

INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE
EN INFORMATIQUE
ET EN AUTOMATIQUE



INRIA

centre de recherche **BORDEAUX - SUD-OUEST**

INGÉNIERIE STOCHASTIQUE

Une Introduction avec Applications

P. Del Moral

Centre INRIA Bordeaux Sud-Ouest

É Institut de Mathématiques de Bordeaux

Université Bordeaux I, 351, cours de la Libération

33405 Talence, France

Avant propos

Le but de ce cours est de parcourir les principaux éléments de la modélisation stochastique, et de la simulation numérique. Ce voyage ne nécessite aucun bagage spécifique sur la théorie des processus stochastiques, sinon les quelques outils de modélisation sur les chaînes de Markov, et les techniques de simulation présentées dans des cours élémentaires sur les méthodes de Monte-Carlo. L'ouvrage [1] peut servir de référence sur ces notions. Quelques éléments sur la théorie de systèmes dynamiques déterministes permettront d'apprécier la beauté de certains paysages. En effet, d'un point de vue purement mathématique, la théorie des processus stochastiques est une extension naturelle de la théorie de systèmes dynamiques à des phénomènes aléatoires se déroulant dans le temps. Néanmoins, comme le souligne Ian Stewart dans son ouvrage [6], le mot grec *stochastikos* signifie "habile à viser", et "transmet ainsi l'idée de l'utilisation contemporaine des lois du hasard en vue d'avantages personnels". L'un des objectifs de ce cours est de préciser ces idées sous des angles de vues mathématiques et pratiques.

Il est important de noter que la nature aléatoire ajoutée de ces systèmes dynamiques stochastiques provient de trois sources naturelles et distinctes :

Tout d'abord, les fluctuations aléatoires de certaines grandeurs physiques, biologiques, ou économiques telles la répartition de la chaleur, l'évolution de populations génétiques, l'évolution des prix des actions financières sont souvent le reflet d'un processus chaotique.

D'autre part, la plupart des processus aléatoires formalisés sont des modèles simplifiés ne rendant compte que d'une partie du phénomène étudié. Dans ce contexte, les erreurs de modèles, ou tout autre quantité influant sur son évolution (paramètres de contrôles, perturbations de mesures) peuvent être représentées par des variables aléatoires. Leur nature probabiliste est souvent dictée par une connaissance a priori du système.

Enfin, dans le cadre des algorithmes stochastiques, les composantes aléatoires du

système permettent d'augmenter les capacités d'exploration et d'adaptation du modèle.

Ces trois aspects sont développés dans ce cours sous des angles théoriques et pratiques, en insistant sur les fondations mathématiques, tout en illustrant chaque modèle par une variété d'applications issues de domaines scientifiques connexes. Nous soulignerons dès que possible les différentes expressions de ces modèles en physique, en biologie, ainsi que dans les sciences sociales, en mathématiques financières, et dans les sciences de l'ingénieur.

L'ingénierie stochastique est essentiellement consacrée à l'analyse de deux classes de modèles probabilistes :

- Les processus stochastiques représentant des évolutions dynamiques et aléatoires de systèmes techniques, physiques, biologiques, ou économiques.
- Les algorithmes stochastiques d'exploration, d'estimation, d'apprentissage, et d'adaptation.

Ces deux notions sont loin d'être sans rapport. En effet, la plupart des algorithmes stochastiques modernes sont fondés sur des mécanismes de recherche mimant des processus d'exploration et d'adaptation biologiques ou physiques :

Les fonctions itérées aléatoires simulent l'élaboration naturelle et chaotique de formes symétriques complexes, telles les flocons de neige ou d'autres paysages fractals.

L'algorithme de Robbins-Monro simule un processus d'apprentissage humain de recherche d'un dosage optimal, en observant les différents effets et réactions au produit.

Le recuit simulé mime le refroidissement d'un métal vers un état solide stable et optimal.

Les algorithmes génétiques, et les arbres généalogiques correspondants, font actuellement partie des techniques de résolution les plus avancées en statistique bayésienne, en traitement du signal, en analyse d'évènements rares, en mathématiques financières, ainsi qu'en physique et chimie quantique.

Nous avons choisi d'articuler ce cours autour de deux axes :

La première partie du cours synthétise les principales notions de modélisation markovienne. Nous examinons l'expression de ces modèles mathématiques formalisés dans une variété d'applications : description de capteurs en traitement du signal, modèles d'évolution de prix d'actifs financiers, filtrage de volatilité des marchés, processus de branchements, évolution génétiques, dynamiques d'exploration par renforcement, représentation microscopiques d'évolution de quantités physiques. La seconde partie du cours concerne les algorithmes d'exploration et d'adaptation stochastiques. Nous soulignons la performance de ces modèles probabilistes dans

la résolution de problèmes classiques de l'ingénierie mathématique : description et analyse d'image, recherche de dosages, optimisation globale, filtrage de signaux linéaires-gaussiens, et traitement de signaux non linéaires.

Afin d'admirer cette scène interdisciplinaire, et coller au mieux à la réalité scientifique, nous avons choisi d'insister sur la modélisation stochastique, en évitant de présenter les démonstrations mathématiques complètes des convergences de la plupart des algorithmes stochastiques traités dans ce cours. Nous avons insisté sur les fondements physiques ou biologiques des algorithmes stochastiques, en soulignant intuitivement leurs fondations mathématiques. Le lecteur désireux d'approfondir ces aspects théoriques peut consulter les deux ouvrages complémentaires consacrés à ces questions [1, 2], ainsi que les articles référencés.

Comme nous l'avons dit plus haut, les modèles stochastiques décrits dans ce cours admettent des interprétations distinctes et variées, selon le domaine d'application considéré. Nous avons ici choisi de souligner leurs expressions biologiques ou physiques originelles, tout en illustrant leurs applications dans la résolution de problèmes d'estimation classiques des sciences de l'ingénieur. Ce catalogue d'application est loin d'être exhaustif, il reflète simplement certaines expressions classiques de ces modèles, ou certain goûts des auteurs.

Bordeaux, le 7 Janvier 2009.

Table des matières

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Modélisation markovienne. | 7 |
| 1.1 | Introduction | 7 |
| 1.2 | Chaînes de Markov discrètes | 8 |
| 1.2.1 | Semigroupes de transitions | 10 |
| 1.2.2 | Processus historique | 12 |
| 1.2.3 | Interprétation matricielle | 13 |
| 1.3 | Exemples | 17 |
| 1.3.1 | Files d'attentes | 17 |
| 1.3.2 | Modèle d'urne | 18 |
| 1.3.3 | Marche aléatoire sur \mathbb{Z} | 18 |
| 1.3.4 | Marche aléatoire sur \mathbb{Z}^d | 20 |
| 1.3.5 | Marche aléatoire arrêtée | 20 |
| 1.3.6 | Processus de branchements | 21 |
| 1.4 | Chaînes de Markov abstraites | 23 |
| 1.4.1 | Semigroupe des transitions | 24 |
| 1.4.2 | Équations de Chapman-Kolmogorov | 26 |
| 1.4.3 | Processus historique | 27 |
| 2 | Quelques domaines d'application | 29 |
| 2.1 | Chaînes linéaires et gaussiennes | 29 |
| 2.1.1 | Introduction | 29 |
| 2.1.2 | Formulation canonique | 29 |
| 2.1.3 | Formulation dynamique | 30 |
| 2.2 | Processus de Poisson | 31 |
| 2.3 | Modèles stochastiques en traitement du signal | 32 |
| 2.4 | Modèles stochastiques en finance | 34 |
| 2.4.1 | Évolution de prix d'actions | 34 |
| 2.4.2 | Estimation des volatilités du marché | 35 |
| 2.5 | Milieux absorbants | 36 |
| 2.5.1 | Introduction | 36 |
| 2.5.2 | Description des modèles | 37 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 2.6 | Dynamiques de population avec branchements | 39 |
| 2.7 | Algorithme génétique | 41 |
| 2.7.1 | Sélection/Adaptation | 43 |
| 2.7.2 | Mutation/Exploration | 43 |
| 2.8 | Modèles d'arbres généalogiques | 45 |
| 2.8.1 | Modèles non homogènes | 45 |
| 2.8.2 | Modèles trajectoriels | 46 |
| 2.9 | Chaînes renforcées | 49 |
| 2.10 | Algorithme de Robbins-Monro | 50 |
| 2.10.1 | Introduction | 50 |
| 2.10.2 | Description du modèle | 51 |
| 2.10.3 | Applications | 52 |
| 2.11 | Filtre de Kalman-Bucy | 53 |
| 2.11.1 | Introduction | 53 |
| 2.11.2 | Description du modèle | 53 |
| 2.11.3 | Les équations du filtrage | 55 |
| 3 | Algorithmes stochastiques | 59 |
| 3.1 | Introduction | 59 |
| 3.2 | Éléments d'analyse asymptotique | 61 |
| 3.2.1 | Loi des grands nombres | 61 |
| 3.2.2 | Théorème ergodique | 64 |
| 3.2.3 | Exemple, les fonctions itérées stochastiques | 66 |
| 3.3 | Exercices | 67 |
| 3.4 | Mesures invariantes et algorithmes de simulation | 72 |
| 3.4.1 | Plus court chemin | 74 |
| 3.4.2 | Modèle d'Ising | 75 |
| 3.4.3 | Transition de Métropolis-Hastings | 76 |
| 3.4.4 | Recuit simulé | 80 |
| 3.4.5 | Echantillonneur de Gibbs | 81 |
| 3.5 | Mesures de Feynman-Kac et algorithmes de simulation | 86 |
| 3.5.1 | Introduction | 86 |
| 3.5.2 | Description des modèles | 89 |
| 3.5.3 | Méthodes particulières | 90 |
| 3.5.4 | Chaîne de Markov restreintes | 94 |
| 3.5.5 | Filtre, et prédicteur optimal | 96 |
| 3.5.6 | Polymères dirigés | 98 |
| 3.5.7 | Chaînes auto-évitantes | 99 |
| 3.5.8 | Mesures de Boltzman-Gibbs | 102 |
| 4 | Corrections | 107 |

Chapitre 1

Modélisation markovienne.

1.1 Introduction

Un processus aléatoire est un phénomène dont une partie de l'évolution temporelle est aléatoire. On rencontre ces processus dans divers domaines de la physique, ou des sciences de l'ingénieur. Par exemple la répartition et l'évolution de la chaleur dans un corps, la turbulence atmosphérique ; c'est aussi le cas des temps d'arrivée d'appels téléphoniques, les erreurs de mesures dues aux perturbations thermiques dans des capteurs électroniques de type radar ou sonar, ou encore l'évolution des cours de marchés boursiers.

La théorie de processus aléatoires est une théorie mathématique très riche, offrant de nombreuses interactions avec diverses branches des mathématiques, telles la théorie des graphes, l'analyse fonctionnelle, la théorie des opérateurs, ainsi que la théorie ergodique des systèmes dynamiques.

Formellement, un processus aléatoire est une succession de variables aléatoires $(X_n)_{n \geq 0}$

$$X_0 \longrightarrow X_1 \longrightarrow \dots \longrightarrow X_n \longrightarrow X_{n+1} \longrightarrow \dots$$

L'indice $n \in \mathbb{N}$ représente la paramètre temporel. Les variables X_n peuvent être à valeurs dans un espace discret E , dans des espaces euclidiens $E = \mathbb{R}^d$, ou dans des espaces plus complexes tels des espaces de chemins ou d'excursions.

Ces modèles trajectoriels sont utiles en biologie dans l'analyse d'évolutions ancestrales de population. On rencontre aussi des processus à valeurs dans des espaces de matrices en physique statistique, ou en analyse d'images. L'étude de tels modèles sort bien entendu du cadre de ce cours.

Les états X_n peuvent évoluer aléatoirement au cours du temps selon des mécanismes plus ou moins complexes. Dans certains cas, les épreuves X_n sont indépendantes ; c'est le cas des séquences de lancers de dés, ou les successions de jets de pièces de monnaies.

Dans d'autres situations, le processus aléatoire est donné par une équation physique récursive de la forme suivante

$$X_n = F_n(X_{n-1}, U_n)$$

La v.a. X_0 désigne la condition initiale du système, F_n des fonctions de dérive déterministes, et enfin U_n des variables aléatoires "indépendantes" des précédents états X_0, \dots, X_{n-1} . De telles séquences sont appelées des *chaînes de Markov*.

En traitement du signal, de tels systèmes peuvent représenter l'évolution temporelle d'un cible dans l'espace. Dans ce contexte, les variables aléatoires U_n ont une double dimension. Elles correspondent à la fois, aux erreurs de modélisation, ainsi qu'aux stratégies inconnues de guidage.

En mathématiques financières, l'évolution des prix d'actifs dans des marchés boursiers sont aussi modélisés par des chaînes de Markov. Dans ce contexte, les variables U_n représentent les fluctuations, et la volatilité stochastique du marché financier.

Nous reviendrons sur des exemples plus précis dans la suite du cours.

1.2 Chaînes de Markov discrètes

Les chaînes de Markov les plus élémentaires sont bien entendu celles dont les états aléatoires ne prennent qu'un nombre fini, ou au plus dénombrable de valeurs. Cette section est consacrée à l'étude de ces chaînes élémentaires. Nous insisterons sur les réalisations "canoniques", et dynamiques, de ces processus aléatoires. La seconde partie de cette section concerne l'étude des semigroupes d'évolution des ces chaînes de Markov.

Afin de satisfaire la curiosité du lecteur, et souligner les points d'interaction avec d'autres domaines scientifiques, nous soulignerons les interactions entre la théorie des chaînes de Markov, l'analyse fonctionnelle, l'algèbre matricielle, et la théorie des graphes. Enfin, nous illustrerons ces nouvelles notions sur une variété d'exemples précis liés à des phénomènes aléatoires issus de la physique, de la biologie, et des sciences de l'ingénieur.

