

PHÉNOMÈNE DE CUTOFF POUR LES CHAÎNES DE MARKOV  
À COURBURE POSITIVE  
[d'après J. Salez]

par Anna Ben-Hamou

## Introduction

Soient  $\mathcal{X}$  un ensemble fini et  $P$  un noyau de transition sur  $\mathcal{X}$ . On supposera toujours que  $P$  est irréductible, c'est-à-dire que pour tous  $x, y \in \mathcal{X}$ , il existe  $k \in \mathbb{N}$  tel que  $P^k(x, y) > 0$ . La chaîne de Markov en temps continu  $(X_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$  de noyau  $P$  est obtenue en effectuant des transitions selon  $P$  à des temps espacés par des variables indépendantes de loi exponentielle de paramètre 1. En notant, pour  $t \in \mathbb{R}_+$  et pour  $x, y \in \mathcal{X}$ ,  $\mathcal{P}_t(x, y) = \mathbf{P}_x(X_t = y)$ , et en remarquant que le nombre de sauts entre 0 et  $t$  est de loi de Poisson de paramètre  $t$ , on a donc

$$\mathcal{P}_t(x, y) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{e^{-t} t^k}{k!} P^k(x, y) = e^{-t(I-P)}(x, y).$$

On dit que  $(\mathcal{P}_t)_{t \geq 0}$  est le semigroupe associé à  $P$ . Considérer la chaîne en temps continu plutôt que discret permet en particulier de parer à tout éventuel problème de périodicité et garantit la convergence de la chaîne vers son unique probabilité stationnaire  $\pi = \pi P$ , au sens où, pour tous  $x, y \in \mathcal{X}$ , on a

$$\mathcal{P}_t(x, y) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \pi(y).$$

Une question cruciale est celle de savoir à quelle vitesse a lieu cette convergence. Pour pouvoir quantifier l'écart entre la loi  $\mathcal{P}_t(x, \cdot)$  et la loi  $\pi$ , il faut déjà se donner une distance sur l'ensemble des mesures de probabilité sur  $\mathcal{X}$ . Il existe de nombreux choix possibles mais le plus naturel pour le probabiliste est celui de la distance en variation totale

$$\|\mu - \pi\|_{\text{TV}} = \max_{A \subset \mathcal{X}} \{\mu(A) - \pi(A)\} = \frac{1}{2} \sum_{x \in \mathcal{X}} |\mu(x) - \pi(x)|.$$

Pour obtenir un contrôle uniforme sur le point de départ, on s'intéresse à la fonction  $\mathcal{D} : \mathbb{R}_+ \rightarrow [0, 1]$  définie par

$$\forall t \geq 0, \mathcal{D}(t) = \max_{x \in \mathcal{X}} \|\mathcal{P}_t(x, \cdot) - \pi\|_{\text{TV}}$$

La fonction  $\mathcal{D}$  est à valeurs dans  $[0, 1]$  et décroît vers 0 quand  $t \rightarrow +\infty$ . On peut précisément caractériser le taux asymptotique de cette décroissance exponentielle :

$$\mathcal{D}(t)^{1/t} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} e^{-\tau}, \quad (1)$$

