

Table des matières

Introduction	4
1 Motivation du sujet	6
2 Un résumé des notions biologiques utile à l'identification des protéines	8
2.1 Les protéines, les peptides et les acides aminés	8
2.2 Identification des protéines	10
2.2.1 La spectrométrie de masse	10
2.2.2 Digestion des protéines à la Trypsine	14
2.2.3 La chromatographie liquide en phase inversée	14
2.2.4 La fragmentation des peptides	14
2.2.5 Que se passe-t-il dans le spectromètre de masse ?	17
2.2.6 De la protéine au spectre de masse et vice-versa	19
2.2.7 Le séquençage de NOVO	23
3 Les chaînes de Markov	24
3.1 Définitions	24
3.2 La relation de Chapman-Kolmogorov	30
3.3 Distribution d'une chaîne de Markov homogène	33
3.4 La propriété forte de Markov	38
3.5 Mesures invariantes	44
3.6 Irréductibilité, récurrence et transience	45
3.7 Propriétés sur les temps de retours et les excursions d'une chaîne de Markov	49
3.8 Résultats de convergence	58
3.9 Estimation de la matrice de transition	66
3.9.1 Rappel théorique sur l'estimateur du maximum de vraisemblance	66
3.9.2 L'estimation des probabilités de transition	67
4 Les modèles de Markov cachés	72
4.1 Introduction	72
4.2 Définition	73
4.3 Lemmes préparatoires	75
4.4 Les trois problèmes liés aux Modèles de Markov Cachés	83

4.4.1	Le problème de l'évaluation	84
4.4.2	Le problème du décodage	86
4.4.3	Le problème de l'apprentissage	90
5	Application biologique	97

Remerciements

Je remercie chaleureusement les deux directeurs de ce mémoire Monsieur Christophe TROESTLER et Monsieur Ruddy WATTIEZ pour les remarques toujours pertinentes qu'ils m'ont formulées lors des différents entretiens que j'ai pu avoir avec eux, pour m'avoir transmis une partie de leurs connaissances et pour avoir rendu possible l'élaboration de ce mémoire.

J'exprime ma vive reconnaissance au corps professoral y compris les assistants de l'Institut de Mathématique de l'UMONS pour la qualité des cours enseignés ainsi que pour leur accueil chaleureux.

J'exprime ma profonde gratitude envers mes parents et tous les membres de ma famille qui m'ont apporté leur soutien moral, leurs encouragements tout au long de ces années d'études et qui, de près ou de loin ont participé à la réalisation de ce travail. Un remerciement tout particulier est adressé à mon oncle Bernard.

Je remercie tous mes amis et mes amies rencontrés durant ces cinq années d'étude supérieure pour leur appui et je profite de l'occasion pour dire à ces derniers que j'ai apprécié l'entraide que nous avons partagé. Je tiens particulièrement à remercier Corentin pour son écoute et les conseils qu'il m'a prodigués tout au long de cette aventure.

Je terminerai par remercier Jean-François pour sa compréhension face au temps consacré aux études ainsi que pour le soutien sans faille et le bonheur qu'il m'a apportés durant ces années d'études.

Introduction

Ce mémoire fait référence à deux disciplines scientifiques à savoir la biologie et plus particulièrement l'analyse protéomique et les probabilités par le biais des modèles de Markov cachés.

L'analyse protéomique est l'analyse systématique des protéines dans un système biologique. L'objectif poursuivi est de décrire de façon détaillée les structures de ces systèmes pour mieux comprendre leur fonctionnement et leur mécanisme de contrôle. Dès le début des années 90, l'analyse protéomique à l'aide de la spectrométrie de masse, devient la technique analytique essentielle dans l'étude de la structure des protéines. Depuis lors, cette technique d'analyse n'a cessé de progresser tant au niveau des équipements que des techniques de séparation, ce qui a permis la croissance constante des banques de données relatives aux protéines identifiées.

Les chaînes de Markov, du nom de son inventeur Andreï Markov datent du début du $XX^{\text{ème}}$ siècle, date à laquelle on obtient les premiers résultats. Elles permettent de modéliser l'évolution d'un système au cours du temps en tenant compte d'une condition relative à l'état du système au moment présent. Les chaînes de Markov, ainsi que les modèles de Markov cachés ont des applications multiples dans de nombreux domaines tels que la physique, la finance, les assurances et dans le cas qui nous concerne la biologie.

Ce mémoire est structuré en 5 chapitres. Dans le premier chapitre nous développons et nous tentons d'expliquer la place de notre travail au sein du projet global faisant appel à une synergie entre l'Institut de mathématique et celui de biologie. L'objectif commun étant l'identification des protéines au moyen d'un modèle probabiliste.

Dans le second chapitre nous retraçons les notions biologiques indispensables à la compréhension du cheminement à parcourir pour identifier les peptides, éléments constitutifs des protéines et du fonctionnement d'un spectromètre de masse.

Le troisième chapitre sera principalement consacré aux chaînes de Markov. Nous les définissons, en expliquons toutes leurs propriétés associées. Nous envisageons également les notions et estimations de probabilités dites de transition ainsi que leur convergence.

Dans le quatrième chapitre nous nous intéressons aux modèles de Markov cachés et principalement aux trois types de problèmes auxquels ils peuvent apporter une solution.

L'application des modèles de Markov cachés aux données biologiques obtenues en laboratoire fait l'objet du dernier chapitre de ce mémoire. Nous y faisons figurer les différentes étapes parcourues, les algorithmes et les premiers résultats obtenus.

Chapitre 1

Motivation du sujet

La génomique est une discipline très utilisée dans le domaine de la biologie. Elle a pour objectif, d'analyser le fonctionnement d'un organisme, d'un organe,... par le biais de l'étude structurale et fonctionnelle du génome. *Le génome est l'ensemble du matériel génétique d'un individu ou d'une espèce codé dans son ADN*, cette définition du génome se retrouve dans [?]. Il est constitué de régions codantes, qui correspondent aux gènes, et des régions non-codantes. Les gènes sont des portions d'ADN, ce sont donc des séquences de nucléotides qui contiennent toute l'information nécessaire pour synthétiser les protéines. Dans la structure de l'ADN, il existe quatre nucléotides différents correspondant à quatre bases azotées différentes : l'adénine (A), la guanine (G), la thymine (T), la cytosine (C). La lecture de l'ADN se fait par groupe de trois nucléotides, qui forment des codons. La phase ouverte (ORF, Open Reading Frame) est la région de l'ADN qui sépare deux codons STOP. Dans celle-ci, une séquence codante (CDS, CoDing Sequence, région traduite en protéine) commence par un codon START et se termine par un codon STOP. De manière générale, un codon (3 nucléotides) code un acide aminé. Mais puisqu'il existe 64 codons différents pour seulement 20 acides aminés différents, un même acide aminé peut-être codé par plusieurs codons. Ce phénomène complique les analyses et est appelé la dégénérescence du code génétique. Le codon AUG est le codon START, mais ce dernier code également pour l'acide aminé « méthionine ». Dès lors, un codon START ne représente pas nécessairement le début d'une zone codante puisqu'il peut également coder une méthionine. Pour tenter de déterminer si le codon AUG est un codon START ou pas, il faut observer la séquence qui se trouve en amont de ce codon. Si celle-ci possède les caractéristiques spécifiques représentant une séquence promotrice, alors le codon AUG est considéré comme un codon START. Par ailleurs, un codon STOP détermine bien la fin d'une zone codante. En réalité, les zones codantes peuvent-être des successions d'exons et d'introns. Lors de la première étape de la synthèse des protéines ; transcription de l'ADN en ARN (messenger), les exons des zones codantes sont copiés en molécule d'ARN puisque seule cette partie de la zone codante peut coder les protéines. La modification au niveau des bases nucléotides est la transformation de la base azotée thymine dans l'ADN en uracile dans l'ARN. Lors de la traduction, la deuxième étape de la synthèse des protéines, les codons de l'ARN (messenger) sont interprétés en acides aminés et les successions d'acides aminés forment les protéines.

Le travail de recherche des ORF est primordial pour les biologistes puisque déterminer de manière précise les caractéristiques liées aux cellules et cachées dans les fonctions des protéines, est l'une de leur tâche principale. Actuellement, la prédiction des ORF occasionne un certain nombre d'erreurs. Ces erreurs peuvent provenir, soit d'une mauvaise identification du codon AUG comme un codon START, et donc nous trouvons une zone codante qui n'en est en réalité, pas une, soit d'un oubli d'ORF.

L'objectif du projet, dont ce mémoire en fait partie, est de procéder au raisonnement inverse, c'est-à-dire partant du postulat qu'une protéine provient nécessairement d'une zone codante, nous pouvons valider ou corriger les ORF prédites grâce aux protéines expérimentalement identifiées par une approche « à haut débit » telle que la spectrométrie de masse, c'est ce que l'on appelle la protéogénomique. Le problème est un peu plus compliqué que simplement regarder si une protéine se trouve dans une zone codante du génome ou non. En réalité, il existe six phases de lecture d'un génome obtenu expérimentalement. Puisque chaque codon est constitué de trois nucléotides, la lecture peut commencer au premier, au deuxième ou au troisième nucléotide. Mais la lecture peut se faire aussi bien de gauche à droite que de droite à gauche, ce qui engendrent six phases de lecture différentes. Le problème se transforme alors à identifier si les protéines se trouvent bien dans une de ces six phases de lecture. Dès lors, si des protéines sont identifiées expérimentalement et qu'elles ne se correspondent pas à une ORF, cela signifie qu'un ORF a été oublié. Ce raisonnement inverse permet de valider et/ou de corriger les prédictions des différents ORF. Dans le cadre de ce mémoire, nous nous concentrerons sur la partie du projet qui consiste à l'analyse des données expérimentales obtenues par spectrométrie de masse et permettant l'identification de l'ensemble des protéines exprimés par un génome (protéome).

Chapitre 2

Un résumé des notions biologiques utile à l'identification des protéines

Avant de développer la technique utilisée pour identifier les protéines, nous allons introduire une série de notions utiles à sa bonne compréhension. Ce chapitre abordera entre-autre la théorie sur la spectrométrie de masse mais aussi la notion de fragmentation des peptides et du séquençage de novo. Ce chapitre se base majoritairement sur les notions des livres référencés dans [?] et [?], certaines images et certains explications se retrouvent dans [?] et [?].

2.1 Les protéines, les peptides et les acides aminés

Les **protéines** sont des macro-molécules biologiques essentielles au bon fonctionnement de tous les êtres vivants, des bactéries aux êtres humains, en passant par les plantes. Elles sont indispensables dans la mesure où elles assurent presque toutes les fonctions d'un organisme. Par exemple, il existe des protéines de transport (*le transport de l'oxygène*), des protéines structurelles (*elles assurent la cohésion des tissus*), les enzymes (*les protéines catalysent les réactions chimiques*), ...

Une protéine est un polymère d'acides aminés, autrement dit c'est une succession d'acides aminés, liés les uns aux autres par les liaisons peptidiques. Les protéines peuvent avoir une longueur variable de 100 à 10 000 acides aminés et être constituées d'une seule ou plusieurs chaînes d'acides aminés qui s'assemblent. Nous pouvons comparer une protéine à un train dont chaque acide aminé constituerait un wagon. Une chaîne d'acides aminés est appelée protéine si celle-ci possède un grand nombre d'acides aminés, et **peptide** pour des assemblages de petite taille, inférieurs à 100 acides aminés.

Les **acides aminés** sont des molécules possédant :

1. un groupement amine (NH_2)
2. un groupement acide carboxylique ($COOH$)
3. une chaîne latérale ou radical R

Le radical est la seule portion variable d'un acide aminé à l'autre. Il permet donc de déterminer la nature de l'acide aminé puisque le reste est invariant. Toutes les protéines sont construites à partir de 20 acides aminés différents. Il existe donc 20 radicaux différents. L'atome de carbone sur lequel est fixé le groupement amine (NH_2) et le groupement acide carboxylique ($COOH$) est appelé par convention le carbone alpha.

A pH physiologique (pH 7,2), les acides aminés s'ionisent et se retrouvent sous la forme d'un Zwiterion (figure 2.1).

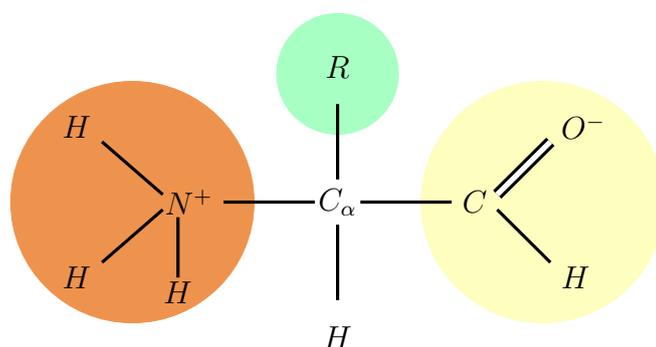


FIGURE 2.1 – Structure générale d'un acide aminé à pH 7,2.

Une classification des acides aminés peut-être réalisée en utilisant le caractère hydrophobe des radicaux. Certains acides aminés sont hydrophiles alors que d'autres sont hydrophobes. Le table 2.1 reprend cette caractéristique pour chacun des acides aminés. Pour des raisons pratiques dans le stockage des protéines dans les bases de données, le nom générique de chaque acide aminé s'est vu réduit premièrement à 3 lettres mais très vite à 1 lettre. La lettre représentant l'acide aminé est généralement la première lettre du nom générique sauf quand celle-ci représente déjà un autre acide aminé.

Comme cité précédemment, les acides aminés sont liés les uns aux autres par une liaison peptidique. La liaison peptidique se fait entre le groupement acide ($COOH$) d'un acide aminé et le groupement amine (NH_2) de l'autre. La condensation de deux acides aminés dont les radicaux sont, respectivement, R_1 et R_2 , engendre la perte d'une molécule d' H_2O . Un dipeptide est alors obtenu. Le mot dipeptide signifie simplement que c'est un peptide contenant seulement deux acides aminés. La partie supérieure de la figure 2.2 illustre cette réaction.

Par convention internationale, la séquence d'une protéine, c'est-à-dire l'agencement des acides aminés les uns derrière les autres se lit de gauche à droite. Le premier acide aminé possédant son extrémité amine libre ($-NH_2$) est appelé **acide aminé N-terminal**. Par ailleurs, le dernier acide aminé de la protéine possède à son extrémité droite une fonction carboxyle libre ($-COOH$) et est appelé **acide aminé C-terminal**. Un exemple de peptide, contenant quatre acides aminés, est représenté

dans la partie inférieure de la figure 2.2.

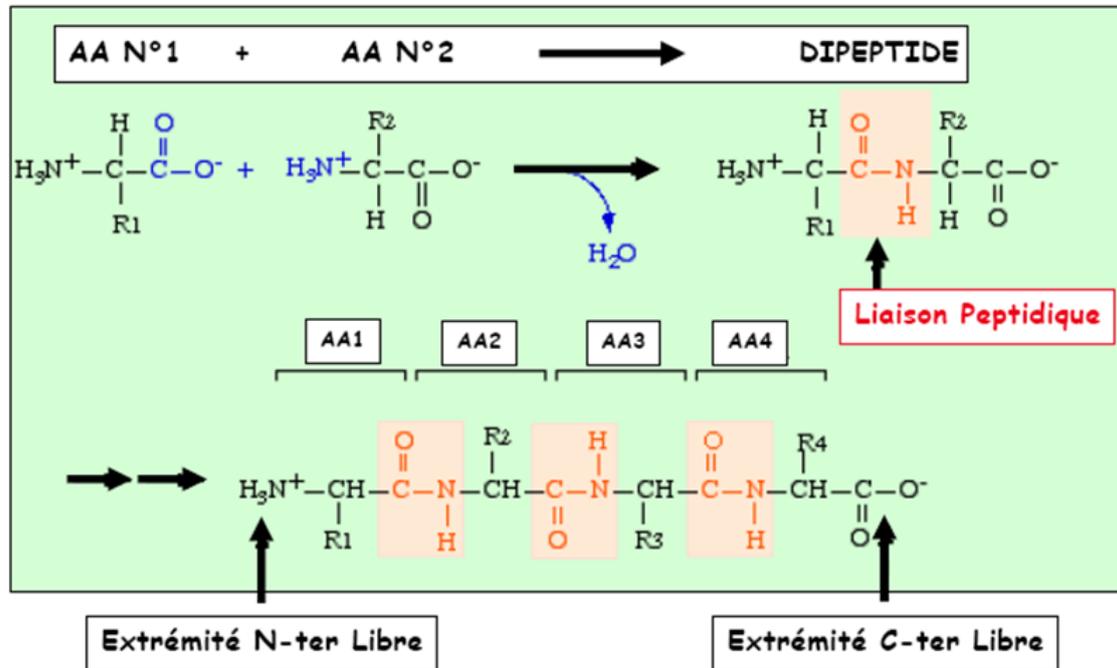


FIGURE 2.2 – Les liaisons peptidiques et les fragments N et C terminaux.

2.2 Identification des protéines

2.2.1 La spectrométrie de masse

Pour identifier les protéines, nous allons nous référer à la spectrométrie de masse. Dans un premier temps, nous nous attarderons sur cette technique.

La spectrométrie de masse, est actuellement l'outil le plus performant mis au point ces vingt dernières années pour l'analyse protéomique. L'analyse protéomique consiste à analyser les protéines présentes dans une cellule en vue de les identifier, de les caractériser et de les quantifier afin de mieux comprendre comment varient leurs propriétés dans l'espace, le temps et les états cellulaires. Elle permet de recueillir un maximum d'informations, avec précision et rapidité. La spectrométrie de masse est une technique de détection hyper sensible qui permet de mettre en évidence des structures moléculaires. Son objectif principal est de déterminer avec une grande précision la masse des ions et leur structure. Pour une analyse protéomique détaillée, celle-ci fera appel à un pré-fractionnement préalable des différentes molécules par une chromatographie liquide, une méthode de séparation couplée « on-line » au spectromètre de masse que nous développerons plus loin dans cette section.

Nom générique	Code 3 lettres	Code 1 lettre	Hydrophobicité	Masse mono-isotopique
Alanine	Ala	A	Hydrophobe	71,03711
Arginine	Arg	R	Hydrophyle	156,10111
Asparagine	Asn	N	Hydrophyle	114,04293
Aspartate	Asp	D	Hydrophyle	115,02694
Cystéine	Cys	C	Hydrophyle	103,00918
Glutamate	Glu	E	Hydrophyle	129,04259
Glutamine	Gln	Q	Hydrophyle	128,05858
Glycine	Gly	G	Hydrophobe	57,02146
Histidine	His	H	Hydrophyle	137,05891
Isoleucine	Ile	I	Hydrophobe	113,08406
Leucine	Leu	L	Hydrophobe	113,08406
Lysine	Lys	K	Hydrophyle	128,09496
Méthionine	Met	M	Hydrophobe	131,04048
Phénylalanine	Phe	F	Hydrophobe	147,06841
Proline	Pro	P	Hydrophobe	97,05276
Sérine	Ser	S	Hydrophyle	87,03203
Thréonine	Thr	T	Hydrophyle	101,04768
Thryptophane	Trp	W	Hydrophobe	186,07931
Tyrosine	Tyr	Y	Hydrophobe	163,06333
Valine	Val	V	Hydrophobe	99,06841

TABLE 2.1 – Les acides aminés.

Le spectromètre de masse est constitué de différents éléments à savoir : la source d'ionisation, le filtre, la chambre de collision, le séparateur, le détecteur et la partie qui traite le signal pour générer le spectre de masse (= l'ordinateur). Les différents éléments constituant un spectromètre de masse sont schématisés sur la figure 2.3. Ces instruments sont de manière générale appelés spectromètres de masse en tandem.

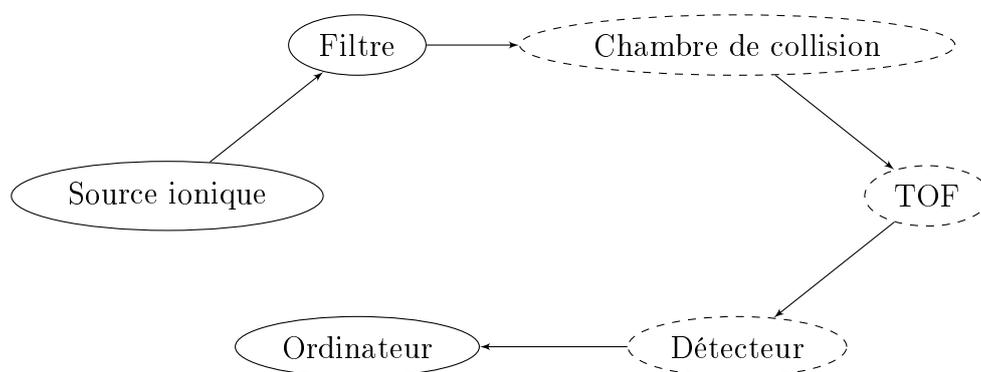


FIGURE 2.3 – Un spectromètre de masse.

1. Source d'ionisation

Un spectromètre de masse ne sépare que des ions en phase gazeuse. Le passage par la source d'ionisation a donc pour objectif de transformer les protéines ou

les peptides, préalablement dissous dans un solvant à pH acide (≤ 2) en ions en phase gazeuse. Pour y arriver, plusieurs types de sources ioniques existent mais nous ne détaillerons ici qu'un seul, à savoir la source électrospray (notée ESI). Celle-ci consiste à appliquer une différence de potentiel entre le capillaire, à travers lequel la solution contenant les protéines s'écoule et l'entrée du séparateur, appelée la contre-électrode. De ce fait un champ électrique est créé. Un cône, dit cône de Taylor apparaît par attraction de la contre-électrode. Des gouttelettes porteuses de plusieurs charges positives se forment. Ensuite, une évaporation du solvant pulvérisé est réalisée en augmentant la température dans l'enceinte de la source ionique. Des gouttes de taille réduite sont ainsi obtenues. Cette désolvation entraînera une augmentation de la densité de charge. Arrivé à un certain seuil, appelé limite de stabilité de RAYLEIGH, une succession d'explosions Coulombiennes vont se produire au fur et à mesure de l'évaporation du solvant jusqu'à l'obtention des ions complètement désolvatés.

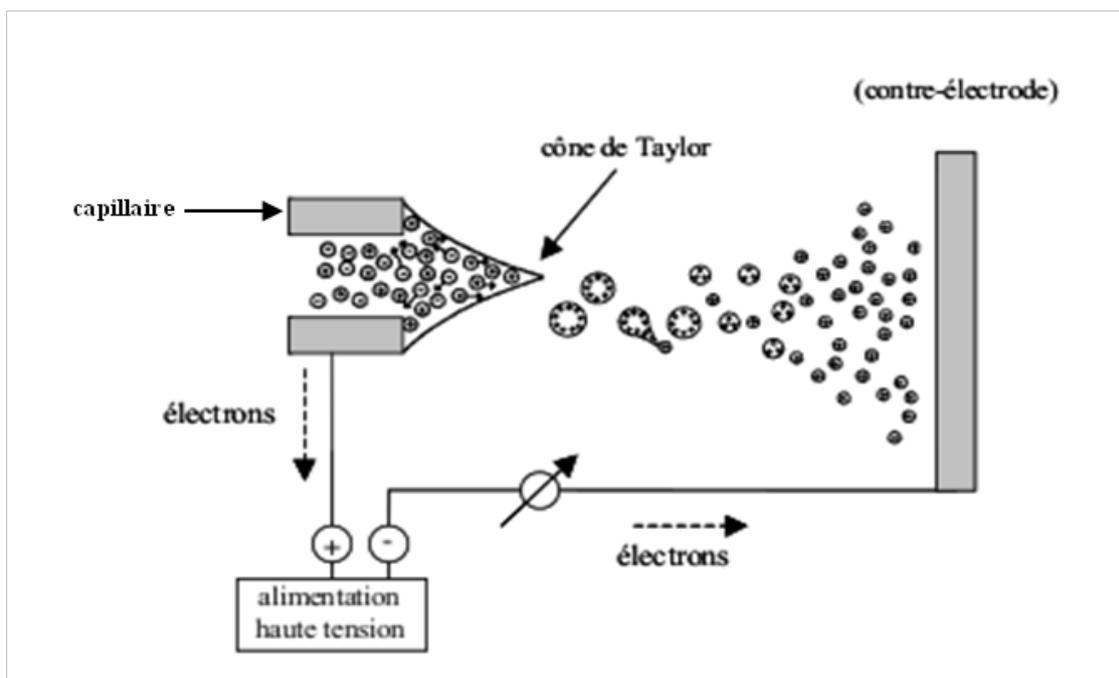


FIGURE 2.4 – La source ESI.

2. Le filtre

Le filtre permet de sélectionner et d'isoler un ion appelé ion parent ayant un rapport masse sur la charge (noté m/z) déterminé. Les ions ayant un rapport m/z supérieur ou inférieur à celui choisi seront éliminés.

3. Chambre de collision

Les ions parents, ayant un rapport m/z déterminé et dopés en énergie cinétique, entrent en collision avec des molécules d'hélium présentes dans la chambre de collision. Les collisions entraînent la fragmentation de l'ion parent et donnent

donc naissance à des ions fragments appelés **ions fils**.

4. TOF, « Time of Flight »

Le TOF est l'élément central d'un spectromètre de masse. Il réceptionne les ions produits et se charge de les séparer suivant leur rapport masse sur charge (m/z). Le principe du séparateur « TOF » est de distinguer les ions par la mesure du temps qu'ils mettent à parcourir un tube sous haut vide, et sans champ électrique. Mais puisque le temps de vol (t) est proportionnel au rapport masse sur charge (m/z), connaissant t et la charge de l'ion, la masse peut en être déduite.

5. Le détecteur

Il est placé à la fin du tube TOF. Il réceptionne les ions et les transforme en signal électrique. Plus les ions sont nombreux et plus le courant est important. Le détecteur a comme objectif d'amplifier un courant ionique très faible en un courant mesurable, par le biais d'un multiplicateur d'électrons.

6. L'ordinateur

Il permet de traiter les données reçues par le détecteur afin d'obtenir les spectres de masse.

La forme générale d'un spectre de masse est un graphique dont les rapports masse sur charge des différents ions sont représentés sur les abscisses. Seul les ions chargés s'y retrouvent. Sur les ordonnées, nous retrouvons leur intensité. Les formules du calcul de masse des ions sont développées dans la sous-section : *De la protéine au spectre de masse et vice-versa*. La figure 2.5 représente un spectre de masse expérimental obtenu par un spectromètre de masse de haute résolution (ABSciex) représentant le peptide ASFNADDLEK.

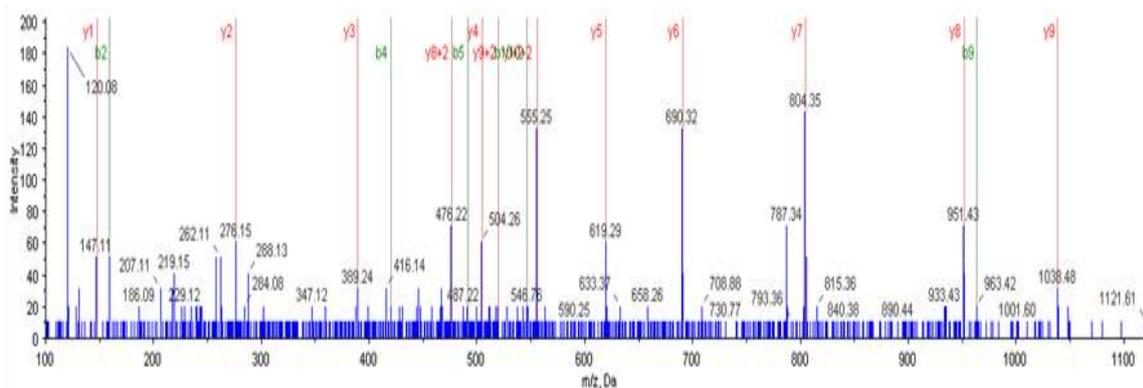


FIGURE 2.5 – Le spectre de masse expérimental du peptide ASFNADDLEK.

2.2.2 Digestion des protéines à la Trypsine

Dans le type d'analyse protéomique que nous détaillons dans ce chapitre, la digestion préalable des protéines à la trypsine fait partie d'une de ces étapes. Pour résumer simplement, la trypsine est une enzyme¹ permettant de « couper » une protéine au niveau de ses liaisons peptidiques à droite de deux acides aminés. Ces derniers sont la Lysine et l'Arginine. Toutefois, lorsqu'une Lysine ou une Arginine est suivie d'une Proline, la coupure ne se réalise pas. L'objectif est de faciliter l'identification des protéines, en passant par celle des peptides issus de sa digestion à l'aide de la trypsine. Pour des raisons propres aux techniques liées à la spectrométrie de masse, l'identification des protéines sans passer par le biais des peptides reste relativement inefficace. Par exemple, la fragmentation d'une protéine nécessite beaucoup plus d'énergie. Or dans ce cas présent, le risque que d'autres liaisons que les liaisons peptidiques se rompent est fortement augmenté, ce qui engendre des pertes d'informations.

2.2.3 La chromatographie liquide en phase inversée

Avant de rentrer dans le spectromètre de masse, les peptides tryptiques obtenus sont séparés par chromatographie liquide en phase inversée. Dans une cellule, le nombre de protéines différentes varient de 10.000 à 20.000. Le traitement à la trypsine de l'ensemble de ces protéines engendrerait de 100.000 à 300.000 peptides tryptiques. Injecter ce grand nombre de peptides d'un coup dans la source ionique est déraisonnable au niveau de l'efficacité d'analyse. Alors, l'objectif de la chromatographie liquide préalable à l'analyse par spectrométrie de masse est de préfractionner ces peptides. Ce préfractionnement est obtenu en séparant les peptides en fonction de leur caractère hydrophobe. La chromatographie liquide en phase inversée est une technique d'analyse séparatrice, très souvent utilisée en biologie et en chimie. Son principe repose sur la séparation de composés solubilisés dans un solvant de nature organique mais soluble dans l'eau (phase liquide), à travers une phase stationnaire hydrophobe (grains de silice comportant des chaînes hydrocarbonées de 18 carbones). Les peptides hydrophyles ayant peu d'affinité avec la phase stationnaire seront élués très rapidement de la colonne chromatographique tandis que les peptides hydrophobes auront tendance à s'adsorber². Leur élution ne pourra se réaliser qu'en augmentant le caractère hydrophyle de la phase mobile.

2.2.4 La fragmentation des peptides

Une fois préfractionnés, des groupes de peptides sont introduits « on-line » dans le spectromètre de masse. Après ionisation, ces peptides ou plutôt ions, subissent une filtration en fonction de leur m/z . Un peptide ainsi isolé selon son rapport m/z subit une fragmentation. La fragmentation des peptides se déroule dans une chambre de

1. Une enzyme est une protéine qui joue un rôle de catalyseur biologique, c'est-à-dire de composé qui augmente la vitesse d'une réaction biochimique [?].

2. Définition reprise du « le Petit Larousse illustré »(1993) : Fixer par adsorption. Et l'*adsorption* est la pénétration superficielle d'un gaz ou d'un liquide dans un solide, dans un autre liquide.

collision. A basse énergie, les liens autour des liaisons peptidiques sont affaiblies et se rompent préférentiellement. Trois types de liaisons peuvent être rompues lors de la fragmentation :

- Entre les deux atomes de carbone : $C_\alpha - C$
- Entre l'atome de carbone et l'atome d'azote : $C - N$
- Entre l'atome d'azote et l'atome de carbone (liaison peptidique) : $N - C_\alpha$

Ces différentes liaisons sont représentées dans la figure 2.6. Le premier C_α est celui d'un acide aminé n et le deuxième est celui d'un autre acide aminé $n + 1$ qui lui est juxtaposé.

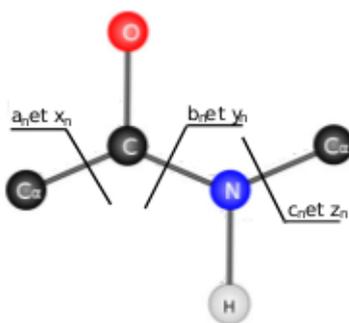


FIGURE 2.6 – Les différents types de liaisons

Une nomenclature bien spécifique a été établie pour nommer les fragments obtenus après qu'une liaison soit rompue. Si la cassure se passe au niveau du premier type de liaison, alors nous obtenons des fragments a_n et x_n . De manière similaire, la coupure au niveau de la deuxième liaison donne des fragments b_n et y_n . Enfin, au niveau de la troisième liaison, nous pouvons observer des fragments c_n et z_n . Les ions a_n , b_n et c_n sont des ions N-terminaux tandis que les autres sont des ions C-terminaux. Comme nous l'illustrons dans l'exemple qui suit, la numérotation N-terminaux, se font de gauche (N-terminal) à droite (C-terminal), tandis que les C-terminaux, la numérotation et la lecture sont inversées.

Par exemple, pour un peptide constitué de quatre acides aminés dont les radicaux sont R_1 , R_2 , R_3 et R_4 , l'ensemble des ions possibles, c'est-à-dire lorsque nous regardons toutes les fragmentations préférentielles possibles, est a_1 , a_2 , a_3 , x_1 , x_2 , x_3 , b_1 , b_2 , b_3 , y_1 , y_2 , y_3 , c_1 , c_2 , c_3 , z_1 , z_2 , z_3 . L'ion a_1 est constitué d'un groupement amine, du carbone alpha, d'un hydrogène et d'un radical R_1 . Par contre, l'ion x_3 est associé à l'ion a_1 , dans la mesure où l'ion x_3 est le peptide total auquel l'ion a_1 est extrait. Il en va de même pour les suivants. Ce même principe de complémentarité se produit entre les ions b_n et y_n et entre c_n et z_n . Chacun de ces ions est représenté dans la figure 2.7.

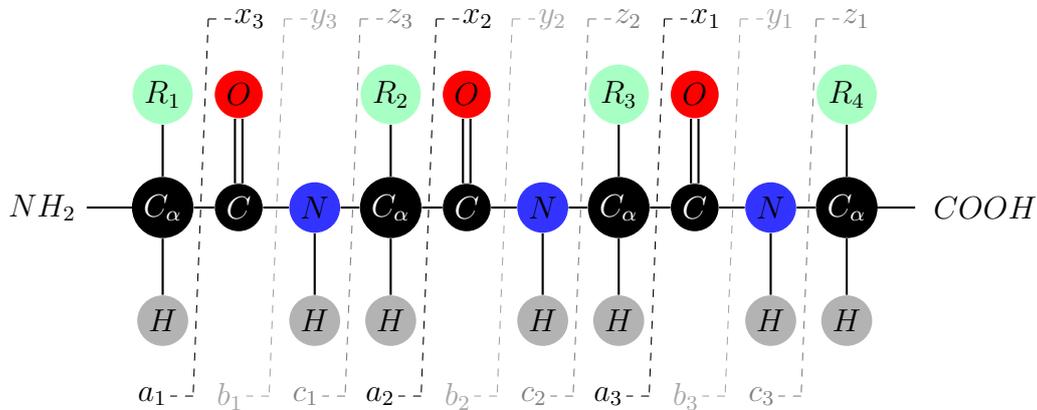
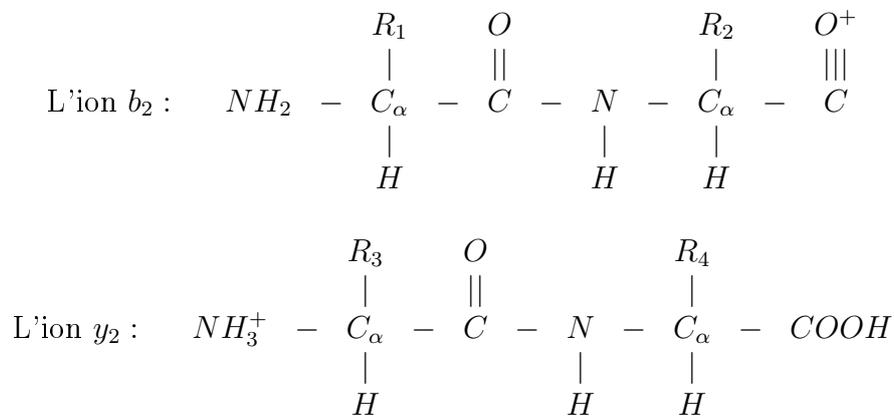
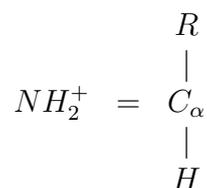


FIGURE 2.7 – La nomenclature liée aux ions.