Dans la suite de cette section, X_n désigne une chaîne de Markov discrète à valeurs dans un espace E , au plus dénombrable. Ses transitions de probabilités seront données par une **collection** $(M_n(x, \cdot))_{x \in E}$ de mesures de probabilités sur E .

Autrement dit, les probabilités de passage d'un état $X_{n-1} = x$ à un nouvel état aléatoire X_n sont données par l'application suivante

$$y \in E \mapsto M_n(x, y) = \mathbb{P}(X_n = y \mid X_{n-1} = x) \in [0, 1]$$

On utilise parfois la notation

$$\mathbb{P}^{X_n|X_{n-1}}(y|x) = \mathbb{P}(X_n = y \mid X_{n-1} = x)$$

On désigne par la suite $\eta_n = \mathbb{P}^{X_n}$, la loi de l'état X_n de la chaîne, à chacun des instants $n \in \mathbb{N}$.

On remarquera que la loi de la trajectoire (X_0, \dots, X_n) de l'origine jusqu'à l'instant n est alors décrite par la formule multiplicative

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{(X_0, X_1, \dots, X_n)}(x_0, x_1, \dots, x_n) &= \mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) \\ &= \eta_0(x_0)M_1(x_0, x_1) \dots M_n(x_{n-1}, x_n) \end{aligned}$$

pour toute trajectoire $(x_p)_{0 \leq p \leq n} \in E^{n+1}$.

On peut clairement étendre la notion de chaîne de Markov précédente à des modèles markoviens X_n prenant leurs valeurs dans des espaces E_n **liés au paramètre temporel!** Dans ce contexte, $M_{n+1}(x_n, x_{n+1})$ désigne la probabilité de passer d'un état $x_n \in E_n$ vers un état $x_{n+1} \in E_{n+1}$. Plus formellement, nous avons à nouveau

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

et

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{(X_0, X_1, \dots, X_n)}(x_0, x_1, \dots, x_n) &= \mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) \\ &= \eta_0(x_0)M_1(x_0, x_1) \dots M_n(x_{n-1}, x_n) \end{aligned}$$

Bien que cette extension ne puisse paraître purement formelle, sans d'autres intérêts que mathématiques, cette notion apparaît naturellement dans la représentation de chaînes trajectorielles.

1.2.1 Semigroupes de transitions

Les probabilités de transitions M_n d'une chaîne de Markov sur un espace E sont associées à deux opérateurs naturels :

1. Le premier agit à droite sur les fonctions bornées sur E . A chacune de ces fonctions f , on associe la fonction bornée $M_n[f]$ définie par la formule suivante

$$M_n[f](x) =_{\text{déf.}} \mathbb{E}(f(X_n) | X_{n-1} = x) = \sum_{y \in E} M_n(x, y) f(y)$$

2. Le second agit à gauche sur les mesures de probabilités sur E . A chacune de ces mesures η , on associe la mesure de probabilité (ηM_n) définie par

$$(\eta M_n)(y) = \sum_{x \in E} \eta(x) M_n(x, y) \in [0, 1]$$

Dans ce contexte, il est aussi très utile de voir une mesure de probabilité η comme un opérateur sur l'ensemble des fonctions f bornées sur l'espace des états E

$$\eta[f] = \sum_{x \in E} \eta(x) f(x) \in \mathbb{R}$$

Avec ce système de notations, pour les fonctions indicatrices $f = 1_B$ d'ensembles $B \subset \mathbb{R}$, on retrouve la mesure $\eta(B)$ des ensembles B

$$\eta[1_B] = \sum_{x \in B} \eta(x) = \eta(B)$$

De même, on observe que

$$M_n[1_B](x) = \mathbb{E}(1_B(X_n) | X_{n-1} = x) = M_n(x, B) = \mathbb{P}(X_n \in B | X_{n-1} = x)$$

Lorsqu'il n'y a pas de confusions, il est coutume de noter $\eta(f)$, et $M_n(f)$ plutôt que $\eta[f]$, et $M_n[f]$. Dans ce système de notations, nous avons

$$\mathbb{E}(f(X_n)) = \sum_{x \in E} f(x) \eta_n(x) = \eta_n(f)$$

et

$$\mathbb{E}(f(X_n) | X_{n-1} = x) = \sum_{y \in E} M_n(x, y) f(y) = M_n(f)(x)$$

En utilisant la formule des conditionnements emboîtés on montre que

$$\begin{aligned}\eta_n(f) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(f(X_n)|X_{n-1})) \\ &= \mathbb{E}(M_n(f)(X_{n-1})) \\ &= \sum_{x \in E} \eta_{n-1}(x) M_n(f)(x) = \eta_{n-1}(M_n(f))\end{aligned}$$

Autrement dit, les lois η_n des différents états de la chaîne de Markov X_n peuvent “se calculer” récursivement. Ces dernières sont solution d’un système dynamique discret à valeurs dans l’espace des probabilités :

$$\eta_n = \eta_{n-1}M_n$$

Notre prochain objectif est de décrire plus précisément le semigroupe d’évolution du flot de mesures $(\eta_n)_n$. On introduit pour cela la probabilité conditionnelle de X_n en X_p

$$M_{p,n}(x, y) = \mathbb{P}^{X_n|X_p}(y|x) = \mathbb{P}(X_n = y \mid X_p = x)$$

avec $0 \leq p \leq n$, Comme précédemment, on associe à toute fonction f sur E , la fonction $M_{p,n}(f)$ sur E donnée par

$$M_{p,n}(f)(x) = \mathbb{E}(f(X_n)|X_p = x) = \sum_{y \in E} M_{p,n}(x, y) f(y) \quad (1.1)$$

En particulier pour $p = n$, on a $M_{n,n}(f) = f$; et pour $p = (n - 1)$, nous avons

$$M_{n-1,n}(f)(x) = M_n(f)(x) = \mathbb{E}(f(X_n)|X_{n-1} = x)$$

D’après la formule de conditionnements emboîtés, nous avons la formule de récurrence

$$\begin{aligned}M_{p,n}(f)(x) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(f(X_n)|X_{n-1})|X_p = x) \\ &= \mathbb{E}(M_n(f)(X_{n-1})|X_p = x) = M_{p,n-1}(M_n(f))(x)\end{aligned}$$

Par conséquent, l’opérateur de transition $M_{p,n}$ est donné par la formule (1.1) avec

$$\begin{aligned}M_{p,n}(x, y) \\ = \sum_{x_{p+1} \in E, \dots, x_{n-1} \in E} M_{p+1}(x, x_{p+1})M_{p+1}(x_{p+1}, x_{p+2}) \dots M_n(x_{n-1}, y)\end{aligned}$$

On en déduit une formulation des transitions conditionnelles $X_p \rightsquigarrow X_n$, en terme de compositions d’opérateurs

$$M_{p,n}(f) = M_{p+1}M_{p+2} \dots M_n(f)$$

En utilisant la formule

$$\forall p \leq n \quad \mathbb{E}(f(X_n)) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(f(X_n)|X_p)) = \mathbb{E}(M_{p,n}(f)(X_p))$$

on en conclut que

$$\begin{aligned} \eta_n(f) &= \eta_p(M_{p,n}f) = \sum_{x \in E} \eta_p(x) \left[\sum_{y \in E} M_{p,n}(x,y) f(y) \right] \\ &= (\eta_p M_{p,n})(f) = \sum_{y \in E} \left(\sum_{x \in E} \eta_p(x) M_{p,n}(x,y) \right) f(y) \end{aligned}$$

L'ordre des sommes étant sans importance, on simplifie les notations, et on écrit tout simplement

$$\eta_n = \eta_p M_{p,n} \quad \text{avec} \quad M_{p,n} = M_{p+1} M_{p+2} \dots M_n \quad (1.2)$$

Nous avons donc montré que les opérateurs $M_{p,n}$, $p \leq n$, correspondent au semigroupe d'évolution du flot de mesures $(\eta_n)_{n \geq 0}$.

Lorsque la chaîne est homogène, ces opérateurs correspondent à la composition du même opérateur de transition M . Dans cette situation, on utilise souvent les notations synthétiques suivantes

$$M_{p,p+n} = M^n \quad \text{et} \quad \eta_n = \eta_0 M^n \quad \text{avec} \quad M^n = M^{n-1} M = M M^{n-1}$$

1.2.2 Processus historique

On considère une chaîne de Markov discrète X'_n à valeurs dans un espace au plus dénombrable E' . On note $M'_n(x', y')$, la probabilité de passage de $X_{n-1} = x'$ vers $X_n = y'$. La séquence de trajectoires aléatoires

$$X_n = (X'_0, \dots, X'_n) \in E_n =_{\text{déf.}} (E')^{n+1}$$

forme à nouveau une chaîne de Markov à valeurs dans les espaces trajectoriels E_n . En effet, le passage de X_n à X_{n+1} s'effectue en deux temps. On conserve tout d'abord le segment de trajectoire $X_n = (X'_0, \dots, X'_n)$, puis on lui adjoint une extension élémentaire $X'_{n+1} = x'$ de loi $M'_{n+1}(X'_n, x')$. Autrement dit, nous avons

$$\begin{aligned} X_n = (X'_0, \dots, X'_n) &\rightsquigarrow X_{n+1} = \left(\underbrace{(X'_0, \dots, X'_n)}_{X_n}, X'_{n+1} \right) \\ &= (X_n, X'_{n+1}) \in E_{n+1} = (E_n \times E') \end{aligned}$$

On notera que pour toute fonction f_{n+1} bornée sur E_{n+1} , et pour tout segment de trajectoire $x_n = (x'_0, \dots, x'_n) \in E_n$, nous avons

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(f_{n+1}(X_{n+1}) \mid X_n = x_n) \\ &= \mathbb{E}(f_{n+1}([X'_0, \dots, X_n], X'_{n+1}) \mid (X'_0, \dots, X'_n) = (x'_0, \dots, x'_n)) \\ &= \sum_{x'_{n+1} \in E'} f_{n+1}([x'_0, \dots, x'_n], x'_{n+1}) M'_{n+1}(x'_n, x'_{n+1}) \end{aligned}$$

Cette équation s'exprime aussi sous la forme trajectorielle suivante

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(f_{n+1}(X_{n+1}) \mid X_n = x_n) \\ &= \sum_{(y'_0, \dots, y'_{n+1}) \in E_{n+1}} f_{n+1}(y'_0, \dots, y'_{n+1}) \mathbf{1}_{(x'_0, \dots, x'_n)}(y'_0, \dots, y'_n) M'_{n+1}(y'_n, y'_{n+1}) \end{aligned}$$

La dernière formule montre que X_n est une chaîne de Markov, de probabilités de transitions M_{n+1} de E_n vers E_{n+1} , données par

$$M_{n+1}((x'_0, \dots, x'_n), (y'_0, \dots, y'_{n+1})) = \mathbf{1}_{(x'_0, \dots, x'_n)}(y'_0, \dots, y'_n) M'_{n+1}(y'_n, y'_{n+1})$$

1.2.3 Interprétation matricielle

Lorsque l'espace d'état E est, soit fini, soit indexé de façon naturelle par \mathbb{N} , ou encore par \mathbb{Z} , les semigroupes de transitions $M_{p,n}$ définis dans la section 1.2.1 correspondent à des compositions "élémentaires" de matrices. Pour préciser cette assertion, commençons par l'exemple le plus simple, où l'espace d'état est donné par un ensemble à deux points $E = \{1, 2\}$. Dans ce cas, la donnée des transitions de la chaîne

$$M_n(x, y) = \mathbb{P}(X_n = y \mid X_{n-1} = x)$$

est équivalente à la donnée des matrices (2×2) suivantes

$$M_n = (M_n(x, y))_{x, y \in E} = \begin{pmatrix} M_n(1, 1) & M_n(1, 2) \\ M_n(2, 1) & M_n(2, 2) \end{pmatrix}$$

Par exemple, la matrice

$$M = \begin{pmatrix} 6/7 & 1/7 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

correspond au mouvement aléatoire entre deux états $E = \{1, 2\}$, synthétisé par le schéma ci-dessous

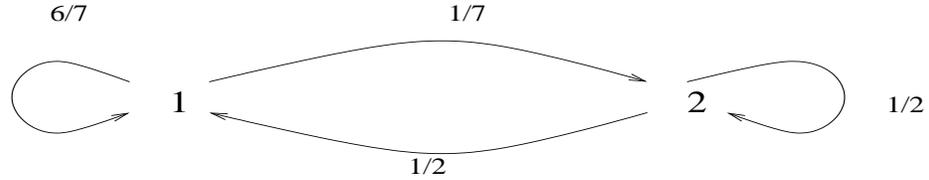


FIG. 1.1 – Chaîne à deux états

Par définition de l'opérateur de transition M_n , nous avons, pour toute fonction f sur $E = \{1, 2\}$, la formule matricielle

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} M_n(f)(1) \\ M_n(f)(2) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} M_n(1,1) f(1) + M_n(1,2) f(2) \\ M_n(2,1) f(1) + M_n(2,2) f(2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} M_n(1,1) & M_n(1,2) \\ M_n(2,1) & M_n(2,2) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} f(1) \\ f(2) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.3)$$

D'autre part, en utilisant la formule des conditionnements emboîtés

$$\mathbb{E}(f(X_n)) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(f(X_n)|X_{n-1})) = \mathbb{E}(M_n(f)(X_{n-1}))$$

on obtient une nouvelle formule matricielle

$$\begin{aligned} [\eta_n(1), \eta_n(2)] &= \begin{bmatrix} \eta_{n-1}(1) M_n(1,1) & \eta_{n-1}(2) M_n(2,1) \\ \eta_{n-1}(1) M_n(1,2) & \eta_{n-1}(2) M_n(2,2) \end{bmatrix} \\ &= [\eta_{n-1}(1), \eta_{n-1}(2)] \begin{pmatrix} M_n(1,1) & M_n(1,2) \\ M_n(2,1) & M_n(2,2) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Par conséquent, si l'on représente une fonction numérique f , et une mesure de probabilité η sur E par les vecteurs colonnes et lignes

$$f = \begin{bmatrix} f(1) \\ f(2) \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \eta = [\eta(1), \eta(2)]$$

alors, les équations (1.3) et (1.4) s'expriment sous la forme d'un **semigroupe matriciel**

$$M(f) = M f \quad \text{et} \quad \eta_n = \eta_{n-1} M_n = \eta_0 M_1 \dots M_n$$

