quad (82)$$

avec $z \in \mathbb{R}$ fixé. Dans ce régime, l'approximation $\ln(1+h) = h + o(h)$ montre que

$$g_n(r(n), k(n)) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \exp \left\{ z e^{-\alpha} - \frac{e^{-2\alpha}}{2} \right\}.$$

La convergence a lieu en probabilité si l'on remplace $r(n)$ par $R_{t(n)}$, au vu de (81). Par Fatou,

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E} [g_n(R_{t(n)}, k(n))] \geq \exp \left\{ z e^{-\alpha} - \frac{e^{-2\alpha}}{2} \right\}.$$

Autrement dit, pour tout suite $(y(n))_{n \geq 1}$ avec $y(n) \in \{0, 1\}^n$ et $\|y(n)\| = \frac{n+z\sqrt{n}+o(\sqrt{n})}{2}$, on a

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} 2^n P^{t(n)}(0, y(n)) \geq \exp \left\{ z e^{-\alpha} - \frac{e^{-2\alpha}}{2} \right\}.$$

Au vu de (78), nous pouvons prendre $y(n) = Y_n$ et $z = Z$. Mais alors, les deux membres sont d'espérance 1, et le lemme classique ci-dessous entraîne que

$$2^n P^{t(n)}(0, Y_n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{L^1} \exp \left\{ Z e^{-\alpha} - \frac{e^{-2\alpha}}{2} \right\}.$$

Il suffit de réinjecter cela dans (77) et de faire un petit calcul gaussien pour conclure. \square

Lemme 19 (Une variante du Lemme de Scheffé). *Soient W, W_1, W_2, \dots des variables aléatoires positives et intégrables, toutes définies sur le même espace. On suppose que*

$$\liminf_{n \geq 1} W_n \geq W \quad \text{et} \quad \limsup_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[W_n] \leq \mathbb{E}[W].$$

Alors $(W_n)_{n \geq 1}$ converge dans L^1 vers W .

Démonstration. On écrit $\mathbb{E}[|W - W_n|] = 2\mathbb{E}[(W - W_n)_+] + \mathbb{E}[W_n - W]$, et l'on conclut aisément. \square

Cutoff pour le mélange “riffle-shuffle”

Le mélange le plus commun consiste à couper le paquet en deux, puis à réunir les deux moitiés en les entrelaçant. On décrira le paquet par une permutation $x \in \mathfrak{S}_n$, comme au Chapitre 2. Effectuer le geste ci-dessus revient alors à choisir une partie $J \subseteq \{1, \dots, n\}$ au hasard, puis à remplacer x par $x \circ \sigma_J$, où $\sigma_J = (\sigma_J(1), \dots, \sigma_J(n))$ admet pour restrictions à J et à J^c les suites $(1, \dots, |J|)$ et $(|J| + 1, \dots, n)$. En clair : les cartes du dessus sont placées dans les positions $j \in J$, et les cartes du dessous dans les positions $j \notin J$, dans leur ordre initial. Quelle que soit la loi de J , on a

$$t_{\text{mix}}(\varepsilon) \gtrsim \log_2(n), \quad (83)$$

grâce au Lemme 11 avec $\Delta \leq 2^n$. Nous allons maintenant étudier plus en détail le cas où la loi de la partie J est uniforme. En partant du paquet ordonné $\text{id} = (1, \dots, n)$, la chaîne s’écrit

$$X_t := \sigma_{J_1} \circ \dots \circ \sigma_{J_t},$$

où les parties $(J_t)_{t \geq 1}$ sont indépendantes et de loi uniforme. Comme pour toute marche aléatoire sur un groupe, la distance à l’équilibre ne dépend pas du point de départ. Ainsi, $\mathfrak{D}(t) = \mathfrak{D}_{av}(t)$, où

$$\mathfrak{D}_{av}(t) = \sum_{x \in S} \pi(x) d_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi) = \frac{1}{2} \sum_{(x,y) \in S^2} |\pi(x)P^t(x,y) - \pi(x)\pi(y)|.$$

Mais, par définition de P_\star , on a $\pi(x)P^t(x,y) = \pi(y)P_\star^t(y,x)$, ce qui montre que la distance typique $\mathfrak{D}_{av}(t)$ est invariante par retournement du temps. En conséquence, nous pouvons remplacer X_t par

$$X_t^\star := \sigma_{J_t}^{-1} \circ \dots \circ \sigma_{J_1}^{-1}. \quad (84)$$