où  $\tau$  correspond à la plus petite partie réelle des valeurs propres non nulles de  $I - P$ . Ainsi, le spectre de la matrice de transition gouverne en grande partie le profil asymptotique de la fonction  $\mathcal{D}$ . L'étude de la convergence des chaînes de Markov finies a longtemps consisté à déterminer les valeurs propres de  $P$ , la principale quantité d'intérêt étant le trou spectral, dont l'inverse est appelé temps de relaxation. Cependant, l'approximation  $\mathcal{D}(t) \approx e^{-\tau t}$  n'est valable que pour un espace d'états fixé et pour de très grandes valeurs de  $t$ , donc lorsque la loi de la chaîne est déjà arbitrairement proche de la loi stationnaire. Ce que l'on aimerait plutôt comprendre, c'est le temps qu'il faut à la chaîne pour que la distance devienne plus petite qu'un certain  $\varepsilon \in ]0, 1[$  fixé, et comment ce temps dépend de la taille de l'espace d'états, que l'on aimerait pouvoir faire tendre elle aussi vers l'infini. En général en effet, on considère en réalité une suite de noyaux irréductibles  $(P_n)_{n \geq 1}$ , et donc une suite  $(\mathcal{D}_n)_{n \geq 1}$  de fonctions de distance, indexées par un entier  $n \geq 1$  qui correspond typiquement à une mesure de la taille de l'espace d'états. Au lieu de s'intéresser au comportement d'une chaîne fixée lorsque  $t \rightarrow \infty$  comme dans (1), on va maintenant se donner une cible  $\varepsilon \in ]0, 1[$  pour la distance et s'intéresser au comportement asymptotique quand  $n \rightarrow +\infty$  de la quantité

$$t_{\text{mix}}^{(n)}(\varepsilon) = \inf\{t \geq 0, \mathcal{D}_n(t) \leq \varepsilon\},$$

appelée  $\varepsilon$ -temps de mélange.

Ce changement de paradigme, initié notamment par les travaux de Persi Diaconis et David Aldous au début des années 1980, a donné lieu à un vif regain d'intérêt pour les chaînes de Markov finies, et a permis de voir que la question des temps de mélange était en fait loin de se réduire à celle du spectre. Cela a aussi permis de découvrir un phénomène fascinant, le phénomène de cutoff, qui correspond à des situations où le premier ordre de  $t_{\text{mix}}^{(n)}(\varepsilon)$  ne dépend pas de  $\varepsilon$  :

$$\forall \varepsilon \in ]0, 1[, \frac{t_{\text{mix}}^{(n)}(\varepsilon)}{t_{\text{mix}}^{(n)}(1 - \varepsilon)} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 1.$$

Cela signifie que la distance à l'équilibre reste proche de 1 pendant un temps de l'ordre du temps de mélange, puis chute abruptement vers 0 en un temps bien

plus court. Ce phénomène a été observé pour la première fois par DIACONIS et SHAHSHAHANI (1981) pour le mélange de cartes par transpositions aléatoires. ALDOUS (1983) observe ce même phénomène pour la marche aléatoire sur l'hypercube  $\{0, 1\}^n$ .

Depuis ces exemples pionniers, le cutoff a été identifié dans des contextes très variés. Établir le cutoff de façon rigoureuse requiert une analyse très détaillée de la chaîne considérée et constitue bien souvent une tâche difficile, même dans des situations présentant beaucoup de symétrie. On sait désormais que ce phénomène est largement répandu, et l'on conjecture qu'il est vérifié pour plusieurs grandes familles de chaînes de Markov. Cependant, il existe très peu de résultats généraux concernant le cutoff.

Identifier des conditions générales sous lesquelles le cutoff a lieu, sans forcément chercher à déterminer le temps de mélange, est très vite apparu comme une question essentielle et reste probablement l'un des problèmes les plus fondamentaux dans le domaine des temps de mélange. À cet égard, l'article *Cutoff for non-negatively curved Markov chains* (SALEZ, 2023a) de Justin Salez constitue une considérable avancée.

La première contribution de cet article est l'énoncé d'une borne supérieure très générale sur la fenêtre du mélange  $t_{\text{mix}}^{(n)}(\varepsilon) - t_{\text{mix}}^{(n)}(1 - \varepsilon)$ , en fonction d'une quantité appelée *varentropie*. De cette borne découle un critère général pour le cutoff : le critère varentropique. Si ce critère offre une compréhension nouvelle du cutoff comme résultant d'un phénomène de concentration entropique, son utilisation pratique suppose d'estimer la varentropie, qui est une quantité complexe et encore peu étudiée. La deuxième contribution de l'article est de montrer que la varentropie peut être relativement facilement estimée pour une grande famille de chaînes de Markov : les chaînes à *courbure* positive ou nulle (notion définie plus bas). Cela conduit au théorème suivant :