Ces interprétations matricielles restent valables pour des chaînes de Markov à valeurs dans des espaces d'états finis abstraits $E = \{x_1, \dots, x_d\}$. Dans ce contexte, les matrices de transitions sont données par

$$M_n = \begin{pmatrix} M_n(x_1, x_1) & \dots & M_n(x_1, x_d) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_n(x_d, x_1) & \dots & M_n(x_d, x_d) \end{pmatrix}$$

Les mesures de probabilités η , et les fonctions f sur E sont associées au vecteurs lignes et colonnes suivants

$$\eta = [\eta(x_1), \dots, \eta(x_d)] \quad \text{et} \quad f = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_d) \end{bmatrix}$$

Exemple 1.2.1 *La figure suivante*

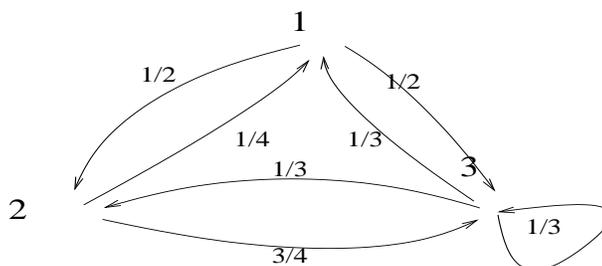


FIG. 1.2 – Chaîne à 3 états

présente un schéma d'évolution de chaîne de Markov sur un espace à trois points $E = \{1, 2, 3\}$, et de matrice de transition homogène donnée par

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/4 & 0 & 3/4 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

Lorsque l'espace d'états est dénombrable, et indexé par les entiers positifs $E = \{x_i, i \in \mathbb{N}\}$, les matrices de transition sont infini-dimensionnelles

$$M_n = (M_n(x, y))_{x, y \in E} = \begin{pmatrix} M_n(x_0, x_0) & M(x_0, x_1) & M(x_0, x_2) & \dots \\ M_n(x_1, x_0) & M(x_1, x_1) & M(x_1, x_2) & \dots \\ M_n(x_2, x_0) & M(x_2, x_1) & M(x_2, x_2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Dans ce cas, les probabilités η , et les fonctions f sur E sont associés au vecteurs

$$\eta = [\eta(x_0), \eta(x_1), \eta(x_2), \dots] \quad \text{et} \quad f = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Exemple 1.2.2 Une marche aléatoire homogène sur \mathbb{N} , absorbée en 0, peut être représentée par le schéma suivant

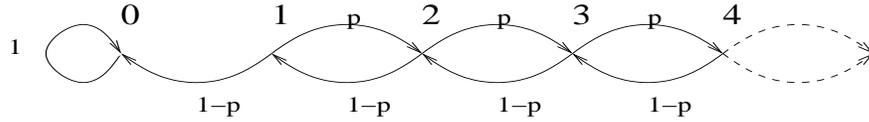


FIG. 1.3 – Chaîne absorbée en 0

La matrice de transition associée à cette chaîne est donnée par

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ (1-p) & 0 & p & 0 & \dots \\ 0 & (1-p) & 0 & p & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Lorsque le point 0 est réfléchissant, la matrice de transition s'écrit sous la forme

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ (1-p) & 0 & p & 0 & \dots \\ 0 & (1-p) & 0 & p & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Cette situation correspond au schéma suivant

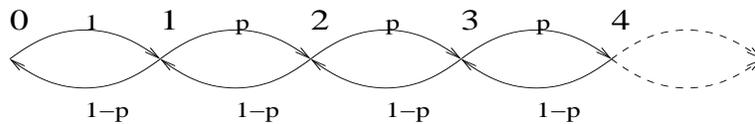


FIG. 1.4 – Chaîne réfléchie en 0

Dans le dernier cas, où l'espace d'états est dénombrable, et indexé par les entiers relatifs $E = \{x_i, i \in \mathbb{Z}\}$, les matrices de transition sont données par

$$M_n = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & M(x_{-1}, x_{-1}) & M_n(x_{-1}, x_0) & M(x_{-1}, x_1) & \dots \\ \dots & M(x_0, x_{-1}) & M_n(x_0, x_0) & M(x_0, x_1) & \dots \\ \dots & M(x_1, x_{-1}) & M_n(x_1, x_0) & M(x_1, x_1) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

et les probabilités η , et les fonctions f sur E sont associés au vecteurs

$$\eta = [\dots, \eta(x_{-1}), \eta(x_0), \eta(x_1), \dots] \quad \text{et} \quad f = \begin{bmatrix} \vdots \\ f(x_{-1}) \\ f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Exemple 1.2.3 Une marche aléatoire simple sur \mathbb{Z} peut être représenté par le schéma suivant

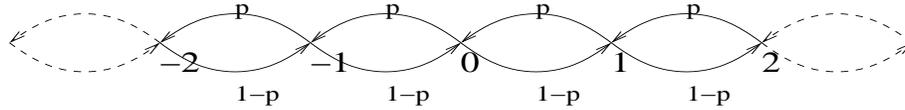


FIG. 1.5 – Marche simple sur \mathbb{Z}

La matrice de transition de cette évolution est donnée par

$$M = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & 0 & (1-p) & 0 & \dots \\ \dots & p & 0 & (1-p) & \dots \\ \dots & & p & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

1.3 Exemples

1.3.1 Files d'attentes

Soit $(U_n)_{n \geq 1}$ une suite de v.a. positives et indépendantes de lois respectives $(\mu_n)_{n \geq 1}$. On considère la chaîne de Markov définie de façon récursive par l'équation suivante

$$\begin{cases} X_{n+1} = (X_n - 1)^+ + U_{n+1} \\ X_0 = 0 \end{cases}$$

Dans la formule précédente $a^+ = \max(a, 0)$ désigne le maximum entre un nombre réel $a \in \mathbb{R}$ et 0.

Ce processus aléatoire peut s'interpréter comme la longueur d'**une file d'attente**, ou encore **le temps d'attente d'un client** arrivant à un guichet, servant une personne par unité de temps. Dans ce contexte, la v.a. U_{n+1} représente le nombre de clients arrivant dans la file d'attente au temps $(n+1)$.

On peut aussi interpréter X_n comme le nombre de paquets (symboles binaires représentant de l'information : voix, vidéo, données,...) en attente dans **la mémoire d'un canal de communication**, transmettant un paquet par unité de temps. Dans cette situation, la v.a. U_{n+1} représente le nombre de paquets arrivant dans le canal à l'instant $(n+1)$.

On notera que les transitions de cette chaîne sont données pour tout $i \geq 1$, et pour tout $j \geq 0$, par la formule suivante

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = (i-1) + j \mid X_n = i) = \mu_{n+1}(j) = \mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = 0)$$

1.3.2 Modèle d'urne

On considère une urne contenant initialement B_0 boules blanches, et N_0 boules noires. A chaque instant n , on choisit au hasard une boule, puis on remet cette boule dans l'urne accompagnée d'une nouvelle boule de la même couleur. On note (B_n, N_n) le nombre de boules blanches, et noires, dans l'urne au temps n . Par construction, le couple $X_n = (B_n, N_n)$ est une chaîne de Markov à valeurs dans $E = \mathbb{N}^2$, et de probabilités de transitions

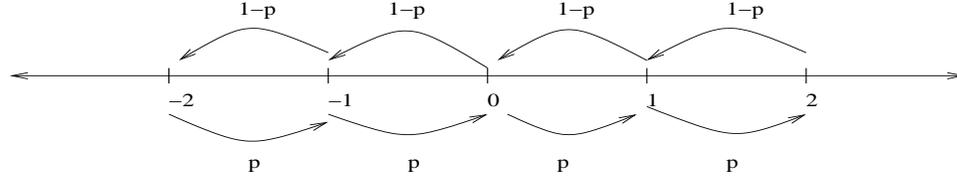
$$\mathbb{P}^{X_n | X_{n-1}}(\cdot | (b, m)) = \frac{b}{m+b} \delta_{(b+1, m)} + \frac{m}{b+m} \delta_{(b, m+1)}$$

1.3.3 Marche aléatoire sur \mathbb{Z}

La marche aléatoire simple sur \mathbb{Z} correspond à un mouvement aléatoire d'une particule sur les entiers relatifs, se déplaçant soit d'un pas vers la droite, avec une probabilité p , soit d'un pas vers la gauche, avec une probabilité $(1-p)$, avec $p \in (0, 1)$. Ce mouvement peut être représenté schématiquement par la figure suivante :

Plus formellement, ce mouvement aléatoire est défini par une chaîne de Markov $X = (X_n)_{n \geq 0}$ définie sur un espace de probabilités $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$, d'origine $X_0 = 0$ et de probabilités de transitions homogènes

$$\begin{aligned} M(x, y) &=_{\text{déf.}} \mathbb{P}(X_n = y \mid X_{n-1} = x) = \mathbb{P}^{X_n | X_{n-1}}(y | x) \\ &= p \mathbf{1}_{x+1}(y) + (1-p) \mathbf{1}_{x-1}(y) \end{aligned}$$

FIG. 1.6 – Marche aléatoire simple sur \mathbb{Z}

Pour décrire une réalisation dynamique de cette chaîne, on se donne une suite de v.a. indépendantes $U = (U_n)_{n \geq 1}$ distribuées sur $\{-1, +1\}$ selon la même loi de Bernoulli

$$\mathbb{P}(U_n = +1) = 1 - \mathbb{P}(U_n = -1) = p$$

On suppose, comme d’habitude, que cette suite est définie sur un espace de probabilités $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. On associe à U , le système dynamique aléatoire donné par

$$\begin{cases} X_n = X_{n-1} + U_n \\ X_0 = 0 \end{cases} \quad (1.5)$$

Cette interprétation dynamique offre un certain nombre d’avantages. Par exemple, elle permet une représentation “explicite” de l’état X_n en terme de v.a. indépendantes, et simplifie l’analyse des transitions de probabilités.

Exercice 1.3.1 *Cet exercice a pour objectif d’analyser plus en profondeur la marche aléatoire sur \mathbb{Z} décrite dans l’exemple 1.3.3.*

1. Vérifier que l’interprétation dynamique introduite en (1.5) correspond bien à la donnée d’une marche aléatoire simple sur \mathbb{Z} .
2. Montrer que la position moyenne de la particule au temps n est donnée par la formule $\mathbb{E}(X_n) = n \times (2p - 1)$. En conclure que

$$\begin{cases} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(X_n) = -\infty & \text{si } p \in [0, 1/2) \\ \mathbb{E}(X_n) = 0 & \text{si } p = 1/2 \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(X_n) = +\infty & \text{si } p \in (1/2, 1] \end{cases}$$

3. Vérifier que les transitions de la chaîne entre deux instants, m et $(m + n)$, sont données par la formule

$$\mathbb{P}(X_{m+n} = x + [k - (n - k)] \mid X_m = x) = C_n^k p^k (1 - p)^{n-k}$$

pour tous les $k \in \{0, \dots, n\}$, et

$$\mathbb{P}(X_{m+n} \notin \{2k - n : k = 0, \dots, n\} \mid X_n = x) = 0$$

4. En déduire que

$$\mathbb{P}(X_{m+2k} = 0 \mid X_m = 0) = \frac{(2k)!}{k!k!} (p(1-p))^k$$

En utilisant la formule de Stirling ($k! \simeq \sqrt{2\pi k} k^k e^{-k}$), montrer que

$$\mathbb{P}(X_{m+2k} = 0 \mid X_m = 0) \simeq \frac{(4p(1-p))^k}{\sqrt{\pi k}} \quad (= 1/\sqrt{\pi k} \text{ si } p = 1/2)$$

1.3.4 Marche aléatoire sur \mathbb{Z}^d

On note $|\cdot|$ la distance l^1 sur $E = \mathbb{Z}^d$ définies par

$$|x| = \sum_{i=1}^d |x^i|$$

pour tout $x = (x^i)_{1 \leq i \leq d} \in \mathbb{Z}^d$. On associe à une mesure de probabilité p sur l'ensemble des $2d$ vecteurs unitaires directionnels

$$\mathcal{U} = \{u \in \mathbb{Z}^d : |u| = 1\}$$

la transition homogène

$$M(x, y) = \sum_{u \in \mathcal{U}} p(u) 1_{x+u}(y)$$

L'évolution aléatoire de la chaîne X_n associée à M est claire. A chaque étape n , la particule choisit aléatoirement un vecteur $u \in \mathcal{U}$ avec la probabilité $p(u)$, et se déplace dans cette direction. Autrement dit, si $(U_n)_{n \geq 1}$ désigne une suite de v.a. indépendantes de même loi p sur \mathcal{U} , on a une représentation dynamique de l'évolution

$$X_n = X_{n-1} + U_n = X_0 + \sum_{i=1}^n U_i$$

La figure suivante présente une réalisation d'une trajectoire aléatoire de la chaîne X_n sur \mathbb{Z}^2 , d'origine $X_0 = 0 \in \mathbb{Z}^2$.