A basse énergie, les ions principalement générés sont les ions b_n et y_n puisque c'est cette liaison qui se fragilise le plus à ce niveau d'énergie. La structure des ions b_2 et y_2 d'un ion parent mono-chargé, contenant quatre acides aminés, est explicitement représentée ci-dessous.



Lors de la fragmentation, il se peut qu'un ion subisse une fragmentation à la fois du côté N-terminal et C-terminal. Ces types de fragments portent le nom de « fragments internes ». De plus, des ions immoniums peuvent également apparaître. Un ion immonium est obtenu lorsqu'une fragmentation de type y est suivie d'une fragmentation de type a . De ce fait, les ions immoniums sont de la forme :



Les ions immoniums se retrouvent dans la région des masses faibles, plus précisément inférieure à 150 Da³.

Pour terminer cette sous-section, nous voulons encore insister sur un point. Le solvant dans lequel les peptides sont dissous est à pH acide (≤ 2). Or, les acides aminés lysine et arginine ont la particularité d'être protonés (ils gagnent un proton, ou dit autrement, ils captent un ion H^+) en milieu acide. Il en résulte que tous les peptides tryptiques ont tendance à être doublement chargés ; une charge du côté N-terminal (sur le groupement amine) et une charge sur le côté C-terminal, qui contient nécessairement le radical « lysine » ou « arginine ». Des peptides triplement chargés sont encore assez fréquents. Par exemple, si dans un peptide, nous retrouvons Arg Pro, alors l'arginine peut capter un proton, et donc le peptide peut être triplement chargé. Il n'est pas impossible qu'un peptide ait un total de charges plus grand que 3, mais cela ne se produit que très rarement.

2.2.5 Que se passe-t-il dans le spectromètre de masse ?

Le spectromètre de masse permet de construire des spectres de masses à certains instants précis comme nous l'explique le paragraphe ci-dessous.

Les peptides tryptiques préfractionnés préalablement par chromatographie liquide en phase inversée sont analysés « on-line » par un spectromètre de masse en tandem. Cette analyse comporte quatre étapes qui peuvent être résumées comme suit :

- Les peptides élués à un temps donné (t_1) de la chromatographie sont ionisés, puis séparés en fonction de leur m/z à l'aide d'un analyseur TOF. Nous obtenons ainsi un spectre de masse de masse reprenant l'ensemble des ions / peptides provenant du temps t_1 de la chromatographie et séparé en fonction du rapport m/z . Un exemple théorique d'un tel spectre est celui noté (a) dans la figure 2.8.
- A l'aide du filtre, un ion / peptide de rapport m/z donné est filtré spécifiquement. Un exemple de spectre correspondant à cette étape est le spectre (b) de la figure 2.8.
- Celui-ci subit une fragmentation dans une chambre de collision.
- Les fragments obtenus sont séparés en fonction de leur m/z à l'aide du séparateur TOF. Nous obtenons dans ce cas un spectre de fragmentation dont l'analyse permettra de déduire la séquence de peptide correspondante. Le spectre (c) de la figure 2.8 en est un exemple.

Étant donné la rapidité du spectromètre de masse de haute résolution utilisé actuellement, 50 spectres MS/MS peuvent être obtenus en trois secondes, ce qui correspond à 50 ions / peptides qui peuvent être filtrés dans un premier temps et subir dans

3. Da est l'abréviation de Dalton. Le Dalton est l'unité de masse des atomes.

un deuxième temps les étapes 2-4 avant de passer à d'autres peptides élués de la chromatographie à un temps t_2 .

Les spectromètres de masse sont tellement résolutifs qu'ils sont capables de séparer des entités moléculaires de formule générale identique et comportant des isotopes différents. Parmi l'ensemble des isotopes, le *Carbone-12/13*, l'*Hydrogène-1/2*, l'*Azote-14/15* et l'*Oxygène-16/17/18* sont les principaux rencontrés au niveaux des polypeptides⁴. L'ensemble des différents pics obtenus grâce aux différents isotopes présents au niveau des ions est appelé la **distribution isotopique** de l'ion. Le premier pic représente l'ion dont l'isotope le plus abondant est considéré, à savoir C-12, H-1, N-14 et l'O-16 ; quant au deuxième, la seule différence est qu'un des C n'est plus du carbone 12 mais du carbone 13. Les autres pics sont obtenus en considérant les autres isotopes.

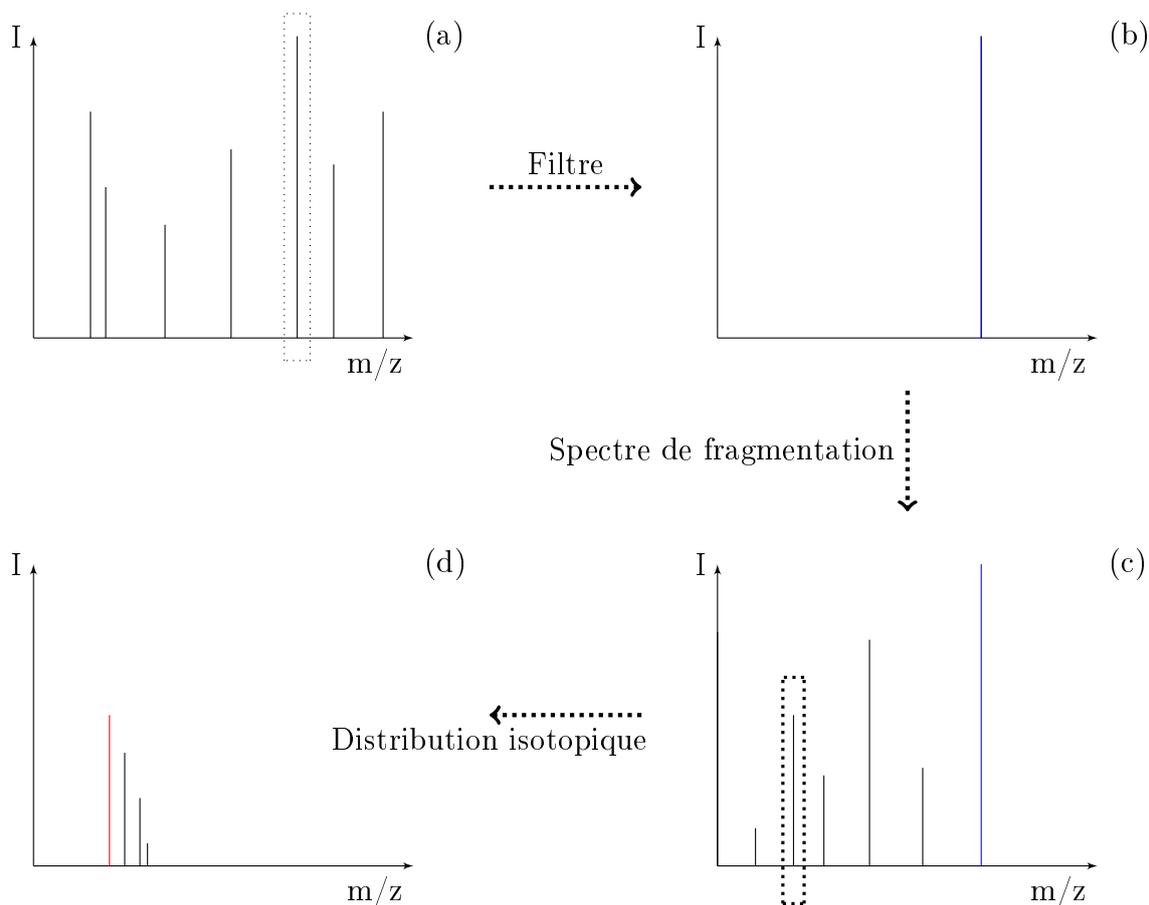


FIGURE 2.8 – Représentation schématique des différentes étapes d'une analyse par spectrométrie de masse en tandem.

4. Un polypeptide est une chaîne de 10 à 100 acides aminés reliés par des liaisons peptidiques.

2.2.6 De la protéine au spectre de masse et vice-versa

Dans cette sous-section, nous allons décrire les différentes étapes pour obtenir le spectre de masse théorique des différents peptides tryptiques associés à une protéine. Pour cela, nous nous basons sur un exemple de protéine, donnée sous sa forme primaire, (succession d'acides aminés). La protéine suivante est composée de 113 acides aminés.

AFKGILSNADIKAAEAACFKEGSFDEDGFYAKVGLDAF
SADELKKLFKIADEDKEGFIEEDELKLFLIAFAADLRA
LTDAETKAFLKAGDSDGDGKIGVDEFGALVDKWGAKG

Comme il en a été annoncé précédemment, la protéine est tout d'abord transformée en peptides à l'aide de l'enzyme protéolytique : la trypsine. Cette dernière produit des peptides qui se terminent soit par une « lysine » soit par une « arginine ».

En supposant que toutes les coupures enzymatiques se réalisent, les peptides obtenus sont :

AFK GILSNADIK AAEAACFK EGSFDEDGFYAK VGLDAFSADELK
K LFK IADEDK EGFIEEDELK LFLIAFAADLR ALTDAETK AFLK
AGDSDGDGK IGVDEFGALVDK WGAK G

Dès à présent, nous allons nous concentrer sur le deuxième peptide afin de déterminer son spectre de masse théorique.

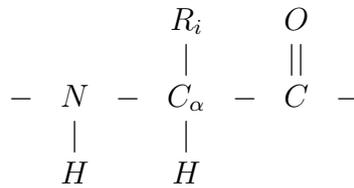
Le calcul de la masse totale du peptide, sans tenir compte des charges, se trouve ci-dessous. Les masses mono-isotopiques se trouvent dans la table 2.1. La masse de l'hydrogène est de 1,00782504667 et celle de l'hydroxyde est de 17,002739677.

$$\begin{aligned}
 M &= 1,00782504667 \\
 &+ 57,021463735 + 113,084064015 + 113,084064015 \\
 &+ 87,032028435 + 114,042927470 + 71,037113805 \\
 &+ 115,026943065 + 113,084064015 + 128,094963050 \\
 &+ 17,002739677 \\
 &= 929,5181963283
 \end{aligned}$$

Avant de déterminer, la masse de tous les ions b et y de notre peptide, donnons les équations permettant de les calculer. Nous donnons, également les relations pour les ions a et x , et c et z . Supposons un peptide comportant n acides aminés. Pour j , le $j^{\text{ème}}$ fragment d'ion du peptide :

$$\begin{array}{l}
a_j = [\text{N-terme}] + \sum_{i=1}^j aa_i - [\text{CO}] \\
b_j = [\text{N-terme}] + \sum_{i=1}^j aa_i \\
c_j = [\text{N-terme}] + \sum_{i=1}^j aa_i + [\text{NH}_2]
\end{array}
\left\| \begin{array}{l}
x_j = [\text{C-terme}] + \sum_{i=n-j+1}^n aa_i + [\text{CO}] \\
y_j = [\text{C-terme}] + \sum_{i=n-j+1}^n aa_i + [\text{NH}_2] \\
z_j = [\text{C-terme}] + \sum_{i=n-j+1}^n aa_i - [\text{NH}]
\end{array} \right.$$

où aa_i est la masse du $i^{\text{ème}}$ acide aminé, le [N-terme] représente la masse du groupe attaché au premier acide aminé, le [C-terme] est la masse du groupe attaché au dernier acide aminé. Les masses du groupement CO et NH_2 sont représentée respectivement par [CO] et [NH₂]. Dans notre cas, la masse des aa_i correspond à la masse de :



Nous supposons que le peptide GILSNADIK est mono-chargé. De ce fait, nous déduisons, en comparant avec la forme explicite des ions b et y données dans la sous-section *La fragmentation des peptides*, que le [N-terme] correspond simplement à un hydrogène H et le [C-terme] correspond à un hydroxyde OH . De plus, le [NH₂] ne correspondant pas exactement à la masse de NH_2 mais plutôt au groupement NH_3^+ . Dès lors, la table suivant récapitule les masses de tous les ions b et y pour ce même peptide.

b_1	58,0287402018	y_8	873,5040090601
b_2	171,1128042168	y_7	760,4199450451
b_3	284,1968682318	y_6	647,3358810301
b_4	371,2288966668	y_5	560,3038525951
b_5	485,2718241368	y_4	446,2609251251
b_6	556,3089379418	y_3	375,2238113201
b_7	671,3358810068	y_2	260,1968682551
b_8	784,4199450218	y_1	147,1128042401

L'ion b_1 est obtenu en sommant 1,00782504667 (masse de l'hydrogène) à 57,021463735 (masse de la Glycine) et en soustrayant la masse d'un électron 0,0005485799. Il faut soustraire la masse d'un électron car une charge positive sur un atome provient toujours de la perte d'un électron. Pour obtenir b_2 , il suffit de rajouter la masse de I . De manière analogue, les autres fragments d'ions b sont calculés.

Pour obtenir y_1 , il suffit d'additionner 17,002739677 (masse du groupement OH) à la masse du dernier acide aminé (K) et y ajouter une fois la masse de l'hydrogène et une fois la masse d'un proton. Ici, le [NH₂] correspond à la masse d'un hydrogène et d'un proton car dans la masse de chaque acide aminé la masse de NH est déjà comprise. L'ion y_2 s'obtient en ajoutant la masse de l'acide aminé I à la masse de y_1 . Le raisonnement est similaire pour les autres ions y .

Grâce aux calculs de masse des ions, le spectre de masse associé au peptide GILSNADIK représenté dans la figure 2.9, est obtenu. Les rapports masse sur charge figurent en abscisse et l'intensité en ordonnée. Dans ce cas-ci, tous les ions ont la même intensité, puisque nous considérons qu'une seule copie du peptide GILSNADIK. Dans cette situation bien précise, où nous avons supposé que le peptide est mono-chargé, le rapport masse sur charge d'un ion se réduit ici à la masse de l'ion divisé par la masse d'un proton. Le calcul des masses tient compte de la masse de la charge. La figure 2.9 est un spectre théorique qui s'écarte assez bien de l'expérimental, puisque premièrement aucun bruit de fond n'est représenté, et deuxièmement tous les ions sont représentés. En pratique, il y a des pertes d'informations, seul les ions chargés sont visibles par la spectrométrie de masse.

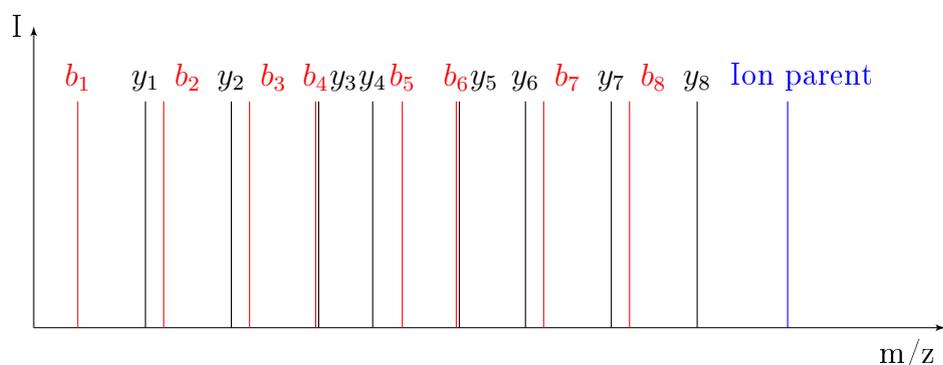


FIGURE 2.9 – Spectre de masse théorique associé au peptide GILSNADIK.

La deuxième partie de cette sous-section va être consacrée à déterminer comment à partir du spectre de masse, il est possible d'identifier la séquence d'acides aminés constituant un peptide. Reprenons le spectre 2.9, où nous ne considérons uniquement les ions y . Il est très important de garder en mémoire que la lecture des ions y sur un spectre de masse se fait de droite à gauche et de gauche à droite pour les ions b . Pour obtenir le premier acide aminé, nous calculons la différence entre le rapport masse sur charge de l'ion parent et celui de l'ion y_8 . Nous obtenons :

$$\frac{(929,5181963283 + 1,00782504667)}{z} - \frac{873,5040090601}{z} = \frac{57,021463735}{z}$$

En regardant dans la table 2.1, cette valeur multipliée par z correspond à la masse de **G**. Le premier acide aminé a donc été identifié. Pour obtenir le deuxième, nous calculons la différence entre le rapport masse sur charge de l'ion y_8 et celui de l'ion y_7 , ce qui revient à :

$$\frac{873,5040090601}{z} - \frac{760,4199450451}{z} = \frac{113,084064015}{z}$$

En parcourant la table 2.1, nous constatons que deux acides aminés ont cette même masse, l'Isoleucine et la Leucine. Il est donc impossible de les distinguer. Pour obtenir les six acides aminés suivants, le procédé est le même. Pour le premier,

il faut être attentif. En effet, la masse de l'ion y_1 est 147,1128042401. Ceci correspond à la masse de : $NH_3^+ - CHK - COOH$, or dans la table, les masses s'y trouvant correspondent aux masses de : $NH - CHR - CO$, il faut donc lui soustraire un OH et une fois H et une fois H^+ . La masse obtenue est alors :

$$147,1128042401 - 17,002739677 - 1,00782504667 - 1,00727646677 = 128,09496305.$$

Cette dernière est la masse de la Lysine qui se trouve dans la table. Cette même procédure, pour identifier les acides aminés du peptide, peut-être réalisée sur base des ions b . L'unique différence provient du sens de lecture des ions b qui est inversé par rapport à celui des ions y . Pour obtenir les masses des différents acides aminés, il suffit de faire la différence des rapports masse sur charge des ions successifs en partant de la gauche.

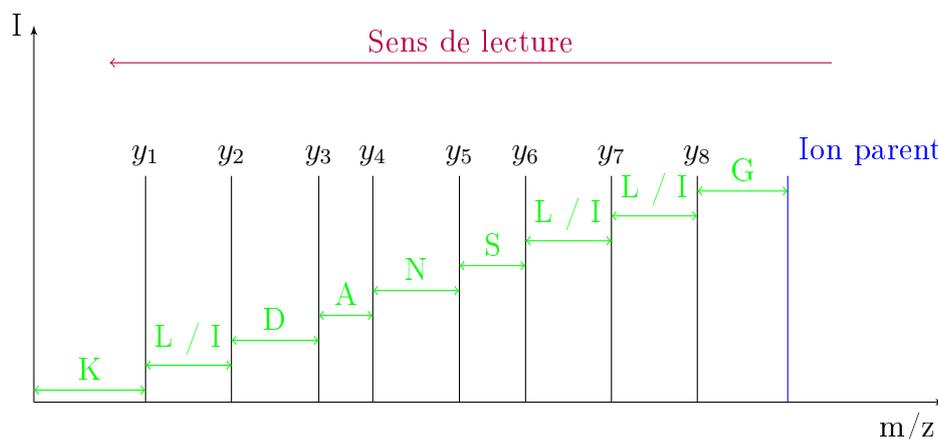


FIGURE 2.10 – Le spectre de masse simplifié associé au peptide GILSNADIK.

Remarque 2.1. Le raisonnement qui lie un peptide et le spectre de masse associé vient d'être souligné dans le cas d'un peptide **mono-chargé**. La seule adaptation à réaliser est que pour obtenir les rapports masse sur charge, il faut sommer aux masses calculées comme ci-dessus, le nombre de charges multiplié par la masse d'un proton, le tout divisé par le nombre de charges multiplié par la masse du proton.

Avant de clôturer cette sous-section, nous allons discuter d'une propriété très intéressante. Cette dernière stipule que **la différence entre les rapports masse sur charge de deux pics successifs de la distribution isotopique est de $1/z$** (avec z qui représente la charge). En effet, le rapport masse sur charge du premier pic est :

$$\frac{M + nz}{nz}$$

où M est la masse de l'ion sans sa charge et n , le nombre de charges. Le pic successif possède la caractéristique d'être le même que le précédent à la seule différence que

dans ce pic, une modification d'un des isotopes est considérée. Son rapport masse sur charge est donc de

$$\frac{M + 1 + nz}{nz}.$$

Leur différence vaut donc l'inverse de la charge. Cette relation permet donc de déterminer très facilement la charge d'un ion. Dès lors, grâce au spectre de masse et à cette relation, il est facile d'en déduire la masse.

2.2.7 Le séquençage de NOVO

L'approche du séquençage de novo consiste en l'interprétation des spectres de masse en tandem afin de déduire directement de ces spectres des fragments de séquence en acides aminés, voire la séquence complète lorsque le spectre MS/MS le permet. Dans cette approche, les séquences en acides aminés sont directement déduites des différences de masses entre pics successifs sur les spectres MS/MS expérimentaux. Comme détaillé à la sous-section : *De la protéine au spectre de masse et vice-versa* de ce même chapitre, la différence de masse entre deux fragments de peptide consécutifs issus d'une même série correspond à la masse d'un acide aminé. Ainsi, il est possible de reconstituer toute ou une partie de la séquence du peptide fragmenté en considérant les différences de masses entre les membres d'une série de pics successifs. Les fragments de séquence d'acides aminés ainsi déterminés sont ensuite soumis à des programmes de recherche de similarités de séquences dans les banques de données. En fait, pour un processus de fragmentation idéal conduisant à la coupure de toutes les liaisons peptidiques et un spectromètre de masse idéal (sans bruit de fond), le problème du séquençage de novo est très simple. Mais dans la pratique, ce processus ne se déroule pas de cette manière. Par conséquent, le séquençage de novo est une tâche nullement facile. Les spectres expérimentaux contiennent rarement tous les ions fragments et sont toujours bruités. De plus, l'imprécision sur la masse (provenant des erreurs expérimentales) augmente le nombre de séquences peptidiques possibles de façon exponentielle. Qui plus est, la plus part de ces algorithmes actuels ne tiennent pas en compte les fragments internes ni les ions immoniums.

La technique d'identification des protéines développée dans ce mémoire, ne se base pas sur le principe de recherche de similarités. Un modèle probabiliste, appelé les *Modèles de Markov Cachés*, permet de déterminer la séquence d'acides aminés la plus probable associé à un spectre de masse. L'application de ce modèle probabiliste au problème d'identification des protéines fera l'objet du chapitre 5.

Chapitre 3

Les chaînes de Markov

Dans ce chapitre, certaines définitions ainsi que certaines notions à propos des chaînes de Markov sont introduites. Il existe des chaînes dont l'ensemble des états est continu - leur étude n'est pas abordée ici - et les chaînes dont l'ensemble des états est discret. Ces derniers font l'objet du présent chapitre. Le but, étant bien entendu, de comprendre la philosophie des chaînes de Markov, et de faciliter la transition aux modèles de Markov cachés. Ces derniers seront abordés au chapitre 4. Les applications des chaînes de Markov sont très variées et sont, par exemple, utilisées en statistique pour modéliser les files d'attentes, par les actuaires des assurances automobiles dans le système Bonus/Malus [?]. Cette théorie s'applique également dans le domaine de la physique (utilisé dans le dimensionnement des systèmes photovoltaïques [?]), de la finance (modélisation du titre en bourse [?]), de la météorologie [?] mais aussi et surtout en biologie [?],[?], comme nous pourrions nous en rendre compte plus tard dans ce mémoire. Il est judicieux de signaler que la majorité des définitions, propositions et théorèmes abordés dans ce chapitre se retrouvent dans les deux livres dont les références sont données dans [?] et [?].

3.1 Définitions

Définition 3.1. Soit $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ un espace de probabilité et E un espace fini ou dénombrable. Une suite de variables aléatoires $\{X_n\}_{n \geq 0}$ prenant ses valeurs dans E est une **chaîne de Markov** si pour tout $n \geq 1$ et toute suite $(x_0, x_1, \dots, x_{n+1})$ d'éléments de E , pour laquelle la probabilité $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n)$ est strictement positive, alors

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n). \quad (3.1)$$

L'équation (3.1) est appelée la propriété de Markov. L'ensemble E est l'espace des états et les éléments x_0, x_1, \dots, x_{n+1} sont des états de la chaîne. Lorsque $X_{n+1} = x_{n+1}$, cela signifie que la chaîne est dans l'état x_{n+1} au temps $n+1$ ou encore, qu'elle visite l'état x_{n+1} au temps $n+1$. Les chaînes de Markov permettent de décrire l'évolution d'un système au cours dont la particularité est que l'état du processus à l'instant $n+1$, dépend de celui à l'instant n mais pas des états antérieurs à n . Proprement

parlant, la propriété de Markov s'interprète comme *le futur proche* ($n + 1$) *ne dépend du passé* ($0, 1, \dots, n$) *uniquement à travers le présent* (n).

Comme nous pouvons l'observer dans la définition, une chaîne de Markov est définie sur un espace de probabilité et sous la condition que la probabilité $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n)$ est strictement positive. Si cette dernière condition n'est point satisfaite, rien ne peut être avancé. Dans la suite de ce mémoire, lorsque nous parlons de chaîne de Markov, l'espace de probabilité et la condition sont toujours sous-entendus.

Donnons à présent quelques exemples de chaîne de Markov afin d'illustrer la définition 3.1. Le premier a été repris du livre [?].

Exemple 3.2 (Bruit qui court...). Les notes de cours seront-elles autorisées à l'examen ? La réponse qui peut prendre deux formes (« oui » ou « non ») est transmise à travers n intermédiaires. Nous supposons que chaque intermédiaire transmet le message de façon correcte avec une probabilité p telle que $0 < p < 1$ ou le déforme en son contraire avec probabilité $1 - p$. Les intermédiaires sont des personnes indépendantes.

Cette situation peut-être modélisée par une chaîne de Markov $\{X_n\}_{n \geq 1}$ dont l'espace des états E est composé de deux états ; oui et non. Si le $n^{\text{ème}}$ intermédiaire transmet la réponse « oui », le système au temps X_n se retrouvera sur l'état « oui » et sur l'état « non », dans le cas contraire. De plus, l'information qu'un intermédiaire donne au suivant dépend uniquement de celle qu'il a reçue du précédent.

Les chaînes de Markov sont très utilisées pour modéliser le système du *Bonus-Malus* en assurance automobile, comme il en est décrit dans [?]. Nous proposons, à titre d'exemple, une situation simplifiée reprise de [?].

Exemple 3.3 (Le système du Bonus-Malus en assurance automobile). Une compagnie d'assurance classe les niveaux de bonus-malus de ses clients suivant les entiers $0, 1, 2, \dots, l$. Les primes d'assurance de ces derniers dépendent de la classe où l'assuré se trouve. Le niveau 0 est le plus avantageux pour les assurés puisqu'il correspond à la prime d'assurance la plus faible (superbonus) et inversement, le niveau l est le moins bénéfique (supermalus). Chaque année, la classe de l'assuré est déterminée suivant la classe dans laquelle il se trouvait l'année précédente et du nombre de sinistres reportés pendant l'année. Si aucun sinistre n'est reporté par l'assuré, il reçoit un bonus exprimé sous forme de passage à une classe inférieure, lui octroyant des primes moins fortes. Au contraire, si l'assuré occasionne un ou plusieurs sinistres, la compagnie donne un malus exprimé sous forme de passage à un niveau supérieur, ayant des primes plus importantes.

Nous désignons par $\{X_n\}_{n \geq 0}$, la suite des niveaux de bonus-malus successifs qu'un assuré donné parcourt au cours du temps. De plus, le niveau d'une année ne dépend que du niveau de l'année précédente et pas des niveaux antérieurs.

Définition 3.4. Une chaîne de Markov $\{X_n\}_{n \geq 0}$ est dite **homogène**, si pour tout état x et y de E et pour tout entier n et m supérieur à 1 tel que $\mathbb{P}(X_n = x) > 0$ et $\mathbb{P}(X_m = x) > 0$ alors $\mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x) = \mathbb{P}(X_{m+1} = y \mid X_m = x)$.

Dit autrement, une chaîne de Markov est homogène, si la probabilité de visiter l'état x suivi de l'état y ne dépend pas du temps.

Définition 3.5. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène. La **probabilité de transition de l'état x à l'état y** est définie par la probabilité conditionnelle $p_{x|y} = \mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x)$ si pour tout $n \geq 0$, la $\mathbb{P}(X_n = x) > 0$. Par contre, lorsque $\mathbb{P}(X_n = x) = 0$, nous associons à $p_{x|y}$, la valeur nulle.

La probabilité $p_{x|y}$ se lit la probabilité d'aller de x à y en une étape.

Étant donné cette dernière définition, une chaîne de Markov homogène n'est rien d'autre qu'une chaîne de Markov dont son mécanisme de transition ne se modifie pas au cours du temps. En voici deux exemples :

Exemple 3.6 (Bruit qui court...). En réalité, la chaîne de Markov décrite dans l'exemple 3.2 est une chaîne de Markov homogène puisque les probabilités de transmission du message d'un intermédiaire au suivant ne dépendent pas de l'intermédiaire qui transfère le message.

Exemple 3.7 (Le système du Bonus-Malus en assurance automobile). Supposer le caractère homogène de la chaîne de Markov signifie que les probabilités d'avoir ou de ne pas avoir de sinistre sont les mêmes aujourd'hui que dans 50 ans. Sur des horizons de cinq à dix ans, cette hypothèse n'est pas choquante. Par contre, sur de plus longues périodes, elle pourrait être remise en question puisqu'elle omet, entre autre, l'évolution des conditions d'apprentissage de la conduite, de la sécurité routière, Toutefois, nous maintiendrons cette hypothèse quelle que soit la durée retenue.

Dans la suite de ce mémoire, nous nous restreignons aux chaînes de Markov homogènes à valeurs dans un espace d'états fini puisque celles-ci modélisent les situations qui nous intéressent. Dorénavant, nous considérerons que l'espace des états $E = \{1, 2, \dots, J\}$ avec J fini.

Définition 3.8. La **matrice de transition** P sur E est une matrice définie par les probabilités de transitions : $P = (p_{x|y})_{x,y \in E}$.

Si l'espace des états E est de cardinal J alors la matrice P est une matrice $J \times J$. Par contre, lorsque E est dénombrable, cette matrice est infinie. Cette matrice vérifie, en outre, les deux propriétés définissant une matrice stochastique à savoir :

1. $\forall x, y \in E \quad p_{x,y} \geq 0$
2. $\forall x \in E \quad \sum_{y \in E} p_{x,y} = 1$

Remarque 3.9 (Graphe associé à une matrice de transition). À toute matrice de transition, un graphe lui est associé. Les sommets du graphe sont les différents états de la chaîne. Il y a une flèche étiquetée $p_{x|y}$, entre le sommet étiqueté x et le sommet étiqueté y si et seulement si la probabilité de transition de l'état x à l'état y est strictement positive : $p_{x|y} > 0$.

Lorsque l'ensemble des états est fini, cette présentation de la matrice de transition est particulièrement utile et parlante.

Illustrons ces notions à l'aide de nos deux exemples, « Le bruit qui court » et « Le système de Bonus-Malus en assurance automobile ».

Exemple 3.10 (Bruit qui court...). La matrice associée à la chaîne de Markov qui décrit l'évolution de la réponse à la question : « Les notes de cours seront-elles autorisées à l'examen ? » est :

$$\begin{pmatrix} p & 1-p \\ 1-p & p \end{pmatrix}$$

La probabilité p correspond à la probabilité qu'un intermédiaire ayant reçu la réponse « oui » (respectivement « non ») transmette la même information. Dans le cas contraire, la probabilité est $1-p$. Cette matrice vérifie les deux propriétés définissant une matrice stochastique puisque p est strictement compris entre 0 et 1, nous avons que $1-p$ est également strictement positif. De plus, la somme des éléments de chaque ligne vaut 1. Quant au graphe associé à cette chaîne de Markov, il est représenté à la figure 3.1.

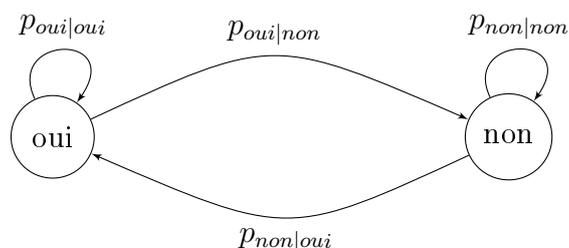


FIGURE 3.1 – Le bruit qui court...

Exemple 3.11 (Le système de Bonus-Malus en assurance automobile). Si l'assuré n'occasionne pas de sinistre pendant une année, il passera du niveau i (où $0 \leq i \leq l$) au niveau $\max\{0; i-1\}$. Inversement, s'il occasionne k sinistres (où k est un naturel supérieur à 1) pendant l'année, son niveau de bonus-malus passera du niveau i au niveau $\min\{l; i+k\}$. Par conséquent, la probabilité de transition du niveau 0 au niveau 0, revient à la probabilité de n'occasionner aucun sinistre. Or, en pratique, le nombre de sinistres reportés est décrit par une loi de Poisson de paramètre λ . D'où, pour N , le nombre de sinistres pour l'année considérée,

$$p_{0|0} = \mathbb{P}(N = 0) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^0}{0!}.$$

La probabilité de transition du niveau 0 au niveau 1 est équivalente à la probabilité que l'assuré occasionne exactement un sinistre. Donc,

$$p_{0|1} = \mathbb{P}(N = 1) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^1}{1!}.$$

Par contre, lorsque l'assuré n'occasionne pas de sinistre, son niveau du bonus-malus ne diminue que d'une unité. Le passage du niveau 2 au niveau 0 est donc impossible ; $p_{2|0} = 0$. Il est en de même pour tous les niveaux distants de plus d'une unité. Le cas extrême est le cas où l'année précédente, le bonus-malus de l'assuré se trouve au maximum (niveau l). Dans ce cas, pendant l'année qui suit, soit il n'occasionne pas de sinistre et son bonus-malus descend d'un niveau, ou soit il en occasionne un ou plusieurs, et donc, son bonus-malus reste au maximum. La matrice associée à la chaîne de Markov est pour le cas $l = 6$ définie de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} p_0 & p_1 & p_2 & p_3 & p_4 & p_5 & (1 - p_0 - p_1 - p_2 - p_3 - p_4 - p_5) \\ p_0 & 0 & p_1 & p_2 & p_3 & p_4 & (1 - p_0 - p_1 - p_2 - p_3 - p_4) \\ 0 & p_0 & 0 & p_1 & p_2 & p_3 & (1 - p_0 - p_1 - p_2 - p_3) \\ 0 & 0 & p_0 & 0 & p_1 & p_2 & (1 - p_0 - p_1 - p_2) \\ 0 & 0 & 0 & p_0 & 0 & p_1 & (1 - p_0 - p_1) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_0 & 0 & (1 - p_0) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_0 & (1 - p_0) \end{pmatrix}$$

où $p_u = \mathbb{P}(N = u) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^u}{u!}$. Le graphe associée est représenté dans la figure 3.2. Afin de garder une certaine visibilité, nous n'avons tracé uniquement les flèches partant de l'état 0 et 1.