La composition par σ_J^{-1} déplace simplement sur le dessus du paquet les cartes en position $j \in J$, en préservant leur ordre initial. Comme J est uniforme, effectuer une transition selon P_\star revient à inscrire un 0 ou un 1 sur chaque carte au hasard, puis à placer les cartes marquées par un 0 au dessus, dans leur ordre initial. De même, une transition selon P_\star^t consiste à inscrire sur chaque carte une suite binaire uniforme de longueur t , puis à ranger les cartes dans l’ordre des mots binaires, en utilisant l’ordre initial pour trancher en cas d’égalité. Cette description conduit à un couplage trajectorien : la carte de valeur i reçoit le même mot binaire U_i dans les deux paquets. La coalescence est assurée lorsque les n mots U_1, \dots, U_n sont 2 à 2 distincts, et le Théorème 3 donne

$$\mathfrak{D}(t) \leq \mathbb{P}(\exists 1 \leq i < j \leq n : U_i = U_j). \quad (85)$$

Le membre droit vaut au plus $n^2 2^{-t}$ puisque $\mathbb{P}(U_i = U_j) = 2^{-t}$, ce qui permet de conclure que

$$t_{\text{mix}}(\varepsilon) \lesssim 2 \log_2(n). \quad (86)$$

C’est le double de la minoration (83). La bonne réponse se trouve en fait précisément au milieu :

Théorème 19 (Cutoff pour le “riffle-shuffle”). *Pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$,*

$$t_{\text{MIX}}(\varepsilon) \sim \frac{3}{2} \log_2(n).$$

Démonstration de la minoration. Soit f l’observable qui compte les paires consécutives croissantes :

$$f(x) := \# \{1 \leq i < n : x(i) < x(i+1)\}. \quad (87)$$

Pour une permutation aléatoire X de loi uniforme, on calcule aisément

$$\mathbb{E}[f(X)] = \frac{n-1}{2} \quad \text{et} \quad \text{Var}(f(X)) = \frac{n-1}{4} - \frac{n-2}{6} = \frac{n+1}{12}.$$

Soit à présent X_t^* une variable de loi $P_\star^t(\text{id}, \cdot)$ construite à l’aide des mots (U_1, \dots, U_n) , et soit

$$R := n - \# \{U_1, \dots, U_n\} = \# \{i \leq n : U_i \in \{U_1, \dots, U_{i-1}\}\},$$

le nombre de répétitions parmi ces mots. Par construction, on a

$$\mathbb{E}[f(X_t^*)|R] = \frac{n-1}{2} + \frac{R}{2} \quad \text{et} \quad \text{Var}(f(X_t^*)|R) = \frac{n+1-R}{12},$$

si bien que

$$\mathbb{E}[f(X_t^*)] = \frac{n-1}{2} + \frac{\mathbb{E}[R]}{2} \quad \text{et} \quad \text{Var}(f(X_t^*)) \leq \frac{n+1}{12} + \frac{\text{Var}(R)}{4}.$$

Le Lemme 20 ci-dessous appliqué à $m = 2^t$ montre que dans le régime $t \sim \alpha \log_2(n)$ avec $\alpha \in (1, 2)$,

$$\mathbb{E}[R] = n^{2-\alpha+o(1)} \quad \text{et} \quad \text{Var}(R) \leq n^{2-\alpha+o(1)}. \quad (88)$$

Si $\alpha < \frac{3}{2}$, on voit que $f(X)$ et $f(X_t^*)$ fluctuent dans des intervalles disjoints, et $\mathfrak{D}(t) \rightarrow 1$. \square

Lemme 20 (Répétitions). *Soit $R := \# \{i \in [n] : U_i \in \{U_1, \dots, U_{i-1}\}\}$ le nombre de répétitions parmi n variables indépendantes U_1, \dots, U_n de loi uniforme sur un ensemble à m éléments. Alors,*

$$\mathbb{E}[R] \in \left[\frac{n^2}{2m} - \frac{n^3}{4m^2}, \frac{n^2}{2m} \right] \quad \text{et} \quad \text{Var}[R] \leq \frac{n^2}{2m}.$$

Démonstration. Notons $R = R_n$. Sachant R_n , la loi de $R_{n+1} - R_n$ est Bernoulli $\left(\frac{n-R_n}{m}\right)$. Ainsi,

$$\mathbb{E}[R_{n+1}|R_n] = \frac{n}{m} + \left(1 - \frac{1}{m}\right) R_n \quad \text{et} \quad \text{Var}[R_{n+1}|R_n] \leq \frac{n}{m}.$$