1.3.5 Marche aléatoire arrêtée

Supposons qu'une particule évolue sur \mathbb{Z}^d selon les principes de transitions élémentaires décrits dans l'exemple 1.3.4, mais cette dernière ne peut se mouvoir que s'il elle se trouve dans une région spécifique de l'espace $B \subset \mathbb{Z}^d$. Autrement dit, lorsque la chaîne X_n sort de B , elle s'immobilise. Ce modèle physique peu à nouveau être

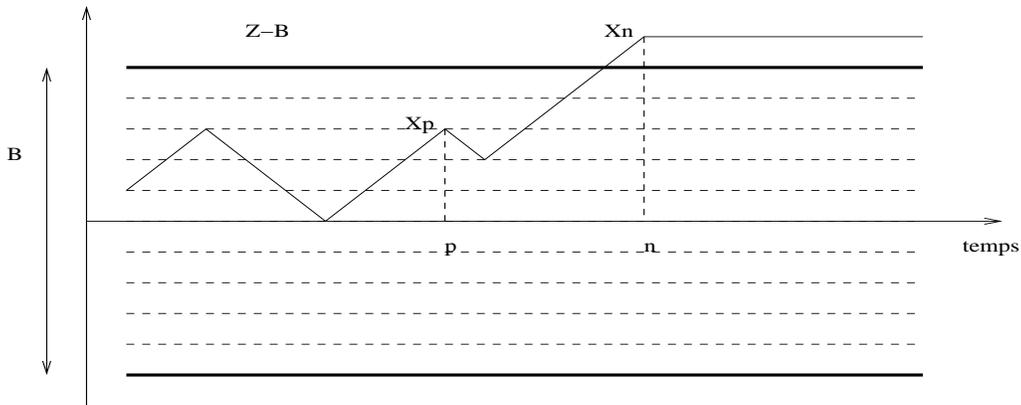


FIG. 1.8 – Chaîne stoppée

Lorsque les v.a. de branchement $(N_n^i)_{i \geq 1, n \geq 1}$ sont des copies indépendantes d'une même v.a. entière N , on notera que

$$\mathbb{E}(X_{n+1}|X_n) = \sum_{i=1}^{X_n} \mathbb{E}(N_n^i) = X_n \times \mathbb{E}(N) \Rightarrow \mathbb{E}(X_{n+1}) = \mathbb{E}(X_0) \mathbb{E}(N)^{n+1}$$

Par conséquent, en supposant que $\mathbb{E}(X_0) \neq 0$, la population moyenne s'éteindra lorsque $\mathbb{E}(N) < 1$, et elle explosera lorsque $\mathbb{E}(N) > 1$. La figure suivante présente une réalisation d'un arbre de descendance d'un individu ($X_0 = 1$).

Examinons la situation où chaque individu se dédouble avec une probabilité p , ou disparaît avec la probabilité $(1 - p)$. Ce modèle correspond au choix d'une v.a. N de Bernoulli loi

$$\mathbb{P}^N = p \delta_2 + (1 - p) \delta_0$$

Dans ce contexte, on notera que $\mathbb{E}(N) = 2p$. De plus, on montre les transitions de cette chaîne sont données par la formule binomiale

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = 2y \mid X_n = x) = C_x^y p^y (1 - p)^{x-y}$$

pour tout $y \in \{0, \dots, x\}$, et $\mathbb{P}(X_{n+1} \in 2\mathbb{N} + 1 \mid X_n = x) = 0$, pour tout $x \in \mathbb{N}$.

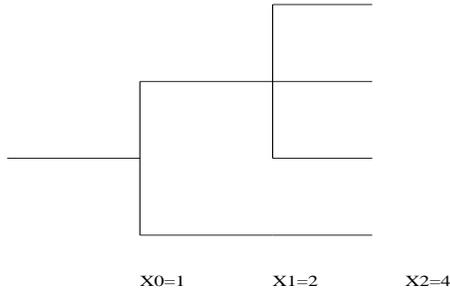


FIG. 1.9 – Processus de branchement

1.4 Chaînes de Markov abstraites

Comme nous l’avons souligné dans l’introduction, la notion de chaîne de Markov, est loin d’être restreinte à des phénomènes aléatoires à valeurs dans des espaces discrets. Les fluctuations de température d’un liquide par unité de temps correspondent à des chaînes de Markov à valeurs réelles. L’évolution d’une cible spatiale peut être modélisée par une chaîne de Markov à valeurs dans l’espace euclidien \mathbb{R}^3 , ou bien dans \mathbb{R}^9 si l’on tient compte des coordonnées de position, vitesse et accélération. Enfin, si l’on tient compte des évolutions de cette même cible entre certains paliers, on obtient une chaîne de Markov à valeurs dans des espaces de chemins ou d’excursions.

Tous ces modèles physiques, s’inscrivent dans la théorie abstraite des chaînes de Markov à valeurs dans des espaces mesurables. Leur analyse s’exprime de façon naturelle dans la théorie de l’intégration de Lebesgue. Afin d’éviter un langage trop technique, j’ai volontairement choisi de ne pas inscrire ce cours d’ingénierie stochastique dans ce cadre trop mathématique. Nous ignorerons donc les notions d’ensembles et de fonctions mesurables, les théorèmes de Fubini, et d’autres propriétés fondamentales de la théorie de l’intégration de Lebesgue. La nature est suffisamment stable pour polir les erreurs et les confusions dues à de tels écarts. J’ai plutôt essayé de coller au plus près à la réalité scientifique et technique, tout en aiguissant la curiosité mathématique du lecteur.

Dans la suite du cours, on utilisera donc la terminologie “chaîne de Markov abstraite” pour désigner une chaîne de Markov X_n à valeurs dans des ensembles suffisamment réguliers E_n , de transitions de probabilités

$$M_n(x_{n-1}, dx_n) =_{\text{déf.}} \mathbb{P}^{X_n|X_{n-1}}(dx_n|x_{n-1}) = \mathbb{P}(X_n \in dx_n \mid X_{n-1} = x_{n-1})$$

et de loi initiale $\eta_0(dx_0) = \mathbb{P}^{X_0}(dx_0)$ sur E_0 . On note alternativement

$$\eta_n(dx_n) = \mathbb{P}^{X_n}(dx_n) = \mathbb{P}(X_n \in dx_n)$$

la loi de la v.a. X_n sur E_n , donnée pour toute fonction f_n bornée sur E_n par la formule

$$\mathbb{E}(f_n(X_n)) = \int f_n(x_n) \eta_n(dx_n) \stackrel{\text{déf.}}{=} \eta_n(f_n)$$

Dans ce système de notations abusives, une mesure donnée sur E_n s'interprète, soit comme un opérateur intégral, soit comme une fonction ensembliste. Ainsi, pour tout sous ensemble suffisamment régulier $B_n \subset E_n$, nous avons les représentations équivalentes

$$\begin{aligned} \eta_n(B_n) &= \mathbb{P}^{X_n}(B_n) = \eta_n[1_{B_n}] \\ M_n(x_{n-1}, B_n) &= \mathbb{P}^{X_n|X_{n-1}}(B_n|x_{n-1}) \\ &= \mathbb{P}(X_n \in B_n \mid X_{n-1} = x_{n-1}) = M_n[1_{B_n}](x_{n-1}) \end{aligned}$$

On dit qu'une chaîne de Markov **réelle** $X = (X_n)_{n \geq 0}$ est **absolument continue**, lorsque la v.a. initiale X_0 est absolument continue de densité p_0 sur \mathbb{R} , et lorsque ses transitions de probabilités sont données en terme d'une famille de densités de probabilités $\{p_n(x, \cdot), x \in \mathbb{R}\}$ sur \mathbb{R}

$$M_n(x_{n-1}, dx_n) = \mathbb{P}^{X_n|X_{n-1}}(dx_n|x_{n-1}) = p_n(x_{n-1}, x_n) dx_n \quad (1.6)$$

Dans la formule précédente dx_n désigne la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R} . A titre illustratif, on pourra considérer les familles de densités gaussiennes, ou exponentielles données par la formule

$$p_n(x, y) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(y-x)^2}}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{ou} \quad p_n(x, y) = 1_{[0, \infty)}(y) (|x| + 1) e^{-(|x|+1)y}$$

Dans ce contexte, la trajectoire (X_0, \dots, X_n) de l'origine jusqu'à l'instant n est une v.a. absolument continue, de loi donnée par la formule

$$\mathbb{P}^{(X_0, \dots, X_n)}(d(x_0, \dots, x_n)) = p_0(x_0)p_1(x_0, x_1) \dots p_n(x_{n-1}, x_n) dx_0 dx_1 \dots dx_n$$

1.4.1 Semigroupe des transitions

Comme dans le cas des chaînes discrètes, il existe un système de notations naturel permettant de décrire les semigroupes d'évolution des lois des états X_n .

Les probabilités de transitions $M_n(x_{n-1}, dx_n)$ permettent de définir deux opérateurs intégraux naturels :

1. Le premier agit à droite sur les fonctions bornées. A chacune de ces fonctions f , on associe la fonction bornée $M_n[f]$ définie par la formule suivante

$$M_n[f] : x \in \mathbb{R} \mapsto M_n[f](x) =_{\text{déf.}} \mathbb{E}(f(X_n) | X_{n-1} = x) \in \mathbb{R}$$

2. Le second agit à gauche sur les mesures de probabilités sur \mathbb{R} . A chacune de ces mesures η , on associe la mesure de probabilité (ηM_n) définie par

$$(\eta M_n) : B \subset \mathbb{R} \mapsto (\eta M_n)(B) = \int \eta(dx) M_n(x, B) \in [0, 1]$$

Dans ce contexte, une mesure de probabilité η correspond à un opérateur intégral sur l'ensemble des fonctions f mesurables et bornées

$$\eta[f] = \int \eta(dx) f(x) \in \mathbb{R}$$

Avec ce système de notations, pour les fonctions indicatrices $f = 1_B$ d'ensembles $B \subset \mathbb{R}$, nous avons $\eta(B) = \eta[1_B]$. Lorsqu'il n'y a pas de confusions, il est coutume de noter $\eta(f)$ et $M_n(f)$ plutôt que $\eta[f]$ et $M_n[f]$. Cet abus de notation évident est parfois poussé à l'extrême. Certains auteurs notent parfois tout simplement ηf , pour insister sur le fait que cette opération intégrale n'est autre qu'une extension naturelle du produit matriciel.

À la différence des chaînes discrètes, les lois $\eta_n(dx)$ des états X_n de chaînes abstraites sont données par des équations d'évolution intégrales. Il est bien entendu hors de question d'être tenté de calculer, ou d'estimer ces formules de transport. Il convient néanmoins de souligner qu'il existe des stratégies numériques et probabilistes pour le faire! Ces techniques sont connues sous le nom de *méthodes de Monte-Carlo*, en référence au fait qu'elles sont basées sur des simulations concrètes de trajectoires aléatoires.

En utilisant la propriété de Markov, on notera que pour toute fonction f_{n+1} , mesurable et bornée sur E_{n+1} , on a

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(f_{n+1}(X_{n+1})|X_{n-1}) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(f_{n+1}(X_{n+1})|X_{n-1}, X_n) |X_{n-1}) \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(f_{n+1}(X_{n+1})|X_n) |X_{n-1}) \\ &= \mathbb{E}(M_{n+1}(f_{n+1})(X_n) |X_{n-1}) \\ &= M_n[M_{n+1}(f_{n+1})](X_{n-1}) \end{aligned}$$

On note $(M_n M_{n+1})(x_{n-1}, dx_{n+1})$ la collection de mesures sur E_{n+1} , indexée par les $x_{n-1} \in E_{n-1}$ et définies pour tout $B_{n+1} \subset E_{n+1}$ par la formule de composition intégrale

$$(M_n M_{n+1})(x_{n-1}, B_{n+1}) = \int_{E_n} M_n(x_{n-1}, dx_n) M_{n+1}(x_n, B_{n+1})$$

En terme d'indicatrices cette équation s'exprime sous la forme suivante

$$(M_n M_{n+1})(1_{B_{n+1}})(x_{n-1}) = \int_{E_n} M_n(x_{n-1}, dx_n) M_{n+1}(1_{B_{n+1}})(x_n)$$

Plus généralement, on a la formule de conditionnement

$$\mathbb{E}(f_{n+p}(X_{n+p})|X_{n-1}) = M_n M_{n+1} \dots M_{n+p}(f_{n+p})(X_{n-1})$$

pour toute fonction f_{n+p} bornée sur E_{n+p} , et pour tout décalage d'indice temporel $p \geq 1$. Les opérateurs intégraux

$$M_{n,n+p} \stackrel{\text{aéf.}}{=} M_n M_{n+1} \dots M_{n+p}$$

avec $n \geq 1$ et $p \geq 1$, forment *un semigroupe d'opérateurs intégraux*, en ce sens où

$$\forall n \leq m \leq n+p \quad M_{n,n+p} = M_{n,m} M_{m,n+p}$$

1.4.2 Équations de Chapman-Kolmogorov

D'après la formule des conditionnements emboîtés, nous avons

$$\begin{aligned} \eta_n(f_n) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(f_n(X_n)|X_{n-1})) = \mathbb{E}(M_n(f_n)(X_{n-1})) \\ &= \int_{E_{n-1}} \eta_{n-1}(dx_{n-1}) M_n(f_n)(x_{n-1}) = \eta_{n-1}(M_n(f_n)) \end{aligned} \quad (1.7)$$

Soit $(\eta_{n-1} M_n)$ la mesure sur E_n définie, pour tout $B_n \subset E_n$, par la formule

$$(\eta_{n-1} M_n)(1_{B_n}) = \int_{E_{n-1}} \eta_{n-1}(dx_{n-1}) M_n(1_{B_n})(x_{n-1})$$

Par construction, nous avons les représentations équivalentes suivantes

$$\begin{aligned}
\eta_n(f_n) &= \eta_{n-1}(M_n(f_n)) \\
&= \int_{E_{n-1}} \eta_{n-1}(dx_{n-1}) \left[\int_{E_n} M_n(x_{n-1}, dx_n) f_n(x_n) \right] \\
&= \int_{E_n} \left[\int_{E_{n-1}} \eta_{n-1}(dx_{n-1}) M_n(x_{n-1}, dx_n) \right] f_n(x_n) \\
&= (\eta_{n-1}M_n)(f_n) \stackrel{\text{déf.}}{=} \eta_{n-1}M_n(f_n)
\end{aligned}$$

En utilisant (1.7), nous obtenons la formule de transport intégral des lois des états de la chaîne

$$\eta_n = \eta_{n-1}M_n = \eta_0M_1M_2 \dots M_n \quad (1.8)$$

Cette équation intégrale, appelée **la formule de Chapman-Kolmogorov**, permet de voir les lois η_n comme solution d'un système dynamique (déterministe) intégral (et donc linéaire) sur les espaces de mesures de probabilités.