Les deux définitions précédentes expriment les transitions d'un état x à un état y en une étape. Cette notion se généralise naturellement à plusieurs étapes.

Définition 3.12. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène. La **probabilité de transition de l'état x à l'état y en n étapes**, pour n un naturel strictement positif est définie par la probabilité conditionnelle $p_{x|y}(n) = \mathbb{P}(X_{m+n} = y \mid X_m = x)$ si pour tout $m \geq 0$, la $\mathbb{P}(X_m = x) > 0$. Par contre, lorsque $\mathbb{P}(X_m = x) = 0$, nous associons à $p_{x|y}(n)$, la valeur nulle.

Par convention, nous dirons que $p_{x|y}(0)$ prendra la valeur 1, dans le cas de l'égalité des états et 0 dans les autres cas.

Définition 3.13. La **matrice de transition à n étapes** $P(n)$ sur E , pour un naturel strictement positif n , est une matrice définie par les probabilités de transitions à n étapes : $P(n) = (p_{x|y}(n))_{x,y \in E}$.

Exemple 3.14 (Bruit qui court...). Nous sommes intéressés pour connaître la probabilité que l'information transmise par le 3^{ème} intermédiaire soit conforme à l'information initiale. La probabilité de cet événement revient à calculer $\mathbb{P}(X_3 = \text{oui} \mid X_1 = \text{oui})$ et $\mathbb{P}(X_3 = \text{non} \mid X_1 = \text{non})$ qui, au vu des notations introduites, se réécrit comme

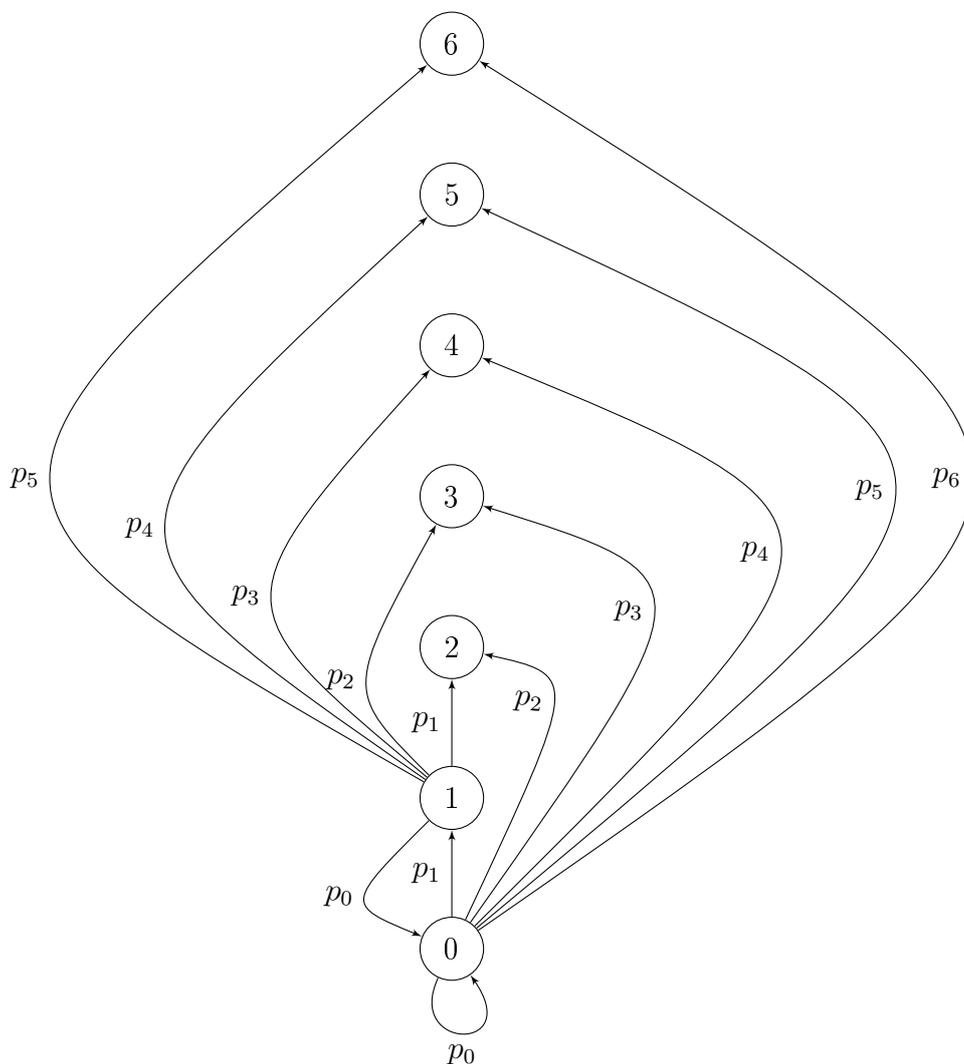


FIGURE 3.2 – Le système de Bonus-Malus en assurance automobile.

$p_{\text{oui}|\text{oui}}(2)$ et $p_{\text{non}|\text{non}}(2)$. Deux chemins possibles existent ; soit les trois intermédiaires transmettent la réponse oui, et cela arrive avec probabilité p^2 ou soit le 1^{er} et le 3^{ème} transmettent la réponse oui mais le 2^{ème} transmet l'information inverse. Ce chemin arrive avec probabilité $(1-p)^2$. Dès lors, $p_{\text{oui}|\text{oui}}(2) = p^2 + (1-p)^2$. La même probabilité est obtenue pour $p_{\text{non}|\text{non}}(2) = p^2 + (1-p)^2$.

Pour obtenir la matrice $P(2)$, il reste donc à calculer $p_{\text{oui}|\text{non}}(2)$ car $p_{\text{non}|\text{oui}}(2)$ prend la même valeur. Par le même raisonnement que ci-dessus, $p_{\text{oui}|\text{non}}(2) = 2p \cdot (1-p)$. D'où, $P(2)$ est la matrice,

$$\begin{pmatrix} p^2 + (1-p)^2 & 2p \cdot (1-p) \\ 2p \cdot (1-p) & p^2 + (1-p)^2 \end{pmatrix}$$

Définition 3.15. Le vecteur de probabilité, $(\mathbb{P}(X_0 = x))_{x \in E}$, noté p_{X_0} , définit la **loi initiale**.

Comme son nom l'indique, la loi initiale est la loi de l'état initial X_0 .

Exemple 3.16 (Le bruit qui court...). Un exemple de loi initiale est $(1, 0)$, c'est à dire que le premier intermédiaire transfère au suivant la réponse « oui » avec probabilité 1. Cela pourrait se produire si le premier intermédiaire est, en fait, le fils de l'enseignant.

Exemple 3.17 (Le système du Bonus-Malus en assurance automobile). La loi initiale est $(\mathbb{P}(X_0 = 0), \mathbb{P}(X_0 = 1), \dots, \mathbb{P}(X_0 = l)) = (0, 0, \dots, 1, \dots, 0)$ où 1 se positionne à la $\frac{l}{2}$ ^{ème} position. En effet, chaque nouvel assuré débute au niveau $(l/2)$. En Belgique, par exemple, il y a 22 niveaux. Le niveau octroyé à un nouvel assuré est 11, si celui-ci utilise son véhicule à des fins privées et à 14, si le véhicule est utilisé à des fins professionnels.

Du point de vue de la modélisation, la propriété de Markov peut se révéler être trop restrictive : au sein d'une suite, la dépendance d'une valeur vis-à-vis de l'ensemble des valeurs passées peut s'étendre au-delà de la simple valeur précédente. Par conséquent, il est naturel de s'intéresser à des modèles incorporant des dépendances à plus longue portée. Pour cela, nous définissons la propriété de Markov avec une mémoire de longueur k , où k est un naturel strictement positif.

Définition 3.18. Une suite de variables aléatoires $\{X_n\}_{n \geq 0}$ est une **chaîne de Markov d'ordre k** pour k un naturel strictement positif, si pour tout $n \geq 1$ et toute suite $(x_0, x_1, \dots, x_{n+1})$ d'éléments de E , pour laquelle la probabilité $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n)$ est strictement positive, alors

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

La propriété de Markov (équation (3.1)) énoncée précédemment correspond à une chaîne de Markov d'ordre 1.

3.2 La relation de Chapman-Kolmogorov

La proposition suivante facilite le calcul des probabilités de transition à n étapes.

Proposition 3.19. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène de matrice de transition P . Alors, pour tout $n \geq 0$, la matrice de transition en n étapes est égale à la puissance $n^{\text{ème}}$ de la matrice de transition en une étape :

$$P(n) = P^n.$$

Démonstration. Procédons par récurrence. Pour $n = 0$ et 1, le résultat est évident. En effet, $P^0 = I = P(0)$ (la matrice identité) et $P^1 = P = P(1)$. Dès à présent, supposons $n \geq 2$, nous avons alors, par hypothèse de récurrence que $P(n-1) = P^{n-1}$. Mais

puisque, $P^n = P^{n-1}P^1 = P(n-1)P(1)$ et que nous désignons par $p_{x|y}^n$, le coefficient en (x,y) de la matrice P^n , nous obtenons :

$$\begin{aligned} p_{x|y}^n &= \sum_{k \in E} p_{x|k}^{n-1} \cdot p_{k|y}^1 \\ &= \sum_{k \in E} p_{x|k}(n-1) \cdot p_{k|y}(1) \\ &= \sum_{k \in E} \mathbb{P}(X_{n-1} = k \mid X_0 = x) \cdot \mathbb{P}(X_1 = y \mid X_0 = k) \\ &= \sum_{k \in E} \mathbb{P}(X_{n-1} = k \mid X_0 = x) \cdot \mathbb{P}(X_n = y \mid X_{n-1} = k) \end{aligned}$$

où la dernière égalité provient du fait que la chaîne est homogène. Or premièrement, par la propriété de Markov, nous avons pour toute suite d'états $(x, x_1, \dots, x_{n-1}, k, y)$,

$\mathbb{P}(X_n = y \mid X_{n-1} = k) = \mathbb{P}(X_n = y \mid X_0 = x, X_1 = x_1, \dots, X_{n-2} = x_{n-2}, X_{n-1} = k)$,
et deuxièmement, par un argument de marginalisation¹, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n-1} = k \mid X_0 = x) &= \\ &= \sum_{x_1 \in E} \dots \sum_{x_{n-2} \in E} \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_{n-2} = x_{n-2}, X_{n-1} = k \mid X_0 = x). \end{aligned}$$

Nous réintégrons ces deux expressions dans la dernière égalité de $p_{x|y}$. pour ainsi obtenir le résultat souhaité.

$$\begin{aligned} p_{x|y}^n &= \sum_{k \in E} \sum_{x_1 \in E} \dots \sum_{x_{n-2} \in E} \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_{n-2} = x_{n-2}, X_{n-1} = k \mid X_0 = x) \\ &\quad \cdot \mathbb{P}(X_n = y \mid X_0 = x, X_1 = x_1, \dots, X_{n-2} = x_{n-2}, X_{n-1} = k) \\ &= \sum_{k \in E} \sum_{x_1 \in E} \dots \sum_{x_{n-2} \in E} \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_{n-2} = x_{n-2}, X_{n-1} = k, X_n = y \mid X_0 = x) \\ &= \mathbb{P}(X_n = y \mid X_0 = x) \end{aligned}$$

Cette dernière expression représente la quantité $p_{x|y}(n)$. □

Exemple 3.20 (Un bruit qui court...). Remarquons que la matrice $P(2)$,

$$\begin{pmatrix} p^2 + (1-p)^2 & 2p \cdot (1-p) \\ 2p \cdot (1-p) & p^2 + (1-p)^2 \end{pmatrix}$$

correspond bien au carré de la matrice P ,

$$\begin{pmatrix} p & 1-p \\ 1-p & p \end{pmatrix}$$

1. La marginalisation est le procédé réalisé pour obtenir la loi marginale d'une variable aléatoire lorsque la loi conjointe d'un vecteur contenant cette variable y fait partie. Si toutes les variables aléatoires du vecteur sont discrètes, alors il suffit de sommer sur toutes les valeurs qu'elles peuvent prendre.

La proposition qui suit, permet de calculer la probabilité de passer d'un état à un autre en un nombre d'étapes souhaité.

Proposition 3.21 (Chapman-Kolmogorov). *Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène. Pour tout m et n deux naturels et x, y deux états. Alors,*

$$\mathbb{P}(X_{m+n} = y \mid X_0 = x) = \sum_{k \in E} \mathbb{P}(X_m = k \mid X_0 = x) \cdot \mathbb{P}(X_n = y \mid X_0 = k).$$

ou encore,

$$p_{x|y}(m+n) = \sum_{k \in E} p_{x|k}(m) \cdot p_{k|y}(n)$$

Démonstration. L'associativité du produit matriciel est l'argument clé de la preuve. En effet, $P(m+n) = P^{m+n} = P^m P^n = P(m)P(n)$. La dernière égalité est obtenue en appliquant la proposition 3.19. \square

Afin de mieux visualiser l'équation de Chapman-Kolmogorov, nous proposons la figure 3.3 qui transparait bien l'idée de regarder toutes les possibilités d'aller de l'état x à l'état y en $m+n$ étapes et ce en passant par un état k au temps m .

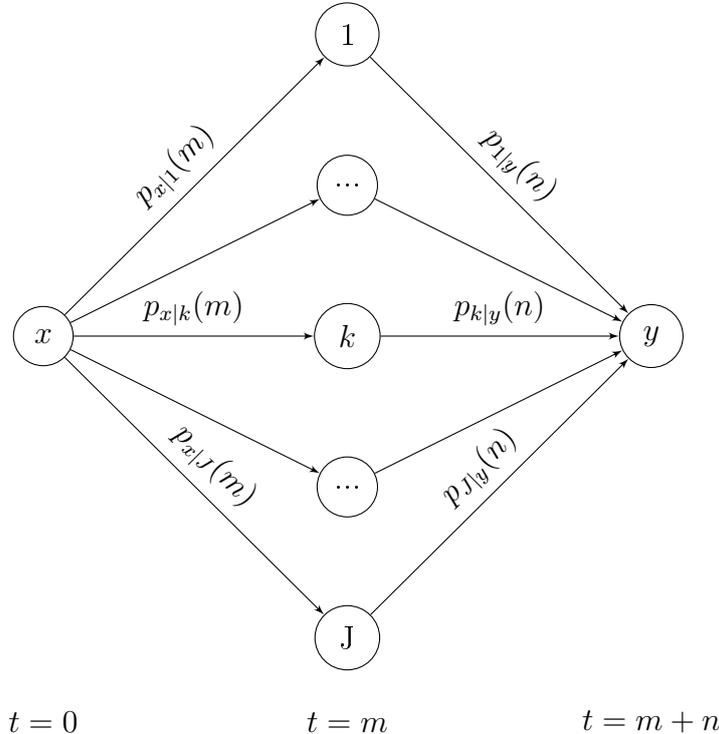


FIGURE 3.3 – La relation de Chapman-Kolmogorov.

3.3 Distribution d'une chaîne de Markov homogène

Le résultat suivant est très souvent utilisé lorsque des chaînes de Markov sont manipulées. Il permet de déterminer la loi du vecteur (X_0, \dots, X_n) où $\{X_n\}_{n \geq 0}$ est une chaîne de Markov homogène.

Proposition 3.22. *La distribution de probabilité d'une chaîne de Markov homogène est entièrement déterminée par sa distribution initiale et sa matrice de transition.*

Pour tout naturel $n \geq 1$ et pour tous éléments x_0, x_1, \dots, x_n de E ,

$$\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = p_{X_0}(x_0) \prod_{l=1}^n p_{x_{l-1}|x_l}.$$

Nous ne détaillons pas la preuve de cette proposition, il suffit d'appliquer successivement la définition de la probabilité conditionnelle et la propriété de Markov. Remarquons que $p_{X_0}(x_0)$ est juste une notation pour $\mathbb{P}(X_0 = x_0)$.

Comme nous l'avons déjà signalé précédemment, une chaîne de Markov, décrit l'évolution d'un système au cours du temps, dont la particularité est que l'état du processus à l'instant $(n + 1)$, ne dépend que de celui à l'instant n , précédant, mais non de ses états antérieurs. Se restreindre à l'instant $(n + 1)$ n'est pas nécessaire. La condition reste vraie, si des événements futurs sont également pris en compte. Cette situation est décrite dans la proposition 3.23. La proposition 3.25, quant à elle permet de généraliser la forme des événements du passé dont la propriété de Markov permet de ne pas en tenir compte.

Proposition 3.23. *Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène sur E et P , sa matrice de transition. Soient $n \geq 0$, $r \geq 1$ deux entiers et x_0, \dots, x_{n+r} des éléments de E . Alors*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ = p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}}. \end{aligned}$$

Démonstration. Pour prouver cette identité, nous procédons par récurrence sur r . Dans le cas où $r = 1$ (cas de base), l'identité se réduit à la propriété de Markov d'ordre 1. Supposons, maintenant que $r \geq 2$. Posons

$$\begin{aligned} A_1 &:= \{X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n\}, \\ A_2 &:= \{X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r-1} = x_{n+r-1}\}, \\ A_3 &:= \{X_{n+r} = x_{n+r}\}. \end{aligned}$$

D'après la propriété de Markov, nous avons : $P(A_3 \mid A_1 A_2) = p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}}$. De plus, l'hypothèse de récurrence nous affirme que, $P(A_2 \mid A_1) = p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-2}|x_{n+r-1}}$. On conclut alors la première égalité, en utilisant la propriété : $\mathbb{P}(A_2 A_3 \mid A_1) = \mathbb{P}(A_3 \mid A_1 A_2) \cdot \mathbb{P}(A_2 \mid A_1)$.

□

Dans la proposition 3.25, A désigne un événement appartenant à la sigma algèbre engendrée par le vecteur (X_0, \dots, X_n) , notée \mathcal{A}_n pour $n \geq 0$. L'événement A est une réunion dénombrable d'événements deux à deux disjoints de la forme $\{X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n\}$, comme l'affirme la proposition 3.24.

Proposition 3.24. *Soient $I = \{i_1 < \dots < i_k\}$ un sous-ensemble de \mathbb{N} et $\{X_i\}_{i \in I}$ une famille de variables aléatoires à valeurs entières, indicées par I . Soit \mathcal{C} l'ensemble des événements de la forme*

$$\{X_{i_1} = x_1, \dots, X_{i_k} = x_k\}$$

où les x_i sont des entiers. Alors, les éléments de sigma-algèbre engendrée $\sigma(\{X_i\}_{i \in I})$ sont les réunions au plus dénombrables disjointes d'éléments de \mathcal{C} .

Démonstration. Soit $\bar{\mathcal{C}}$ l'ensemble des réunions au plus dénombrables disjointes d'éléments de \mathcal{C} . Il faut donc montrer que $\bar{\mathcal{C}} = \sigma(\{X_i\}_{i \in I})$. Pour cela, nous procédons en deux étapes ; premièrement nous montrons que $\sigma(\{X_i\}_{i \in I}) = \sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k}))$ et deuxièmement $\sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k})) = \bar{\mathcal{C}}$. Rappelons en les définitions :

$$\sigma(\{X_i\}_{i \in I}) := \sigma(\{X_i^{-1}(B) : B \in \mathcal{P}(\mathbb{Z}), i \in I\})$$

$$\sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k})) := \{(X_{i_1}, \dots, X_{i_k})^{-1}(B) : B \in \mathcal{P}(\mathbb{Z}^k)\}$$

1. $\sigma(\{X_i\}_{i \in I}) = \sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k}))$
 - (\subseteq) Comme $\sigma(\{X_i\}_{i \in I})$ est la plus petite sigma-algèbre qui contient les événements $\{X_i = b\}$ où $i \in I$ et $b \in \mathcal{P}(\mathbb{Z})$, il suffit de vérifier que ces événements élémentaires appartient à la $\sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k}))$. Donc pour $\{b\} \in \mathcal{P}(\mathbb{Z})$ et $i \in I$ fixés,
$$\{X_i = b\} = (X_{i_1}, \dots, X_{i_k})^{-1}(\mathbb{Z} \times \dots \times \mathbb{Z} \times \{b\} \times \mathbb{Z} \times \dots \times \mathbb{Z}) \in \sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k}))$$
 - (\supseteq) De manière analogue, comme $\sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k}))$ est la plus petite sigma-algèbre qui contient les événements $\{(X_{i_1} = b_1, \dots, X_{i_k} = b_k)\}$ où $\{(b_1, \dots, b_k)\} \in \mathcal{P}(\mathbb{Z}^k)$, il suffit de vérifier que ces événements élémentaires se retrouvent dans $\sigma(\{X_i\}_{i \in I})$. Dès lors, pour $\{(b_1, \dots, b_k)\} \in \mathcal{P}(\mathbb{Z}^k)$,
$$(X_{i_1}, \dots, X_{i_k})^{-1}(b_1, \dots, b_k) = \bigcap_{i \in I} \{X_i = b_i\} \in \sigma(\{X_i\}_{i \in I}).$$

2. $\sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k})) = \bar{\mathcal{C}}$

- (\subseteq) Soit $B \in \mathcal{P}(\mathbb{Z}^k)$. On a $B = \bigcup_{(x_1, \dots, x_k) \in B} \{(x_1, \dots, x_k)\}$ et cette union est dénombrable. Par conséquent

$$\begin{aligned} (X_{i_1}, \dots, X_{i_k})^{-1}(B) &= \bigcup_{(x_1, \dots, x_k) \in B} (X_{i_1}, \dots, X_{i_k})^{-1}\{(x_1, \dots, x_k)\} \\ &= \bigcup_{(x_1, \dots, x_k) \in B} \{X_{i_1} = x_1, \dots, X_{i_k} = x_k\} \in \bar{\mathcal{C}} \end{aligned}$$

par définition de $\bar{\mathcal{C}}$.

- (\supseteq) Soit $A \in \bar{\mathcal{C}}$ c'est-à-dire qu'il existe un ensemble au plus dénombrable $\mathcal{X} \subset \mathbb{Z}^k$ tel que

$$A = \bigcup_{(x_1, \dots, x_k) \in \mathcal{X}} \{X_{i_1} = x_1, \dots, X_{i_k} = x_k\}.$$

Ceci est bien dans $\sigma((X_{i_1}, \dots, X_{i_k}))$ car $\{X_{i_1} = x_1, \dots, X_{i_k} = x_k\}$ y appartient et donc aussi l'union au plus dénombrable puisque c'est une sigma-algèbre. \square

Proposition 3.25. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène sur E et P , sa matrice de transition. Soient $n \geq 0$, $r \geq 1$ deux entiers, x_n, \dots, x_{n+r} des éléments de E et A un événement appartenant à $\mathcal{A}_n = \sigma(X_0, \dots, X_n)$.

Si $\mathbb{P}(A, X_n = x_n) > 0$, alors :

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid A, X_n = x_n) = p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}}. \quad (3.2)$$

Démonstration. Pour $n = 0$, la probabilité conditionnelle dans l'équation ci-dessus, n'est définie que pour $A = \{X_0 = x_0\}$ ou $A = \Omega$ et dans ces cas-là, elle vaut $p_{x_0|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r}$, si $\mathbb{P}(X_0 = x_0) > 0$ (proposition 3.22 avec $n = r$).

Considérons une suite d'événements $(A_k)_{k \geq 0}$, deux à deux disjoints tel que pour tout entier k :

si $\mathbb{P}(A_k, X_n = x_n) > 0$ alors,

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid A_k, X_n = x_n) = p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}}.$$

Dans ce cas, l'union dénombrable de ces événements est telle que

$$\mathbb{P}\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k, X_n = x_n\right) > 0 \text{ et}$$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid \bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k, X_n = x_n) \\ = p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}}. \end{aligned}$$

En effet, $\mathbb{P}\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k, X_n = x_n\right) = \sum_{k \in \mathbb{N}} \mathbb{P}(A_k, X_n = x_n) > 0$ et

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r}, \bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k, X_n = x_n) \\ = \sum_{k \in \mathbb{N}} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r}, A_k, X_n = x_n) \\ = \sum_{k \in \mathbb{N}} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid A_k, X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(A_k, X_n = x_n) \end{aligned}$$

Mais par hypothèse sur la suite des événements $(A_k)_{k \geq 0}$, la dernière égalité revient à

$$p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}} \cdot \sum_{k \in \mathbb{N}} \mathbb{P}(A_k, X_n = x_n)$$

ou encore à,

$$p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}} \cdot \mathbb{P}\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k, X_n = x_n\right).$$

Or la proposition 3.23 stipule que tout événement de la forme $\{X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n\}$ satisfaisant $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) > 0$ est tel que

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ = p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}}. \end{aligned}$$

Dès lors, au vu de la proposition 3.24, tout événement A de \mathcal{A}_n est une réunion au plus dénombrable d'événements $\{X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n\}$, et donc par ce qui vient d'être montré, nous avons pour les événements $\{X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n\}$ de probabilité strictement positive que la relation souhaitée est satisfaite. \square

Remarque 3.26. Grâce aux propositions 3.23 et 3.25, nous pouvons montrer que la propriété de Markov se généralise lorsque plusieurs événements futurs sont considérés. En effet, par la proposition 3.23, nous avons pour tout $n \geq 0$, $r \geq 1$ deux naturels et pour tout x_0, \dots, x_{n+r} des éléments de E :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ = p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}} \\ = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_n = x_n), \end{aligned}$$

où la dernière égalité est obtenue en appliquant la proposition 3.25 avec $A = \Omega$. Nous avons donc

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_n = x_n), \end{aligned}$$

ce qui signifie qu'enlever les événements antérieurs à $\{X_n = x_n\}$ ne modifie pas les probabilités.

Remarque 3.27. Le membre de droite de l'équation (3.2) ne dépendant pas de l'événement A, nous avons donc aussi l'égalité :

$$\begin{aligned} P(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid A, X_n = x_n) = \\ \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_n = x_n). \end{aligned}$$

Cette identité se prolonge à tous les éléments de la sigma-algèbre $\mathcal{A}_{n+1, \infty}$ définie par $\sigma(\{X_m\}_{m \geq n+1})$. Cette dernière représente les événements qui se passent après le temps $n+1$. Pour montrer cette extension, nous procédons comme suit.

Premièrement, l'identité se prolonge aux éléments de la sigma-algèbre $\mathcal{A}_{n+1, n+r}$, engendrée par le vecteur $(X_{n+1}, \dots, X_{n+r})$, puisque tous les éléments de cette sigma-algèbre sont des réunions au plus dénombrables disjointes d'événements de la forme

$\{X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r}\}$ (proposition 3.24). Dès lors, nous avons pour tout $B \in \mathcal{A}_{n+1, n+r}$ et pour tout $A \in \mathcal{A}_n$,

$$\mathbb{P}(B \mid A, X_n = x_n) = \mathbb{P}(B \mid X_n = x_n).$$

Deuxièmement, l'identité est encore valable pour tous les éléments B appartenant à la réunion dénombrable de toutes les sigma-algèbres $\mathcal{A}_{n+1, n+r}$ ($r \geq 1$).

Pour montrer finalement que l'identité est valable pour les éléments de la sigma-algèbre $\mathcal{A}_{n+1, \infty}$, nous utilisons le théorème d'unicité des mesures (théorème 3.28), énoncé dans le livre [?] et rappelé ci-dessous. Pour pouvoir l'appliquer, il faut encore s'assurer que :

1. $\mathcal{C} = \bigcup_{r \geq 1} \mathcal{A}_{n+1, n+r}$ est stable par intersection finie
2. $\mathcal{A}_{n+1, \infty} = \sigma(\mathcal{C})$

Pour vérifier le point 1, il suffit de considérer $F, G \in \mathcal{C}$ et de montrer que $F \cap G$ est encore dans \mathcal{C} . Or, $F, G \in \mathcal{C}$ signifie qu'il existe $r \geq 0$ et $r^* \geq 0$ tels que $F \in \mathcal{A}_{n+1, n+r}$ et $G \in \mathcal{A}_{n+1, n+r^*}$. Sans perdre de généralité, nous supposons que $r^* \geq r$. D'où,

$$F = \bigcup_{x_{n+1}, \dots, x_{n+r} \in F} \{X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r}\}$$

$$G = \bigcup_{x_{n+1}, \dots, x_{n+r^*} \in G} \{X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r}, \dots, X_{n+r^*} = x_{n+r^*}\}$$

et

$$F \cap G = \begin{cases} \emptyset & \text{si } F \text{ et } G \text{ ne coïncident pas sur les } r \text{ premières composantes} \\ B & \text{sinon.} \end{cases}$$

Dans les deux cas, l'intersection entre F et G appartient à \mathcal{C} .

Pour montrer le point 2, il faut premièrement se rappeler de la définition $\mathcal{A}_{n+1, \infty} = \sigma(\{X_m\}_{m \geq n+1})$ et ensuite vérifier les deux inclusions. L'inclusion $\sigma(\bigcup_{r \geq 1} \mathcal{A}_{n+1, n+r}) \subseteq \sigma(\{X_m\}_{m \geq n+1})$ est satisfaite. En effet, puisque les événements élémentaires $\{X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r}\}$ où $r \geq 0$ et $x_{n+1}, \dots, x_{n+r} \in E$ sont dans $\sigma(\{X_m\}_{m \geq n+1})$, nous avons que $\mathcal{A}_{n+1, n+r} \subseteq \sigma(\{X_m\}_{m \geq n+1})$. Et donc, en prenant l'union, l'inclusion est conservée car c'est une sigma-algèbre. L'autre inclusion se montre de manière similaire.

Dès lors, et ce grâce au théorème 3.28, nous avons obtenu ce qui était souhaité, à savoir que pour tout $B \in \mathcal{A}_{n+1, \infty}$ et pour tout $A \in \mathcal{A}_n$,

$$\mathbb{P}(B \mid A, X_n = x_n) = \mathbb{P}(B \mid X_n = x_n).$$

Théorème 3.28 (Théorème d'unicité des mesures). *Soient \mathbb{P} et \mathbb{P}' deux probabilités définies sur l'espace de probabilisable (Ω, \mathcal{A}) et coïncidant sur une classe stable par intersection finie $\mathcal{C} \subset \mathcal{A}$, coïncident aussi sur la sigma-algèbre engendrée par \mathcal{C} c'est-à-dire*

$$\text{si } \forall A \in \mathcal{C} \mathbb{P}(A) = \mathbb{P}'(A) \text{ alors } \forall A \in \sigma(\mathcal{C}) \mathbb{P}(A) = \mathbb{P}'(A).$$

3.4 La propriété forte de Markov

Avant d'expliciter la propriété forte de Markov, revenons à l'équation de la proposition 3.25, qui stipule que pour un événement A appartenant à la sigma-algèbre \mathcal{A}_n , et en supposant que $\mathbb{P}(A, X_n = x_n) > 0$, nous avons l'identité suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid A, X_n = x_n) \\ &= p_{x_n|x_{n+1}} \cdot p_{x_{n+1}|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}} \\ &= \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_n = x_n). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Cette propriété implique, par marginalisation des paramètres, à la fois la propriété de Markov et la propriété d'homogénéité. En effet,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_{n+r} \in E} \\ &\quad \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, X_{n+2} = x_{n+2}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_{n+r} \in E} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, X_{n+2} = x_{n+2}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_n = x_n) \end{aligned}$$

car nous avons appliqué l'équation (3.3) avec $A = \{X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}\}$ qui appartient bien à la sigma-algèbre \mathcal{A}_n . Cette dernière égalité se réduit simplement à $\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n)$. D'où par le raisonnement précédent, si l'équation (3.3) est vérifiée alors la propriété de Markov l'est aussi.

Il nous reste à vérifier la propriété d'homogénéité. Pour y arriver, la démarche à suivre est du même type que celle pour obtenir la propriété de Markov. En effet,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x) \\ &= \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_{n+r} \in E} \mathbb{P}(X_{n+1} = y, X_{n+2} = x_{n+2}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_n = x) \\ &= \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_{n+r} \in E} p_{x|y} \cdot p_{y|x_{n+2}} \cdots p_{x_{n+r-1}|x_{n+r}} \\ &= p_{x|y} \cdot \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_{n+r} \in E} \mathbb{P}(X_{n+2} = x_{n+2}, X_{n+3} = x_{n+3}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r} \mid X_{n+1} = y) \\ &= p_{x|y} \cdot \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_{n+r} \in E} \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = y, X_{n+2} = x_{n+2}, X_{n+3} = x_{n+3}, \dots, X_{n+r} = x_{n+r})}{\mathbb{P}(X_{n+1} = y)} \\ &= p_{x|y} \end{aligned}$$

Nous avons, en réalité, appliqué deux fois l'identité (3.3) et utilisé l'argument de la marginalisation.

Une extension très importante de la propriété de Markov discutée précédemment consiste à considérer un conditionnement par rapport à un présent aléatoirement fixé

$\{X_T = x\}$, où T est un temps d'arrêt de la chaîne de Markov, plutôt que par un présent fixé $\{X_n = x\}$. Nous devons auparavant définir deux notions fondamentales ; le temps d'arrêt et la sigma-algèbre antérieure.

Définition 3.29. Étant donnée une suite de variables aléatoires $\{X_n\}_{n \geq 0}$ définie sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ et à valeur dans un ensemble fini ou dénombrable, une variable aléatoire T définie sur $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ à valeur dans $\mathbb{N} \cup \{+\infty\}$ est appelée un **temps d'arrêt adapté à $\{X_n\}_{n \geq 0}$** lorsque, pour tout $n \in \mathbb{N}$, l'événement $\{T = n\} \in \sigma(X_0, \dots, X_n)$.

Remarque 3.30. La condition $\{T = n\} \in \sigma(X_0, \dots, X_n)$ signifie que la réalisation ou non de l'événement $\{T = n\}$ se base que sur l'information fournie par le vecteur (X_0, \dots, X_n) .

Exemple 3.31. Un exemple fondamental de temps d'arrêt adapté à $\{X_n\}_{n \geq 0}$ est fourni par le temps d'atteinte à l'état x , défini par $R_0^x = \inf\{l \geq 0; X_l = x\}$. Car,

$$\begin{aligned} \{\omega \in \Omega; R_0^x = n\} = \\ \{\omega \in \Omega; X_n(\omega) = x \text{ et } X_0(\omega) \neq x, \dots, X_{n-1}(\omega) \neq x\} \in \sigma(X_0, \dots, X_n). \end{aligned}$$

Remarque 3.32. La $\sigma(X_0, \dots, X_n)$, où $\{X_n\}_{n \geq 0}$ est une suite de variables aléatoires définies sur l'espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$, vérifie que pour tout naturel n , $\sigma(X_0, \dots, X_n) \subseteq \sigma(X_0, \dots, X_n, X_{n+1})$. Lorsque une suite de sous-sigma algèbre $\{\mathcal{A}_n\}_{n \geq 0}$ de \mathcal{A} vérifie la propriété d'inclusion $\mathcal{A}_n \subseteq \mathcal{A}_{n+1}$, pour tout naturel n , elle est appelée **filtration**.