**Théorème 0.1.** *Soit  $(P_n)_{n \geq 1}$  une suite de noyaux irréductibles à courbure positive ou nulle tels que*

$$\forall x, y \in \mathcal{X}_n, P_n(x, y) > 0 \Leftrightarrow P_n(y, x) > 0.$$

*Soit  $t_{\text{rel}}^{(n)}$  le temps de relaxation de  $P_n$  et soit  $\delta^{(n)}$  la plus petite entrée non nulle de  $P_n$ . Si pour tout  $\varepsilon \in ]0, 1[$ , on a*

$$t_{\text{mix}}^{(n)}(\varepsilon) \gg \left( \log \left( \frac{1}{\delta^{(n)}} \right) t_{\text{rel}}^{(n)} \right)^2,$$

*alors la suite  $(P_n)_{n \geq 1}$  présente un cutoff.*

Le but de ce texte est de faire comprendre à des personnes qui ne sont pas expertes en temps de mélange en quoi ce résultat constitue une avancée majeure. On commence par rappeler les liens entre temps de relaxation et temps de mélange en Section 1. La Section 2 est ensuite consacrée au phénomène de cutoff et à la question de l'identification des mécanismes sous-jacents. En Section 3, on présente le critère varentropique de SALEZ (2023a). Finalement, en Section 4, on présente les implications de ce critère pour les chaînes à courbure positive.

## 1. Temps de relaxation et temps de mélange

Revenons temporairement au cas d'un seul noyau irréductible  $P$  et notons  $\mathcal{D}$  la fonction distance associée. Par la propriété de sous-multiplicativité  $\mathcal{D}(t+s) \leq 2\mathcal{D}(t)\mathcal{D}(s)$  et le lemme de Fekete, le terme de droite dans (1) correspond en fait à l'infimum de l'ensemble  $\{(2\mathcal{D}(t))^{1/t}, t > 0\}$ . Ainsi, pour tout  $t > 0$ , on a

$$\mathcal{D}(t) \geq \frac{1}{2}e^{-\tau t},$$

et pour tout  $\varepsilon \in ]0, 1[$ ,

$$t_{\text{mix}}(\varepsilon) \geq \frac{1}{\tau} \log \left( \frac{1}{2\varepsilon} \right), \quad (2)$$

où  $t_{\text{mix}}(\varepsilon) = \inf\{t \geq 0, \mathcal{D}(t) \leq \varepsilon\}$ . Dans l'autre direction, on aimerait pouvoir dire qu'en prenant  $t$  de l'ordre de  $1/\tau$ , on rend la distance  $\mathcal{D}(t)$  petite. Comme nous le verrons, cela est très souvent faux. On peut néanmoins obtenir une borne supérieure spectrale sur  $t_{\text{mix}}(\varepsilon)$  de la façon suivante. Soit  $\gamma$  la constante de Poincaré de  $P$ , i.e. la plus grande constante telle que pour toute fonction  $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ , on a

$$\gamma \text{Var}(f) \leq \mathcal{E}(f, f),$$

où  $\text{Var}(f)$  correspond à la variance de  $f$  sous la loi  $\pi$  :

$$\text{Var}(f) = \frac{1}{2} \sum_{x, y \in \mathcal{X}} \pi(x)\pi(y) (f(y) - f(x))^2,$$

et où  $\mathcal{E}(f, g)$  correspond à la forme de Dirichlet de  $P$  :

$$\mathcal{E}(f, g) = \langle (I - P)f, g \rangle_{\pi},$$

avec  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\pi}$  le produit scalaire dans  $\ell^2(\pi)$ . En particulier, on a

$$\mathcal{E}(f, f) = \frac{1}{2} \sum_{x, y \in \mathcal{X}} \pi(x)P(x, y) (f(y) - f(x))^2,$$