1.4.3 Processus historique

Comme nous l'avons vu pour les chaînes discrètes dans la section 1.2.2, le cadre non homogène est utile pour représenter des modèles trajectoriels, tel le processus historique associé à une chaîne de Markov élémentaire. La construction abstraite de ces modèles trajectoriels est analogue à celle présentée à l'exemple 1.2.2. Ainsi, si X'_n est une chaîne de Markov de transitions M'_n sur des ensembles E'_n , les séquences de trajectoires

$$X_n = (X'_0, \dots, X'_n)$$

forment un processus de Markov sur les espaces produits

$$E_n = (E'_0 \times \dots \times E'_n)$$

Le passage de X_n à X_{n+1} s'effectue en deux temps. On conserve tout d'abord le segment de trajectoire $X_n = (X'_0, \dots, X'_n)$, puis on lui adjoint une extension élémentaire aléatoire X'_{n+1} de loi $M'_{n+1}(X'_n, dx')$. Plus formellement, nous avons

$$\begin{aligned}
X_n = (X'_0, \dots, X'_n) &\rightsquigarrow X_{n+1} = \left(\underbrace{(X'_0, \dots, X'_n)}_{X_n}, X'_{n+1} \right) \\
&= (X_n, X'_{n+1}) \in E_{n+1} = (E_n \times E')
\end{aligned}$$

On notera que pour toute fonction f_{n+1} bornée sur E_{n+1} , et pour tout segment de trajectoire $x_n = (x'_0, \dots, x'_n) \in E_n$, nous avons

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(f_{n+1}(X_{n+1}) \mid X_n = x_n) \\ &= \mathbb{E}(f_{n+1}([X'_0, \dots, X_n], X'_{n+1}) \mid (X'_0, \dots, X'_n) = (x'_0, \dots, x'_n)) \\ &= \int_{x'_{n+1} \in E'} f_{n+1}([x'_0, \dots, x'_n], x'_{n+1}) M'_{n+1}(x'_n, dx'_{n+1}) \end{aligned}$$

Cette équation s'exprime aussi sous la forme trajectorielle suivante

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(f_{n+1}(X_{n+1}) \mid X_n = x_n) \\ &= \int_{(y'_0, \dots, y'_{n+1}) \in E_{n+1}} f_{n+1}(y'_0, \dots, y'_{n+1}) \delta_{(x'_0, \dots, x'_n)}(d(y'_0, \dots, y'_n)) M'_{n+1}(y'_n, dy'_{n+1}) \end{aligned}$$

La dernière formule montre que X_n est une chaîne de Markov, de probabilités de transitions M_{n+1} de E_n vers E_{n+1} , données par la formule

$$\begin{aligned} & M_{n+1}((x'_0, \dots, x'_n), d(y'_0, \dots, y'_{n+1})) \\ &= \delta_{(x'_0, \dots, x'_n)}(d(y'_0, \dots, y'_n)) M'_{n+1}(y'_n, dy'_{n+1}) \end{aligned}$$

Ces processus historiques interviennent de façon naturelle dans divers problèmes issus de la physique, ou de la biologie. Ils offrent un cadre markovien naturel pour modéliser et analyser des évolutions aléatoires complexes, liées le plus souvent à des effets de dépendance trajectorielles. Ainsi, dans la section 2.8, ces processus historiques nous permettront de définir des modèles d'arbres généalogiques en terme d'algorithmes génétiques trajectoriels. Dans la section 2.9, nous utiliserons à nouveau ces modèles pour représenter des explorations évolutives basées sur des mécanismes de mémoire renforçant les probabilités de retours vers des sites qui ont déjà été visités.

Chapitre 2

Quelques domaines d'application

2.1 Chaînes linéaires et gaussiennes

2.1.1 Introduction

La distribution gaussienne joue un rôle essentiel dans la théorie des probabilités. L'importance des variables gaussiennes est en grande partie due au théorème central de la limite. Ce dernier nous informe que toute accumulation de petites fluctuations indépendantes, et de nature quelconque, se traduit asymptotiquement et irrémédiablement par une variable gaussienne. Tout phénomène résultant d'une addition d'effets aléatoires indépendants est donc nécessairement de nature gaussienne. Dans de nombreux problèmes pratiques, il est donc naturel de considérer comme gaussiennes les erreurs de mesures, et les erreurs de modélisation.

2.1.2 Formulation canonique

Les systèmes linéaires et gaussiens $X = (X_n)_{n \geq 0}$ sont définis par la donnée d'une suite de v.a. à valeurs réelles de lois marginales

$$\mathbb{P}^{(X_0, \dots, X_n)}(d(x_0, \dots, x_n)) = \left[\prod_{p=1}^n \frac{e^{-\frac{(x_p - a_p x_{p-1})^2}{2\sigma_p^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma_p^2}} dx_p \right] \frac{e^{-\frac{x_0^2}{2\sigma_0^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} dx_0 \quad (2.1)$$

Dans le formule ci-dessus $(a_n)_{n \geq 1}$ désigne une suite de nombres réels, et $(\sigma_n)_{n \geq 0}$ une suite de nombres strictement positifs.

En intégrant la formule (2.1) en la coordonnée x_n , on montre facilement que

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}^{X_n|(X_0, \dots, X_{n-1})}(dx_n|x_0, \dots, x_{n-1}) \\ &= \mathbb{P}^{X_n|X_{n-1}}(dx_n|x_{n-1}) \\ &= M_n(x_{n-1}, dx_n) =_{\text{déf.}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_n^2} (x_n - a_n x_{n-1})^2\right\} dx_n \end{aligned}$$

pour tout $n \geq 1$, et $x_0, \dots, x_{n-1} \in \mathbb{R}$. De même, on montre que la loi de la condition initiale X_0 est donnée par

$$\mathbb{P}^{X_0}(dx_0) = \eta_0(dx_0) =_{\text{déf.}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} \exp\left\{-\frac{x_0^2}{2\sigma_0^2}\right\} dx_0$$

La formule multiplicative (2.1) doit donc se lire comme une formule de Bayes séquentielle

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{(X_0, \dots, X_n)}(d(x_0, \dots, x_n)) &= \left[\prod_{p=1}^n \mathbb{P}^{X_p|X_{p-1}}(dx_p|x_{p-1}) \right] \mathbb{P}^{X_0}(dx_0) \\ &= \eta_0(dx_0) M_1(x_0, dx_1) \dots M_n(x_{n-1}, dx_n) \end{aligned}$$

2.1.3 Formulation dynamique

Notons $W = (W_n)_{n \geq 0}$ une suite de v.a. indépendantes et gaussiennes, et telles que

$$\mathbb{P}^{(W_0, \dots, W_n)}(d(w_0, \dots, w_n)) = \prod_{p=0}^n \mathbb{P}^{W_p}(dw_p) = \prod_{p=0}^n \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{w_p^2}{2}\right\} dw_p \right)$$

On associe à cette séquence de v.a. gaussiennes, le système dynamique

$$\begin{cases} X_n &= a_n X_{n-1} + \sigma_n W_n \\ X_0 &= \sigma_0 W_0 \end{cases} \quad (2.2)$$

Par construction, nous avons pour toute fonction bornée f

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(f(X_n)|X_{n-1} = x_{n-1}) \\ &= \mathbb{E}(f(x_{n-1} + \sigma_n W_n)|X_{n-1} = x_{n-1}) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_{n-1} + \sigma_n w_n) \frac{e^{-\frac{w_n^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dw_n \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_n) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_n^2} (x_n - a_n x_{n-1})^2} dx_n = \int M_n(x_{n-1}, dx_n) f(x_n) \end{aligned}$$

Il est donc équivalent de définir la chaîne X_n soit de façon dynamique, soit directement par la donnée de ses transitions de probabilités.

2.2 Processus de Poisson

Le processus de Poisson est souvent associé à des phénomènes de comptages dans le temps : arrivées de clients dans une file d'attente, nombres de transactions journalières autour d'une action boursière, arrivées et départs d'avions dans des aéroports, nombres d'appels dans un central téléphonique, etc. Nous renvoyons le lecteur à l'ouvrage de F.A. Haight [5] consacré aux différentes applications de ce processus.

D'un point de vue mathématique, le processus de Poisson est défini en terme d'une suite de v.a. $(T_n)_{n \geq 0}$, à valeurs positives, et de lois marginales données par la formule

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{(T_0, \dots, T_n)}(d(t_0, \dots, t_n)) & \quad (2.3) \\ &= [1_{[0, \infty)}(t_0) \lambda e^{-\lambda t_0} dt_0] [1_{[t_0, \infty)}(t_1) \lambda e^{-\lambda(t_1 - t_0)} dt_1] \\ & \quad \dots \times [1_{[t_{n-1}, \infty)}(t_n) \lambda e^{-\lambda(t_n - t_{n-1})} dt_n] \end{aligned}$$

Dans la formule ci-dessus, $\lambda > 0$ désigne un paramètre fixé. En interprétant (2.3) comme une formule de Bayes séquentielle, on obtient

$$\mathbb{P}^{(T_0, \dots, T_n)}(d(t_0, \dots, t_n)) = \left[\prod_{p=1}^n \mathbb{P}^{T_p | T_{p-1}}(dt_p | t_{p-1}) \right] \mathbb{P}^{T_0}(dt_0)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{T_0}(dt_0) &= 1_{[0, \infty)}(t_0) \lambda e^{-\lambda t_0} dt_0 \\ \mathbb{P}^{T_n | T_{n-1}}(dt_n | t_{n-1}) &= 1_{[t_{n-1}, \infty)}(t_n) \lambda e^{-\lambda(t_n - t_{n-1})} dt_n \end{aligned}$$

Par un simple changement de variable, on montre aussi facilement que

$$U_0 =_{\text{déf.}} T_0 \quad \text{et} \quad U_n =_{\text{déf.}} (T_n - T_{n-1})$$

forment une suite de v.a. exponentielles et indépendantes de paramètre λ . Le processus continu de comptage des sauts

$$t \in \mathbb{R}_+ \mapsto N(t) = \sum_{n \geq 0} 1_{[T_n, \infty)}(t) \in \mathbb{N}$$

est appelé le Processus de Poisson d'intensité λ . Une réalisation de ce processus est donnée dans la figure suivante

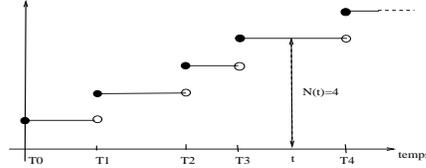


FIG. 2.1 – Processus de Poisson

2.3 Modèles stochastiques en traitement du signal

Le modèle que nous proposons est issu d'un modèle de filtrage de signaux radar. Cette chaîne de Markov est appelé **le modèle de Singer**. L'espace d'état est ici \mathbb{R}^3 . Le signal correspond à l'évolution d'une cible abstraite ponctuelle formé de trois coordonnées

$$X_n = \begin{pmatrix} X_n^{(1)} \\ X_n^{(2)} \\ X_n^{(3)} \end{pmatrix}$$

La première coordonnée $X_n^{(1)}$ représente les accélérations, la seconde $X_n^{(2)}$ les vitesses, et la dernière $X_n^{(3)}$ les positions.

L'évolution du signal X est donné par les équations suivantes

$$\begin{cases} X_n^{(1)} &= X_{n-1}^{(1)} + \epsilon_n W_n \\ X_n^{(2)} &= (1 - \alpha \Delta) X_{n-1}^{(2)} + \beta \Delta X_n^{(1)} \\ X_n^{(3)} &= X_{n-1}^{(3)} + \Delta X_n^{(2)} \end{cases}$$

avec des coefficients de viscosités $\alpha = 1$ et $\beta = 18$, et des conditions initiales gaussiennes $X_0^{(1)} \sim N(30, \sigma_0)$, $X_0^{(2)}$ et $X_0^{(3)} \sim N(500, \sigma_0)$ avec $\sigma_0 \in \{10, 100\}$. Le paramètre $\Delta = 10^{-2}$ correspond à la période d'échantillonnage du radar. La suite $(\epsilon_n)_{n \geq 1}$ est formée de v.a. indépendantes de Bernoulli de paramètre Δ . Ces dernières représentent les instants aléatoires où la cible accélère. Enfin la suite $(W_n)_{n \geq 1}$ représente les amplitudes des accélérations. On peut supposer par exemple que cette suite est formée de v.a. indépendantes et uniformes sur l'intervalle $[0, 60]$.

Le lecteur avisé aura très probablement noté que ce modèle discret correspond à la discrétisation du système dynamique suivant

$$\begin{cases} dX_t^{(1)} &= W_t dN_t \\ \frac{dX_t^{(2)}}{dt} &= -\alpha X_t^{(2)} + \beta X_t^{(1)} \\ \frac{dX_t^{(3)}}{dt} &= X_t^{(2)} \end{cases}$$

où W_t , N_t désignent respectivement une trajectoire gaussienne, et poissonnienne.