La propriété forte de Markov recourt encore à une autre notion. En voici, la définition :

Définition 3.33. Soit T un temps d'arrêt adapté à $\{X_n\}_{n \geq 0}$, une suite de variables aléatoires définie sur $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. La **sigma-algèbre des événements antérieurs à T** est définie par :

$$\mathcal{A}_T = \{A \in \mathcal{A} \mid \text{pour tout } n \geq 0, A \cap \{T \leq n\} \in \sigma(X_0, \dots, X_n)\}.$$

Dès à présent, énonçons la propriété forte de Markov, ainsi qu'une conséquence très utilisée par la suite.

Définition 3.34 (Propriété forte de Markov). Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$, une chaîne de Markov homogène dont l'ensemble des états est E et la matrice de transition $P = (p_{x|y})_{x,y \in E}$. Soit T un temps d'arrêt adapté à $\{X_n\}_{n \geq 0}$. Soit A un événement de la sigma-algèbre \mathcal{A}_T tel que $\mathbb{P}(T < \infty, A, X_T = x) > 0$. Alors, l'identité suivante est satisfaite pour tout naturel $r \geq 1$ et $x_1, \dots, x_r \in E$:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+r} = x_r \mid T < \infty, A, X_T = x) \\ = \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r \mid X_0 = x) \quad (3.4) \\ = p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r}. \end{aligned}$$

Démonstration. Posons,

$$\begin{aligned} A' &:= \{T < \infty, A, X_T = x\} \\ B &:= \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+r} = x_r\} \\ B_n &:= \{X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+r} = x_r\}, \text{ pour } n \geq 0. \end{aligned}$$

Au vu de ces notations, il faut montrer : $\mathbb{P}(B \mid A') = p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r}$, ou encore $\mathbb{P}(A', B) = p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r} \mathbb{P}(A')$. Comme,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(A', B) &= \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}(T = n, A, X_T = x, B) \\ &= \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}(T = n, A, X_n = x, B_n) \\ &= \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}(B_n \mid T = n, A, X_n = x) \cdot \mathbb{P}(T = n, A, X_n = x). \end{aligned}$$

et que dans cette somme, les seuls termes pris en compte, sont ceux tels que $\mathbb{P}(T < \infty, A, X_T = x) > 0$, nous pouvons utiliser la proposition 3.25. En effet, par définition de la sigma-algèbre \mathcal{A}_T , l'événement $\{T = n, A\}$ appartient à $\sigma(X_0, \dots, X_n)$. Nous avons donc :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(B_n \mid T = n, A, X_n = x) &= \mathbb{P}(B_n \mid X_n = x) \\ &= \mathbb{P}(X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+r} = x_r \mid X_n = x) \\ &= p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r}. \end{aligned}$$

De là, nous déduisons

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(A', B) &= p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r} \cdot \sum_{n \geq 0} \mathbb{P}(T = n, A, X_n = x) \\ &= p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r} \cdot \mathbb{P}(T < \infty, A, X_T = x). \end{aligned}$$

D'où, nous concluons $\mathbb{P}(B \mid A') = p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r}$. □

Théorème 3.35. *Conditionnellement à l'événement $\{R_0^y < \infty\}$, la suite translatée $\{X_{R_0^y+r}\}_{r \geq 0}$ est une chaîne de Markov homogène, de même matrice de transition P que la chaîne de Markov $\{X_r\}_{r \geq 0}$ et d'état initial y . De plus, la suite translatée $\{X_{R_0^y+r}\}_{r \geq 1}$ est indépendante de la sigma-algèbre $\mathcal{A}_{R_0^y}$.*

La sigma-algèbre $\mathcal{A}_{R_0^y}$ est définie de manière similaire que \mathcal{A}_T dans la définition 3.33. En d'autres termes, ce théorème traduit le fait que la suite $\{X_{R_0^y+r}\}_{r \geq 0}$ repart après le temps R_0^y en oubliant le passé, avec la même structure markovienne que la chaîne de Markov non translatée.

Démonstration. En considérant dans la propriété forte de Markov (définition 3.34) le temps d'atteinte R_0^y de la chaîne dans l'état y comme temps d'arrêt, nous avons que : pour $x = y$ (car $X_{R_0^y} = y$ puisque nous supposons $R_0^y < +\infty$)

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{R_0^y+1} = x_1, \dots, X_{R_0^y+r} = x_r \mid R_0^y < \infty, A) &= \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r \mid X_0 = y) \\ &= p_{y|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r} \end{aligned} \quad (3.5)$$

où A est un événement de la sigma-algèbre $\mathcal{A}_{R_0^y}$. □

Nous avons discuté comment à partir de l'équation (3.3), la propriété de Markov et la propriété d'homogénéité pouvaient être prouvées. Un même raisonnement s'applique ici sur base de l'équation (3.5) pour montrer que $\{X_{R_0^y+r}\}_{r \geq 0}$ est une chaîne de Markov homogène. En effet, pour l'homogénéité, en supposant que le temps R_0^y est fini, nous avons pour $x, y \in E$ et $r \geq 0$:

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}(X_{R_0^y+r+1} = z \mid X_{R_0^y+r} = x) \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_{R_0^y+r} = x, X_{R_0^y+r+1} = z)}{\mathbb{P}(X_{R_0^y+r} = x)} \\ &= \frac{\sum_{x_1 \in E} \cdots \sum_{x_{r-1} \in E} \mathbb{P}(X_{R_0^y+1} = x_1, \dots, X_{R_0^y+r-1} = x_{r-1}, X_{R_0^y+r} = x, X_{R_0^y+r+1} = z)}{\sum_{y_1 \in E} \cdots \sum_{y_{r-1} \in E} \mathbb{P}(X_{R_0^y+1} = y_1, \dots, X_{R_0^y+r-1} = y_{r-1}, X_{R_0^y+r} = x)} \\ &= \frac{\sum_{x_1 \in E} \cdots \sum_{x_{r-1} \in E} \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_{r-1} = x_{r-1}, X_r = x, X_{r+1} = z \mid X_0 = y)}{\sum_{y_1 \in E} \cdots \sum_{y_{r-1} \in E} \mathbb{P}(X_1 = y_1, \dots, X_{r-1} = y_{r-1}, X_r = x \mid X_0 = y)} \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_r = x, X_{r+1} = z \mid X_0 = y)}{\mathbb{P}(X_r = x \mid X_0 = y)} \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_0 = y, X_r = x, X_{r+1} = z)}{\mathbb{P}(X_0 = y, X_r = x)} \\ &= \mathbb{P}(X_{r+1} = z \mid X_0 = y, X_r = x) \end{aligned}$$

où la première égalité est une application de la définition de la probabilité conditionnelle et la troisième est obtenue en employant l'équation (3.5) avec $A = \Omega$. La condition $R_0^y < \infty$ ne se retrouve pas dans l'équation de la deuxième égalité puisque $\mathbb{P}(R_0^y < \infty) = 1$ comme la finitude du temps d'atteinte est supposée. La dernière expression est équivalente à $p_{x|z}$ car la propriété de Markov simple permet de ne pas tenir compte de l'événement $\{X_0 = y\}$ dans les probabilités.

Pour montrer que nous avons une chaîne de Markov, le raisonnement est pour

$A \in \mathcal{A}_{R_0^y}$:

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(X_{R_0^y+r+1} = x_{r+1} \mid A, X_{R_0^y+1} = x_1, \dots, X_{R_0^y+r} = x_r) \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_{R_0^y+1} = x_1, \dots, X_{R_0^y+r} = x_r, X_{R_0^y+r+1} = x_{r+1} \mid A)}{\mathbb{P}(X_{R_0^y+1} = x_1, \dots, X_{R_0^y+r} = x_r \mid A)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r, X_{r+1} = x_{r+1} \mid A, X_0 = y)}{\mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r \mid A, X_0 = y)} \\
&= \mathbb{P}(X_{r+1} = x_{r+1} \mid X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r, A, X_0 = y) \\
&\quad \cdot \frac{\mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r \mid A, X_0 = y)}{\mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r \mid A, X_0 = y)}
\end{aligned}$$

où la deuxième égalité est une simple application de l'équation (3.5) au numérateur et au dénominateur et la troisième est obtenue en employant la définition de la probabilité conditionnelle. D'un autre côté, la suite $\{X_r\}_{r \geq 0}$ est une chaîne de Markov, ce qui implique que la dernière égalité se réduit à :

$$\mathbb{P}(X_{r+1} = x_{r+1} \mid X_r = x_r).$$

Par homogénéité dans le temps, un décalage d'un temps R_0^y ne modifie pas les probabilités. Dès lors, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(X_{R_0^y+r+1} = x_{r+1} \mid A, X_{R_0^y} = y, X_{R_0^y+1} = x_1, \dots, X_{R_0^y+r} = x_r) \\
&= \mathbb{P}(X_{R_0^y+r+1} = x_{r+1} \mid X_{R_0^y+r} = x_r).
\end{aligned}$$

Remarque 3.36. Le raisonnement précédent peut être établi de manière totalement similaire pour le temps du $n^{\text{ème}}$ retour à l'état y . Par conséquent, l'équation (3.5) s'applique au temps du $n^{\text{ème}}$ retour à l'état y . Celui-ci est noté R_n^y et est défini dans la section *Irréductibilité, récurrence et transience*.

Remarque 3.37. En résumé pour le cas général, nous avons obtenu pour un temps d'arrêt T , l'équation (3.4) qui signale que pour tout événement A appartenant à la sigma-algèbre \mathcal{A}_T tel que $\mathbb{P}(T < \infty, A, X_T = x) > 0$, l'identité

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+r} = x_r \mid T < \infty, A, X_T = x) \\
&= \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_r = x_r \mid X_0 = x) \quad (3.6) \\
&= p_{x|x_1} \cdot p_{x_1|x_2} \cdots p_{x_{r-1}|x_r},
\end{aligned}$$

est satisfaite pour tout naturel $r \geq 1$ et $x_1, \dots, x_r \in E$. Mais cette équation « s'étend » aux événements de la sigma-algèbre $\mathcal{A}_{T+1, \infty}$. Cette « extension » exprime l'idée que la probabilité d'un événement $\mathcal{A}_{T+1, \infty}$ conditionné à un quelconque événement de \mathcal{A}_T et à l'événement $\{X_T = x\}$ revient à la probabilité de ce même événement décalé de T unités de temps sachant l'événement initial $\{X_0 = x\}$. Nous ne présentons pas

une preuve générale de cette propriété mais simplement un exemple d'application pour faciliter la compréhension de cette généralisation. La preuve générale n'est pas évidente. Les difficultés proviennent du fait que les informations connues concernent la probabilité des ensembles et non sur les ensembles en tant que tels. De plus, un même événement peut être défini sur base des événements élémentaires de différentes manières mais nous n'avons aucune garantie que la translation par T (ou $-T$) préserve ces égalités entre événements. En effet, il est possible de définir une chaîne de Markov telle que

$$\{X_k = x\} \cap \{X_l = y\} = \{X_n = z\},$$

mais qu'après translation de T ,

$$\{X_{T+k} = x\} \cap \{X_{T+l} = y\} \neq \{X_{T+n} = z\}.$$

En outre, la translation T (et $-T$) n'est définie que sur les événements élémentaires. Par conséquent, lorsque la forme des événements sur lesquels la translation est appliquée est plus complexe, il faut réécrire ces événements sous la forme d'unions disjointes d'événements élémentaires.

Voici maintenant l'exemple d'application. Pour cela, considérons $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov et x, y deux états. Alors, nous allons prouver l'égalité suivante :

$$\mathbb{P}(\exists m > 0 \ X_{T+m} = y \mid T < +\infty, X_T = x) = \mathbb{P}(\exists m > 0 \ X_m = y \mid X_0 = x). \quad (3.7)$$

L'ensemble

$$\{\omega \in \Omega; \exists m > 0, X_{T(\omega)+m}(\omega) = y\} = \bigcup_{m>0} \{\omega \in \Omega; X_{T(\omega)+m}(\omega) = y\} \in \mathcal{A}_{T+1, \infty}$$

et pour obtenir une union disjointe

$$\begin{aligned} & \bigcup_{m>0} \{\omega \in \Omega; X_{T(\omega)+m}(\omega) = y\} \cap \mathcal{C} \bigcup_{0 \leq m' < m} \{\omega \in \Omega; X_{T(\omega)+m'}(\omega) = y\} \\ &= \bigcup_{m>0} \{\omega \in \Omega; \forall 0 \leq m' < m, X_{T(\omega)+m'}(\omega) \neq y \text{ et } X_{T(\omega)+m}(\omega) = y\} \\ &= \bigcup_{m>0} \bigcup_{x_1 \in E \setminus \{y\}} \dots \bigcup_{x_{m-1} \in E \setminus \{y\}} \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m-1} = x_{m-1}, X_{T+m} = y\}. \end{aligned}$$

Mais grâce à l'équation (3.6) avec $A = \Omega$ et $r = m$, nous avons :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m-1} = x_{m-1}, X_{T+m} = y \mid T < +\infty, X_T = x) = \\ \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_{m-1} = x_{m-1}, X_m = y \mid X_0 = x) \end{aligned}$$

et comme ce sont des unions disjointes, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(\exists m > 0 \ X_{T+m} = y \mid T < +\infty, X_T = x) \\
&= \mathbb{P}\left(\bigcup_{m>0} \bigcup_{x_1 \in E \setminus \{y\}} \dots \bigcup_{x_{m-1} \in E \setminus \{y\}} \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m-1} = x_{m-1}, X_{T+m} = y\} \right. \\
&\qquad \qquad \qquad \left. \mid T < +\infty, X_T = x\right) \\
&= \sum_{m>0} \sum_{x_1 \in E \setminus \{y\}} \dots \sum_{x_{m-1} \in E \setminus \{y\}} \\
&\qquad \qquad \qquad \mathbb{P}(X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m-1} = x_{m-1}, X_{T+m} = y \mid T < +\infty, X_T = x) \\
&= \sum_{m>0} \sum_{x_1 \in E \setminus \{y\}} \dots \sum_{x_{m-1} \in E \setminus \{y\}} \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_{m-1} = x_{m-1}, X_m = y \mid X_0 = x) \\
&= \sum_{m>0} \mathbb{P}(X_m = y \mid X_0 = x) \\
&= \mathbb{P}(\exists m > 0, X_m = y \mid X_0 = x)
\end{aligned}$$

qui correspond à (3.7).

3.5 Mesures invariantes

Par souci de faciliter les calculs, nous allons utiliser les notations matricielles, dans cette section. Nous notons $\pi(0)$ pour le vecteur de la loi initiale $(p_{X_0}(1), \dots, p_{X_0}(J))$ et $\pi(n)$, pour le vecteur de probabilité à l'instant n , $(\mathbb{P}(X_n = 1), \dots, \mathbb{P}(X_n = J))$.

Par une simple application de la définition de probabilité conditionnelle, la relation de base suivante est évidente. Considérons une chaîne de Markov homogène et x état de $\{X_n\}_{n \geq 0}$, alors pour tout $n \geq 0$,

$$\mathbb{P}(X_n = x) = \sum_{k=1}^J \mathbb{P}(X_{n-1} = k) \cdot p_{k|x}.$$

Au vu des notations introduites, cette expression se réécrit comme $\pi(n) = \pi(n-1)P$, où P représente la matrice de transition associée à la chaîne.

Définition 3.38. Une mesure $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_J)$ sur E est **invariante** pour la chaîne de Markov homogène $\{X_n\}_{n \geq 0}$ avec P , comme matrice de transition, si elle satisfait l'équation :

$$\pi = \pi P$$

ou encore,

$$\forall x \in E \ \pi_x = \sum_{k=1}^J \pi_k \cdot p_{k|x}.$$

La notion de mesure invariante exprime l'idée que les probabilités sont stationnaires dans le temps, autrement dit, si à un moment n , la loi de X_n est π alors à tout instant ultérieur m , X_m est aussi de loi π . La proposition suivante transparaît bien cette idée.

Proposition 3.39. *Si π est une mesure invariante pour la chaîne de Markov homogène $\{X_n\}_{n \geq 0}$ et si la loi de X_n vaut π alors la loi de X_m vaut π quelque soit l'instant $m \geq n$.*

Démonstration. Soit $m \geq n \geq 0$ fixé et $\pi(n) = \pi$. Alors, au vu de la propriété de base et en utilisant les hypothèses, nous avons :

$$\begin{aligned}\pi(m) &= \pi(m-1)P \\ &= \pi(n)P^{m-n} \\ &= \pi.\end{aligned}$$

car par hypothèse, nous avons $\pi(n) = \pi$ et $\pi = \pi P$ et donc aussi $\pi = \pi P^k$ pour tout $k \geq 0$. \square

Exemple 3.40 (Un bruit qui court ...). Pour calculer la mesure invariante associée à la chaîne de Markov, il suffit de déterminer le vecteur (π_1, π_2) tel que :

$$(\pi_1 \quad \pi_2) = (\pi_1 \quad \pi_2) \begin{pmatrix} p & 1-p \\ 1-p & p \end{pmatrix}$$

La résolution du système nous amène à l'égalité entre π_1 et π_2 . Mais puisque nous avons la condition supplémentaire : $\pi_1 + \pi_2 = 1$, il est évident que la mesure invariante est $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

Une série de résultats concernant l'existence et l'unicité d'une mesure invariante existe. Dans le cadre de ce mémoire, ces résultats ne sont pas essentiels, seule la définition et l'intuition de cette invariance des probabilités dans le temps est importante et utilisée dans la suite.

3.6 Irréductibilité, récurrence et transience

Définition 3.41. Soient x et y deux états de E . L'état y est dit **accessible à partir de x** s'il existe un $n \geq 0$ tel que $p_{x|y}(n) > 0$. Cela est noté $x \rightarrow y$. Si nous avons simultanément que $x \rightarrow y$ et $y \rightarrow x$, nous notons $x \leftrightarrow y$ et nous disons que x et y **communiquent**.

Il est facile de montrer que la relation « \leftrightarrow » est une relation d'équivalence sur E . L'espace E peut donc être partitionné en classes d'équivalence pour cette relation. Remarquons que le cas où $n = 0$ n'est pas exclus. En effet, nous avons pour tout $x \in E$ $p_{x|x} = 1 > 0$. Par conséquent, $x \leftrightarrow x$ même s'il n'existe pas de flèche qui va de l'état x à l'état x .

Définition 3.42. Une chaîne de Markov est **irréductible**, si pour tous $x, y \in E$, la probabilité d'atteindre y partant de x est strictement positive, autrement dit : si tous les états communiquent entre eux ou encore s'il n'existe qu'une seule classe.

Illustrons ces notions sur les trois exemples qui suivent :

Exemple 3.43 (Un bruit qui court...). L'état « oui » est accessible à partir de l'état « non ». Pour le vérifier, il suffit de considérer $n = 1$, puisque $p_{\text{non}|\text{oui}}(1) = (1-p) > 0$. Le raisonnement est totalement similaire pour montrer que l'état « non » est accessible à partir de l'état « oui ». Il y a donc qu'une seule classe. D'où, cette chaîne est irréductible.

Exemple 3.44 (Le système du bonus-malus en assurance automobile.). Le processus est irréductible. En effet, pour les états 0 et 1, c'est clair qu'ils communiquent avec tous les autres (cf : figure 3.2). Par contre, l'état 2 communique directement (c'est-à-dire en une étape) avec les états 1, 3, 4, 5 et 6 et indirectement avec l'état 0. En effet, pour atteindre l'état 0, à partir de l'état 2, il faut passer par l'état 1. Une justification analogue montre que les états 3, 4, 5 et 6 communiquent avec les autres états de la chaîne.

Exemple 3.45. Considérons la chaîne de Markov dont le graphe est décrit dans la figure 3.4. Partant de n'importe quel état, la chaîne de Markov peut atteindre n'importe quel autre état avec une probabilité strictement positive. La communication entre deux états ne se fait pas nécessairement de manière directe, autrement dit en une étape (exemple : l'état 0 est accessible en une étape à partir de l'état 1), mais elle peut se faire par l'intermédiaire d'autres états (exemple : l'état 3 est accessible à partir de l'état 0 en passant par l'état 2). De ce constat, nous déduisons que tous les états communiquent entre-eux. Par conséquent, la chaîne ne dispose que d'une seule classe.

Exemple 3.46. Considérons la chaîne de Markov dont le graphe associé à la matrice de transition est celui de la figure 3.5. Dans cet exemple, l'état 0 n'est accessible à partir d'aucun autres états de la chaîne de Markov puisqu'aucune flèche ne pointe vers l'état 0. Par ailleurs, les états 1, 2, 3 et 4 communiquent entre-eux. Ils forment donc une classe. Par conséquent, cette chaîne dispose de deux classes : la classe $\{0\}$ et la classe $\{1, 2, 3, 4\}$, elle est donc non-irréductible.

Définition 3.47. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène et x , un état. Le **temps de première atteinte à l'état x** est la variable aléatoire réelle définie par :

$$R_0^x(\omega) = \inf\{l \geq 0; X_l(\omega) = x\},$$

avec la convention usuelle : $\inf \emptyset = +\infty$.

Si le temps de première atteinte à l'état x est nul alors le **temps du premier retour en x** est la variable aléatoire réelle définie par :

$$R_1^x(\omega) = \inf\{l \geq 1; X_l(\omega) = x\},$$

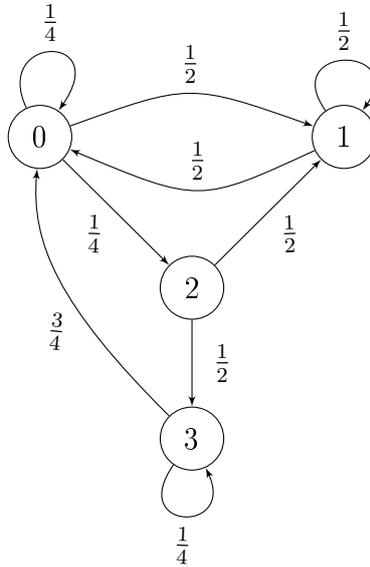


FIGURE 3.4 – Une chaîne de Markov irréductible.

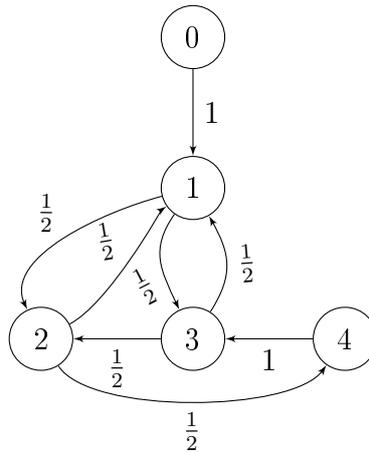


FIGURE 3.5 – Une chaîne de Markov non irréductible.

avec, de nouveau, la convention usuelle : $\inf \emptyset = +\infty$ (Ici : $R_1^x(\omega) = \infty$ si $X_l(\omega) \neq x$ pour tout $l \geq 1$).

Si par contre $X_0(\omega) = y$ alors $R_1^x(\omega) = R_0^x(\omega)$, c'est-à-dire que le temps du premier retour à x correspond au temps de première atteinte à x .

Maintenant, pour n fixé, nous définissons :

$$R_n^x(\omega) = \inf\{l > R_{n-1}^x(\omega); X_l(\omega) = x\},$$

le temps du $n^{\text{ème}}$ retour à x .

La définition suivante permet de classer les différents états d'une chaîne de Markov suivant que partant de cet état, le premier temps de retour à cet état est fini ou pas. Dans la suite, nous allons très souvent utiliser les notations $\mathbb{P}_x(A)$ où A est un événement pour $\mathbb{P}(A \mid X_0 = x)$ et $\mathbb{E}_x(X)$ pour $\mathbb{E}(X \mid X_0 = 0)$ où X est une variable aléatoire.

Définition 3.48. Un état $x \in E$ est **récurrent** si $\mathbb{P}_x(R_1^x < \infty) = 1$. Un état x récurrent est dit **récurrent positif** si de plus, $E_x(R_1^x) < \infty$ et **récurrent nul** si $E_x(R_1^x) = \infty$. Un état qui n'est pas récurrent est dit **transient**. Une chaîne de Markov irréductible est **récurrente** (respectivement **transiente**), si chaque état est récurrent (respectivement transient).

Vérifier qu'un état est récurrent ou transient sur base de la définition n'est pas toujours simple, c'est la raison pour laquelle nous proposons une caractérisation dont la preuve a été présentée dans le cadre du cours de probabilités et statistique III.

Proposition 3.49. Soit $x \in E$. Les assertions suivantes sont équivalentes,

- (1) x est récurrent
- (2) $\mathbb{P}_x(X_n = x \text{ une infinité de fois}) = 1$
- (3) $\mathbb{P}_x(X_n = x \text{ une infinité de fois}) > 0$
- (4) $\sum_{n=0}^{\infty} p_{x|x}(n) = +\infty$

Remarque 3.50. Notons N^x , le nombre de fois que l'état x est visité, alors x est un état récurrent si $\mathbb{P}_x(N^x = \infty) = 1$.

Avant de donner quelques exemples d'états récurrents, transients,... nous allons présenter une proposition qui caractérise les états d'une chaîne de Markov irréductible.

Proposition 3.51. Soient x et y deux états d'une chaîne de Markov homogène définie sur l'espace des états E . Si x et y communiquent et si x est récurrent alors y l'est aussi.

Démonstration. Comme $x \leftrightarrow y$, nous savons qu'il existe deux entiers n_1 et n_2 , tels que $p_{x|y}(n_1) > 0$ et $p_{y|x}(n_2) > 0$. Mais grâce à la relation de Chapman-Kolmogorov (proposition 3.21), nous avons

$$\sum_{n \in \mathbb{N}} p_{y|y}(n_2 + n + n_1) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \sum_{k \in E} \sum_{l \in E} p_{y|k}(n_2) \cdot p_{k|l}(n) \cdot p_{l|y}(n_1) \geq \sum_{n \in \mathbb{N}} p_{y|x}(n_2) \cdot p_{x|x}(n) \cdot p_{x|y}(n_1)$$

où l'inégalité est obtenue en considérant uniquement le cas $k = l = x$. Mais, puisque x est récurrent et que $p_{x|y}(n_1)$ et $p_{y|x}(n_2)$ sont tous deux strictement positifs, le terme à l'extrême droite est infini. De là, nous concluons que y est également récurrent. \square

Grâce à ce résultat, une chaîne de Markov irréductible est soit une classe récurrente, soit une classe transiente.

De nombreux résultats sur la classification des états existent mais un, en particulier a attiré notre attention. Ce résultat utilise la notion de classe fermée dont la définition est donnée ci-dessous. Par contre, la preuve n'est pas présentée dans le cadre de ce mémoire mais s'y retrouve dans le cours de probabilités et statistique III.

Définition 3.52. Une classe est dite **fermée** si la chaîne de Markov ne peut la quitter. Autrement dit, si pour tout état $x \in \mathcal{C}$ et pour tout état $y \notin \mathcal{C}$, y n'est pas accessible à partir de x alors la classe \mathcal{C} est fermée. Dans le contraire, la classe \mathcal{C} est non-fermée

Proposition 3.53. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène définie sur un espace d'états fini. Alors,

- Chaque classe fermée est récurrente positive.
- Chaque classe non-fermée est transiente.

Cette propriété nous intéresse, puisqu'étant presque toujours sous l'hypothèse que l'espace des états est fini et que la chaîne de Markov est irréductible, nous pouvons déduire que dès qu'une classe est fermée, elle est, en réalité, récurrente positive.

Illustrons la classification des états sur ces trois exemples.

Exemple 3.54. Puisque la chaîne de Markov représentée dans la figure 3.4 est irréductible, et que l'unique classe de la chaîne est fermée, nous avons que $\{0, 1, 2, 3\}$ est une classe récurrente positive. Quant à la classe $\{0\}$, elle est transiente puisqu'elle est non fermée. L'état $1 \notin \{0\}$ et il est pourtant accessible à partir de l'état 0.

Exemple 3.55. En utilisant la proposition 3.53, nous pouvons nous assurer que la classe $\{1,2,3,4\}$ de la chaîne de Markov représentée à la figure 3.5 est récurrente positive puisqu'elle est, en effet, fermée.

Exemple 3.56 (Un bruit qui court...). La classe formée par les états oui et non étant fermée, est l'unique classe récurrente positive.

3.7 Propriétés sur les temps de retours et les excursions d'une chaîne de Markov

Le premier objectif de cette section est de montrer qu'une chaîne de Markov homogène visite un état y transient un nombre fini de fois, quelque soit son point de départ x dans la même classe que y . Pour cela, certaines propositions intermédiaires, tirées de [?] et complétées, sont indispensables. Rappelons que N^y signifie le nombre de visites de l'état y .

Proposition 3.57. Soient x et y deux éléments de l'espace des états E d'une chaîne de Markov homogène. Alors pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$\mathbb{P}_x(N^y \geq n + 1) = \mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty) \cdot \mathbb{P}_y(N^y \geq n). \quad (3.8)$$

Démonstration. La première étape de cette preuve est de se rendre compte de l'inclusion des ensembles suivante :

$$\{\omega \in \Omega; N^y(\omega) \geq n + 1\} \subseteq \{\omega \in \Omega; R_1^y(\omega) < +\infty\}.$$

Dès lors,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(N^y \geq n + 1) &= \mathbb{P}_x(\{N^y \geq n + 1\} \cap \{R_1^y < +\infty\}) \\ &= \mathbb{P}(N^y \geq n + 1 \mid R_1^y < +\infty, X_0 = x) \cdot \mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Mais l'événement $\{N^y \geq n + 1 \text{ et } X_{R_1^y} = y\}$ est équivalent à

$$\begin{aligned} B &= \{\omega \in \Omega; N^y(\omega) \geq n + 1 \text{ et } X_{R_1^y}(\omega) = y\} \\ &= \{\omega \in \Omega; \exists i_n > i_{n-1} > \dots > i_1 > 0 \text{ tels que } \forall j = 1, \dots, n \ X_{R_1^y(\omega) + i_j}(\omega) = y \\ &\quad \text{et } X_{R_1^y}(\omega) = y\} \\ &= \bigcup_{i_n > i_{n-1} > \dots > i_1 > 0} \bigcap_{j=1, \dots, n} \{\omega \in \Omega; X_{R_1^y + i_j}(\omega) = y \text{ et } X_{R_1^y}(\omega) = y\} \in \mathcal{A}_{R_1^y, \infty} \end{aligned}$$

Donc, par la remarque 3.37 avec $A = \{X_0 = x\} \in \mathcal{A}_{R_1^y}$ et R_1^y comme temps d'arrêt, nous obtenons

$$\mathbb{P}(B \mid R_1^y < +\infty, X_0 = x) = \mathbb{P}(C \mid X_0 = y),$$

où C correspond à l'ensemble B où tout a été décalé de R_1^y unités de temps,

$$\begin{aligned} C &= \{\omega \in \Omega; \exists i_n > i_{n-1} > \dots > i_1 > 0 \text{ tels que } \forall j = 1, \dots, n \ X_{i_j}(\omega) = y \\ &\quad \text{et } X_0(\omega) = y\} \\ &= \{\omega \in \Omega; N^y(\omega) \geq n \text{ et } X_0(\omega) = y\}. \end{aligned}$$

L'égalité obtenue peut encore se réécrire comme

$$\mathbb{P}_x(N^y \geq n + 1 \mid R_1^y < +\infty, X_0 = x) = \mathbb{P}(N^y \geq n \mid X_0 = y).$$

D'où, en remplaçant ce résultat dans l'équation (3.9), l'équation (3.8) est obtenue. \square

Proposition 3.58. *Si y est un état transient alors $\mathbb{E}_y(N^y) < +\infty$.*

Démonstration. Par définition que y est transient, nous avons que $\mathbb{P}_y(R_1^y < +\infty) < 1$. Pour simplifier les notations, cette probabilité est notée α_y . L'équation (3.8) pour $x = y$ est pour tout $n \geq 0$:

$$\mathbb{P}_y(N^y \geq n + 1) = \alpha_y \cdot \mathbb{P}_y(N^y \geq n) = (\alpha_y)^{n+1}.$$

Mais,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_y(N^y) &= \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n \cdot \mathbb{P}_y(N^y = n) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{N}} \mathbb{P}_y(N^y \geq n + 1) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{N}} (\alpha_y)^{n+1}. \end{aligned}$$

Dès lors, puisque $\sum_{n \in \mathbb{N}} (\alpha_y)^{n+1}$ est une série et que $\alpha_y < 1$, l'espérance de N^y conditionné par l'événement $\{X_0 = y\}$ se réécrit sous la forme :

$$\frac{\alpha_y}{1 - \alpha_y}$$

qui est bien entendu fini. □

Proposition 3.59. *Si y est un état transient et que x est un état de la même classe que y alors $\mathbb{E}_x(N^y) < +\infty$.*

Démonstration. Par définition de l'espérance de N^y conditionné par l'événement $\{X_0 = x\}$, nous avons :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_x(N^y) &= \sum_{n \in \mathbb{N}} \mathbb{P}_x(N^y \geq n + 1) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{N}} \mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty) \cdot \mathbb{P}_y(N^y \geq n). \end{aligned}$$

Cette dernière égalité est obtenue grâce à l'équation (3.8) et revient simplement à $\mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty) \cdot (1 + \mathbb{E}_y(N^y))$. Nous obtenons que $\mathbb{E}_x(N^y) < +\infty$ car c'est le produit de deux termes finis. Le premier est une probabilité et donc, sa valeur est finie. Par la proposition 3.58, le deuxième est également fini. □

Ces trois propositions permettent de conclure qu'une chaîne de Markov homogène ne peut visiter un état transient y qu'un nombre fini de fois, quelque soit son point de départ x dans la même classe que y . Mathématiquement, cela se note : $\mathbb{P}_x(N^y < +\infty) = 1$. En effet, par la proposition 3.59, nous avons que $\mathbb{E}_x(N^y) < +\infty$, et donc, $\mathbb{P}_x(N^y < +\infty)$ est nécessairement égale à 1. La contraposée de cette implication se montre facilement.

Avant d'entamer une série de propriétés sur les chaînes de Markov homogènes, récurrentes et irréductibles, nous allons montrer un résultat qui sera utilisé dans ces propriétés.

Proposition 3.60. *Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène et récurrente. Alors pour tout $x \in E$, les temps de retour R_n^x ($n \geq 0$) sont tous fini \mathbb{P}_x -p.s.*

Démonstration. D'un côté, puisque x est récurrent, nous avons que $\mathbb{P}_x(N^x = \infty) = 1$. D'un autre côté, il est clair que : si $N^x = \sum_{l \geq 0} \mathbf{1}_{\{X_l = x\}}$ (le nombre de fois que la chaîne visite l'état x) alors pour tout entier n , comme $\{X_0 = x\}$

$$N^x \geq n + 1 \Leftrightarrow R_n^x < \infty.$$

Or, $\{N^x = \infty\} = \bigcap_{n \in \mathbb{N}} \{N^x \geq n + 1\}$, ce qui implique

$$1 = \mathbb{P}_x(N^x = \infty) \leq \mathbb{P}_x(N^x \geq n + 1).$$

Par l'équivalence ci-dessus, nous pouvons conclure que $\mathbb{P}_x(R_n^x < \infty) = 1$. □

Pour la preuve de la proposition suivante, nous nous sommes inspirés du cours donné dans la référence [?].