On en déduit que

$$\mathbb{E}[R_{n+1}] = \frac{n}{m} + \left(1 - \frac{1}{m}\right) \mathbb{E}[R_n] \quad \text{et} \quad \text{Var}[R_{n+1}] \leq \frac{n}{m} + \left(1 - \frac{1}{m}\right)^2 \text{Var}[R_n].$$

Comme $R_0 = 0$, une récurrence immédiate montre que $\text{Var}(R_n) \leq \mathbb{E}[R_n]$ et que

$$\mathbb{E}[R_n] = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{i}{m} \left(1 - \frac{1}{m}\right)^{n-1-i}.$$

L’encadrement $1 - \frac{n-1-i}{m} \leq \left(1 - \frac{1}{m}\right)^{n-1-i} \leq 1$ mène alors facilement au résultat. \square

Démonstration de la majoration. Réciproquement, montrons que $\mathfrak{D}(t) \rightarrow 0$ dès lors que

$$t \sim \alpha \log_2(n), \quad \text{avec} \quad \alpha > \frac{3}{2}. \quad (89)$$

Notons E l'événement “dans la liste (U_1, \dots, U_n) , chaque élément apparaît au plus deux fois”. Alors

$$\mathbb{P}(E^c) = \mathbb{P}(\exists 1 \leq i < j < k \leq n : U_i = U_j = U_k) \leq \frac{n^3}{4^t} = o(1). \quad (90)$$

Cela entraîne aussitôt que

$$d_{\text{TV}}(\mathbb{P}(X_\star^t = \cdot), \mathbb{P}(X_\star^t = \cdot | E)) \rightarrow 0, \quad (91)$$

et il nous reste donc à montrer que $d_{\text{TV}}(\mathbb{P}(X_\star^t = \cdot | E), \pi) \rightarrow 0$. Mais la loi de X_\star^t sachant E est simple à décrire : on part d'une permutation aléatoire X uniforme, et on réarrange $X(i)$ et $X(i+1)$ dans l'ordre croissant pour chaque $i \in \mathcal{I}$, où \mathcal{I} est une partie à R éléments de $\{1, \dots, n-1\}$ choisie uniformément. Le lemme suivant montre que la permutation Y obtenue est statistiquement indistinguable de X , du moment que le nombre de réarrangements effectués est petit, i.e.

$$\frac{R}{\sqrt{n}} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 0. \quad (92)$$

C'est bien le cas dans notre régime, grâce à (88). \square

Lemme 21. *Soit X une permutation uniforme, et Y la permutation obtenue en réarrangeant $X(i)$ et $X(i+1)$ dans l'ordre croissant pour chaque $i \in \mathcal{I}$, où \mathcal{I} est une partie à r éléments de $\{1, \dots, n-1\}$ choisie uniformément au hasard. Si $n \rightarrow \infty$ et $r = o(n^{1/2})$, alors la loi μ de Y vérifie*

$$d_{\text{TV}}(\mu, \pi) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0.$$

Par convexité de d_{TV} , cela reste vrai si r est aléatoire, sous la condition (92).

Démonstration. Pour un \mathcal{I} donné, il y a au moins 2^r permutations distinctes qui produisent la même permutation après le réordonnement ci-dessus. Ainsi,

$$\mathbb{P}(Y = x | \mathcal{I}) \geq \frac{2^r}{n!} \mathbf{1}_{(\forall i \in \mathcal{I}, x(i) < x(i+1))}.$$

En passant à l'espérance, et en utilisant l'uniformité de \mathcal{I} , on en déduit que

$$\mu(x) \geq \frac{2^r}{n!} \frac{\binom{f(x)}{r}}{\binom{n-1}{r}} = \frac{1}{n!} \prod_{i=0}^{r-1} \left(1 + \frac{2f(x) - n + 1 - i}{n - 1 - i} \right) \geq \frac{1}{n!} \left(1 + r \frac{2f(x) - (n-1) - r}{n-1} \right),$$

où l'on rappelle que $f(y) = \#\{i < n : x(i) < x(i+1)\}$. Mais on a la représentation

$$\begin{aligned} d_{\text{TV}}(\mu, \pi) &= \sum_{x \in S} \pi(x) \left(1 - \frac{\mu(x)}{\pi(x)} \right)_+ \\ &\leq \frac{r}{n} \mathbb{E} [|2f(X) - (n-1) - r|] \leq \frac{r^2}{n} + \frac{r}{n} \sqrt{\text{Var}(f(X))}, \end{aligned}$$

puisque $\mathbb{E}[f(X)] = \frac{n-1}{2}$. Ce terme tend bien vers zéro puisque $r = o(\sqrt{n})$ et $\text{Var} f(X) = O(n)$. \square