Le système dynamique discret peut se représenter sous la forme vectorielle suivante

$$X_n = A X_{n-1} + U_n$$

avec la matrice A , et les vecteur aléatoires U_n , donnés par

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \beta \Delta & (1 - \alpha \Delta) & 0 \\ 0 & \Delta & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad U_n = \begin{pmatrix} \epsilon_n W_n \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Le processus d'observation est défini par les équations

$$\forall n \geq 0, \quad Y_n = X_n^{(3)} + \Delta V_n$$

Les perturbations de mesures $V = (V_n)_{n \geq 1}$ sont une suite de variables indépendantes des v.a. précédentes, et indépendantes de même loi gaussienne centrée et d'écart type $\sigma_v^2 = 100$. Le problème du filtrage consiste à calculer, ou plutôt à estimer, les lois conditionnelles du vecteur X_n sachant les observations $Y_0 = y_0, \dots, Y_n = y_n$, fournies par le radar.

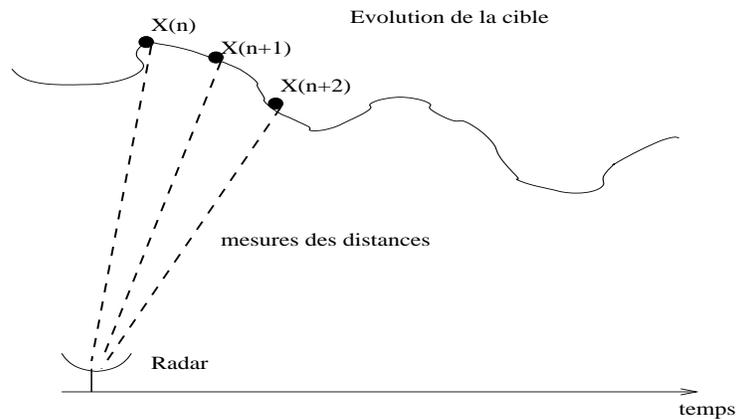


FIG. 2.2 – Chaîne à deux états

2.4 Modèles stochastiques en finance

2.4.1 Évolution de prix d'actions

L'évolution des prix d'actifs risqués dans les marchés financiers sont souvent modélisés par des processus aléatoires réels de la forme suivante :

$$Y_n = (1 + a_n(Y_{n-1}) \Delta + b_n(Y_{n-1}) \Delta W_n) \times Y_{n-1}$$

Les fonctions (a_n, b_n) représentent respectivement la tendance et la volatilité du marché. Le paramètre $\Delta > 0$ correspond à un pas de temps. Les fluctuations aléatoires du marché sont représentées par les accroissement

$$\Delta W_n = W_n - W_{n-1}$$

d'un processus aléatoire W_n , tel que $W_0 = 0$. Elles sont souvent choisies indépendantes, et de même loi gaussienne centrée et de variance Δ . On conviendra que ces accroissement aléatoires sont tels que

$$(\Delta W_n)^2 \simeq \Delta$$

A titre d'exemple, W_n peut correspondre à une marche aléatoire vers le haut ou vers le bas, et définie par la formule

$$\Delta W_n = \epsilon_n \sqrt{\Delta}$$

avec une suite de variables ϵ_n indépendantes, et distribuées selon la même loi

$$\mathbb{P}(\epsilon_n = 1) = 1 - \mathbb{P}(\epsilon_n = -1) = 1/2$$

En termes financiers, l'accroissement relatif du prix d'un actif sur une petite durée est donné par la formule

$$\frac{\Delta Y_n}{Y_{n-1}} = \frac{Y_n - Y_{n-1}}{Y_{n-1}} = a_n(Y_{n-1}) \Delta + b_n(Y_{n-1}) \Delta W_n$$

Le modèle introduit par Black et Scholes en 1973 correspond à la situation où les fonctions de tendance et volatilité sont constantes et homogènes en temps

$$a_n(x) = a \quad \text{et} \quad b_n(x) = b$$

Dans cette situation, l'équation précédente admet pour solution explicite :

$$\begin{aligned} Y_n &= \left[\prod_{p=1}^n (1 + a \Delta + b \Delta W_p) \right] Y_0 \\ &= \exp \left\{ \sum_{p=1}^n \log (1 + a \Delta + b \Delta W_p) \right\} Y_0 \end{aligned}$$

En utilisant le développement du logarithme autour de l'origine

$$\log(1 + u) \simeq u - \frac{u^2}{2}$$

on montre que

$$\begin{aligned} Y_n &\simeq \exp \left\{ \sum_{p=1}^n (a \Delta + b \Delta W_p) - \frac{1}{2} b^2 n \Delta \right\} Y_0 \\ &\simeq \exp \left\{ \left(a - \frac{b^2}{2} \right) n \Delta + b W_n \right\} Y_0 \end{aligned}$$

En pratique, les paramètres de tendance et volatilité sont de l'ordre de 10^{-p} log d'euros par minute, avec $p = 1, 2, 3, \dots$. On peut donc en première approximation, remplacer cette formulation exponentielle par

$$Y_n \simeq \exp \{ a n \Delta + b W_n \} Y_0$$

2.4.2 Estimation des volatilités du marché

En pratique on observe les cours des actifs Y_n mais la tendance et la volatilité du marché sont des paramètres inconnus. L'estimation de ces quantités est l'un des problèmes les plus courants en mathématiques financières.

Pour résoudre numériquement ce problème, le Professeur René Carmona du Bendheim Center for Finance de Princeton, proposa en 2001 un modèle de filtrage de signaux analogue à celui du filtrage de signaux radar décrit dans la section précédente. L'idée est la suivante. Supposons tout d'abord que les tendances du marché sont des paramètres constants homogènes et connus $a_n(x) = a$, disons $a = 6 \cdot 10^{-3}$. On suppose de plus que la volatilité du marché est un paramètre aléatoire b_n oscillant autour de sa condition initiale b_0 selon l'équation suivante

$$b_n = -c (b_{n-1} - b_0) \Delta + d \Delta \widetilde{W}_n$$

où (c, d) désigne un couple de paramètres fixés, et $\Delta \widetilde{W}_n$ une suite d'accroissement aléatoires indépendants, du même type que ΔW_n . Pour fixer les idées on peut convenir que $b_0 = 10^{-1}$, $c = 2$, $d = 1$, et un pas de temps $\Delta = 10^{-3}$. La volatilité du marché financier est observée indirectement par la donnée des prix des actifs

$$Y_n / Y_{n-1} = (1 + a_n \Delta) + b_n \Delta W_n$$

Le problème de filtrage associé consiste donc à calculer les lois conditionnelles

$$\text{Loi}((b_0, \dots, b_n) \mid Y_0, \dots, Y_n)$$

du processus de volatilité connaissant l'évolution du prix des actifs.

2.5 Milieux absorbants

2.5.1 Introduction

En termes physiques, la chaîne de Markov suivante représente l'évolution d'une particule physique dans un puit de potentiel absorbant. Ce modèle peut aussi s'interpréter comme une désintégration, ou encore comme une absorption de la radioactivité dans des containers de stockages de déchets nucléaires.

Très brièvement, une particule évolue aléatoirement dans un environnement absorbant avec un taux de survie $G(x) \in [0, 1]$, en chaque site x .

Les obstacles sont d'autant plus absorbants que les valeurs de G sont proches de 0. Inversement, la particule évolue librement dans des régions où G vaut 1. Les régions où le potentiel est strictement inférieur à 1 représentent des obstacles dans lesquels la particule peut être piégée.

Ces trappes peuvent représenter des **niveaux de sécurité** dans tout type d'environnements, tels des aéroports, des milieux carcéraux, des chaînes de production, des réseaux de télécommunications, des containers de stockage de radioactivité, des tissus cellulaires, etc.

En pharmacologie, ces modèles d'absorption sont aussi utilisés pour modéliser l'évolution des taux de leucocytes dans des traitements du cancer. Dans ce contexte, les trappes reflètent des chutes de niveaux de leucocytes dans lesquels un individu risque de décéder.

En biologie et en recherche médicale, ces modèles d'absorption sont aussi utilisés pour modéliser l'évolution de photons émis par un laser sur un tissu cellulaire. Les trappes représentent des régions cellulaires, telles des tumeurs plus sombres absorbant les photons. L'analyse de ces modèles permet de localiser et d'analyser ces régions de gonflement pathologiques des tissus.

Enfin, ces modèles peuvent aussi s'interpréter comme des **processus économiques** tels les évolutions de portefeuilles, ou tout autre indicateur économique, dans des milieux financiers ou géopolitiques-politiques.

Dans tous ces domaines d'applications, l'un des problèmes majeurs est de calculer les probabilités de défaillances, autrement dit les probabilités pour que l'absorption de la particule ne soit pas effective à des instants donnés.

2.5.2 Description des modèles

Pour fixer les idées, nous conviendrons par la suite que l'espace des états est donné par le réseau \mathbb{Z}^d . Plus formellement, on adjoint à l'espace des sites \mathbb{Z}^d , un point cimetière "c". On considère alors une particule évoluant sur l'espace augmenté $E = \mathbb{Z}^d \cup \{c\}$, selon une transition $Y_n \rightsquigarrow Y_{n+1}$ se décomposant en deux étapes

$$Y_n \xrightarrow{\text{absorption}} \widehat{Y}_n \xrightarrow{\text{évolution}} Y_{n+1}$$

Pour construire le mécanisme d'absorption, on considère à chaque instant n , une collection de v.a. indépendantes $(\epsilon_n(x))_{x \in \mathbb{Z}^d}$, de Bernoulli à valeurs dans $\{0, 1\}$, de paramètre $G(x)$. Sur l'évènement $\epsilon_n(x) = 0$, le site x devient une pure trappe hautement absorbante. Inversement, si $\epsilon_n(x) = 1$, le site x reste viable, et la particule peut le traverser sans encombres.

Le mécanisme d'évolution libre est analogue à celui de la marche aléatoire sur \mathbb{Z}^d présenté dans l'exemple 1.3.4. Pour le décrire, on se donne une mesure de probabilité p , sur l'ensemble des $2d$ vecteurs unitaires directionnels

$$\mathcal{U} = \{u \in \mathbb{Z}^d : |u| = 1\}$$

ainsi qu'une suite de vecteurs indépendants $(U_n)_{n \geq 1}$ de même loi p sur \mathcal{U} . On suppose que les suites de v.a. d'exploration U_n , et de v.a. d'absorption $\epsilon_n(x)$, sont indépendantes. On convient enfin que $\epsilon_n(c) = 0 = g(c)$.

Les transitions élémentaires de la chaîne sont définies récursivement de la façon suivante. Supposons que la particule se trouve à l'instant n sur un site $Y_n = x \in \mathbb{Z}^d$ (si $Y_n = c$, on pose $Y_{n+1} = c$).

1. Avec une probabilité $(1 - G(x))_2$, la particule est tuée, puis placée dans l'état cimetière. Dans ce cas, on pose $\widehat{Y}_n = c$. Dans le cas contraire, la particule reste active et l'on pose $\widehat{Y}_n = x$. Plus formellement, on a

$$\widehat{Y}_n = \epsilon_n(Y_n) Y_n + (1 - \epsilon_n(Y_n)) c$$

2. Comme il n'y a semble-t-il pas de vie après la mort, lorsque la particule a été tuée, elle reste inactive à l'instant suivant. Dans ce cas, on pose $Y_{n+1} = c$. Dans le cas contraire, la particule est encore active, et effectue un mouvement exploratoire analogue à celui d'une marche aléatoire sur \mathbb{Z}^d . Plus formellement, on pose dans ce dernier cas

$$Y_{n+1} = \widehat{Y}_n + U_{n+1}$$

Par construction, la suite

$$Y_0 \rightarrow \widehat{Y}_0 \rightarrow \dots \rightarrow Y_n \rightarrow \widehat{Y}_n \rightarrow Y_{n+1} \rightarrow \widehat{Y}_{n+1} \rightarrow \dots$$

forme une chaîne de Markov de transitions

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\widehat{Y}_n = y \mid Y_n = x) &= G(x) 1_x(y) + (1 - G(x)) 1_c(y) \\ \mathbb{P}(Y_{n+1} = z \mid \widehat{Y}_n = y) &= 1_c(y) 1_c(z) + 1_{\mathbb{Z}^d}(y) K(y, z)\end{aligned}$$

avec la probabilité de transition

$$K(y, z) = \sum_{u \in \mathcal{U}} p(u) 1_{y+u}(z)$$

La figure suivante montre deux réalisations de trajectoires absorbées dans des “poches” d’obstacles associés à des régions où le potentiel $G(x) < 1$. Lorsque $G(x) = 1$, la particule ne subit pas le mécanisme d’absorption, et évolue librement comme une marche aléatoire sur \mathbb{Z}^2 . Les traits pointillés témoignent du fait qu’une particule visitant une poche d’obstacles s’essouffle. Sa durée de vie diminue à chaque instant, en “subissant” les v.a. trappes de Bernoulli.

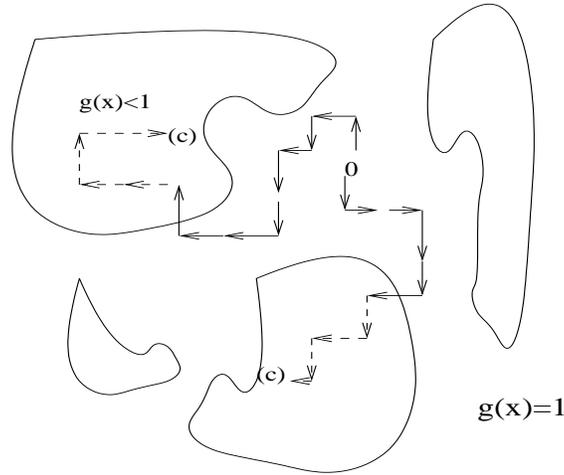


FIG. 2.3 – Particule absorbée dans \mathbb{Z}^2

Exercice 2.5.1 On note T l’instant d’absorption de la particule

$$T = \inf \{n \geq 0 : \widehat{Y}_n = c\} = \inf \{n \geq 0 : \epsilon_n(Y_n)_n = c\}$$

1. Montrer que

$$\mathbb{P}(T > n) = \mathbb{E} \left(\prod_{p=0}^n G_p(X_p) \right)$$

où X_n désigne une chaîne de Markov sur \mathbb{Z}^d de transitions de probabilités K , et de même loi que Y_0 sur \mathbb{Z}^d . Lorsque le potentiel est uniformément majoré $G(x) \leq e^{-\lambda}$, avec $\lambda > 0$, montrer que

$$\mathbb{P}(T > n) \leq e^{-\lambda(n+1)}$$

Interpréter ce résultat.