Proposition 3.61. *Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène, récurrente et irréductible. Alors pour tout $y \in E$, le temps du premier retour R_1^y est fini \mathbb{P}_x -p.s, quelque soit l'état de départ x .*

Remarque 3.62. Cette proposition contrairement à la précédente (proposition 3.60) nécessite l'hypothèse supplémentaire d'irréductibilité. En effet, considérons la chaîne de Markov décrite à la figure 3.6. Elle a deux classes d'équivalence : $\{1,2,3\}$ et $\{4,5\}$, elle est donc bien non-irréductible. Ces deux classes sont toutes deux récurrentes positives et donc en particulier récurrentes, puisqu'elles sont finies et fermées (proposition 3.53). Par contre, partant d'un état x d'une classe (exemple : $x = 1$), la probabilité que le premier retour à un état y de l'autre classe (exemple : $y = 5$) ne vaudra jamais 1. Cette probabilité sera toujours nulle, car ces deux états ne communiquent pas. La condition d'irréductibilité est donc indispensable pour la proposition 3.61.

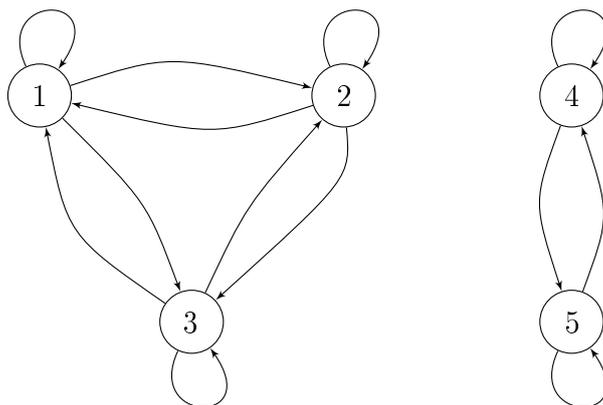


FIGURE 3.6 – Une chaîne de Markov récurrente et non irréductible.

Démonstration. Sans perdre de généralité, nous supposons que $x \neq y$. Nous allons structurer cette preuve en trois étapes.

1. Vérifier que $\mathbb{P}_x(R_1^y > R_1^x) < 1$.
2. Montrer que pour tout naturel $k \geq 1$, $\mathbb{P}_x(R_1^y > R_{k+1}^x) = \mathbb{P}_x(R_1^y > R_k^x) \cdot \mathbb{P}_x(R_1^y > R_1^x)$
3. Conclure que $\mathbb{P}_x(R_1^y = +\infty) = 0$

Preuve du point 1. Supposons au contraire : $\mathbb{P}_x(R_1^y > R_1^x) = 1$ et obtenons une contradiction. De manière équivalente, nous supposons que $\mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_1^x) = 0$. Montrons par récurrence que pour tout naturel $k \geq 1$

$$\mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_k^x) = 0.$$

Pour le cas de base ($k = 1$), nous avons : $\mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_1^x) = 0$, par hypothèse. Dès lors, supposons que $\mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_k^x) = 0$ et vérifions la propriété pour $k + 1$,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_{k+1}^x) &= \mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_k^x \text{ ou } R_k^x < R_1^y \leq R_{k+1}^x) \\ &= \mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_k^x) + \mathbb{P}_x(R_k^x < R_1^y \leq R_{k+1}^x) \\ &= \mathbb{P}_x(R_k^x < R_1^y \leq R_{k+1}^x).\end{aligned}$$

Or,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_x(R_k^x < R_1^y \leq R_{k+1}^x) &= \mathbb{P}_x(\exists m > 0 \ X_{R_k^x+m} = y \text{ et } \forall 0 < m' < m \ X_{R_k^x+m'} \neq x \text{ et } R_k^x < R_1^y) \\ &= \mathbb{P}(\exists m > 0 \ X_{R_k^x+m} = y \text{ et } \forall 0 < m' < m \ X_{R_k^x+m'} \neq x \mid R_k^x < R_1^y, X_0 = x) \\ &\quad \cdot \mathbb{P}_x(R_k^x < R_1^y) \\ &= \mathbb{P}(\exists m > 0 \ X_m = y \text{ et } \forall 0 < m' < m \ X_{m'} \neq x \mid X_0 = x) \\ &= \mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_k^x)\end{aligned}$$

qui vaut 0 (hypothèse de récurrence). Pour obtenir la troisième égalité, nous avons utilisé le fait que $\mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_1^x) = 0$ et appliqué la remarque 3.37 avec R_k^x comme temps d'arrêt qui est fini car la chaîne est homogène récurrente (proposition 3.60) mais aussi avec

$$\begin{aligned}A &= \{R_k^x < R_1^y\} \cap \{X_0 = x\} = \{\forall l > 0, l \leq R_k^x \Rightarrow X_l \neq y\} \cap \{X_0 = x\} \in \mathcal{A}_{R_k^x} \\ B &= \{\exists m > 0 \ X_{R_k^x+m} = y \text{ et } \forall 0 < m' < m \ X_{R_k^x+m'} \neq x\} \in \mathcal{A}_{R_k^x, \infty}.\end{aligned}$$

D'un autre côté, comme la suite des événements $\{R_1^y \leq R_k^x\}_{k \geq 0}$ est croissante, en passant à la limite sur k , il en vient que :

$$\mathbb{P}_x(R_1^y \leq R_k^x) \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} \mathbb{P}_x\left(\bigcup_{k \geq 1} \{R_1^y \leq R_k^x\}\right) = \mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty).$$

Par conséquent, $\mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty) = 0$. Or, la chaîne est irréductible, ce qui signifie qu'il existe un naturel $p \geq 0$, tel que $\mathbb{P}(X_p = y \mid X_0 = x) > 0$. Nous avons obtenu une contradiction car $\{\omega \in \Omega; X_p(\omega) = y\} \subseteq \{\omega \in \Omega; R_1^y(\omega) < +\infty\}$ implique

$$0 < \mathbb{P}_x(X_p = y) \leq \mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty) = 0.$$

Preuve du point 2. Pour prouver cette égalité entre probabilités, il faut premièrement se rendre compte de l'inclusion des ensembles suivants :

$$\{\omega \in \Omega \mid R_1^y(\omega) > R_{k+1}^x(\omega)\} \subset \{\omega \in \Omega \mid R_1^y(\omega) > R_k^x(\omega)\}.$$

Dès lors, $\mathbb{P}_x(R_1^y > R_{k+1}^x) = \mathbb{P}_x(R_1^y > R_{k+1}^x \text{ et } R_1^y > R_k^x)$ est une égalité triviale. D'un autre côté, une réécriture des événements peut se faire de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\{R_1^y > R_{k+1}^x\} &= \{\forall l > 0 \ X_{R_k^x+l} = y \Rightarrow (\exists 0 < l^* < l \ X_{R_k^x+l^*} = x)\} \cap \{R_1^y > R_k^x\} \\ \{R_1^y > R_k^x\} &= \{\forall l > 0 \ l \leq R_k^x \Rightarrow X_l \neq y\}.\end{aligned}$$

En appliquant premièrement, la définition de probabilité conditionnelle et en tenant compte du premier ensemble défini ci-dessous, nous avons :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_x(R_1^y > R_{k+1}^x \text{ et } R_1^y > R_k^x) \\ &= \mathbb{P}_x(\forall l > 0 \quad X_{R_k^x+l} = y \Rightarrow (\exists 0 < l^* < l \quad X_{R_k^x+l^*} = x) \mid R_1^y > R_k^x) \cdot \mathbb{P}_x(R_1^y > R_k^x). \end{aligned}$$

Mais au vu de la définition ensembliste que nous avons donnée des événements $\{R_1^y > R_{k+1}^x\}$ et $\{R_1^y > R_k^x\}$, il est clair que le premier appartient à la sigma-algèbre $\mathcal{A}_{R_k^x+1,\infty}$ et le deuxième à $\mathcal{A}_{R_k^x}$. D'où, au vu de la remarque 3.37 appliquée de manière similaire qu'au point 1, nous obtenons :

$$\mathbb{P}_x(\forall l > 0 \quad X_l = y \Rightarrow (\exists 0 < l^* < l \quad X_{l^*} = x) \mid X_0 = x) \cdot \mathbb{P}_x(R_1^y > R_k^x),$$

ce qui est équivalent à

$$\mathbb{P}_x(R_1^y > R_1^x) \cdot \mathbb{P}_x(R_1^y > R_k^x).$$

Le point 2 est désormais prouvé.

Preuve du point 3.

$$\mathbb{P}_x(R_1^y = +\infty) = \mathbb{P}_x(\bigcap_{k \geq 1} \{R_1^y > R_{k+1}^x\}) \leq \mathbb{P}_x(R_1^y > R_{k+1}^x)$$

Mais par un application successive du point 2, nous avons que pour tout $k \geq 1$,

$$\mathbb{P}_x(R_1^y = +\infty) \leq \mathbb{P}_x(R_1^y > R_1^x)^k.$$

En passant à la limite sur k , nous obtenons que $\mathbb{P}_x(R_1^y = +\infty) = 0$, car $\lim_{k \rightarrow +\infty} c^k = 0$ avec $c = \mathbb{P}_x(R_1^y > R_1^x) < 1$ (Point 1). \square

Remarque 3.63. Grâce à la proposition 3.61, nous avons pour une chaîne de Markov homogène, récurrente et irréductible que $\mathbb{P}(R_1^y < +\infty) = 1$ pour n'importe quel état y . En effet, nous avons montré qu'en commençant par n'importe quel état $x \in E$, la $\mathbb{P}_x(R_1^y < +\infty) = 1$. La preuve de la proposition 3.61 s'adapte facilement à tous les temps de retour à y . Par conséquent, nous avons pour tout $x \in E$ et pour tout $n \geq 1$ $\mathbb{P}(R_n^y < \infty) = 1$. Cette constatation va être très utile dans la suite de ce mémoire, particulièrement lorsque nous allons appliquer la **propriété forte de Markov**. En effet, celle-ci demande un conditionnement par un temps d'arrêt fini. Dès lors, pour les chaînes de Markov homogène, récurrente et irréductible, il est inutile de conditionner par le temps d'arrêt, puisque celui-ci est de probabilité 1.

La trajectoire de la chaîne entre deux temps de retours successifs défini par

$$(X_{R_n^x}, X_{R_n^x+1}, \dots, X_{R_{n+1}^x})$$

est appelée la $n^{\text{ème}}$ excursion de la chaîne à l'état x . Le résultat suivant est intuitif et sera très utile dans la preuve concernant le comportement asymptotique du nombre moyen de visites dans un état, développé dans la section suivante : *Résultats de convergence*. La rédaction de cette preuve a été basée sur un chapitre référencé dans [?] mais des points sous-entendus dans la preuve originale ont du être détaillés .

Proposition 3.64. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène, récurrente et irréductible. Alors pour tout $x \in E$, les variables aléatoires

$$Y_n := (R_{n+1}^x - R_n^x, X_{R_n^x}, X_{R_n^x+1}, \dots, X_{R_{n+1}^x}) \quad n \geq 0$$

sont indépendantes et identiquement distribuées pour \mathbb{P}_x .

Plus précisément, nous montrons, pour tout $n \geq 0$ et pour tout $y_0, \dots, y_n \in E^{\text{traj}}$,

$$\mathbb{P}_x(Y_0 = y_0, \dots, Y_n = y_n) = \prod_{k=0}^n \mathbb{P}_x(Y_0 = y_k). \quad (3.10)$$

Avant de prouver ce résultat, nous aimerions faire quelques remarques.

Remarque 3.65. L'ensemble E^{traj} correspond à $\cup_{k \geq 1} \{k\} \times E^{k+1}$ avec E l'espace des états.

Il peut sembler surprenant d'avoir l'indépendance de deux variables consécutives Y_{n-1} et Y_n , puisque la dernière composante de Y_{n-1} correspondant à la première de Y_n . Comme la chaîne est homogène, récurrente et irréductible, nous sommes sous l'hypothèse que les temps de retours sont finis, l'événement $\{X_{R_n^x} = x\}$ est donc de probabilité égale à 1. Dès lors, retirer ou ajouter cet événement, ne change pas les probabilités ($\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A)$, si $\mathbb{P}(B) = 1$). L'indépendance de ces deux variables n'est donc pas déraisonnable.

Démonstration. Pour un $y = (r, x_0, \dots, x_r) \in E^{\text{traj}}$, nous allons utiliser les notations $t_y = r$ et $y(k) = x_k$ pour $0 \leq k \leq r$.

Pour $n \geq 1$ et $y_0, \dots, y_n \in E^{\text{traj}}$, nous dirons que la suite des excursions (y_0, y_1, \dots, y_n) est **compatible** si toutes les excursions débutent et se terminent en x et si les deux retours à x sont successifs. Mathématiquement, cela s'écrit :

- $y_k(0) = y_k(t_{y_k}) = x$ pour tout $0 \leq k \leq n$
- $y_k(l) \neq x$ pour tout $1 \leq k \leq n$ et pour tout $0 < l < t_{y_k}$.

Supposons, dans un premier temps, que la suite des excursions (y_0, y_1, \dots, y_n) n'est pas compatible. Mais, pour un naturel k^* compris entre 1 et n tel que $y_{k^*}(0) \neq x$ ou $y_{k^*}(t_{y_{k^*}}) \neq x$, nous avons que le terme de gauche de l'équation (3.10) s'annule. En effet, nous constatons que

$$\{\omega; Y_0(\omega) = y_{k^*}\} \subseteq \{\omega; X_{R_0^x(\omega)}(\omega) = y_{k^*}(0)\}$$

et

$$\{\omega; Y_0(\omega) = y_{k^*}\} \subseteq \{\omega; X_{R_1^x(\omega)}(\omega) = y_{k^*}(t_{y_{k^*}})\}.$$

Et puisque si l'ensemble de droite est de probabilité \mathbb{P}_x nulle, alors celui de gauche l'est automatiquement. D'un autre côté, s'il existe un naturel k^* compris entre 1 et n et un l^* strictement compris entre 0 et $t_{y_{k^*}}$ tel que $y_{k^*}(l^*) = x$ alors, $\mathbb{P}_x(Y_0 = y_{k^*}) = 0$ car l'ensemble $\{\omega; X_{R_0^x+l^*}(\omega) = x\}$ est de probabilité \mathbb{P}_x puisque l'écart entre deux temps de retour à x est $t_{y_{k^*}}$ et que $\{\omega; Y_0(\omega) = y_{k^*}\} \subseteq \{\omega; X_{R_0^x+l^*}(\omega) = x\}$. L'équation (3.10) est donc prouvée dans le cas où la suite des excursions n'est pas compatible.

Supposons, maintenant, que la suite des excursions (y_0, y_1, \dots, y_n) est compatible. L'événement $\{Y_n = y_n\}$ peut se réécrire sous la forme $\{R_{n+1}^x - R_n^x = t_{y_n}, X_{R_n^x} = y_n(0), X_{R_n^x+1} = y_n(1), \dots, X_{R_n^x+t_{y_n}} = y_n(t_{y_n})\}$. Ou encore, puisque nous supposons que la suite des excursions est compatible, $\{X_{R_n^x} = x, X_{R_n^x+1} = y_n(1), \dots, X_{R_n^x+t_{y_n}} = x\}$. Dès lors,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_x(Y_0 = y_0, \dots, Y_n = y_n) \\ &= \mathbb{P}(Y_0 = y_0, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}, X_{R_n^x} = x, X_{R_n^x+1} = y_n(1), \dots, X_{R_n^x+t_{y_n}} = x \mid X_0 = x) \\ &= \mathbb{P}(X_{R_n^x+1} = y_n(1), \dots, X_{R_n^x+t_{y_n}} = x \mid X_0 = x, X_{R_n^x} = x, Y_0 = y_0, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}) \\ &\quad \cdot \mathbb{P}(Y_0 = y_0, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}, X_{R_n^x} = x \mid X_0 = x) \\ &= \mathbb{P}(X_1 = y_n(1), \dots, X_{t_{y_n}} = x \mid X_0 = x) \cdot \mathbb{P}_x(Y_0 = y_0, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}, X_{R_n^x} = x) \end{aligned}$$

où la dernière égalité est obtenue en appliquant l'équation (3.5) du théorème 3.35, concernant la propriété de Markov forte, avec $A = \{Y_0 = y_0, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}\} \cap \{X_0 = x\} \in \mathcal{A}_{R_n^x}$. L'application de celle-ci ne pose aucun souci puisqu'étant sous l'hypothèse que la chaîne est homogène, récurrente et irréductible, le $n^{\text{ème}}$ temps de retour R_n^x est fini p.s (remarque 3.63). De plus, comme l'événement $\{X_{R_n^x} = x\}$ est la dernière des conditions de l'événement $\{Y_{n-1} = y_{n-1}\}$, il est redondant et peut donc être retiré de la deuxième probabilité.

D'un autre côté, puisque sous \mathbb{P}_x , $R_0^x = 0$, la dernière équation est équivalente à :

$$\mathbb{P}(X_0 = x, X_{R_0^x+1} = y_n(1), \dots, X_{R_0^x+t_{y_n}} = x \mid X_0 = x) \cdot \mathbb{P}_x(Y_0 = y_0, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1})$$

Cette égalité revient à $\mathbb{P}_x(Y_0 = y_n) \cdot \mathbb{P}_x(Y_0 = y_0, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1})$. Mais si la suite des excursions (y_0, y_1, \dots, y_n) est compatible, il en est de même pour les suites (y_0, y_1, \dots, y_k) où k est entier tel que $1 \leq k \leq n$. En itérant le raisonnement précédent, nous obtenons l'équation (3.10). Et puisque cette égalité est également obtenue dans le cas où la suite des excursions n'est pas compatible, nous l'avons pour tout $n \geq 1$ et pour tout $y_0, y_1, \dots, y_n \in E^{\text{traj}}$. \square

Avant de prouver le résultat concernant la convergence du nombre moyen de visites dans un état, nous allons citer et prouver un corollaire de la proposition 3.64 et un lemme qui seront utiles dans la preuve de la proposition 3.68.

Corollaire 3.66. *Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène, récurrente et irréductible. Pour tout $x \in E$. Alors la suite des variables aléatoires*

$$\{R_{n+1}^x - R_n^x\}_{n \geq 0},$$

sont indépendantes et identiquement distribuées sous \mathbb{P}_x .

Démonstration. Les variables $\{R_{n+1}^x - R_n^x\}_{n \geq 0}$ sont, en réalité, les premières composantes des variables $\{Y_n\}_{n \geq 0}$ définies dans la proposition 3.64. Grâce à la proposition 3.64, les variables $\{Y_n\}_{n \geq 0}$ sont indépendantes et identiquement distribuées sous

\mathbb{P}_x et par conséquent les variables $\{R_{n+1}^x - R_n^x\}_{n \geq 0}$ le sont également. En effet, il suffit d'utiliser l'argument de marginalisation pour s'en convaincre. Ce dernier permet d'écrire pour des entiers $l_0, \dots, l_n \geq 1$:

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}_x((R_1^x - R_0^x) = l_0, \dots, (R_{n+1}^x - R_n^x) = l_n) \\
&= \sum_{j_{0,0}, \dots, j_{0,l_0} \in E} \dots \sum_{j_{n,0}, \dots, j_{n,l_n} \in E} \mathbb{P}_x(R_1^x - R_0^x = l_0, X_{R_0^x} = j_{0,0}, X_{R_0^x+1} = j_{0,1}, \dots, \\
& X_{R_0^x+l_0} = j_{0,l_0}, \dots, R_{n+1}^x - R_n^x = l_n, X_{R_n^x} = j_{n,0}, X_{R_n^x+1} = j_{n,1}, \dots, X_{R_n^x+l_n} = j_{n,l_n}) \\
&= \sum_{j_{0,0}, \dots, j_{0,l_0} \in E} \dots \sum_{j_{n,0}, \dots, j_{n,l_n} \in E} \mathbb{P}_x(Y_0 = (l_0, j_{0,0}, \dots, j_{0,l_0}), \dots, Y_n = (l_n, j_{n,0}, \dots, j_{n,l_n})).
\end{aligned}$$

La $\sum_{j_{k,0}, \dots, j_{k,l_k} \in E}$ ($0 \leq k \leq n$) est une notation pour $\sum_{j_{k,0} \in E}, \dots, \sum_{j_{k,l_k} \in E}$ qui permet de réduire considérablement le nombre de sommes dans les expressions ci-dessus.

Or, comme les variables $\{Y_n\}_{n \geq 0}$ sont iid sous \mathbb{P}_x , la dernière expression se réécrit :

$$\sum_{j_{0,0}, \dots, j_{0,l_0} \in E} \dots \sum_{j_{n,0}, \dots, j_{n,l_n} \in E} \prod_{k=0}^n \mathbb{P}_x(Y_0 = (l_k, j_{k,0}, \dots, j_{k,l_k})),$$

ou encore,

$$\prod_{k=0}^n \mathbb{P}_x(R_1^x - R_0^x = l_k).$$

□

Lemme 3.67. Soient $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène, récurrente et irréductible et y un état de la chaîne. Alors, pour tout naturel $k \geq 1$,

$$\mathbb{P}_x(R_1^y - R_0^y = k) = \mathbb{P}_x(R_1^y - R_0^y = k \mid X_{R_0^y} = y) = \mathbb{P}_y(R_1^y = k).$$

Démonstration. Tout d'abord, la première égalité est satisfaite car l'événement $\{X_{R_0^y} = y\}$ est de probabilité \mathbb{P}_x et est égale à 1 car nous sommes sous l'hypothèse que la chaîne de Markov est homogène, récurrente et irréductible ($\mathbb{P}_x(R_0^y < +\infty) = 1$: proposition 3.61).

Ensuite, il faut se rendre compte que si l'écart entre deux temps de retour à y est k alors cela signifie que pendant k unités de temps, la chaîne de Markov ne visitera pas l'état y . La probabilité $\mathbb{P}_x(R_1^y - R_0^y = k \mid X_{R_0^y} = y)$ peut alors se réécrire sous la forme :

$$\mathbb{P}(X_{R_0^y} = y, X_{R_0^y+1} \neq y, \dots, X_{R_0^y+(k-1)} \neq y, X_{R_0^y+k} = y \mid X_0 = x, X_{R_0^y} = y)$$

ou encore en utilisant une propriété des probabilités conditionnelles, et le fait que $\mathbb{P}(X_{R_0^y} = y \mid X_0 = x, X_{R_0^y} = y) = 1$,

$$\mathbb{P}(X_{R_0^y+1} \neq y, \dots, X_{R_0^y+(k-1)} \neq y, X_{R_0^y+k} = y \mid X_0 = x, X_{R_0^y} = y).$$

Mais l'événement $\{X_{R_0^y+l} \neq y\}$ est équivalent à l'union disjointe des événements $\{X_{R_0^y+l} = i\}$ pour $i \neq y$. Ce même raisonnement s'applique pour tout $1 \leq l \leq (k-1)$. Comme nous sommes sous l'hypothèse que la chaîne de Markov est homogène, récurrente et irréductible, le temps d'arrêt R_0^y est fini par la remarque 3.63. Dès lors en appliquant le théorème 3.35 avec $A = \{X_0 = x\} \in \mathcal{A}_{R_0^y}$, il ne reste donc que le membre de droite,

$$\mathbb{P}(X_1 \neq y, \dots, X_{(k-1)} \neq y, X_k = y \mid X_0 = y).$$

□

Ce résultat permet directement d'affirmer que : $\mathbb{E}_x(R_1^y - R_0^y) = \mathbb{E}_y(R_1^y)$.

3.8 Résultats de convergence

Dans cette section, nous allons aborder deux résultats de convergence. Le premier a déjà été annoncé précédemment et concerne la convergence du nombre moyen de visites dans un état. Ce résultat sera ensuite utilisé dans la preuve du théorème relatif à la convergence de la moyenne d'une fonction à deux variables. La rédaction de ces deux preuves a été basée sur le cours donné en référence [?], mais a nécessité de nombreuses précisions de notre part afin de détailler certains points.

Proposition 3.68. *Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène irréductible. Alors, pour tous $x, y \in E$:*

$$\frac{1}{n} N_n^y := \frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_l=y\}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{\mathbb{E}_y(R_1^y)} \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.} \quad (3.11)$$

Avant d'entamer la preuve de ce résultat, nous rappelons simplement l'énoncé de la loi des grands nombres dans le cas d'une suite de variables aléatoires positives.

Théorème 3.69. *(La loi des grands nombres) Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une suite de variables aléatoires iid à valeur dans $[0, +\infty]$, alors*

$$\frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} X_l \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}(X_0) \quad p.s.$$

Démonstration. Par un résultat précédent (conséquence de la proposition 3.51), soit tous les états sont récurrents, soit tous les états sont transients, puisque la chaîne est irréductible.

1. Supposons que la chaîne est transiente.

Comme y est visité un nombre \mathbb{P}_x -p.s fini de fois (i.e $\mathbb{P}_x(N^y < \infty) = 1$)(conclusion suite à la proposition 3.59), la suite $\{\mathbb{1}_{\{X_l=y\}}\}_{l \geq 0}$ est nulle à partir d'un certain l^* suffisamment grand. Dès lors, nous avons

$$\frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_l=y\}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

D'un autre côté, y est transient revient, par définition, à $\mathbb{P}_y(R_1^y < \infty) < 1$. De manière équivalente, nous avons que $\mathbb{P}_y(R_1^y = \infty) > 0$, et donc $\mathbb{E}_y(R_1^y) = +\infty$. L'équation (3.11) est, dès à présent, vérifiée dans le cas transient.

2. Supposons que la chaîne est récurrente.

D'après le corollaire 3.66, les variables $\{R_{k+1}^x - R_k^x\}_{k \geq 0}$ sont iid sous \mathbb{P}_x . Dès lors, nous pouvons déduire de la loi forte des grands nombres pour des variables aléatoires positives (théorème 3.69) :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} (R_{k+1}^x - R_k^x) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}_x(R_1^x - R_0^x) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

ou encore, par le fait que ce soit une somme télescopique et puisque $R_0^x = 0$ sous \mathbb{P}_x ,

$$\frac{R_n^x}{n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}_x(R_1^x) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.} \quad (3.12)$$

où la limite est éventuellement infinie. Or, en se rappelant que N_n^x est le nombre de fois que la chaîne visite l'état x lors des n premières unités de temps, alors pour tout entier n , il est évident que :

$$R_{N_n^x}^x \leq n \leq R_{N_n^x+1}^x,$$

et donc,

$$\frac{N_n^x}{R_{N_n^x+1}^x} \leq \frac{N_n^x}{n} \leq \frac{N_n^x}{R_{N_n^x}^x}.$$

En appliquant la remarque 3.70 énoncée après la fin de cette preuve, avec $\{Z_n\}_{n \geq 0} = \{\frac{n}{R_n^x}\}_{n \geq 0}$ et $\{K_n\}_{n \geq 0} = \{N_n^x\}_{n \geq 0}$ ($N_n^x \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \infty$ \mathbb{P}_x -p.s, car x est récurrent) , nous avons que :

$$\frac{N_n^x}{R_{N_n^x}^x} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{\mathbb{E}_x(R_1^x)} \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Le théorème du sandwich, nous permet d'affirmer que :

$$\frac{N_n^x}{n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{\mathbb{E}_x(R_1^x)} \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Désormais, le résultat est prouvé dans le cas $y = x$.

Supposons, maintenant, que $y \neq x$. Considérons la suite décalée $\{\widehat{X}_n\}_{n \geq 0} = \{X_{R_0^y+n}\}_{n \geq 0}$. Par le théorème 3.35, nous savons que c'est une chaîne de Markov sous \mathbb{P} . En réalité, puisque R_0^y est \mathbb{P}_x -p.s fini (proposition 3.61) et non nul car nous supposons $\{X_0 = x\}$, la suite $\{X_{R_0^y+n}\}_{n \geq 0}$ est une chaîne de Markov sous \mathbb{P}_x . La preuve est directe puisque rajouter ou retirer une condition du passé, à savoir $\{X_0 = x\} \in \mathcal{A}_{R_0^y}$, ne modifie pas les probabilités.

Les temps de retour à l'état y pour la chaîne $\{X_{R_0^y+n}\}_{n \geq 0}$ sont définis, pour le premier par :

$$\begin{aligned} \widehat{R}_1^y &:= \inf\{l > 0; X_{R_0^y+l} = y\} \\ &= R_1^y - R_0^y \end{aligned}$$

et pour le temps du $k^{\text{ème}}$ retour,

$$\begin{aligned} \widehat{R}_k^y &:= \inf\{l > R_{k-1}^y; X_{R_0^y+l} = y\} \\ &= R_k^y - R_0^y \end{aligned}$$

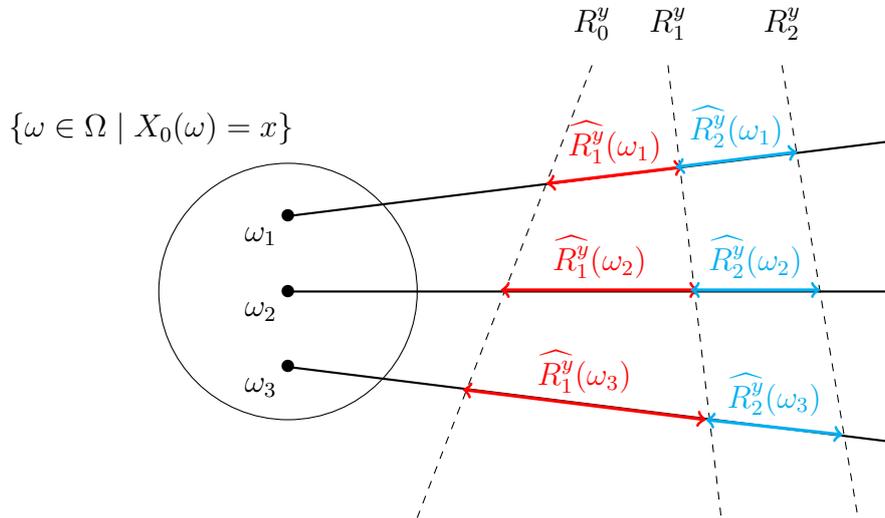


FIGURE 3.7 – Les temps de retours décalés.

Le fait que les temps de retour \widehat{R}_k^y soient les R_k^y , où R_0^y est soustrait, se voit clairement aussi sur la figure 3.7. Par le corollaire 3.66, les variables $\widehat{R}_{k+1}^y - \widehat{R}_k^y = R_{k+1}^y - R_k^y$ (où k est un entier) sont iid sous \mathbb{P}_x . Dès lors, nous pouvons déduire de la loi forte des grands nombres pour les variables aléatoires positives :

$$\frac{1}{n}(R_n^y - R_0^y) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \mathbb{E}_x(R_1^y - R_0^y) \quad \mathbb{P}_x - p.s. \quad (3.13)$$

D'autre part, en conséquent du lemme 3.67, nous obtenons que $\mathbb{E}_x(R_1^y - R_0^y) = \mathbb{E}_y(R_1^y)$. D'où,

$$\frac{1}{n}(R_n^y - R_0^y) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \mathbb{E}_y(R_1^y) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Mais puisque R_0^y est \mathbb{P}_x fini p-s, nous avons $\frac{R_0^y}{n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0 \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s}$ et donc,

$$\frac{1}{n}R_n^y \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \mathbb{E}_y(R_1^y), \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Le raisonnement pour obtenir le résultat (3.11), est totalement similaire à celui que nous avons effectué après avoir obtenu la convergence dans l'équation (3.12). \square

La remarque suivante concerne la convergence de suites.

Remarque 3.70. Considérons deux suites $\{Z_n\}_{n \geq 0}$ et $\{K_n\}_{n \geq 0}$ dont la première converge vers Z_∞ \mathbb{P} -p.s. et la deuxième tend vers $+\infty$ \mathbb{P} -p.s. Alors, la suite $\{Z_{K_n}\}_{n \geq 0}$ converge vers Z_∞ \mathbb{P} -p.s. quand n tend vers $+\infty$.

En effet, Z_{K_n} converge vers Z_∞ \mathbb{P} -p.s, s'il existe un ensemble C dont $\mathbb{P}(C) = 0$ et tel que :

$$\forall \omega \notin C, \forall \epsilon > 0, \exists n_0 \in \mathbb{N}, \forall n \geq n_0, |Z_{K_n(\omega)}(\omega) - Z_\infty(\omega)| \leq \epsilon$$

Or, l'hypothèse que Z_n converge vers Z_∞ \mathbb{P} -p.s, se traduit par : il existe un ensemble A vérifiant $\mathbb{P}(A) = 0$ et tel que :

$$\forall \omega \notin A, \forall \epsilon' > 0 \exists k_0 \in \mathbb{N}, \forall k \geq k_0, |Z_k(\omega) - Z_\infty(\omega)| \leq \epsilon'$$

Il va de même pour la deuxième hypothèse, K_n converge vers $+\infty$ \mathbb{P} -p.s, s'il existe un ensemble B dont $\mathbb{P}(B) = 0$ et tel que :

$$\forall \omega \notin B, \forall \rho > 0, \exists l_0 \in \mathbb{N}, \forall l \geq l_0, K_l(\omega) \geq \rho.$$

Prenons $C = A \cup B$. Nous avons bien que $\mathbb{P}(C) = 0$, car $\mathbb{P}(C) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B) \leq \mathbb{P}(A) + 2\mathbb{P}(B) = 0$. Soit $\omega \notin C$. Soit $\epsilon > 0$.

Prenons $\epsilon' = \epsilon$.

Dès lors, nous avons que : $\exists k_0 \in \mathbb{N}, \forall k \geq k_0, |Z_k(\omega) - Z_\infty(\omega)| \leq \epsilon$.

Prenons $\rho = k_0$. Et donc, il existe l_0 tel que pour tout $l \geq l_0, K_l(\omega) \geq k_0$

En prenant $n_0 = l_0$, nous pouvons conclure que $|Z_{K_n(\omega)}(\omega) - Z_\infty(\omega)| \leq \epsilon$ pour tout $n \geq n_0$.

Remarque 3.71. Le résultat de la proposition 3.68 permet de trouver l'expression de la loi invariante π pour une chaîne homogène, récurrente positive et irréductible, à savoir $\pi_y = \frac{1}{\mathbb{E}_y(R^y)}$ pour tout état y de la chaîne.

La quantité $\pi_y(n) = \mathbb{E}_x(\frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_l=y\}})$ vérifie la propriété de mesure invariante, à savoir : $\pi_y(n) = \sum_{z \in E} \pi_z(n) \cdot p_{z|y}$.