ce qui peut être interprété comme une variance locale de  $f$  sous l'action de  $P$ . Notons que dans le cas réversible où  $P$  est égal à son adjoint  $P^*$  dans  $\ell^2(\pi)$ , on a

$$\gamma = \tau.$$

Dans le cas général, la quantité  $1 - \gamma$  peut être définie, de façon équivalente, comme la deuxième plus grande valeur propre du noyau réversible  $\frac{P+P^*}{2}$ . C'est pourquoi  $\gamma$  est souvent appelé le *trou spectral* : c'est l'écart entre les deux plus grandes valeurs

propres de  $\frac{P+P^*}{2}$ . Le temps de relaxation est alors défini comme l'inverse du trou spectral :

$$t_{\text{rel}} = \frac{1}{\gamma}.$$

Soit maintenant  $\mu_0$  une distribution initiale sur  $\mathcal{X}$  et notons  $\mu_t = \mu_0 \mathcal{P}_t$  la distribution au temps  $t \geq 0$ , et  $f_t = \frac{\mu_t}{\pi}$  la densité de  $\mu_t$  par rapport à la distribution stationnaire  $\pi$ . Par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a

$$4\|\mu_t - \pi\|_{\text{TV}}^2 \leq \sum_{x \in \mathcal{X}} \pi(x) \left( \frac{\mu_t(x)}{\pi(x)} - 1 \right)^2 = \mathbf{Var}(f_t). \quad (3)$$

Or un simple calcul montre que

$$\partial_t \mathbf{Var}(f_t) = -2\mathcal{E}(f_t, f_t).$$

Par définition du trou spectral, on a alors  $\partial_t \mathbf{Var}(f_t) \leq -2\gamma \mathbf{Var}(f_t)$ , ce qui donne

$$\mathbf{Var}(f_t) \leq \mathbf{Var}(f_0) e^{-2\gamma t}.$$

En revenant à (3) et en utilisant le fait que

$$\mathbf{Var}(f_0) \leq \sum_{x \in \mathcal{X}} \pi(x) f_0(x)^2 = \sum_{x \in \mathcal{X}} \mu_0(x) \frac{\mu_0(x)}{\pi(x)} \leq \left\| \frac{\mu_0}{\pi} \right\|_{\infty},$$

avec  $\left\| \frac{\mu_0}{\pi} \right\|_{\infty} = \max_{x \in \mathcal{X}} \frac{\mu_0(x)}{\pi(x)}$ , on obtient

$$\|\mu_t - \pi\|_{\text{TV}} \leq \frac{1}{2} e^{-\gamma t} \sqrt{\left\| \frac{\mu_0}{\pi} \right\|_{\infty}}. \quad (4)$$

En prenant le maximum sur  $\mu_0$  (obtenu pour  $\mu_0$  concentrée sur un point de masse stationnaire minimale), on a

$$\mathcal{D}(t) \leq \frac{1}{2\sqrt{\pi_{\star}}} e^{-\gamma t}, \quad (5)$$

avec  $\pi_{\star} = \min_{x \in \mathcal{X}} \pi(x)$ , soit encore

$$t_{\text{mix}}(\varepsilon) \leq t_{\text{rel}} \log \left( \frac{1}{2\varepsilon\sqrt{\pi_{\star}}} \right). \quad (6)$$

Comme  $\pi_{\star} \leq \frac{1}{|\mathcal{X}|}$ , le terme de droite dans cette inégalité est d'ordre plus grand que  $t_{\text{rel}}$ . Cela dit, savoir estimer le temps de mélange à un facteur logarithmique près en utilisant seulement le trou spectral n'en est pas moins impressionnant, et il existe de nombreuses situations pour lesquelles ce facteur est nécessaire.

Ci-dessous, on détaille deux exemples, illustrant des comportements de mélange très différents : la marche aléatoire sur le cercle et la marche aléatoire sur l'hypercube.