2. Vérifier que la loi d'une particule non absorbée est donnée pour toute fonction bornée f sur \mathbb{Z}^d par la formule renormalisée de Feynman-Kac

$$\mathbb{E}(f(Y_n) \mid T > n) = \frac{\mathbb{E}\left(f(X_n) \prod_{p=0}^n G_p(X_p)\right)}{\mathbb{E}\left(\prod_{p=0}^n G_p(X_p)\right)}$$

2.6 Dynamiques de population avec branchements

Dans la section 1.3.6 nous avons étudié des processus de branchement élémentaires dans lesquels chaque individu donne naissance à un certain nombre d'enfants. Ces modèles simplifiés sont assez éloignés de la réalité. Tout d'abord ils ne tiennent pas compte des explorations des individus dans l'espace. De plus, les taux de branchement sont totalement indépendants des régions plus ou moins accueillantes dans lesquelles se trouvent les populations.

Dans ce qui suit, nous allons essayer de raffiner ces modèles stochastiques pour rendre compte de ces deux paramètres, et essayer de coller au mieux à la réalité scientifique. Nous conviendrons que les individus évoluent à chaque instant n dans un espace d'état E_n . Les populations d'individus seront représentées par des vecteurs de E_n^p . Le paramètre entier $p \geq 0$ correspond à la taille des populations. Lorsque $p = 0$, on conviendra que l'espace d'état se réduit à un état cerceuil, ou cimetière $E_n^0 = \{c\}$. L'espace d'état du système est donc donné par l'ensemble

$$S_n = \cup_{p \geq 0} E_n^p$$

La dynamique d'exploration de chaque individu est associée à des transitions markoviennes M_n de E_{n-1} vers E_n . Les mécanismes de branchements dépendent de fonctions potentiel $G_n : E_N \rightarrow [0, \infty)$ représentant les différents degrés de "fertilité" du milieu. Plus précisément, un individu sur un site $x_n \in E_n$ donnera naissance à un nombre aléatoire d'enfants $g_n(x_n)$ avec

$$\mathbb{E}(g_n(x_n)) = G_n(x_n)$$

Pour illustrer ce modèle, on peut supposer que les populations évoluent dans le réseau du plan $E_n = \mathbb{Z}^2$ selon une marche aléatoire simple, et les variables aléatoires de

branchement sont de Bernoulli

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(g_n(x_n) = [G_n(x)] + 1) &= G_n(x_n) - [G_n(x_n)] \\ &= 1 - \mathbb{P}(g_n(x_n) = [G_n(x)])\end{aligned}$$

où $[a]$ désigne la partie entière d'un nombre $a \in [0, \infty)$. On peut aussi choisir des branchements poissonniens

$$\forall m \in \mathbb{N} \quad \mathbb{P}(g_n(x_n) = m) = \frac{G_n(x_n)^m}{m!} \exp(-G_n(x_n))$$

Pour définir plus formellement notre dynamique de population, il convient d'introduire une suite de variable $(g_n^i(x_n))_{i \geq 1}$ indépendantes, et de même loi que $g_n(x_n)$. On supposera de plus que les variables sur des sites distincts sont indépendantes.

Nous sommes enfin en mesure de construire récursivement le modèle. Initialement, la population \mathcal{X}_0 est formé d'un seul individu \mathcal{X}_0^1 dans l'état $x_0 \in E_0$

$$\mathcal{X}_0 = \mathcal{X}_0^1 = x_0 \in E_0^{p_0} = E_0^1$$

Cet individu donne naissance à

$$\widehat{p}_0 = g_0^1(\mathcal{X}_0^1)$$

enfants que l'on note

$$\widehat{\mathcal{X}}_0 = (\widehat{\mathcal{X}}_0^1, \dots, \widehat{\mathcal{X}}_0^{\widehat{p}_0}) \in E_0^{\widehat{p}_0}$$

Chacun d'entre eux explore aléatoirement l'espace $\widehat{\mathcal{X}}_0^i \rightsquigarrow \mathcal{X}_1^i$ selon la transition M_1 . Cette transition revient à simuler \widehat{p}_0 variables aléatoires \mathcal{X}_1^i de loi $M_1(\widehat{\mathcal{X}}_0^i, dx_1)$. Lorsque cette étape d'exploration est terminée, nous avons une population formée de

$$p_1 = \widehat{p}_0$$

individus. Cette transition peut s'exprimer de façon synthétique par la formule suivante :

$$\widehat{\mathcal{X}}_0 = (\widehat{\mathcal{X}}_0^1, \dots, \widehat{\mathcal{X}}_0^{\widehat{p}_0}) \rightsquigarrow \mathcal{X}_1 = (\mathcal{X}_1^1, \dots, \mathcal{X}_1^{p_1})$$

Durant l'étape de branchement suivante chaque individu \mathcal{X}_1^i donne naissance à $g_1^i(\mathcal{X}_1^i)$ enfants. À la fin de ce processus nous avons une population formée de \widehat{p}_1 individus

$$\widehat{\mathcal{X}}_1 = (\widehat{\mathcal{X}}_1^1, \dots, \widehat{\mathcal{X}}_1^{\widehat{p}_1}) \in E_1^{\widehat{p}_1} \quad \text{avec} \quad \widehat{p}_1 = \sum_{i=1}^{p_1} g_1^i(\mathcal{X}_1^i)$$

Chacun de ces individus explore aléatoirement l'espace E_2 selon la transition M_2 , etc.

$$\mathcal{X}_n = (\mathcal{X}_n^i)_{1 \leq i \leq p_n} \xrightarrow{\text{branchement}} \widehat{\mathcal{X}}_n = (\widehat{\mathcal{X}}_n^i)_{1 \leq i \leq \widehat{p}_n} \xrightarrow{\text{exploration}} \mathcal{X}_{n+1}$$

Si le système meurt au bout d'un certain temps n , nous avons $\widehat{p}_n = 0$. Dans ce cas, on pose

$$\widehat{\mathcal{X}}_p = \mathcal{X}_{p+1} = 0$$

pour tout les instants suivants $p \geq n$.

Exercice 2.6.1 1. Pour toutes fonctions bornées f_n sur E_n , exprimer les variables aléatoires $\sum_{i=1}^{\hat{p}_n} f_n(\hat{\mathcal{X}}_n^i)$ en fonction de p_n , \mathcal{X}_n , et des variables g_n^i (on utilisera la convention $\sum_{\emptyset} = 0$, lorsque la population est éteinte).

2. On considère les mesures empiriques aléatoires

$$s(x_n) =_{\text{def.}} \sum_{i=1}^p \delta_{x_n^i} \quad \text{pour chaque } x_n = (x_n^i)_{1 \leq i \leq d} \in E_n^p$$

Pour toute fonction bornée f_n sur E_n , calculer les moyennes conditionnelles

$$\mathbb{E}(s(\hat{\mathcal{X}}_n)(f_n) \mid \mathcal{X}_n) \quad \text{et} \quad \mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f_{n+1}) \mid \hat{\mathcal{X}}_n)$$

En déduire que

$$\mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f_{n+1}) \mid \mathcal{X}_n) = s(\mathcal{X}_n)(G_n M_{n+1}(f_{n+1}))$$

3. Vérifier que les premiers moments des dynamiques de population sont donnés par la formule suivante

$$\mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f_{n+1})) = \mathbb{E}_{x_0}(f_{n+1}(X_{n+1})) \prod_{k=0}^n G_k(X_k)$$

2.7 Algorithme génétique

En termes biologiques, les algorithmes génétiques représentent les dynamiques de population à nombre constant d'individus. Ces individus explorent des régions plus ou moins accueillantes, selon des mécanismes de mutation et de sélection. Les individus meurent ou donnent naissance à des enfants suivant la qualité de leur milieu, mesurée en terme d'une fonction potentiel.

Dans la section 3.5.3, nous montrerons que ces modèles génétiques sont une simple expression "microscopique" des modèles d'évolution-absorption étudiés dans la section 2.5.

Leurs interprétations sont à l'image des différents domaines d'applications décrits à la page 42.

Lorsque la fonction potentiel représente des **niveaux de sécurité**, tels des risques de collisions dans des aéroports, l'étape de sélection permet par exemple de choisir les configurations les moins sécurisées. L'étape de mutation consiste alors à explorer plus en profondeur les risques de collisions suivantes. Dans ce contexte, l'agorithme génétique peut s'interpréter comme des séquences d'évolutions probables conduisant à des collisions d'avion.

En pharmacologie, la fonction potentiel peut représenter les différents niveaux de leukocytes dans un organisme vivant. Dans ce contexte, l'étape de mutation représente les différentes possibilités d'évolution de ces niveaux. La sélection permet d'évaluer les chutes possibles, et les entrées dans des niveaux mortels. L'algorithme génétique correspondant permet de décrire les histoires possibles conduisant aux décès d'un organisme.

Enfin, dans **des modèles économiques**, les potentiels peuvent représenter des valeurs de portefeuilles. L'étape de mutation consiste à décrire les évolutions envisageables de ces quantités partir de niveaux donnés. L'étape de sélection permet de choisir ces propositions suivant leurs tendances à la hausse ou à la baisse. Le modèles génétiques correspondent alors à des évolutions de portefeuilles vers la ruine ou la fortune dans des milieux financiers.

Enfin, dans **les modèles d'apprentissage** développés en intelligence artificielle, les potentiels représentent la qualité d'une proposition émise. L'étape de mutation consiste tout d'abord à élaborer des séquences de propositions envisageables, plus ou moins bonnes. L'étape de sélection permet ensuite d'affiner le raisonnement, en choisissant les propositions les mieux adaptées pour compléter une action donnée, ou pour reconstruire une information partiellement observée.

En termes mathématiques, un algorithme génétique est une chaîne de Markov $X_n = (X_n^i)_{1 \leq i \leq N}$ sur un espace produit E^N . Pour fixer les idées on pourra supposer que l'espace d'état est donné par $E = \mathbb{Z}^d$ ou $E = \mathbb{R}^d$, avec $d \in \mathbb{N} - \{0\}$. Chacune des composantes X_n^i représente la position de l'individu de label i , avec $i = 1, \dots, N$.

L'évolution de cette chaîne se décompose en deux mécanismes bien distincts. Le premier correspond à une sélection des individus, selon un certain critère de qualité. Le second est une exploration pure de l'espace des états. En biologie, cette étape est souvent appelé mutation, par référence au fait que les codes génétiques des individus changent au cours du temps.

$$X_n = (X_n^i)_{1 \leq i \leq N} \xrightarrow{\text{sélection}} \hat{X}_n = (\hat{X}_n^i)_{1 \leq i \leq N} \xrightarrow{\text{mutation}} X_{n+1} = (X_{n+1}^i)_{1 \leq i \leq N}$$

2.7.1 Sélection/Adaptation

Pour décrire l'étape de sélection, on se fixe une fonction potentiel, strictement positive, G sur l'espace E . Une fois connue la configuration de la chaîne $X_n = (X_n^i)_{1 \leq i \leq N}$ au temps n , l'étape de sélection consiste à simuler N v.a. $(\widehat{X}_n^i)_{1 \leq i \leq N}$ indépendantes de même loi

$$\sum_{i=1}^N \frac{G(X_n^i)}{\sum_{j=1}^N G(X_n^j)} \delta_{X_n^i}$$

Autrement dit chaque v.a. \widehat{X}_n^k choisit l'une des valeurs X_n^i , avec la probabilité $\frac{G(X_n^i)}{\sum_{j=1}^N G(X_n^j)}$. On remarquera que ce procédé de sélection peut aussi s'interpréter comme **un mécanisme de naissances et morts**. Dans cette interprétation, les individus X_n^i disparaissent, ou donnent naissance à un certain nombre de copies.

Il existe divers variantes pour sélectionner les individus les mieux adaptés au potentiel G . Dans le cas où le potentiel G est à valeurs dans $[0, 1]$, il est bien plus naturel "d'accepter" chaque individu X_n^i avec une probabilité $G(X_n^i)$, et de le remplacer (avec une probabilité $[1 - G(X_n^i)]$) par un individu choisi avec la loi discrète

$$\sum_{i=1}^N \frac{G(X_n^i)}{\sum_{j=1}^N G(X_n^j)} \delta_{X_n^i}$$

Plus formellement, ce mécanisme de sélection est équivalent à poser pour chaque $i = 1, \dots, N$

$$\widehat{X}_n^i = \begin{cases} X_n^i & \text{avec probabilité } G(X_n^i) \\ \tilde{X}_n^i & \text{avec probabilité } 1 - G(X_n^i) \end{cases}$$

où \tilde{X}_n^i désigne une v.a. de loi $\sum_{j=1}^N \frac{G(X_n^j)}{\sum_{k=1}^N G(X_n^k)} \delta_{X_n^j}$.

Pour des fonctions potentiel pouvant s'annuler sur certaines régions de l'espace, il est possible que tous les individus aient des potentiels nul. Dans cette situation, l'algorithme est stoppé.