En effet, nous avons :

$$\begin{aligned} \pi_y(n) &= \frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbb{P}_x(X_l = y) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{z \in E} \mathbb{P}(X_l = y \mid X_{l-1} = z, X_0 = x) \cdot \mathbb{P}(X_{l-1} = z \mid X_0 = x) \\ &= \sum_{z \in E} \mathbb{P}(X_l = y \mid X_{l-1} = z) \cdot \frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbb{P}_x(X_{l-1} = z) \end{aligned}$$

où la dernière égalité est obtenue en appliquant la propriété de Markov pour retirer la condition $\{X_0 = x\}$. Cette dernière expression est donc équivalente à : $\sum_{z \in E} \pi_z(n) \cdot p_{z|y}$. D'autre part, nous avons que la suite $\{\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_k=y\}}\}_{n \geq 1}$ converge vers $\frac{1}{\mathbb{E}_y(R_1^y)} \mathbb{P}_x$ -p.s. (proposition 3.68). Cette même suite est également bornée par une fonction intégrable (la constante 1). Satisfaisant toutes les conditions du théorème de convergence dominée conditionnelle, nous pouvons l'appliquer. Le résultat obtenu est

$$\mathbb{E}\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{\{X_k=y\}} \mid X_0 = x\right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}\left(\frac{1}{\mathbb{E}_y(R_1^y)} \mid X_0 = x\right) = \frac{1}{\mathbb{E}_y(R_1^y)} \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Et donc,

$$\pi_y(n) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{\mathbb{E}_y(R_1^y)} = \pi_y.$$

De manière similaire, nous obtenons $\pi_z(n) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \pi_z$. Dès lors, comme $\pi_y(n) = \sum_{z \in E} \pi_z(n) \cdot p_{z|y}$, nous obtenons pour tout $y \in E$:

$$\pi_y = \sum_{z \in E} \pi_z \cdot p_{z|y},$$

ce qui signifie que π , définie par $\pi_y = \frac{1}{\mathbb{E}_y(R_1^y)}$ pour tout $y \in E$, est une mesure invariante.

Le théorème suivant va permettre de montrer la convergence presque sûre de l'estimation des probabilités de transition par le maximum de vraisemblance, dans la section suivante.

Théorème 3.72. Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène, récurrente positive et irréductible sur un espace d'états E fini ou dénombrable, de matrice de transition P , et d'unique mesure invariante π . Alors pour tout état x et pour toute fonction $g : E \times E \rightarrow \mathbb{R}$ mesurable et positive ou telle que $\mathbb{E}_\pi[|g(X_0, X_1)|] < \infty$,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} g(X_k, X_{k+1}) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}_\pi[g(X_0, X_1)] = \sum_{x \in E} \pi_x \cdot \sum_{y \in E} p_{x|y} \cdot g(x, y) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.} \quad (3.14)$$

quelle que soit la loi initiale $\pi(0)$ de X_0 .

Remarque 3.73. Il ne faut pas confondre le vecteur de loi initiale $\pi(0) = (\mathbb{P}(X_0 = x))_{x \in E}$ et celui de la loi invariante $\pi = (\pi_x)_{x \in E}$. Par ailleurs, les hypothèses de positivité de la fonction g et $\mathbb{E}_\pi[|g(X_0, X_1)|] < \infty$ permettent simplement de s'assurer que la limite existe.

Démonstration. Nous commençons par montrer ce résultat pour une fonction $g(x, y) = f(y)$ ne dépendant que d'une seule variable, nous généraliserons ensuite.

1. Supposons $g(x, y) = f(y)$, telle que $f : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ est une fonction mesurable et positive ou telle que $\mathbb{E}_\pi[|f(X_1)|] < +\infty$.

Considérons $F(Y_n)$, les variables aléatoires positives définies par :

$$F(Y_n) := \sum_{i=R_n^x}^{R_{n+1}^x-1} f(X_i), \quad n \geq 0.$$

Les variables $\{Y_n\}_{n \geq 0}$ sont celles définies dans la proposition 3.64. Or, le corollaire 3.66 annonce que ces variables sont indépendantes et ont même distribution pour $n \geq 0$ sous \mathbb{P}_x . La fonction F , étant mesurable, les variables $F(Y_n)$ pour $n \geq 0$ sont iid. Nous déduisons alors de la loi des grands nombres pour les variables positives (proposition 3.69) que :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} F(Y_k) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}_x(F(Y_0)) = \mathbb{E}_x\left(\sum_{i=0}^{R_1^x-1} f(X_i)\right) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Rappelons que sous l'hypothèse $\{X_0 = x\}$, $R_0^x = 0$. D'autre part, dans la preuve de la proposition 3.68, nous avons montré :

$$\frac{R_n^x}{n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}_x(R_1^x) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.},$$

et la remarque 3.71 montre que $\mathbb{E}_x(R_1^x) = \frac{1}{\pi_x}$, quelle que soit la loi initiale $\pi(0)$ de X_0 . Alors, nous en déduisons,

$$\frac{1}{R_n^x} \sum_{l=0}^{R_n^x-1} f(X_l) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \pi_x \cdot \mathbb{E}_x(F(Y_0)) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}, \quad (3.15)$$

car $\frac{n}{R_n^x} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} F(Y_k) = \frac{1}{R_n^x} \sum_{l=0}^{R_n^x-1} f(X_l)$. Mais pour tout entier n , les relations suivantes sont évidentes :

$$R_{N_n^x}^x \leq n \leq R_{N_n^x+1}^x,$$

et

$$\sum_{l=0}^{R_{N_n^x}^x-1} f(X_l) \leq \sum_{l=0}^{n-1} f(X_l) \leq \sum_{l=0}^{R_{N_n^x+1}^x-1} f(X_l).$$

donc,

$$\frac{R_{N_n^x}^x}{R_{N_n^x+1}^x} \frac{1}{R_{N_n^x}^x} \sum_{l=0}^{R_{N_n^x}^x-1} f(X_l) \leq \frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} f(X_l) \leq \frac{R_{N_n^x+1}^x}{R_{N_n^x}^x} \frac{1}{R_{N_n^x+1}^x} \sum_{l=0}^{R_{N_n^x+1}^x-1} f(X_l).$$

Alors, grâce à l'équation (3.15), et en utilisant la remarque 3.70 de la même manière que dans la preuve précédente, nous avons :

$$\frac{1}{R_{N_n^x}^x} \sum_{l=0}^{R_{N_n^x}^x-1} f(X_l) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \pi_x \cdot \mathbb{E}_x(F(Y_0)) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

De plus,

$$\frac{R_{N_n^x}^x}{R_{N_n^x+1}^x} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 1 \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

En effet, car $\frac{R_n^x}{n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \mathbb{E}_x(R_1^x) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$, et donc nous avons que

$$\frac{\frac{R_n^x}{n}}{\frac{R_{n+1}^x}{n+1}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 1 \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.},$$

mais aussi car la suite $\{\frac{n+1}{n}\}_{n \geq 1}$ converge également vers 1. Par le théorème du sandwich, nous déduisons :

$$\frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} f(X_l) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \pi_x \cdot \mathbb{E}_x(F(Y_0)) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.} \quad (3.16)$$

Pour identifier cette limite, nous appliquons le résultat de convergence exprimé dans l'équation (3.16) à la fonction $f(z) := \mathbb{1}_{\{z=y\}}$.

$$\frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_l=y\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \pi_x \cdot \mathbb{E}_x\left(\sum_{i=0}^{R_1^x-1} \mathbb{1}_{\{X_i=y\}}\right) \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

D'autre part, la proposition 3.68 nous affirme que :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_i=y\}} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \frac{1}{\mathbb{E}_y(R_1^y)} \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Par unicité de la limite, nous déduisons donc l'égalité \mathbb{P}_x -p.s suivante :

$$\pi_x \cdot \mathbb{E}_x \left(\sum_{i=0}^{R_1^x-1} \mathbb{1}_{\{X_i=y\}} \right) = \frac{1}{\mathbb{E}_y(R^y)} = \pi_y.$$

Or, en appliquant la définition de l'espérance conditionnelle (conditionné par l'événement $\{X_0 = x\}$) d'une variable aléatoire discrète, nous obtenons cette série d'égalités.

$$\begin{aligned} \pi_x \cdot \mathbb{E}_x(F(Y_0)) &= \pi_x \cdot \sum_{i=0}^{R_1^x-1} \mathbb{E}_x(f(X_i)) \\ &= \pi_x \cdot \sum_{y \in E} f(y) \sum_{i=0}^{R_1^x-1} \mathbb{P}_x(X_i = y) \\ &= \sum_{y \in E} f(y) \cdot \pi_x \cdot \mathbb{E}_x \left(\sum_{i=0}^{R_1^x-1} \mathbb{1}_{\{X_i=y\}} \right) \end{aligned}$$

Afin d'obtenir le résultat (3.14) dans le cas d'une fonction à une variable, il suffit de se rappeler que nous avons aussi $\pi_x \cdot \mathbb{E}_x(\sum_{i=0}^{R_1^x-1} \mathbb{1}_{\{X_i=y\}}) = \pi_y$, ce qui implique que la dernière expression est équivalente à $\sum_{y \in E} f(y) \cdot \pi_y$.

2. Généralisons le résultat à des fonctions à deux variables $g(x, y)$. Nous décomposons $g(x, y) := h(x, y) + f(x)$ où

$$f(x) := \mathbb{E}_x(g(x, X_1)) \quad \text{et} \quad h(x, y) := g(x, y) - f(x).$$

En appliquant le résultat établi à la première étape à f , nous obtenons :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \mathbb{E}_{X_i}(g(X_i, X_1)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \sum_{y \in E} \mathbb{E}_y(g(y, X_1)) \cdot \pi_y \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Par définition de l'espérance conditionnelle, cette limite se réécrit :

$$\sum_{y \in E} \pi_y \cdot \sum_{x \in E} g(y, x) \cdot p_{y|x}.$$

Mais au vu de la limite obtenue pour la fonction $f(x)$ et puisque $g(x, y)$ est une fonction linéaire, il suffit de montrer, pour obtenir le résultat souhaité (3.14) que

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} h(X_k, X_{k+1}) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Pour cela, nous allons suivre une procédure analogue à celle développée à la première étape. Posons

$$H(Y_n, Y_{n+1}) = \sum_{i=R_n^x}^{R_{n+1}^x} h(X_i, X_{i+1}), \quad n \geq 0$$

De nouveau, puisque H est une fonction mesurable, les variables $H(Y_n, Y_{n+1})$ pour $n \geq 0$ sont iid sous \mathbb{P}_x , pour les mêmes raisons que celles citées précédemment. Donc, en appliquant la loi des grands nombres,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} H(Y_k, Y_{k+1}) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \mathbb{E}_x(H(Y_0, Y_1)), \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.}$$

Mais par linéarité et par définition de l'espérance conditionnelle, la limite se réécrit comme :

$$\sum_{i=0}^{R_1^x} \sum_{x \in E} \sum_{y \in E} h(x, y) \cdot \mathbb{P}_x(X_i = x, X_{i+1} = y)$$

ou encore,

$$\sum_{i=0}^{R_1^x} \sum_{x \in E} \sum_{y \in E} h(x, y) \cdot \mathbb{P}_x(X_{i+1} = y \mid X_i = x) \cdot \mathbb{P}_x(X_i = x).$$

Par homogénéité, $\mathbb{P}_x(X_{i+1} = y \mid X_i = x) = \mathbb{P}(X_1 = y \mid X_0 = x)$, ce qui fait apparaître le terme $\mathbb{E}_x(h(x, X_1))$ dans les sommes. En effet, la limite est

$$\sum_{i=0}^{R_1^x} \sum_{x \in E} \mathbb{E}_x(h(x, X_1)) \cdot \mathbb{P}_x(X_i = x)$$

Or, par construction, $\mathbb{E}_x(h(x, X_1)) = 0$, ce qui nous amène à une limite nulle. Un raisonnement totalement similaire à la première étape sur les inégalités permet de montrer ce qui était voulu, à savoir,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} h(X_k, X_{k+1}) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0, \quad \mathbb{P}_x\text{-p.s.} \quad \square$$

3.9 Estimation de la matrice de transition

Les chaînes de Markov peuvent modéliser des situations réelles dont les probabilités de transition ne sont pas toujours connues. Il est donc nécessaire de pouvoir les estimer. L'estimation de ces probabilités par la méthode du maximum de vraisemblance fait l'objet de cette section. Dans celle-ci, nous allons également discuter de la convergence asymptotique de ces estimateurs. Avant cela, un bref rappel sur l'estimateur du maximum de vraisemblance est donné. Pour plus de détails concernant ces estimateurs, nous vous renvoyons au livre référencé en [?].

3.9.1 Rappel théorique sur l'estimateur du maximum de vraisemblance

Étant donné une variable aléatoire discrète X définie sur $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$, nous voulons en calculer la loi. Pour cela, une famille de probabilité $(\mathbb{P}_\theta)_{\theta \in \Theta}$ est fixée et nous supposons que la loi \mathbb{P}_X est \mathbb{P}_θ pour un certain $\theta \in \Theta$. En statistique, la famille $(\mathbb{P}_\theta)_{\theta \in \Theta}$ désigne la famille des probabilités admissibles. Puisque le paramètre θ est inconnu, l'idée consiste alors à construire une fonction sur bases d'observations et permettre ainsi de trouver la valeur numérique la plus vraisemblable pour le paramètre θ . Concrètement, nous supposons que le vecteur des n observations (x_1, x_2, \dots, x_n) sont les réalisations d'un vecteur (X_1, \dots, X_n) de variables aléatoires indépendantes et de même loi que X . Alors, l'approche par le maximum de vraisemblance consiste à déterminer la valeur de θ qui rend les réalisations les plus probables, c'est-à-dire le θ qui maximise :

$$\mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = \prod_{t=1}^n \mathbb{P}_\theta(X_t = x_t).$$

De manière générale, la fonction $\prod_{t=1}^n \mathbb{P}_\theta(X_t = x_t)$ est noté $L(\theta)$ et est appelée **fonction de vraisemblance**. Et donc, l'**estimateur du maximum de vraisemblance** de θ est la valeur $\hat{\theta}$ qui maximise la fonction de vraisemblance.

3.9.2 L'estimation des probabilités de transition

Les paramètres que nous allons estimer sont les éléments, $p_{x|y}$ avec $x, y \in E$, de la matrice de transition P défini par :

$$p_{x|y} = \mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_n = y).$$

Sur base d'une séquence d'observations de la chaîne de Markov, autrement dit sur base d'une séquence d'états notée $z = x_0 x_1 x_2 \dots x_n$, nous allons estimer ces probabilités. D'après la proposition 3.22, la probabilité d'observer la séquence z est donnée par :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n) \\ &= \mathbb{P}(X_0 = x_0) \prod_{t=1}^n \mathbb{P}(X_t = x_t \mid X_{t-1} = x_{t-1}) \end{aligned}$$

En réécrivant en terme de probabilité de transition, nous obtenons la fonction de vraisemblance de P (matrice de transition).

$$L(P) = \mathbb{P}(X_0 = x_0) \prod_{t=1}^n p_{x_t|x_{t-1}}.$$

Mais, en définissant $n_{x|y}$, le nombre de fois que l'état x est suivi de y dans la séquence d'observation z , la fonction de vraisemblance peut s'exprimer en fonction de ces quantités, comme

$$L(P) = \mathbb{P}(X_0 = x_0) \prod_{x=1}^J \prod_{y=1}^J p_{x|y}^{n_{x|y}}.$$

car $E = \{1, \dots, J\}$.

En pratique, la distribution initiale est supposée connue et est identifiée à la loi uniforme sur l'espace des états. La distribution initiale ne fait donc pas partie du problème d'estimation. Par conséquent, le but est de déterminer les $(p_{x|y})_{x,y \in E}$ qui maximisent la fonction $\prod_{x=1}^J \prod_{y=1}^J p_{x|y}^{n_{x|y}}$. La proposition suivante permet d'en donner la forme générale. Avant de l'aborder de plus près, introduisons une dernière notation. La quantité n_x représente le nombre de fois que la séquence z visite l'état x à l'exception de l'état final. Au vu de la définition des $n_{x|y}$,

$$n_x = \sum_{y=1}^J n_{x|y}.$$

Ce prochain paragraphe développe le raisonnement permettant d'aboutir à la forme de l'estimateur par le maximum de vraisemblance des probabilités de transition. Par souci de faciliter les calculs, nous allons déterminer les $p_{x|y}$ qui maximisent le logarithme népérien de la fonction de vraisemblance.

$$\mathcal{L}(P) = \sum_{x=1}^J \sum_{y=1}^J n_{x|y} \ln p_{x|y}.$$

Transformer la fonction de vraisemblance par une fonction strictement croissante, à savoir ici le logarithme népérien, ne modifie pas un maximum. La fonction obtenue est appelée la fonction du **log-vraisemblance**.

Comme les deux contraintes $p_{x|y} \geq 0$, $\sum_{y=1}^J p_{x|y} = 1$ sont exprimées pour chacune des lignes de la matrice de transition, nous allons maximiser $\mathcal{L}(P_x) = \sum_{y=1}^J n_{x|y} \ln p_{x|y}$ comme une fonction de $p_{x|1}, \dots, p_{x|J}$ qui représentent les éléments la $x^{\text{ème}}$ ligne de la matrice P .

De plus, puisque pour tout $x \in E$, $\sum_{y=1}^J p_{x|y} = 1$, nous considérons la fonction auxiliaire à $(J-1)$ variables :

$$\mathcal{L}^*(p_{x|1}, \dots, p_{x|J-1}) = \mathcal{L}(p_{x|1}, \dots, p_{x|J-1}, (1 - p_{x|1} - \dots - p_{x|J-1})).$$

Et donc,

$$\mathcal{L}^*(p_{x|1}, \dots, p_{x|J-1}) = n_{x|1} \ln p_{x|1} + \dots + n_{x|J-1} \ln p_{x|J-1} + n_{x|J} \ln (1 - p_{x|1} - \dots - p_{x|J-1})$$

En calculant les dérivées partielles et en les annulant, nous obtenons le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial p_{x|1}} \mathcal{L}^*(p_{x|1}, \dots, p_{x|J-1}) = \frac{n_{x|1}}{p_{x|1}} - \frac{n_{x|J}}{1 - p_{x|1} - \dots - p_{x|J-1}} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial}{\partial p_{x|J-1}} \mathcal{L}^*(p_{x|1}, \dots, p_{x|J-1}) = \frac{n_{x|J-1}}{p_{x|J-1}} - \frac{n_{x|J}}{1 - p_{x|1} - \dots - p_{x|J-1}} = 0 \end{cases}$$

Ce qui revient à,

$$\frac{n_{x|1}}{p_{x|1}} = \dots = \frac{n_{x|J-1}}{p_{x|J-1}} = \frac{n_{x|J}}{1 - p_{x|1} - \dots - p_{x|J-1}}.$$

Si nous notons λ la valeur commune, alors

$$p_{x|1} = \frac{n_{x|1}}{\lambda}, p_{x|2} = \frac{n_{x|2}}{\lambda}, \dots, p_{x|J} = \frac{n_{x|J}}{\lambda}.$$

Il nous reste, dès à présent à déterminer la valeur λ . Mais puisque $\sum_{y=1}^J p_{x|y} = 1$, nous avons

$$1 = \sum_{y=1}^J \frac{n_{x|y}}{\lambda},$$

et donc, la valeur recherchée est :

$$\lambda = \sum_{y=1}^J n_{x|y} = n_x.$$

D'où, le vecteur $\widehat{P}_x = (\frac{n_{x|1}}{n_x}, \dots, \frac{n_{x|J}}{n_x})$ est celui qui annule le système de dérivée partielle. Nous venons de développer le raisonnement qui permet d'aboutir à la forme de l'estimateur qui maximise $\mathcal{L}(P_x)$. La proposition suivante permet de montrer que c'est réellement un maximum.

Proposition 3.74. *Pour tout $x, y \in E$, l'estimation du maximum de vraisemblance $\widehat{p}_{x|y}$ de $p_{x|y}$ est*

$$\frac{n_{x|y}}{n_x}$$

Démonstration. Commençons par remarquer que $\widehat{P}_x = (\frac{n_{x|1}}{n_x}, \dots, \frac{n_{x|J}}{n_x})$ satisfait bien ; $\forall y \in E \frac{n_{x|y}}{n_x} \geq 0$ et $\sum_{y=1}^n \frac{n_{x|y}}{n_x} = 1$.

Comme la fonction à maximiser $\mathcal{L}(P) = \sum_{x=1}^J \sum_{y=1}^J n_{x|y} \ln p_{x|y}$ peut se réécrire sous la forme $\mathcal{L}(P) = \sum_{x=1}^J \mathcal{L}(P_x)$ où $\mathcal{L}(P_x) = \sum_{y=1}^J n_{x|y} \ln p_{x|y}$, nous allons simplement vérifier que le vecteur $\widehat{P}_x = (\frac{n_{x|1}}{n_x}, \dots, \frac{n_{x|J}}{n_x})$ est un maximum de $\mathcal{L}(P_x)$. Le vecteur composé des maximums ligne à ligne correspond à celui qui maximise $\mathcal{L}(P)$. Nous considérons un vecteur $P_x = (p_{x|1}, \dots, p_{x|J})$ tel que :

$$\forall y \in E, \quad p_{x|y} \geq 0 \text{ et } \sum_{y=1}^n p_{x|y} = 1.$$

et nous vérifions que

$$\mathcal{L}(\widehat{P}_x) \geq \mathcal{L}(P_x).$$

Or,

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\widehat{P}_x) - \mathcal{L}(P_x) &= \sum_{y=1}^n n_{x|y} \left(\ln \frac{n_{x|y}}{n_x} - \ln p_{x|y} \right) \\
&= n_x \sum_{y=1}^n \frac{n_{x|y}}{n_x} \ln \left(\frac{n_{x|y}}{p_{x|y}} \right) \\
&= n_x \mathcal{D}(\widehat{P}_x | P_x).
\end{aligned}$$

où $\mathcal{D}(\widehat{P}_x | P_x)$ est la distance de Kullback (définie dans remarque 3.76 citée ci-dessous). Cette distance est toujours positive ou nulle. La quantité n_x l'est également, ce qui nous amène à,

$$\mathcal{L}(\widehat{P}_x) \geq \mathcal{L}(P_x),$$

c'est-à-dire que \widehat{P}_x est bien un maximum de $\mathcal{L}(P_x)$. \square

Remarque 3.75. Pour estimer les paramètres $p_{x|y}$, inutile de se restreindre à une seule séquence z , comme il en a été introduit avant la proposition. En pratique, un ensemble *d'apprentissage* de séquences z est considéré. Pour le calcul des paramètres estimés $\widehat{p}_{x|y}$ sur cet ensemble d'apprentissage, nous concaténons les différentes séquences de cet ensemble mais nous ne considérons pas les conjonctions entre les différentes séquences.

Remarque 3.76 (Distance de Kullback). Soit $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_L\}$ et

$$\begin{aligned}
f &:= (f(x_1), \dots, f(x_L)) \\
g &:= (g(x_1), \dots, g(x_L))
\end{aligned}$$

deux distributions de probabilités définies sur \mathcal{X} . Alors la distance de Kullback entre f et g est définie par :

$$\mathcal{D}(f | g) = \sum_{i=1}^L f(x_i) \ln \frac{f(x_i)}{g(x_i)}.$$

Les conventions $0 \ln \frac{0}{g(x_i)} = 0$ et $f(x_i) \ln \frac{f(x_i)}{0} = \infty$ sont utilisées.

La seule propriété qui nous intéresse à propos de cette distance est la positivité. Pour la montrer, considérons une variable aléatoire X ayant la distribution de probabilité f . Alors nous avons,

$$\mathcal{D}(f | g) = \mathbb{E} \left[\ln \frac{f(X)}{g(X)} \right],$$

et cela est équivalent à

$$\mathcal{D}(f | g) = -\mathbb{E} \left[\ln \frac{g(X)}{f(X)} \right].$$

Comme la fonction $x \mapsto -\ln(x)$ est une fonction convexe, par l'inégalité de Jensen, nous avons que :

$$-\mathbb{E} \left[\ln \frac{g(X)}{f(X)} \right] \geq -\ln \mathbb{E} \left[\frac{g(X)}{f(X)} \right].$$

Mais,

$$\mathbb{E} \left[\frac{g(X)}{f(X)} \right] = \sum_{i=1}^L f(x_i) \frac{g(x_i)}{f(x_i)} = 1,$$

par définition d'une distribution de probabilité. Dès lors, puisque $\ln 1 = 0$, nous avons prouvé l'assertion

$$\mathbb{E} \left[\ln \frac{f(X)}{g(X)} \right] \geq 0.$$

Proposition 3.77. *Soit $\{X_n\}_{n \geq 0}$ une chaîne de Markov homogène, récurrente positive et irréductible. Soient x et y deux états de la chaîne. Soit $\widehat{p}_{x|y}$, l'estimation par le maximum de vraisemblance des éléments $p_{x|y}$ de la matrice de transition associée à la chaîne. Alors,*

$$\widehat{p}_{x|y} \longrightarrow p_{x|y} \quad \mathbb{P}_{x_0}\text{-P.S.},$$

où x_0 est l'état initial.

Démonstration. Rappelons que l'estimation par le maximum de vraisemblance $\widehat{p}_{x|y}$ de $p_{x|y}$ est pour tout x et $y \in E$:

$$\widehat{p}_{x|y} = \frac{n_{x|y}}{n_x}.$$

Les quantités $n_{x|y}$ et n_x peuvent se réécrire, respectivement comme :

$$n_{x|y} = \sum_{k=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y\}}$$

et,

$$n_x = \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{y \in E} \mathbb{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y\}}$$

En considérant $g(X_k, X_{k+1}) = \mathbb{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y\}}$ qui est bien une fonction positive, le théorème 3.72 nous affirme,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y\}} \longrightarrow \sum_{i \in E} \sum_{j \in E} \pi_i \cdot p_{i|j} \cdot \mathbb{1}_{\{i=x, j=y\}} \quad \mathbb{P}_{x_0}\text{-P.S.}$$

Or, par définition de la fonction indicatrice, la limite se réduit à $\pi_x \cdot p_{x|y}$. En réappliquant une deuxième fois ce même théorème, mais cette fois-ci à la fonction positive : $g(X_k, X_{k+1}) = \sum_{y \in E} \mathbb{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y\}}$, nous obtenons :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{y \in E} \mathbb{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y\}} \longrightarrow \sum_{i \in E} \sum_{j \in E} \pi_i \cdot p_{i|j} \sum_{y \in E} \mathbb{1}_{\{i=x, j=y\}} \quad \mathbb{P}_{x_0}\text{-P.S.}$$

Étant des sommes finies, la limite peut se réécrire comme, $\sum_{y \in E} \pi_x \cdot p_{x|y}$. Mais puisque, $\sum_{y \in E} p_{x|y} = 1$, la limite de la suite s'est vue restreinte à π_x .

En résumé, nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} n_{x|y} &\longrightarrow \pi_x \cdot p_{x|y} \quad \mathbb{P}_{x_0}\text{-p.s.} \\ \frac{1}{n} n_x &\longrightarrow \pi_x \quad \mathbb{P}_{x_0}\text{-p.s.} \end{aligned}$$

En quotientant le premier résultats par le deuxième, nous sommes en mesure de conclure

$$\widehat{p_{x|y}} \longrightarrow p_{x|y} \quad \mathbb{P}_{x_0}\text{-p.s.} \quad \square$$

Chapitre 4

Les modèles de Markov cachés

4.1 Introduction

Un modèle de Markov caché est un processus stochastique généré par deux mécanismes probabilistes liés, dont l'un est observable et l'autre caché. Comme dans le cas des chaînes de Markov, nous nous intéressons à l'évolution d'un processus au cours du temps. L'idée des modèles de Markov cachés, est qu'à chaque unité de temps, le processus est supposé être sur un état et génère une observation. Les états du processus sont cachés, contrairement aux observations émises.

Afin de donner l'intuition des modèles de Markov cachés, nous allons en exposer un qui est inspiré de [?], à titre d'exemple introductif. Supposons que nous voulons connaître la saison dans laquelle nous sommes « aujourd'hui ». Sachant que les quatre saisons — printemps, été, automne, hiver — ne sont pas directement observables, nous allons les déduire à partir des observations telles que la pluie, le soleil et les nuages, visibles à l'œil nu, avec des probabilités. Tout comme les chaînes de Markov, les modèles de Markov peuvent être représentés par un graphe (figure 4.1).

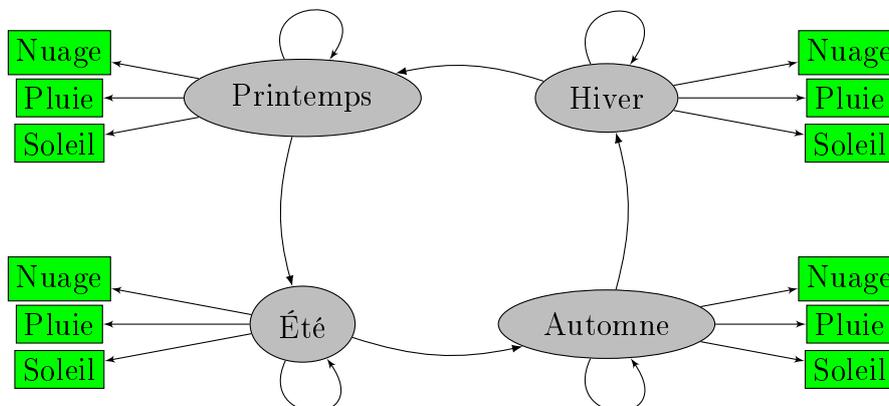


FIGURE 4.1 – La météo

Le premier mécanisme probabiliste est une chaîne de Markov qui décrit les transitions entre les états, printemps, été, automne et hiver. Le deuxième retrace les états émis et donc observables, à partir des états cachés. Les états émis sont les nuages, la pluie et le soleil. Les flèches entre les états cachés sont les probabilités de transitions comme celles qui ont été discutées précédemment. Par ailleurs, une flèche reliant un état caché à un état émis représente une probabilité dite d'émission.

4.2 Définition

Un modèle de Markov caché est défini en trois parties. La première partie se consacre au mécanisme caché et la deuxième lie le mécanisme caché au mécanisme observé. Quant à la troisième, elle aborde la notion d'indépendance.

Concrètement, $(\{X_n\}_{n \geq 0}, \{Y_n\}_{n \geq 0}, A, B, \pi(0))$ est un **modèle de Markov caché** si,

1. $\{X_n\}_{n \geq 0}$ est une chaîne de Markov homogène à valeur dans un ensemble fini E , dont les **probabilités de transitions** sont celles données dans la matrice A et la **loi initiale** est donnée par $\pi(0)$. L'**ensemble des états cachés** E est défini par $\{1, \dots, J\}$.
2. $\{Y_n\}_{n \geq 0}$ est un processus aléatoire à valeur dans un ensemble fini d'états \mathcal{O} . Cet ensemble est appelé **l'ensemble des états observés** et est défini par $\{o_1, \dots, o_K\}$. Les **probabilités d'émissions** sont déterminées par :

$$b_x(o_k) = \mathbb{P}(Y_n = o_k \mid X_n = x)$$

pour tout $x \in E$, pour tout $k = 1, \dots, K$ et pour tout $n \geq 0$. La matrice B est celle qui regroupe ces probabilités. Elle est appelée la **matrice des probabilités d'émissions** et est définie explicitement par :

$$B = (b_x(o_k))_{x \in E, k=1, \dots, K}$$

3. Pour n'importe quelle séquence d'états x_0, \dots, x_n et n'importe quelle séquence d'observations o_0, \dots, o_n , il faut que :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) &= \prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \\ &= \prod_{l=0}^n b_{x_l}(o_l). \end{aligned}$$

Remarque 4.1. – La matrice A correspond à la matrice P définie dans le chapitre 3 : *Les chaînes de Markov*.

- Le cardinal de l'ensemble des observations \mathcal{O} n'est pas nécessairement égal à celui de l'ensemble des états cachés ; K peut être différent de J .

- Au vu de sa définition, la probabilité d'émission lie les deux processus $\{X_n\}_{n \geq 0}$ et $\{Y_n\}_{n \geq 0}$.
- La matrice d'émission est également une matrice stochastique.
- La 3^{ème} partie de la définition n'exprime pas directement l'indépendance des symboles émis conditionnellement à la séquence d'états. Mais en réalité, celle-ci implique cette indépendance conditionnelle des $\{Y_n\}_{n \geq 0}$. Pour cela, nous montrons que pour tout $0 \leq k \leq n$:

$$\mathbb{P}(Y_k = o_k \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(Y_k = o_k \mid X_k = x_k)$$

En effet,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_k = o_k \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \sum_{o_0 \in \mathcal{O}} \cdots \sum_{o_{k-1} \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_k = o_k \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n). \end{aligned}$$

Mais par la proposition 4.7 avec $N = n$ et $n = k$ qui est énoncée et prouvée dans la section 4.3, cela est équivalent à,

$$\sum_{o_0 \in \mathcal{O}} \cdots \sum_{o_{k-1} \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_k = o_k \mid X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k)$$

ou encore à,

$$\mathbb{P}(Y_k = o_k \mid X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k).$$

Mais en appliquant la proposition 4.2 de la section 4.3 avec $m = N = k$ et $n = 0$, nous obtenons le résultat souhaité, à savoir : $\mathbb{P}(Y_k = o_k \mid X_k = x_k)$. En remplaçant ce résultat dans la condition 3, nous obtenons que :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \end{aligned}$$

qui correspond bien à la définition de : *les symboles émis sont indépendants conditionnellement à la séquence d'états cachés.*

- Le triplet des paramètres d'un modèle de Markov $(A, B, \pi(0))$ est généralement noté λ .

Dans l'exemple introductif,

1. L'espace des états de la chaîne de Markov est $E = \{\text{printemps, été, automne, hiver}\}$, la matrice de transition A ,

$$\begin{pmatrix} 0.3 & 0.7 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0.7 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 & 0.7 \\ 0.7 & 0 & 0 & 0.3 \end{pmatrix}$$

et $(0.25, 0.25, 0.25, 0.25)$ est le vecteur de probabilité initiale.

2. L'ensemble des observations est $\mathcal{O} = \{\text{Nuage, Pluie, Soleil}\}$ et la matrice des probabilités d'émission B ,

$$\begin{pmatrix} 0.1 & 0.45 & 0.45 \\ 0.01 & 0.13 & 0.86 \\ 0.05 & 0.55 & 0.4 \\ 0.2 & 0.5 & 0.3 \end{pmatrix}.$$

3. L'hypothèse d'indépendance de la suite des observations sachant la séquence d'états (= la séquence des saisons) ne peut être vérifiée explicitement mais elle ne semble pas déraisonnable. Elle est donc supposée dans notre cas.

Dès à présent, calculons la loi conjointe et loi marginale. La probabilité conjointe des vecteurs (Y_0, \dots, Y_n) et (X_0, \dots, X_n) ($n \geq 0$) est donnée par :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \prod_{l=0}^n b_{x_l}(o_l) \cdot \pi_{x_0}(0) \cdot \prod_{l=1}^n a_{x_{l-1}|x_l} \end{aligned}$$

où la dernière égalité est obtenue en appliquant l'hypothèse 3 des MMC et la loi d'une chaîne de Markov homogène (proposition 3.22).

Pour obtenir la loi marginale du vecteur (Y_0, \dots, Y_n) connaissant la loi conjointe des vecteurs (Y_0, \dots, Y_n) et (X_0, \dots, X_n) , il suffit de sommer sur tous les chemins possibles d'états cachés, c'est-à-dire,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n) &= \sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_n \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_n \in E} \pi_{x_0}(0) \cdot b_{x_0}(o_0) \cdot \prod_{l=1}^n a_{x_{l-1}|x_l} \cdot b_{x_l}(o_l). \end{aligned} \quad (4.1)$$

où la dernière égalité est obtenue en appliquant la loi conjointe définie ci-dessus. Au vu de ce résultat, nous constatons que le loi du vecteur (Y_0, \dots, Y_n) ($n \geq 0$) est complètement spécifiée par les deux matrices A et B et la loi initiale $\pi(0)$.

4.3 Lemmes préparatoires

Cette section développe un ensemble de propriétés énoncées dans [?]. Elles sont utilisées dans la section suivante, à savoir *Les trois problèmes liés aux Modèles de Markov cachés*. Seule, la dernière n'est pas utilisée dans la section suivante, mais elle a été utilisée pour montrer l'indépendance conditionnelle des symboles émis dans la remarque 4.1.

Par souci de faciliter la lecture des preuves des lemmes suivants, nous notons pour tout naturel $t \geq 0$:

- $X^{(t)} = (X_0, \dots, X_t)$
- $x^{(t)} = (x_0, \dots, x_t)$
- $Y^{(t)} = (Y_0, \dots, Y_t)$
- $o^{(t)} = (o_0, \dots, o_t)$

Lemme 4.2. Soit $(\{X_n\}_{n \geq 0}, \{Y_n\}_{n \geq 0}, \lambda)$ un MMC. Pour tout naturel N , n et m tels que $0 \leq n \leq m \leq N$, si $\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N) > 0$ alors,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, \dots, X_N = x_N) \\ &= \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m, \dots, X_N = x_N) \end{aligned} \quad (4.2)$$

Démonstration. Commençons par développer le terme de gauche.

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, \dots, X_N = x_N) \\ &= \frac{\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N, X_n = x_n, \dots, X_N = x_N)}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N)} \\ &= \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \frac{\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N, X^{(N)} = x^{(N)})}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N)} \\ &= \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \frac{\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)})}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N)} \end{aligned}$$

Dans le cas $n = 0$, il suffit de ne pas considérer de somme. Détaillons le terme $\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X^{(N)} = x^{(N)})$. Nous avons, par définition de la probabilité conditionnelle,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \\ &= \frac{\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N, X^{(N)} = x^{(N)})}{\mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)})} \\ &= \sum_{o_0 \in \mathcal{O}} \dots \sum_{o_{m-1} \in \mathcal{O}} \frac{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_{m-1} = o_{m-1}, Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N, X^{(N)} = x^{(N)})}{\mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)})} \\ &= \sum_{o_0 \in \mathcal{O}} \dots \sum_{o_{m-1} \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)} \mid X^{(N)} = x^{(N)}). \end{aligned}$$

Or, par la troisième partie de la définition de MMC, cette dernière égalité revient à

$$\begin{aligned} & \sum_{o_0 \in \mathcal{O}} \dots \sum_{o_{m-1} \in \mathcal{O}} \prod_{l=0}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \\ &= \prod_{l=m}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \sum_{o_0 \in \mathcal{O}} \dots \sum_{o_{m-1} \in \mathcal{O}} \prod_{l=0}^{m-1} \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l). \end{aligned}$$

Mais pour tout état caché $x \in E$, $\sum_{o \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y_k = o \mid X_k = x) = 1$ (car B est une matrice stochastique), d'où

$$\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X^{(N)} = x) = \prod_{l=m}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l).$$

Ce terme ne dépendant pas des états x_0, \dots, x_{n-1} , nous avons en le réintégrant dans l'égalité plus haut, que le terme de gauche de (4.2) correspond :

$$\frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N)} \prod_{l=m}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)}).$$

Or,

$$\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N) = \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)}),$$

et donc,

$$\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, \dots, X_N = x_N) = \prod_{l=m}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l).$$

Le terme de droite de cette dernière égalité est indépendant de n . Mais comme le terme de droite de (4.2) est un cas particulier du terme de gauche de la dernière égalité où $n = m$, nous avons que $\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m, \dots, X_N = x_N) = \prod_{l=m}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l)$. Et par conséquent, l'équation (4.2) est prouvée. \square

La proposition suivante exprime l'idée que le passé et le futur d'un processus d'émission sont indépendants conditionnellement de l'état courant de la chaîne de Markov.

Lemme 4.3. *Soit $(\{X_n\}_{n \geq 0}, \{Y_n\}_{n \geq 0}, \lambda)$ un MMC. Pour tout naturel N et n tels que $0 \leq n \leq N$, si $\mathbb{P}(X_n = x_n) > 0$ alors*

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \\ &= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Démonstration. En appliquant la définition de la probabilité conditionnelle, le terme de gauche de l'équation (4.3) devient :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \\ &= \frac{\mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)}, X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_n = x_n)} \\ &= \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \sum_{x_{n+1} \in E} \dots \sum_{x_N \in E} \frac{\mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)}, X^{(N)} = x^{(N)})}{\mathbb{P}(X_n = x_n)} \\ &= \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \sum_{x_{n+1} \in E} \dots \sum_{x_N \in E} \frac{\mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)} \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)})}{\mathbb{P}(X_n = x_n)}. \end{aligned}$$

Or, par la troisième partie de la définition de MMC, nous avons

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)} \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \\
&= \prod_{l=0}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \\
&= \prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \cdot \prod_{l=n+1}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \\
&= \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&\quad \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\
&= \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&\quad \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N).
\end{aligned}$$

où la dernière égalité est obtenue en appliquant le lemme 4.2 avec $m = n + 1$. D'un autre côté, mais de nouveau par la définition de la probabilité conditionnelle,

$$\mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)}) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}),$$

et la remarque 3.26 avec $N = n + r$ affirme que,

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&= \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n).
\end{aligned}$$

Pour récapituler, nous avons :

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)} \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)}) \\
&= \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&= \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n).
\end{aligned} \tag{4.4}$$

D'où, en réintégrant ces résultats dans l'expression de $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n)$ obtenue plus haut, nous avons

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \\
&= \frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n)} \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \sum_{x_{n+1} \in E} \dots \sum_{x_N \in E} \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n) \\
&= \frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n)} \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \\
&= \frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n)} \cdot \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)}, X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n).
\end{aligned}$$

Le terme de droite de l'équation (4.3) apparaît en réappliquant la définition de la probabilité conditionnelle. \square

Lemme 4.4. *Soit $(\{X_n\}_{n \geq 0}, \{Y_n\}_{n \geq 0}, \lambda)$ un MMC. Pour tout naturel N et n tels que $0 \leq n \leq N$, si $\mathbb{P}(X_n = x_n) > 0$ alors*

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \\ &= \mathbb{P}(Y_n = o_n \mid X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Démonstration. Commençons par réécrire le terme de gauche en utilisant la notation $\sum_{o_0, \dots, o_{n-1} \in \mathcal{O}}$ pour $\sum_{o_0 \in \mathcal{O}} \dots \sum_{o_{n-1} \in \mathcal{O}}$,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \\ &= \sum_{o_0, \dots, o_{n-1} \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_{n-1} = o_{n-1}, Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \end{aligned}$$

appliquons, ensuite, l'équation (4.3),

$$\begin{aligned} & \sum_{o_0, \dots, o_{n-1} \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_{n-1} = o_{n-1}, Y_n = o_n \mid X_n = x_n) \\ & \qquad \qquad \qquad \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n) \end{aligned}$$

et obtenons ainsi, le membre de droite,

$$\mathbb{P}(Y_n = o_n \mid X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n).$$

\square

Lemme 4.5. *Soit $(\{X_n\}_{n \geq 0}, \{Y_n\}_{n \geq 0}, \lambda)$ un MMC. Pour tout naturel N et n tels que $0 \leq n \leq N - 1$, si $\mathbb{P}(X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1}) > 0$ alors*

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1}) \\ &= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = x_{n+1}) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Démonstration. Le terme de gauche peut se réécrire comme

$$\frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1})} \sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \sum_{x_{n+2} \in E} \dots \sum_{x_N \in E} \mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)}, X^{(N)} = x^{(N)}).$$

Or, l'équation (4.4) a été obtenue dans la preuve du lemme 4.3 et exprime l'égalité suivante :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y^{(N)} = o^{(N)} \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \quad \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)}) \\ &= \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \quad \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}) \\ & \qquad \qquad \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n). \end{aligned}$$

Mais en appliquant la définition de probabilité conditionnelle dans un premier temps et l'équation (4.2) avec $m = n + 1$, dans un deuxième temps, le troisième facteur du produit devient

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\ & \quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n) \\ & = \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\ & \quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n). \end{aligned}$$

Or, en insérant tout cela dans la première ligne de la preuve, nous avons que le numérateur est,

$$\begin{aligned} & \sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_{n-1} \in E} \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_N \in E} \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}) \\ & \quad \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\ & \quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n). \end{aligned}$$

Cette expression est équivalente à $S_1 \cdot S_2$ où

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)} \mid X^{(n)} = x^{(n)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(n)} = x^{(n)}) \\ S_2 &= \sum_{x_{n+2} \in E} \cdots \sum_{x_N \in E} \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\ & \quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n). \end{aligned}$$

Premièrement, nous allons évaluer la somme S_2 .

Mais, en utilisant l'équation (3.2) de la proposition 3.25 avec $A = \Omega$ et $N = n + r$,

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N)} \\ & = \frac{\prod_{l=n}^{N-1} \mathbb{P}(X_{l+1} = x_{l+1} \mid X_l = x_l)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}) \cdot \prod_{l=n+1}^{N-1} \mathbb{P}(X_{l+1} = x_{l+1} \mid X_l = x_l)}. \end{aligned}$$

D'où, en simplifiant il ne reste que :

$$\frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1})}.$$

Et donc, en appliquant la définition de la probabilité conditionnelle, nous avons que

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\ & \quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n) \\ & = \frac{\mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N)} \\ & \quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n). \end{aligned}$$

La somme S_2 devient alors

$$\begin{aligned} S_2 &= \sum_{x_{n+2} \in E} \dots \sum_{x_n \in E} \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1})} \\ &\quad \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N) \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1})} \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}). \end{aligned}$$

Regardons la somme S_1 . Par définition de la probabilité conditionnelle, cette somme se réduit à

$$\sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)}, X^{(n)} = x^{(n)}),$$

et cela est équivalent à $\mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)}, X_n = x_n)$. Donc,

$$\begin{aligned} S_1 \cdot S_2 &= \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)}, X_n = x_n) \\ &\quad \cdot \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1})} \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}) \end{aligned}$$

et il faut encore diviser par $\mathbb{P}(X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1})$ pour être équivalent au côté gauche de l'équation (4.6), d'où,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)}, X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1}) \\ \cdot \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}) \cdot \mathbb{P}(X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1})}. \end{aligned}$$

En simplifiant, le terme de gauche de l'équation (4.6) se réduit à :

$$\frac{\mathbb{P}(Y^{(n)} = o^{(n)}, X_n = x_n)}{\mathbb{P}(X_n = x_n)} \cdot \frac{\mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_{n+1} = x_{n+1})}{\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1})},$$

ce qui correspond exactement au terme de droite de l'équation (4.6). \square

Lemme 4.6. Soit $(\{X_n\}_{n \geq 0}, \{Y_n\}_{n \geq 0}, \lambda)$ un MMC. Pour tout naturel N , n et m tels que $0 \leq n \leq m \leq N$, si $\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_m = x_m) > 0$ alors

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x_n, \dots, X_m = x_m) \\ = \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Démonstration. Commençons par développer le terme de gauche. Notons, $\sum_{x_0 \dots x_{n-1} \in E}$ pour $\sum_{x_0 \in E} \dots \sum_{x_{n-1} \in E}$ et $\sum_{x_{m+1} \dots x_N \in E}$ pour $\sum_{x_{m+1} \in E} \dots \sum_{x_N \in E}$.

$$\begin{aligned}
& \frac{\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N, X_n = x_n, \dots, X_m = x_m)}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_m = x_m)} \\
&= \frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_m = x_m)} \\
&\quad \cdot \sum_{x_0 \dots x_{n-1} \in E} \sum_{x_{m+1} \dots x_N \in E} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N, X^{(N)} = x^{(N)}) \\
&= \frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_m = x_m)} \\
&\quad \cdot \sum_{x_0 \dots x_{n-1} \in E} \sum_{x_{m+1} \dots x_N \in E} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \cdot \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)}).
\end{aligned}$$

Or, l'équation (4.2) avec $n = 0$ est

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X^{(N)} = x^{(N)}) \\
= \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m, \dots, X_N = x_N),
\end{aligned}$$

qui est un terme indépendant des variables x_0, \dots, x_{n-1} . Il en résulte que le terme de gauche de l'équation (4.7) devient :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_m = x_m)} \\
&\quad \cdot \sum_{x_{m+1} \dots x_N \in E} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m, \dots, X_N = x_N) \\
&\quad \cdot \sum_{x_0 \dots x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(X^{(N)} = x^{(N)}) \\
&= \frac{1}{\mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_m = x_m)} \\
&\quad \cdot \sum_{x_{m+1} \dots x_N \in E} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m, \dots, X_N = x_N) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N)
\end{aligned}$$

ou encore, par définition de la probabilité conditionnelle,

$$\begin{aligned}
& \sum_{x_{m+1} \dots x_N \in E} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m, \dots, X_N = x_N) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X_{m+1} = x_{m+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_n = x_n, \dots, X_m = x_m) \\
&= \sum_{x_{m+1}, \dots, x_N \in E} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m, \dots, X_N = x_N) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X_{m+1} = x_{m+1}, \dots, X_N = x_N \mid X_m = x_m)
\end{aligned}$$

où la dernière égalité est obtenue en appliquant la remarque 3.27 avec $n+r = N$, $n = m$ et $A = \{X_n = x_n, \dots, X_{m-1} = x_{m-1}\}$. En appliquant, de nouveau, la définition de

probabilité conditionnelle qui engendre des simplifications de termes, nous obtenons que l'expression développée pour le terme de gauche de l'équation (4.6) se réduit à

$$\frac{1}{\mathbb{P}(X_m = x_m)} \cdot \sum_{x_{m+1} \dots x_N \in E} \mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N, X_m = x_m, \dots, X_N = x_N),$$

qui est équivalent à $\mathbb{P}(Y_m = o_m, \dots, Y_N = o_N \mid X_m = x_m)$, le terme de droite de l'équation (4.6). \square

Lemme 4.7. *Soit $(\{X_n\}_{n \geq 0}, \{Y_n\}_{n \geq 0}, \lambda)$ un MMC. Pour tout naturel N et n tels que $n = 0, \dots, N$, si $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N) > 0$ alors*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N) \\ = \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Démonstration. Le côté gauche de l'équation (4.8) peut se réécrire comme

$$\sum_{o_{n+1} \in \mathcal{O}} \dots \sum_{o_N \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y^N = o^N \mid X^N = x^N).$$

Mais par la condition 3 de la définition de modèle de Markov caché, nous obtenons

$$\prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \cdot \sum_{o_{n+1} \in \mathcal{O}} \dots \sum_{o_N \in \mathcal{O}} \prod_{l=n+1}^N \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l).$$

Or, pour tout état caché $x_l \in E$, $\sum_{o_l \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) = 1$, ce qui implique que

$$\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N) = \prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l),$$

qui correspond au terme de droite de l'équation (4.8). \square

4.4 Les trois problèmes liés aux Modèles de Markov Cachés

Lors de la modélisation d'un processus réel par le biais des MMC, les tâches effectuées correspondent généralement aux trois types de problèmes suivants :

- Le problème de l'évaluation
- Le problème du décodage
- Le problème de l'apprentissage.

4.4.1 Le problème de l'évaluation

Le problème de l'évaluation de la probabilité de générer une observation consiste à : étant donné une observation notée $o = o_0 \dots o_N$ de longueur N (un naturel) et un modèle de Markov caché λ , évaluer la probabilité avec laquelle le MMC peut engendrer l'observation o . Cette probabilité désigne la $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$.

Cette probabilité $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$ peut être calculée de manière naïve grâce à la loi marginale (équation (4.1)), mais son calcul demande $(2N + 1) \cdot J^{N+1}$ opérations (avec $|E| = J$). Pour diminuer cette complexité, nous allons calculer cette probabilité sur base de l'algorithme **Forward-Backward**. L'idée est donc de décomposer la probabilité $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$ en une somme de variables forward et backward.

Pour n , un naturel compris entre 0 et N ,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N) &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, X_n = x) \\ &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x) \cdot \mathbb{P}(X_n = x). \end{aligned}$$

En appliquant l'équation (4.3) qui exprime l'indépendance des observations passées et futures conditionnellement à l'état « courant », nous avons

$$\begin{aligned} \sum_{x \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_n = x) \\ \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x) \cdot \mathbb{P}(X_n = x), \end{aligned}$$

et en réemployant la définition de probabilité conditionnelle, il en résulte que

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N) &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, X_n = x) \\ &\quad \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x). \end{aligned} \tag{4.9}$$

Notons $\alpha_n(x)$ pour $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, X_n = x)$ et $\beta_n(x)$ pour $\mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x)$. La variable $\alpha_n(x)$ est la variable forward. Elle représente la probabilité d'observer la séquence émise jusqu'au temps n , simultanément au fait que la chaîne de Markov soit à l'état x . Quant à la variable $\beta_n(x)$, c'est une variable backward qui représente la probabilité d'observer la séquence émise à partir du temps $n + 1$ jusqu'à la fin, sachant que la chaîne de Markov est à l'état x au temps n . L'appellation d'algorithme Forward-Backward émane du fait que le calcul de $\alpha_n(x)$ se fait avec n croissant tandis que celui de $\beta_n(x)$ se fait avec n décroissant.

Nous allons expliciter les algorithmes qui permettent de calculer, respectivement, la variable forward et la variable backward.

– Algorithme forward

L'étape d'initialisation correspond au cas $n = 0$. Pour tout état $x \in E$, nous avons

$$\begin{aligned}\alpha_0(x) &= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, X_0 = x) \\ &= b_x(o_0) \cdot \pi_x(0).\end{aligned}$$

Ensuite, dans l'étape « itération », nous exprimons $\alpha_{n+1}(x)$ en fonction du précédent. Pour $n = 1, \dots, N - 1$, et pour tout état x , nous procédons comme suit,

$$\begin{aligned}\alpha_{n+1}(x) &= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1}, X_{n+1} = x) \\ &= \sum_{y \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1}, X_n = y, X_{n+1} = x) \\ &= \sum_{y \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1} \mid X_n = y, X_{n+1} = x) \\ &\quad \cdot \mathbb{P}(X_n = y, X_{n+1} = x)\end{aligned}$$

mais, en appliquant l'équation (4.6) avec $N = n + 1$, la dernière égalité devient

$$\begin{aligned}\sum_{y \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n \mid X_n = y) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1} \mid X_{n+1} = x) \\ \cdot \mathbb{P}(X_n = y, X_{n+1} = x)\end{aligned}$$

ou encore,

$$\begin{aligned}\sum_{y \in E} \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, X_n = y) \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_n = y) \\ \cdot \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1} \mid X_{n+1} = x)\end{aligned}$$

D'où,

$$\boxed{\alpha_{n+1}(x) = \sum_{y \in E} \alpha_n(y) a_{y|x} b_x(o_{n+1}).}$$

– Algorithme backward

Dans ce cas-ci, l'étape d'initialisation correspond au cas où $n = N$. Alors, pour tout état $x \in E$, nous posons, par convention :

$$\beta_N(x) = 1.$$

Dans l'étape « itération », nous allons exprimer $\beta_n(x)$ en fonction du suivant. Pour $n = N - 1, \dots, 0$ et pour tout état $x \in E$, nous effectuons les calculs

suivants :

$$\begin{aligned}
\beta_n(x) &= \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x) \\
&= \sum_{y \in E} \frac{\mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N, X_n = x, X_{n+1} = y)}{\mathbb{P}(X_n = x)} \\
&= \sum_{y \in E} \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_n = x, X_{n+1} = y) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x).
\end{aligned}$$

En appliquant l'équation (4.7) avec $m = n + 1$, la première probabilité est équivalente à $\mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = y)$. Grâce au lemme 4.4 (avec $n = n + 1$), cette probabilité est en fait,

$$\mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1} \mid X_{n+1} = x) \cdot \mathbb{P}(Y_{n+2} = o_{n+2}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = y).$$

D'où, en réintégrant ces résultats intermédiaires, nous obtenons,

$$\begin{aligned}
\beta_n(x) &= \sum_{y \in E} \mathbb{P}(Y_{n+1} = o_{n+1} \mid X_{n+1} = y) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(Y_{n+2} = o_{n+2}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{n+1} = y) \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x)
\end{aligned}$$

où encore,

$$\boxed{\beta_n(x) = \sum_{y \in E} b_y(o_{n+1}) \beta_{n+1}(y) a_{x|y}.$$

Revenons, maintenant à notre idée de base qui est d'évaluer $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$. Comme l'équation Forward-Backward (équation (4.9)) est valable pour tout n allant de 0 à N , elle est en particulier satisfaite pour $n = N$. Or, dans ce cas-là, la variable backward vaut 1, par convention et donc,

$$\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N) = \sum_{x \in E} \alpha_N(x).$$

Le calcul de $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$ nécessite, dans ce cas-ci, $2NJ^2 - 2J^2 + J$ opérations (où J est le cardinal de l'espace des états E), ce qui donne une complexité de $O(2NJ^2)$, au lieu de $O(2NJ^{N+1})$ avec la méthode naïve.

4.4.2 Le problème du décodage

Le problème du décodage consiste à déterminer la séquence d'états $x = x_0 x_1 \dots x_N$ la plus probable étant donné une séquence d'observations $o = o_0 o_1 \dots o_N$ et un modèle de Markov caché λ .

Nous tentons donc de chercher la séquence d'états cachés $x^* = x_0^* x_1^* \dots x_N^*$ qui maximise $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$. Cette séquence d'états est obtenue par l'algorithme de **Viterbi** qui consiste à calculer de manière récursive, pour tout état $x \in E$, la quantité

$$\delta_n(x) = \max_{x_0 \in E, \dots, x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}, X_n = x, Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n),$$

pour tout naturel n strictement inférieur à N . Cette probabilité correspond à la plus grande probabilité d'observer la séquence émise $o_0 \dots o_n$ obtenue par un chemin qui au temps n , se trouve à l'état x . Cet algorithme stocke à chaque étape de récursion et pour chaque état x , l'état y le plus probable occupé à l'instant $n - 1$, à partir du duquel le processus va évoluer vers l'état x à l'instant n , ceci est noté par $\phi_n(x)$.

Grâce à un « backtracking », la séquence $x^* = x_0^* x_1^* \dots x_N^*$ est obtenue. Par définition, celle-ci maximise $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N, Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$. Mais comme,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N) \\ = \frac{\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_N = x_N, Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)}, \end{aligned}$$

nous maximisons bien la probabilité souhaitée.

Dans l'étape d'initialisation, pour chaque état $x \in E$, nous posons,

$$\delta_0(x) = \mathbb{P}(X_0 = x, Y_0 = o_0) = b_x(o_0) \cdot \pi_x(0).$$

Quant à la valeur des $\phi_0(x)$ pour chaque x , elle peut être initialisée par n'importe quelle valeur puisqu'elle n'est pas utilisée dans la suite.

Ensuite, pour chaque n allant de 1 à $N - 1$, et pour chaque état x , nous allons exprimer $\delta_{n+1}(x)$ en fonction du précédent. Le résultat s'exprime de la manière suivante :

$$\boxed{\delta_{n+1}(x) = \max_{y \in E} \delta_n(y) \cdot a_{y|x} \cdot b_x(o_{n+1})}. \quad (4.10)$$

En effet, en appliquant la définition de probabilité conditionnelle, nous obtenons,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n, X_{n+1} = x, Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1}) \\ = \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n, X_{n+1} = x) \\ \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \cdot \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n), \end{aligned}$$

ce qui devient par la 3^{ème} partie de la définition de MMC

$$\begin{aligned} b_x(o_{n+1}) \cdot \prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \cdot \mathbb{P}(X_{n+1} = x \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ \cdot \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ = b_x(o_{n+1}) \cdot \prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \cdot a_{x_n|x} \cdot \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n), \end{aligned}$$

qui est obtenue grâce à la propriété de Markov. Et puisque $\delta_{n+1}(x)$ est défini comme

$$\max_{x_0 \in E, \dots, x_n \in E} \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n, X_{n+1} = x, Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n, Y_{n+1} = o_{n+1}),$$

nous avons que $\delta_{n+1}(x)$ est équivalent à

$$\max_{x_0 \in E, \dots, x_n \in E} b_x(o_{n+1}) \cdot \prod_{l=0}^n \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x_l) \cdot a_{x_n|x} \cdot \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n).$$

Or, si nous dissocions le max et que nous appliquons, à nouveau, la 3^{ème} partie de la définition de MMC et la définition de probabilité conditionnelle, nous obtenons que $\delta_{n+1}(x)$ vaut

$$b_x(o_{n+1}) \cdot \max_{x_n \in E} a_{x|x_n} \cdot \max_{x_0 \in E, \dots, x_{n-1} \in E} \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}, X_n = x_n, Y_0 = o_0, \dots, Y_n = o_n).$$

Cette dernière expression est équivalente à $b_x(o_{n+1}) \cdot \max_{x_n \in E} a_{x|x_n} \cdot \delta_n(x_n)$, ce qui correspond à l'équation (4.10) si nous remplaçons x_n par y .

Comme il en a été annoncé précédemment, l'algorithme stocke en mémoire, pour chaque état x , l'état y le plus probable occupé à l'instant n , à partir duquel le processus va évoluer vers l'état x , à l'instant $n+1$. Cela correspond à $\phi_{n+1}(x)$ qui définit l'état y^* , lequel maximise l'expression $\delta_n(y) \cdot a_{y|x}$.

Lors de la dernière étape de l'algorithme, la valeur de $\delta_N(x)$ est calculée pour chaque état $x \in E$. Mais $\delta_N(x)$ correspond à la plus grande probabilité d'observer la séquence o_0, \dots, o_N obtenue par un chemin qui se termine en x . Par conséquent, l'état x_N^* est défini comme étant celui qui donne la valeur $\delta_N(x)$ la plus grande. Pour obtenir les autres états, nous procédons par « backtracking », c'est-à-dire, pour n allant de $N-1$ à 0,

$$x_n^* = \phi_{n+1}(x_{n+1}^*).$$

Application

Afin de visualiser le raisonnement associé à l'algorithme de Viterbi, nous exposons le cheminement à parcourir sur l'exemple introductif de la météo. Nous voulons déterminer la séquence d'états $x = x_0 x_1 x_2$ la plus probable étant donné une séquence d'observation $o = \text{Nuage}, \text{Nuage}, \text{Pluie}$ et le modèle de Markov caché détaillé au début du chapitre. Il y a donc trois étapes de calcul. Les lettres P, E, A et H désignent respectivement les états « printemps », « été », « automne » et « hiver ».

– Première étape : $n = 0$

Après calcul, nous obtenons :

$$(\delta_0(P), \delta_0(E), \delta_0(A), \delta_0(H)) = (0.025, 0.0025, 0.0125, 0.05)$$

Cette étape n'a pour objectif que de calculer les $\delta_0(x)$ qui seront utilisés pour déterminer les $\delta_1(x)$ à l'étape suivante.

- Deuxième étape : $n = 1$

Dans cette étape, nous cherchons pour chaque état x , la « meilleure » transition vers cet état à partir d'un état x_0 (en $n = 0$). Donc, parmi toutes les combinaisons d'états x_0, x possibles (treillis de la figure 4.2), nous voulons déterminer celle qui maximise la probabilité d'observer conjointement la séquence *Nuage, Nuage* et x_0, x et qui amène le système à l'état x au temps $n = 1$. Les transitions entre ces états correspondent aux flèches vertes de la figure 4.2 et sont déterminées grâce aux calculs de ϕ_1 pour chaque état.

Après calcul, nous obtenons :

$$(\delta_1(P), \delta_1(E), \delta_1(A), \delta_1(H)) = (0.00075, 0.00035, 0.0001875, 0.003)$$

$$(\phi_1(P), \phi_1(E), \phi_1(A), \phi_1(H)) = (P, H, A, H)$$

Comme $\phi_1(P) = P$, l'état P (en $n = 0$) est celui qui permet d'amener le système à l'état P (en $n = 1$) avec une plus grande probabilité, la flèche de l'état P au temps $n = 0$ vers l'état P au temps $n = 1$ est donc colorée en vert. Ce même raisonnement est effectué pour tous les états et à toutes les étapes.

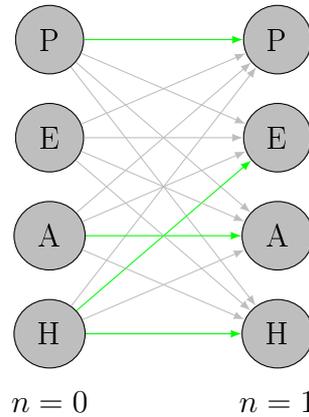


FIGURE 4.2 – Application de l'algorithme de Viterbi : étape 2.

- Troisième étape : $n = 2$

Le même principe est déployé à cette étape, pour chaque état x de E , il faut déterminer parmi toutes les combinaisons x_0, x_1, x , celle qui maximise la probabilité d'observer conjointement la séquence *Nuage, Nuage, Pluie* et x_0, x_1, x et qui amène le système en x au temps $n = 2$.

Après calcul, nous obtenons :

$$(\delta_2(P), \delta_2(E), \delta_2(A), \delta_2(H)) = (0.00010125, 0.000273, 0.00013475, 0.00045)$$

$$(\phi_2(P), \phi_2(E), \phi_2(A), \phi_2(H)) = (P, H, E, H)$$

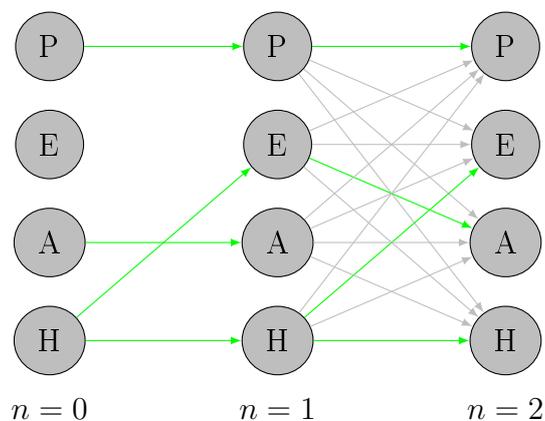


FIGURE 4.3 – Application de l’algorithme de Viterbi : étape 3.

Il faut maintenant procéder au « backtracing » pour obtenir la séquence d’états recherchée. Mais par définition, x_2 est l’état qui donne la plus grande valeur de $\delta_2(x)$. Dans ce cas-ci, c’est l’hiver (H). L’état x_1 est également H , car comme le montre la flèche, c’est cet état à l’étape 2 qui permet d’amener le système à l’état H (en $n = 3$) avec une plus grande probabilité. Il en est de même pour x_3 .

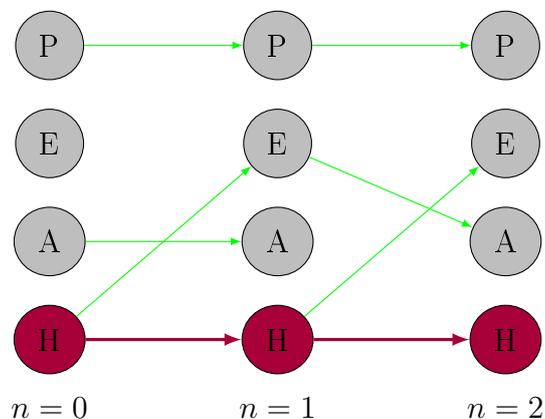


FIGURE 4.4 – Application de l’algorithme de Viterbi : backtracing.

4.4.3 Le problème de l’apprentissage

Le problème de l’apprentissage se résume de la manière suivante : étant donné une séquence d’observations $o = o_0 \dots o_N$, comment déterminer les paramètres du modèle $\lambda = (A, B, \pi(0))$ de telle sorte que ce modèle soit le plus probable pour générer la séquence o ?

Nous introduisons la notation $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda)$ pour désigner quel est le modèle de Markov caché λ utilisé pour calculer la probabilité $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N =$

o_N) qui n'est en aucun cas une probabilité conditionnelle telle que nous avons l'habitude de manipuler. Le problème consiste donc, à déterminer le MMC λ^* qui maximise

$$\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda)$$

ou plutôt, les paramètres $\pi^*(0), A^*, B^*$ qui maximisent

$$\sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_N \in E} \pi_{x_0}(0) \cdot b_{x_0}(o_0) \cdot \prod_{l=1}^N a_{x_{l-1}|x_l} \cdot b_{x_l}(o_l).$$

La recherche du maximum λ^* de cette dernière expression correspond à la solution d'un problème d'optimisation sous contraintes. Les contraintes sont pour la loi initiale : $\forall x \in E \pi_x(0) \geq 0$ et $\sum_{x \in E} \pi_x(0) = 1$ mais il faut également que les matrices de transition et d'émission soient stochastiques. Au vu de la forme complexe de la fonction à optimiser, la résolution de ce problème d'optimisation n'est pas évidente. Par conséquent, nous allons utiliser un algorithme itératif, appelé **algorithme de Baum-Welch** qui consiste, sur base d'une séquence d'observations o et d'un modèle initial λ_0 , à réestimer les paramètres du modèle initial de telle sorte à augmenter $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda_0)$.

Pour cela, nous considérons deux modèles de Markov cachés ; λ et λ' avec λ' tel que $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda') > 0$. Ensuite, nous développons le rapport de vraisemblance entre ces deux modèles.

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda)}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')} \\ &= \frac{\sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_N \in E} \pi_{x_0}(0) \cdot a_{x_0|x_1} \cdots a_{x_{N-1}|x_N} \cdot b_{x_0}(o_0) \cdots b_{x_N}(o_N)}{\sum_{y_0 \in E} \cdots \sum_{y_N \in E} \pi'_{y_0}(0) \cdot a'_{y_0|y_1} \cdots a'_{y_{N-1}|y_N} \cdot b'_{y_0}(o_0) \cdots b'_{y_N}(o_N)} \\ &= \frac{\sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_N \in E} \pi'_{x_0}(0) \cdot a'_{x_0|x_1} \cdots a'_{x_{N-1}|x_N} \cdot b'_{x_0}(o_0) \cdots b'_{x_N}(o_N) \cdot \text{quotient}}{\sum_{y_0 \in E} \cdots \sum_{y_N \in E} \pi'_{y_0}(0) \cdot a'_{y_0|y_1} \cdots a'_{y_{N-1}|y_N} \cdot b'_{y_0}(o_0) \cdots b'_{y_N}(o_N)}, \end{aligned}$$

où le quotient représente la quantité $\frac{\pi_{x_0}(0) \cdot a_{x_0|x_1} \cdots a_{x_{N-1}|x_N} \cdot b_{x_0}(o_0) \cdots b_{x_N}(o_N)}{\pi'_{x_0}(0) \cdot a'_{x_0|x_1} \cdots a'_{x_{N-1}|x_N} \cdot b'_{x_0}(o_0) \cdots b'_{x_N}(o_N)}$.

Et tenu du compte du fait que la fonction $x \mapsto \ln x$ est concave, le $\ln\left(\frac{\mathbb{P}(Y_0=o_0, \dots, Y_N=o_N|\lambda)}{\mathbb{P}(Y_0=o_0, \dots, Y_N=o_N|\lambda')}\right)$ a comme minorant la quantité suivante :

$$\frac{\sum_{x_0 \in E} \cdots \sum_{x_N \in E} \pi'_{x_0}(0) \cdot a'_{x_0|x_1} \cdots a'_{x_{N-1}|x_N} \cdot b'_{x_0}(o_0) \cdots b'_{x_N}(o_N) \cdot \ln(\text{quotient})}{\sum_{y_0 \in E} \cdots \sum_{y_N \in E} \pi'_{y_0}(0) \cdot a'_{y_0|y_1} \cdots a'_{y_{N-1}|y_N} \cdot b'_{y_0}(o_0) \cdots b'_{y_N}(o_N)}.$$

Cette dernière est notée $Q(\lambda, \lambda')$. Dès lors, si un MMC λ est tel que $Q(\lambda, \lambda') > 0$, alors nous avons trouvé un meilleur MMC dans le sens qu'il augmente la fonction de vraisemblance pour la séquence o . Mais si, de plus, nous déterminons un MMC λ^* tel que $Q(\lambda^*, \lambda') > Q(\lambda, \lambda')$ alors, en utilisant l'inégalité de Jensen, nous montrons que $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda^*) > \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')$.

Ce raisonnement est le raisonnement type associé au principe fondamental de « Expectation-Maximization » (maximisation de l'espérance) : si on a déjà l'estimation λ des paramètres et qu'une autre configuration des paramètres λ^* pour laquelle l'inégalité $Q(\lambda^*, \lambda') > Q(\lambda, \lambda')$ est satisfaite alors l'observation o est plus probable avec le modèle λ^* qu'avec le modèle λ .

Par conséquent, nous allons maximiser la fonction $\lambda \mapsto Q(\lambda, \lambda')$. Dans un premier temps, il faut se rendre compte que la quantité $Q(\lambda, \lambda')$ est, par définition de l'espérance conditionnelle, équivalente à

$$\mathbb{E} \left(\ln \left(\frac{\pi_{X_0}(0) \cdot a_{X_0|X_1} \cdots a_{X_{N-1}|X_N} \cdot b_{X_0}(o_0) \cdots b_{X_N}(o_N)}{\pi'_{X_0}(0) \cdot a'_{X_0|X_1} \cdots a'_{X_{N-1}|X_N} \cdot b'_{X_0}(o_0) \cdots b'_{X_N}(o_N)} \right) \middle| Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda' \right).$$

Or, cette espérance conditionnelle revient à

$$\mathbb{E} \left(\ln \pi_{X_0}(0) + \sum_{k=1}^N \ln a_{X_{k-1}|X_k} + \sum_{k=0}^N \ln b_{X_k}(o_k) \middle| Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda' \right) + \text{constante},$$

où la constante est une quantité indépendante du modèle λ . En appliquant la propriété de linéarité de l'espérance conditionnelle ainsi que la définition de celle-ci, nous obtenons :

$$\begin{aligned} Q(\lambda, \lambda') &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(X_0 = x \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') \cdot \ln \pi_x(0) \\ &+ \sum_{x \in E} \sum_{y \in E} \left\{ \sum_{k=1}^N \mathbb{P}(X_{k-1} = x, X_k = y \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') \right\} \cdot \ln a_{x|y} \\ &+ \sum_{x \in E} \sum_{o_l \in \mathcal{O}} \left\{ \sum_{k=0}^N \mathbb{1}_{\{Y_k = o_l\}} \mathbb{P}(X_k = x \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') \right\} \cdot \ln b_x(o_l) \\ &+ \text{constante}. \end{aligned}$$

L'appellation de « Expectation-Maximization » se justifie par le fait que nous maximisons une espérance. Or, les deux expressions suivantes sont satisfaites pour tout état x, y et pour tout $0 \leq k \leq N$:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_k = x \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') &= \frac{\alpha'_k(x) \beta'_k(x)}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')} \\ \mathbb{P}(X_k = x, X_{k+1} = y \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') &= \frac{\alpha'_k(x) \beta'_{k+1}(y) a'_{x|y} b'_y(o_{k+1})}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')}. \end{aligned}$$

En effet,

$$\begin{aligned}
& \alpha'_k(x)\beta'_k(x) \\
&= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_k = o_k \text{ et } X_k = x \mid \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_{k+1} = o_{k+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_k = x, \lambda') \\
&= \mathbb{P}(X_k = x \mid \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_k = o_k \mid X_k = x, \lambda') \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(Y_{k+1} = o_{k+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_k = x, \lambda') \\
&= \mathbb{P}(X_k = x \mid \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_k = x, \lambda') \\
&= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \text{ et } X_k = x \mid \lambda')
\end{aligned}$$

où l'avant-dernière égalité est obtenue grâce au lemme 4.3 avec $n = k$.

Donc,

$$\mathbb{P}(X_k = x \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') = \frac{\alpha'_k(x)\beta'_k(x)}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')}.$$

D'un autre côté, pour la deuxième expression nous avons :

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(X_k = x, X_{k+1} = y \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') \\
&= \frac{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid X_k = x, X_{k+1} = y, \lambda') \cdot \mathbb{P}(X_k = x, X_{k+1} = y \mid \lambda')}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')},
\end{aligned}$$

mais en appliquant successivement le lemme 4.5 (avec $n = k$) et le lemme 4.4 (avec $n = k + 1$), nous avons que le numérateur de cette dernière expression vaut :

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_k = o_k \mid X_k = x, \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_{k+1} = o_{k+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{k+1} = y, \lambda') \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(X_k = x, X_{k+1} = y \mid \lambda') \\
&= \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_k = o_k \mid X_k = x, \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_{k+1} = o_{k+1} \mid X_{k+1} = y, \lambda') \\
&\quad \cdot \mathbb{P}(Y_{k+2} = o_{k+2}, \dots, Y_N = o_N \mid X_{k+1} = y, \lambda') \cdot \mathbb{P}(X_k = x, X_{k+1} = y \mid \lambda')
\end{aligned}$$

ou encore, en utilisant les notations, cela est équivalent à

$$\alpha'_k(x) \quad b'_y(o_{k+1}) \quad \beta'_{k+1}(y) \quad a'_{x|y},$$

et donc,

$$\mathbb{P}(X_k = x, X_{k+1} = y \mid Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N, \lambda') = \frac{\alpha'_k(x)\beta'_{k+1}(y)a'_{x|y}b'_y(o_{k+1})}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')}.$$

Nous en déduisons alors, en remplaçant les deux expressions obtenues que :

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda') \cdot Q(\lambda, \lambda') \\
&= \sum_{x \in E} \alpha'_0(x) \cdot \beta'_0(x) \cdot \ln \pi_x(0) \\
&+ \sum_{x \in E} \sum_{y \in E} \left\{ \sum_{k=1}^N \alpha'_{k-1}(x) \cdot a'_{x|y} \cdot b'_y(o_k) \cdot \beta'_k(y) \right\} \cdot \ln a_{x|y} \\
&+ \sum_{x \in E} \sum_{o_l \in \mathcal{O}} \left\{ \sum_{k=0}^N \mathbb{1}_{\{Y_k = o_l\}} \cdot \alpha'_k(x) \cdot \beta'_k(x) \right\} \cdot \ln b_x(o_l) \\
&+ \text{constante.}
\end{aligned}$$

Nous cherchons donc le MMC λ^* qui maximise cette dernière expression. Le terme $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')$ ne modifie pas le modèle λ^* recherché car il est indépendant de λ . Or, cette expression est une somme d'expression de termes de la forme

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^M c_i \ln x_i$$

où $c_i \geq 0$ et le vecteur $x = (x_1, \dots, x_M)$ est tel que $\sum_{i=1}^M x_i = 1$. Et cette fonction atteint son maximum lorsque

$$\forall i = 1, \dots, M \quad x_i = \frac{c_i}{\sum_{i=1}^M c_i}.$$

La preuve de ce résultat est totalement similaire à celle qui a été réalisée pour la proposition 3.74 qui concerne l'estimation des probabilités de transition.

Comme pour tout état x , $\pi_x(0) \geq 0$ et $\sum_{x \in E} \pi_x(0) = 1$, nous avons que le maximum est atteint lorsque

$$\pi_x^*(0) = \frac{\alpha'_0(x) \beta'_0(x)}{\sum_{x \in E} \alpha'_0(x) \beta'_0(x)} = \frac{\alpha'_0(x) \beta'_0(x)}{\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N \mid \lambda')}. \quad (4.11)$$

Comme tous les éléments de la matrice A sont positifs et que pour chaque ligne, $\sum_{y \in E} a_{x|y} = 1$, nous obtenons, en maximisant ligne à ligne, que le maximum est atteint lorsque

$$a_{x|y}^* = \frac{\sum_{k=1}^N \alpha'_{k-1}(x) a'_{x|y} b'_y(o_k) \beta'_k(y)}{\sum_{y \in E} \sum_{k=1}^N \alpha'_{k-1}(x) a'_{x|y} b'_y(o_k) \beta'_k(y)}, \quad \forall x, y \in E.$$

Par ailleurs, la partie du dénominateur : $\sum_{y \in E} a'_{x|y} b'_y(o_k) \beta'_k(y)$ est, en fait, équivalente à $\beta'_{k-1}(x)$. En effet,

$$\begin{aligned}
& \sum_{y \in E} \mathbb{P}(X_k = y \mid X_{k-1} = x, \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_k = o_k \mid X_k = y, \lambda') \\
& \qquad \qquad \qquad \cdot \mathbb{P}(Y_{k+1} = o_{k+1}, \dots, Y_N = o_N \mid X_k = y, \lambda')
\end{aligned}$$

ce qui revient, par le lemme 4.4 avec $n = k$, à

$$\sum_{y \in E} \mathbb{P}(X_k = y \mid X_{k-1} = x, \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_k = o_k, \dots, Y_N = o_N \mid X_k = y, \lambda').$$

En appliquant le lemme 4.6 avec $m = k$ et $n = k - 1$, cette dernière expression se réécrit comme

$$\sum_{y \in E} \mathbb{P}(X_k = y \mid X_{k-1} = x, \lambda') \cdot \mathbb{P}(Y_k = o_k, \dots, Y_N = o_N \mid X_{k-1} = x, X_k = y, \lambda'),$$

ou encore, comme

$$\mathbb{P}(Y_k = o_k, \dots, Y_N = o_N \mid X_{k-1} = x, \lambda').$$

Mais cette probabilité est la définition de $\beta'_{k-1}(x)$. Donc, le maximum s'exprime sous la forme :

$$a_{x|y}^* = a'_{x|y} \frac{\sum_{k=1}^N \alpha'_{k-1}(x) b'_y(o_k) \beta'_k(y)}{\sum_{k=1}^N \alpha'_{k-1}(x) \beta'_{k-1}(x)}, \quad \forall x, y \in E. \quad (4.12)$$

Pour obtenir l'expression des probabilités d'émissions qui maximisent $Q(\lambda, \lambda')$, nous utilisons le fait que, tous les éléments de la matrice B sont positifs et que pour tout état $x \in E$, $\sum_{o_l \in \mathcal{O}} \mathbb{P}(Y_l = o_l \mid X_l = x) = 1$, ce qui engendre qu'en maximisant ligne à ligne, nous obtenons $\forall x \in E$ et $\forall o_l \in \mathcal{O}$:

$$b_x^*(o_l) = \frac{\sum_{k=0}^N \mathbb{1}_{\{Y_k = o_l\}} \alpha'_k(x) \beta'_k(x)}{\sum_{o_l \in \mathcal{O}} \sum_{k=0}^N \mathbb{1}_{\{Y_k = o_l\}} \alpha'_k(x) \beta'_k(x)} = \frac{\sum_{k=0}^N \mathbb{1}_{\{Y_k = o_l\}} \alpha'_k(x) \beta'_k(x)}{\sum_{k=0}^N \alpha'_k(x) \beta'_k(x)} \quad (4.13)$$

car $\sum_{o_l \in \mathcal{O}} \mathbb{1}_{\{Y_k = o_l\}} = 1$.

En résumé, l'algorithme de Baum-Welch consiste à réestimer les paramètres du modèle de Markov caché avec les formules (4.11)–(4.13) tant que la probabilité $\mathbb{P}(Y_0 = o_0, \dots, Y_N = o_N)$ calculée sur base des nouveaux paramètres soit supérieure à celle calculée avant la réestimation. Dans le cas où le dénominateur d'un élément de la matrice A ou B est nul pour une certaine itération alors l'algorithme retourne les paramètres obtenus juste avant l'itération courante.

Remarque 4.8. Les éléments de la loi initiale $\pi'(0)$ ou de la matrice A' ou de la matrice B' étant définis par 0 le sont encore après ré-estimation.

Pour les éléments de la loi initiale, cela provient du fait que $\alpha'_0(x) = b'_x(o_0) \cdot \pi'_x(0)$ et donc si $\pi'_x(0) = 0$ pour un certain état alors $\alpha'_0(x) = 0$. Par conséquent, la valeur après ré-estimation pour cet état est nulle.

Quant aux éléments de la matrice A' cette constatation est directe au vu de la formule de ré-estimation.

Par ailleurs, pour un élément de B' nulle (exemple : $b'_x(o_l) = 0$), nous avons :

- soit que o_l que ne se trouvent pas dans la séquence d'observation o , ce qui engendre que le numérateur de $b_x^*(o_l)$ est nul
- soit o_l s'y retrouve mais alors c'est le terme $\alpha'_k(x)$ qui annulera le numérateur avec k tel que $o_k = o_l$.

Un raisonnement similaire montre que si un élément de la loi initiale $\pi'(0)$ ou de la matrice A' ou B' vaut 1 alors après ré-estimation il vaudra toujours 1.

Chapitre 5

Application biologique

Dans ce dernier chapitre, nous développons de manière explicite le modèle de Markov caché utilisé pour identifier les peptides. Ce dernier est décrit en partie dans l'article référencé dans [?] et dont le titre est « *NovoHMM : A hidden Markov Model for de Novo Peptide Sequencing* ».

Avant d'appliquer le modèle probabiliste aux données biologiques, ces dernières parcourent un cheminement résumé en différentes étapes et reprise dans la figure 5.1.

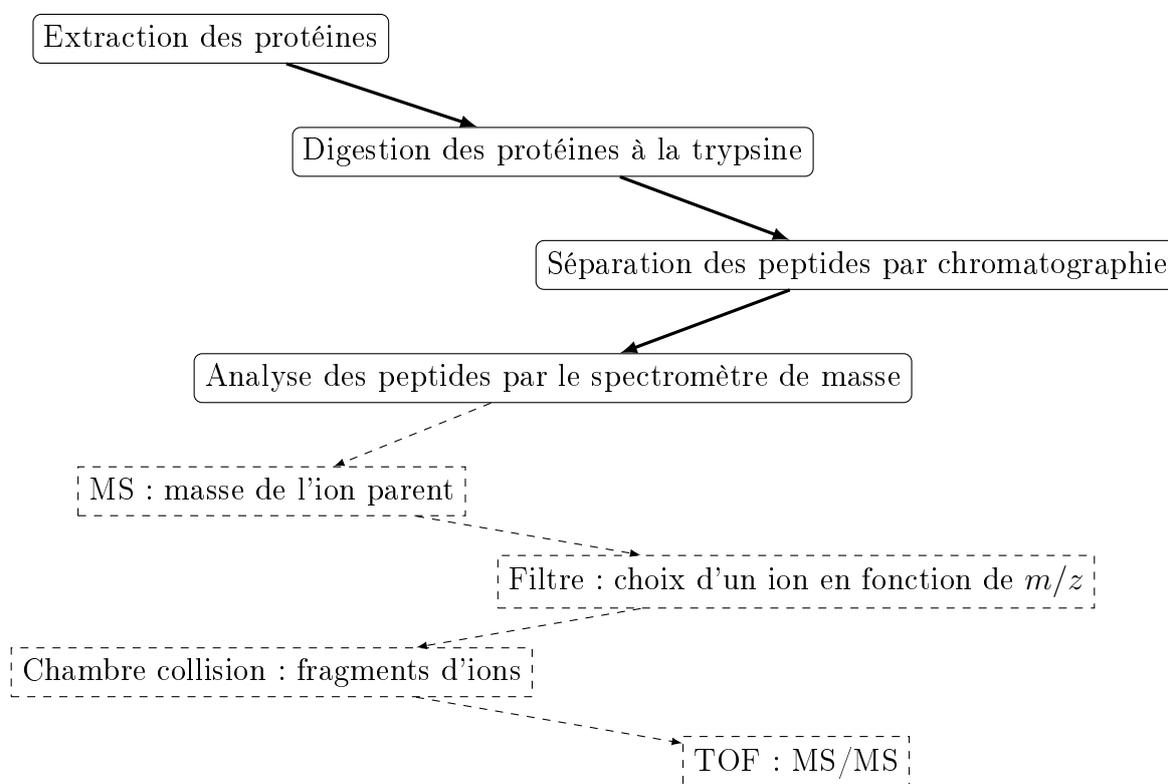


FIGURE 5.1 – De l'échantillon au spectre MS/MS.

Les modèles de Markov cachés sont appliqués aux données biologiques pour déduire la séquence d'acides aminés (un peptide) d'un spectre de masse expérimental. Pour rappel, les modèles de Markov cachés sont des modèles probabilistes qui prennent en compte de l'information cachée et de l'information observée. Dans notre cas, les états cachés sont les 20 acides aminés et les états observés sont les intensités des pics du spectre de masse. Pour pouvoir utiliser les modèles de Markov cachés, il faut définir une loi initiale, des probabilités de transitions ainsi que des probabilités d'émissions. Il faut également supposer que la probabilité d'observer un pic à un certain acide aminé dépend uniquement de l'acide aminé lui-même et que les pics sont indépendants conditionnellement à la séquence d'acides aminés.

Les **probabilités de transition** représentent, dans ce cas-ci, les probabilités de passer d'un acide aminé à un autre. Comme l'ensemble des états cachés comportent 20 acides aminés, la matrice de transition, associée au MMC, est du type 20×20 et est inconnue. Dès lors pour estimer ces 400 probabilités de transition, nous utilisons les estimateurs par le maximum de vraisemblance définis dans la proposition 3.74 du chapitre 3. Rappelons que l'estimation de la probabilité de transition de l'état x à l'état y est déterminée par

$$\hat{p}_{x|y} = \frac{n_{x|y}}{n_x},$$

où $n_{x|y}$ est le nombre de fois que l'état y se trouve après l'état x et n_x le nombre de fois que l'état x apparaît. La quantité $\hat{p}_{x|y}$ est donc la valeur qui se trouve en coordonnée (x, y) de la matrice A qui est, pour rappel, la matrice de transition. Nous avons calculé ces probabilités sur base des peptides provenant de cinq fichiers de type différents ; trois bactéries de trois espèces différentes (Métallidurans, Mycobacterium paratuberculosis et Rhodospirillum), un virus (Herpès chez les bovins), et un fichier contenant des peptides extraits d'humains. Afin de comparer les résultats obtenus, nous les avons reportés sur des histogrammes. Le fruit de cette comparaison montre que les probabilités de transition sont très similaires dans les cinq fichiers, à l'exception des transitions vers l'acide aminé A (alanine). Pour ces probabilités, les trois bactéries donnent des résultats très semblables, par contre, pour l'humain et le virus, cette transition est deux fois moins fréquente. Aucune explication biologique permettant d'interpréter ce phénomène n'a pu être trouvée. En pratique, il faut donc être vigilant à choisir le bon fichier pour estimer les probabilités de transitions suivant le type de séquences d'acides aminés à identifier.

Le graphe associé à la matrice de transition comporte 20 nœuds et tous les nœuds sont reliés entre-eux, c'est-à-dire que la probabilité d'aller d'un acide aminé vers n'importe quel autre est strictement positive. En ne considérant que cinq états et donc cinq acides aminés, le graphe associé à la matrice de transition est celui représenté à la figure 5.2.

En outre, chaque peptide possède une masse, notée M correspondant à la somme des masses des différents acides aminés le constituant. Un exemple de calcul de masse a été donné dans le chapitre 2 à la section 2.2.6. Par conséquent, pour vérifier que

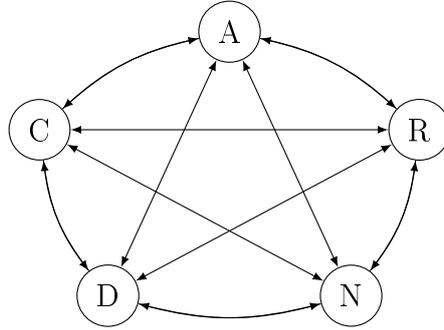


FIGURE 5.2 – Graphe des transitions pour cinq acides aminés.

l'ensemble du peptide est identifié, il faut sommer les masses des acides aminés identifiés et comparer la valeur avec M . Pour prendre en compte de cette condition, nous avons besoin de connaître, à chaque étape de l'évolution du processus probabiliste, la masse totale des acides aminés déjà parcourus. Nous avons, pour cela, discrétisé la masse en unité de un Dalton et introduit un compteur de masse pour chacun des acides aminés. Autrement dit, chaque acide aminé est « explosé » en n_α nœuds, avec n_α qui représente la masse en Dalton de l'acide aminé α . Par exemple, pour l'acide aminé « alanine » qui a une masse de 71 Da, x_1^A représente son premier nœud et le dernier est quant à lui noté x_{71}^A . Cet acide aminé est représenté dans le modèle « explosé » par le graphe de la figure 5.3 où les transitions entre les états intermédiaires d'un acide aminé vaut nécessairement 1. L'idée étant que dès que le processus est sur le premier nœud d'un acide aminé, il le parcourt complètement.

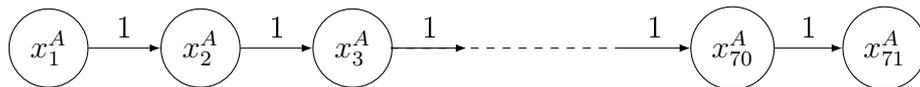


FIGURE 5.3 – Représentation de l'alanine dans le modèle « explosé ».

Dans le modèle dit « explosé », il n'y a plus 20 états mais 2375 états, puisque la valeur 2375 correspond à la somme des masses des 20 acides aminés. Les probabilités de transition doivent donc être définies sur ce nouvel espace d'états. Une probabilité de transition calculée dans le modèle « non-explosé » correspond dans le modèle « explosé » à la transition entre un dernier nœud d'un acide aminé et un premier nœud d'un autre acide aminé. Donc si nous désignons \mathcal{M} l'ensemble des acides aminés alors les probabilités de transitions sont définies comme :

$$a_{s|t} = \mathbb{P}(X_{n+1} = t \mid X_n = s) = \begin{cases} 1 & \text{si } \forall \alpha \in \mathcal{M}, 1 \leq n < n_\alpha : s = x_n^\alpha \text{ et } t = x_{n+1}^\alpha \\ \hat{p}_{s|t} & \text{si } \forall \alpha, \beta \in \mathcal{M} : s = x_{n_\beta}^\beta \text{ et } t = x_1^\alpha \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

pour tous les états s, t de la chaîne de Markov.

Le graphe associé à la matrice de transition du modèle explosé est représenté dans la figure 5.4 pour les cinq mêmes acides aminés que ceux de la figure 5.2. Les flèches

« noires » sont identiques aux transitions représentées dans la figure 5.2 et les bleu vert représentent les transitions entre deux états intermédiaires d'un acide aminé. L'état x_0 symbolise l'état initial. Pour éviter de surcharger le graphe, nous ne représentons pas directement les flèches correspondantes aux probabilités de transition entre le dernier nœud d'un acide aminé et le premier d'un autre, nous utilisons plutôt un point stratégique qui répartit les probabilités vers le premier nœud des acides aminés.

Le modèle « explosé » permet facilement de décider si la condition sur la masse totale M est atteinte. En effet, si après M étapes, la chaîne de Markov est sur un état final d'un acide aminé alors la masse M est atteinte. Dans le cas contraire, la condition de masse n'est pas satisfaite. Pour vérifier cette condition, nous ajoutons deux nouveaux états ; l'état x^+ et l'état x^- . Et si la contrainte de la masse du peptide n'est pas satisfaite après M étapes alors l'unique transition possible est celle vers l'état x^- . Dans le cas contraire, l'unique transition possible est celle vers l'état x^+ . La probabilité de transition après M étapes ne doit pas être estimée. Cette dernière est notée $a'_{s|t}$ où s, t sont deux états et est définie comme :

$$a'_{s|t} = \mathbb{P}(X_{M+1} = t \mid X_M = s) = \begin{cases} 1 & \text{si } \forall \alpha \in \mathcal{M}, 1 \leq n < n_\alpha : s = x_n^\alpha \text{ et } t = x^- \\ 1 & \text{si } \forall \alpha \in \mathcal{M} : s = x_{n_\alpha}^\alpha \text{ et } t = x^+ \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

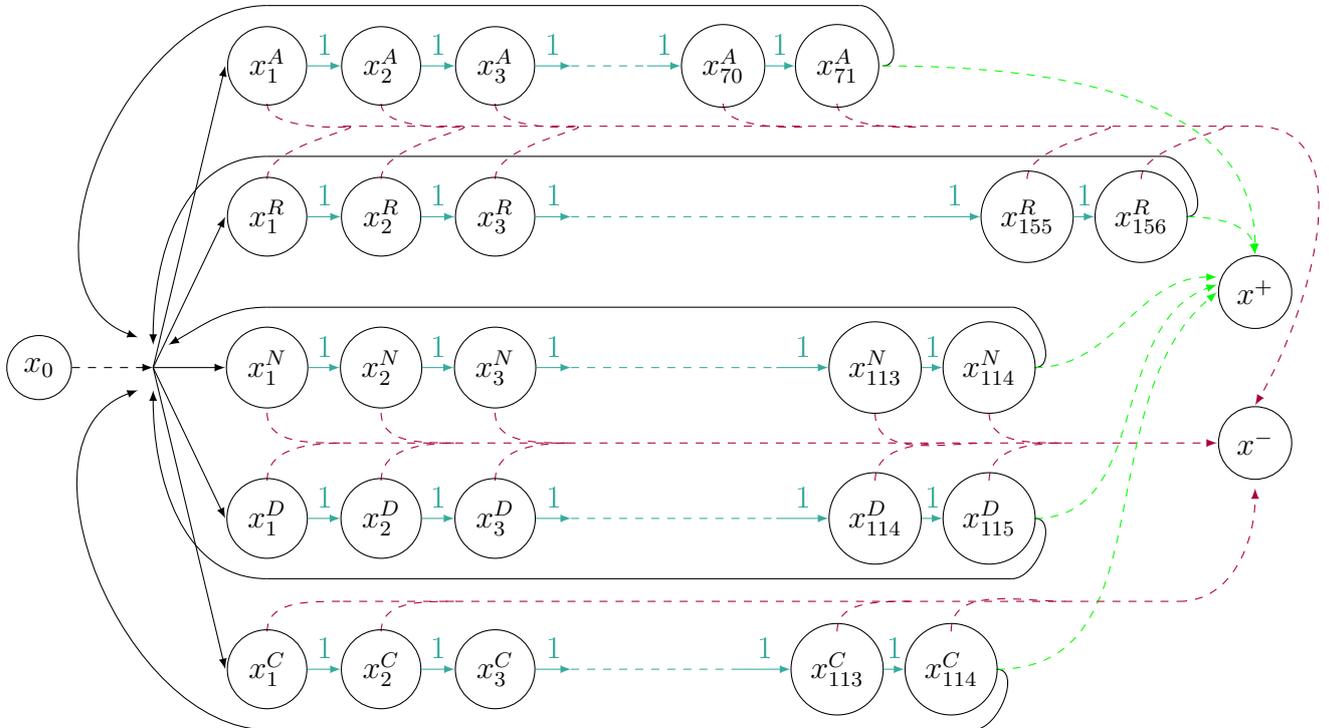


FIGURE 5.4 – Les transitions pour cinq acides aminés dans le modèle « explosé ».

Les flèches en pointillés rouges de la figure 5.4 représentent les transitions après M étapes vers l'état x^+ et celles en pointillés verts correspondent aux transitions vers

l'état x^- .

Les états x^+ et x^- ne sont pas des états en tant que tels du modèle dans le sens où la transition après M étapes vers ces états ne fait pas partie de la matrice de transition. D'ailleurs, si cela était le cas nous n'aurions pas une matrice stochastique. L'introduction de ces deux états a pour objectif de représenter la condition d'atteinte à la masse totale M et par conséquent réduire à 0 la probabilité des chemins ne se terminant pas à la fin d'un acide aminé.

Nous avons considéré la fréquence de chaque acide aminé pour la **loi initiale**. Cette loi représente la probabilité de chaque acide aminé d'être l'état x_0 . Le calcul de ces fréquences est basé sur le même fichier que celui utilisé pour le calcul des probabilités de transitions.

Après avoir spécifié les probabilités de transition et la loi initiale, le **processus d'émission** qui génère finalement les pics du spectre observable doit être modélisé. Pour cela, nous avons, dans un premier temps, discrétisé la hauteur des pics de manière à obtenir des boîtes « équi-peuplées ». Dans l'article [?], le nombre de boîtes sélectionnées est de 5, ce qui signifie que l'ensemble des observations \mathcal{O} est $\{1, 2, 3, 4, 5\}$. Les éléments de la matrice d'émission sont définis pour tout état s de E et pour toute observation o dans \mathcal{O} comme

$$b_s(o) = \mathbb{P}(Y_{n+1} = o \mid X_{n+1} = s) = \begin{cases} 0,6 & \text{si } \forall \alpha \in \mathcal{M} : o = 5 \text{ et } s = x_{n_\alpha}^\alpha \text{ ou si} \\ & \forall \alpha \in \mathcal{M} \ 1 \leq n+1 < n_\alpha : o = 1 \\ & \text{et } s = x_{n+1}^\alpha \\ 0,1 & \text{sinon} \end{cases}$$

Ces probabilités d'émissions n'étaient pas non plus définies dans l'article de référence. Notre idée a été de définir pour les états intermédiaires la probabilité 0,6 d'émettre un pic qui se trouve dans la boîte 1, c'est-à-dire la boîte correspondant aux bruits de fond et de 0,1 pour les autres boîtes. Inversement, comme les pics de plus grandes intensités sont émis normalement par les états terminaux d'un acide aminé, la probabilité de 0,6 a été définie pour l'émission de la boîte 5 à partir des états terminaux et 0,1 pour les autres boîtes.

L'ensemble de ces probabilités permet entre autre de calculer la probabilité d'obtenir une certaine séquence d'acides aminés (un certain peptide) mais aussi la probabilité d'avoir conjointement un peptide et un spectre de masse. Dans le modèle « explosé », un spectre de masse est représenté par une séquence $o = o_1, \dots, o_N$ où o_k représente la boîte dans lequel le pic de masse k se trouve.

Un peptide de masse M est une séquence d'acides aminés, il est donc représenté en terme de séquence d'états par : s_1, \dots, s_M et a une probabilité de :

$$\mathbb{P}(X_1 = s_1, \dots, X_M = s_M \mid X_{M+1} = x^+) \propto \prod_{m=1}^M a_{s_{m-1}|s_m} \cdot a'_{s_M|x^+}$$

où $a_{s_{m-1}|s_m}$ et $a'_{s_M|x^+}$ sont les probabilités définies plus haut.

D'un autre côté, pour un spectre de masse donné et un peptide donné, la probabilité d'avoir les deux conjointement se calcule comme suit

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_1 = s_1, \dots, X_M = s_M, Y_1 = o_1, \dots, Y_M = o_M \mid X_{M+1} = x^+) \\ \propto \prod_{m=1}^M a_{s_{m-1}|s_m} \cdot b_{x_m}(o_m) \cdot a'_{s_M|x^+}. \end{aligned}$$

Mais rappelons-le, l'objectif est d'identifier un peptide sur base d'un spectre de masse. Cette situation correspond aux problèmes du décodage décrit dans le chapitre 4 où la séquence d'observations est ici la séquence des intensités des pics du spectre de masse et la séquence d'états recherchée est la séquence d'acides aminés (le peptide). Les spectres considérés sont les spectres MS/MS, c'est-à-dire que ce sont les spectres obtenus après filtration et passage par la chambre de collision. Par conséquent, la masse M correspond à la masse de l'ion parent. La séquence d'acides aminés s_1, \dots, s_M recherchée est donc celle qui maximise :

$$\mathbb{P}(X_1 = s_1, \dots, X_M = s_M \mid X_{M+1} = x^+, Y_1 = o_1, \dots, Y_M = o_M)$$

ou encore,

$$\mathbb{P}(X_1 = s_1, \dots, X_M = s_M, X_{M+1} = x^+, Y_1 = o_1, \dots, Y_M = o_M), \quad (5.1)$$

et qui est également équivalente à

$$\mathbb{P}(X_1 = s_1, \dots, X_M = s_M, Y_1 = o_1, \dots, Y_M = o_M) \cdot a'_{x_M|x^+}.$$

Du point de vue de la programmation, nous n'avons pas « ajouté » les états x^+ et x^- dans le modèle. Nous voulions dans un premier temps tester le modèle de base. Nous n'avons donc pas tenu compte de la quantité $a'_{s_M|x^+}$ lors de la recherche de la séquence d'acide aminé. En résumé, nous nous sommes occupé de déterminer la séquence s_1, \dots, s_M qui maximisait $\mathbb{P}(X_1 = s_1, \dots, X_M = s_M, Y_1 = o_1, \dots, Y_M = o_M)$ au moyen de l'algorithme de Viterbi commenté au chapitre 4. Une des pistes à poursuivre est donc d'ajouter ces états dans le modèle. Ceci permettra de ne retourner que des séquences d'acides aminés où le dernier est « complètement » identifié.

Des données relatives aux spectres expérimentaux et aux peptides préalablement identifiés nous ont été fournies par le laboratoire de biologie. Les données correspondant à ces spectres forment notre ensemble de spectres dit *d'apprentissage*. Nous avons

également reçu d'autres fichiers contenant des spectres et ceux-là forment l'ensemble *test* de spectres pour lesquels nous voudrions déduire la séquence d'acides aminés représentée.

La première phase du travail correspond à la phase d'apprentissage où nous ré-estimons les paramètres $\pi(0)$, A et B par le biais de l'algorithme de Baum-Welch implémenté et appliqué à l'ensemble *d'apprentissage*. Cet algorithme recalcule toutes les probabilités de telle manière à ce que la séquence d'observation soit la plus probable. Les paramètres obtenus sont ceux utilisés ensuite dans l'algorithme de Viterbi implémenté afin d'identifier les séquences de peptides.

Nous devons reconnaître que les premiers résultats préliminaires n'ont pas été à la hauteur de notre attente. Contrairement aux résultats promis dans notre article de référence [?], les probabilités fournies par le programme sont faibles. Seuls certains acides aminés sont identifiés et pas toujours correctement alors que l'article de référence stipulait entre autre que l'identification des séquences de peptides par les modèles de Markov cachés est la méthode qui, à ce jour, donne les meilleurs résultats. En outre, les auteurs de cet article annonçaient que 76,9% des acides aminés identifiés sont correctement identifiés et parmi les acides aminés de l'ensemble *test*, 61,5% d'entre-eux sont correctement identifiés. Nous sommes persuadés que nous pourrions améliorer significativement nos résultats obtenus. Nous aurions besoin pour cela davantage de temps car nous en avons consacré beaucoup non seulement pour détailler les preuves mais également pour comprendre le modèle et le cheminement qui mène à l'identification des peptides.

Nous pensons que nous pouvons incriminer les problèmes rencontrés à la phase d'apprentissage. En effet, ce n'est pas la « recherche » des maxima locaux obtenus par l'algorithme de Baum-Welch qui posent problème, mais plutôt le fait de savoir si les valeurs du maximum trouvées, qui dépendent de l'estimation initiale des paramètres et des observations, sont vraiment appropriées pour l'identification des peptides.