2.7.2 Mutation/Exploration

Durant la phase de mutation, les individus sélectionnés explorent l'espace indépendamment les uns des autres, selon des transitions de probabilités élémentaires $M(x, y)$. Autrement dit, nous avons

$$\widehat{X}_n^i \rightsquigarrow X_{n+1}^i$$

où X_{n+1}^i désigne une v.a. de loi $M(\widehat{X}_{n-1}^i, \cdot)$.

Plus formellement, nous avons

$$\mathbb{P}(X_{n+1}^1 \in dx^1, \dots, X_{n+1}^N \in dx^N) = M(\widehat{X}_{n-1}^1, dx^1) \dots M(\widehat{X}_{n-1}^N, dx^N)$$

À titre d'exemple, si $M(x, y)$ désigne la matrice de transition d'une marche aléatoire sur \mathbb{Z}^d , on peut réaliser dynamiquement ces explorations locales en posant

$$X_{n+1}^i = \widehat{X}_{n-1}^i + U_{n+1}^i$$

où U_{n+1}^i désigne une suite de v.a. indépendantes de même loi p , sur l'ensemble des vecteurs unitaires directionnels $\mathcal{U} = \{u \in \mathbb{Z}^d : |u| = 1\}$.

Un exemple schématique d'évolution de $N = 4$ individus est représenté dans la figure suivante. Les nombres entiers entre parenthèse correspondent au nombre d'individus sur le site en question, après l'étape de sélection.

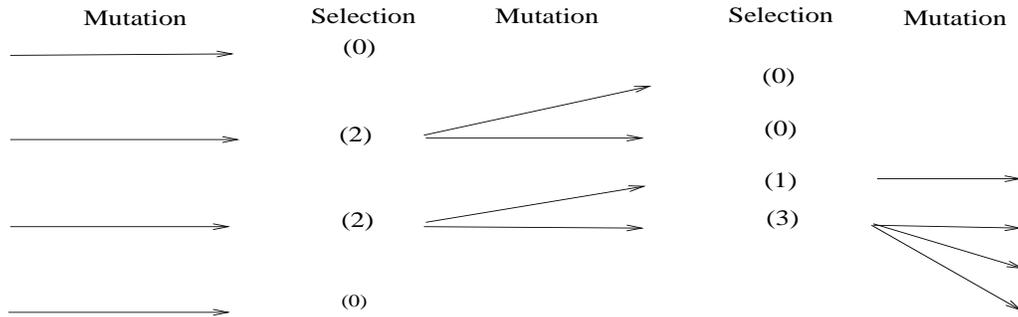


FIG. 2.4 – Algorithme génétique ($N = 4$)

Exercice 2.7.1 *Décrire mathématiquement, et schématiquement, l'algorithme génétique sur \mathbb{Z} associé à la fonction de potentiel indicatrice $G(x) = 1_{[-L,L]}$, avec $L \geq 1$. On conviendra que les mutations sont données par les transitions d'une marche aléatoire sur \mathbb{Z} , et l'on initialisera les individus en l'origine.*

Exercice 2.7.2 *Décrire l'algorithme génétique sur \mathbb{R} associé à des mutations gaussiennes*

$$M(x, dy) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2}(y-x)^2 \right\} dy$$

et un potentiel quadratique centré autour d'un point $a \in \mathbb{R}$

$$G(x) = \exp \left\{ -\frac{1}{2}(x - a)^2 \right\}$$

2.8 Modèles d'arbres généalogiques

2.8.1 Modèles non homogènes

L'algorithme génétique décrit dans la section précédente peut être étendu de façon naturelle à des espaces d'états E_n dépendants du paramètre temporel $n \in \mathbb{N}$. Dans ce contexte, les individus X_n^i vivent à chaque instant n dans l'espace E_n . Les sélections s'effectuent dans ces mêmes espaces, tandis que les mutations s'expriment comme des passages aléatoires d'un état de E_n vers un nouvel état dans E_{n+1} .

Plus formellement, les populations d'individus sont données par des N -uplets

$$X_n = (X_n^i)_{1 \leq i \leq N} \in E_n^N \quad \text{et} \quad \widehat{X}_n = (\widehat{X}_n^i)_{1 \leq i \leq N} \in E_n^N$$

où E_n^N désigne l'espace produit $(E_n \times \dots \times E_n)$, avec N termes.

Dans ce contexte, les transitions de sélection/mutations s'expriment entre des états non homogènes :

$$X_n \in E_n^N \xrightarrow{\text{sélection}} \widehat{X}_n \in E_n^N \xrightarrow{\text{mutation}} X_{n+1} \in E_{n+1}^N$$

Supposons que les sélections à chaque instant n soient aussi dictées par des potentiels non homogènes

$$G_n : x_n \in E_n \mapsto G_n(x_n) \in [0, 1]$$

Dans ce cas, le mécanisme de sélection dans E_n , s'exprime sous la forme suivante :

$$\widehat{X}_n^i = \begin{cases} X_n^i & \text{avec proba } G_n(X_n^i) \\ \widetilde{X}_n^i & \text{avec proba } 1 - G_n(X_n^i) \end{cases}$$

où \widetilde{X}_n^i désigne une v.a. de loi

$$\sum_{j=1}^N \frac{G_n(X_n^j)}{\sum_{k=1}^N G_n(X_n^k)} \delta_{X_n^j}$$

Les individus ainsi sélectionnés \widehat{X}_n^i vivent dans l'espace E_n .

Durant la mutation, ces individus passent de l'état E_n vers un nouvel état E_{n+1} , selon des transitions de probabilités $M_{n+1}(x_n, dx_{n+1})$ de E_n vers E_{n+1} . Autrement dit, nous avons

$$\widehat{X}_n^i (\in E_n) \rightsquigarrow X_{n+1}^i (\in E_{n+1})$$

où X_{n+1}^i désigne une v.a. de loi $M_{n+1}(\widehat{X}_{n-1}^i, \cdot)$. Ces nouveaux individus sont alors sélectionnés en fonction d'un potentiel G_{n+1} sur E_{n+1} , puis ils mutent de E_{n+1} vers E_{n+2} selon une transition markovienne de E_{n+1} vers E_{n+2} , etc.

2.8.2 Modèles trajectoriels

Dans ce qui précède, nous n'avons pas précisé la nature des espaces E_n , ni a fortiori celle des transitions $M_n(x_{n-1}, dx_n)$. Tout ceci semble donc bien abstrait! Revenons donc sur terre en supposant que les espaces E_n sont donnés par des espaces produits

$$E_n = \underbrace{E' \times \dots \times E'}_{(n+1)\text{-fois}}$$

où E' désigne un ensemble quelconque, suffisamment réguliers. Pour fixer les idées, on pourra supposer que $E = \mathbb{Z}^d$, ou $E = \mathbb{R}^d$. On conviendra que les points de E_n sont donnés par des $(n+1)$ -uplets représentant des trajectoires de longueur n dans l'espace E'

$$x_n = (x'_0, \dots, x'_n) \in E_n = (E')^{n+1}$$

L'algorithme génétique précédent est, à chaque étape $n \in \mathbb{N}$, formé de N variables aléatoires trajectorielles, à valeurs dans E_n , que l'on notera

$$X_n^i = (X_{0,n}^i, X_{1,n}^i, \dots, X_{n,n}^i) \in E_n = (E')^{n+1}, \quad 1 \leq i \leq N.$$

et

$$\widehat{X}_n^i = (\widehat{X}_{0,n}^i, \widehat{X}_{1,n}^i, \dots, \widehat{X}_{n,n}^i) \in E_n = (E')^{n+1}, \quad 1 \leq i \leq N.$$

Chacun des individus X_n^i , et \widehat{X}_n^i représente un chemin dans E' de l'origine jusqu'au temps n .

Il est important de souligner que la population initiale

$$X_0^i = X_0'^i \in E_0 = E' \quad \text{avec} \quad 1 \leq i \leq N$$

est tout simplement formée de N variables aléatoires à valeurs dans E' .

Sélection trajectorielle :

Dans notre cadre trajectorien, le mécanisme de sélection, peut s'interpréter comme une sélection de trajectoires, en fonction des différents potentiels

$$G_n(X_n^i) = G_n(X_{0,n}^i, X_{1,n}^i, \dots, X_{n,n}^i)$$

L'expression de cette transition reste inchangée. Nous avons à nouveau

$$\widehat{X}_n^i = \begin{cases} X_n^i & \text{avec proba } G_n(X_n^i) \\ \widetilde{X}_n^i & \text{avec proba } 1 - G_n(X_n^i) \end{cases}$$

où $\widetilde{X}_n^i = (\widehat{X}_{0,n}^i, \widehat{X}_{1,n}^i, \dots, \widehat{X}_{n,n}^i)$ désigne une v.a. de loi

$$\sum_{j=1}^N \frac{G_n(X_n^j)}{\sum_{k=1}^N G_n(X_n^k)} \delta_{X_n^j} = \sum_{j=1}^N \frac{G_n(X_{0,n}^j, \dots, X_{n,n}^j)}{\sum_{k=1}^N G_n(X_{0,n}^k, \dots, X_{n,n}^k)} \delta_{(X_{0,n}^j, \dots, X_{n,n}^j)}$$

Les trajectoires ainsi sélectionnés \widehat{X}_n^i vivent désormais dans l'espace de chemins $E_n = (E')^{n+1}$.

Mutation trajectorielle :

L'étape de mutation dépend uniquement de la nature des transitions $M_{n+1}(x_n, dx_{n+1})$ de E_n dans E_{n+1} . Supposons que ces dernières correspondent aux transitions de probabilités d'un processus historique associé à une évolution markovienne sur E' .

Dans cette situation, on rappelle que ces transitions $M_{n+1}(x_n, dy_{n+1})$ s'expriment sous la forme suivante :

$$M_{n+1}((x'_0, \dots, x'_n), d(y'_0, \dots, y'_{n+1})) = \delta_{(x'_0, \dots, x'_n)}(d(y'_0, \dots, y'_n)) M'_{n+1}(y'_n, dy'_{n+1})$$

M'_{n+1} est une transition de Markov de E' vers lui même. Autrement dit, simuler une variable aléatoire trajectorielle de loi

$$M_{n+1}((x'_0, \dots, x'_n), d(y'_0, \dots, y'_{n+1}))$$

revient à conserver tout d'abord le segment de trajectoire

$$x_n = (x'_0, \dots, x'_n)$$

On lui adjoint ensuite une extension élémentaire aléatoire de loi $M'_{n+1}(x'_n, dy'_{n+1})$

$$x'_n \rightsquigarrow y'_{n+1}$$

Durant l'étape de mutation correspondante

$$\widehat{X}_n^i = \underbrace{\left(\widehat{X}_{0,n}^i, \dots, \widehat{X}_{n,n}^i \right)}_{\downarrow} \in E_n^N$$

$$X_{n+1}^i = \left(\underbrace{\left(X'_{0,n+1}, \dots, X'_{n,n+1} \right)}, X'_{n+1,n+1} \right) \in E_{n+1}^N$$

chaque chemin s'étend selon un déplacement élémentaire de loi M'_{n+1} , c'est à dire

$$X_{n+1}^i = \left(\underbrace{\left[X'_{0,n+1}, \dots, X'_{n,n+1} \right]}, X'_{n+1,n+1} \right) \in E_{n+1} = (E')^{n+2}$$

$$\parallel$$

$$= \left(\underbrace{\left[\widehat{X}_{0,n}^i, \dots, \widehat{X}_{n,n}^i \right]}, X'_{n+1,n+1} \right) = \left(\widehat{X}_n^i, X'_{n+1,n+1} \right)$$

avec une variable aléatoire $X'_{n+1,n+1}$ de loi $M'_{n+1}(\widehat{X}_{n,n}^i, \cdot)$.

À titre d'exemple, dans le cas où M'_{n+1} désigne la matrice de transition d'une marche aléatoire sur $E' = \mathbb{Z}^d$, on peut réaliser dynamiquement ces explorations locales en posant

$$X'_{n+1,n+1} = \widehat{X}_{n,n}^i + U_{n+1}^i$$

où U_{n+1}^i désigne une suite de v.a. indépendantes de même loi p , sur l'ensemble des vecteurs unitaires directionnels

$$\mathcal{U} = \{u \in \mathbb{Z}^d : |u| = 1\}$$

Lignes ancestrales :

L'algorithme génétique trajectorien décrit ci-dessus correspond bien à une évolution d'arbres généalogiques.

Dans cette interprétation, chaque trajectoire

$$X_n^i = (X_{0,n}^i, X_{1,n}^i, \dots, X_{n,n}^i) \in E_n = (E')^{n+1}$$

représente la ligne ancestrale de l'individu courant $X_{n,n}^i$ à la date n . Les coordonnées $X_{p,n}^i$, avec $0 \leq p \leq n$, correspondent aux différents ancêtres de cet individu, à chaque niveau temporel $0 \leq p \leq n$.

Dans ce contexte, $X_{0,n}^i$ représente l'ancêtre initial, $X_{1,n}^i$ sa première descendance, $X_{2,n}^i$ sa seconde, etc. Dans le modèle général que nous avons développé, les disparitions et les sélections de lignes ancestrales dépendent de la qualité de la trajectoire de descendance complète. Les différents degrés d'adaptation d'une lignée complète

$$x_n = (x'_0, \dots, x'_n) \in E_n$$

sont mesurés par une fonction potentiel $G_n(x'_0, \dots, x'_n)$. Lorsque ces fonctions ne dépendent que des composantes terminales, c'est à dire lorsque l'on a

$$G_n(x'_0, \dots, x'_n) = G'_n(x'_n),$$

la sélection des lignes ancestrales ne dépend que de la qualité d'adaptation du **dernier descendant**. Dans cette situation, nous laissons le soin au lecteur de se convaincre que ce modèle trajectorien correspond à l'arbre généalogique d'une population d'individus explorant l'espace E' selon M'_n , et s'adaptant en fonction des potentiels de sélection G'_n .

2.9 Chaînes renforcées

Ces modèles de renforcement sont associés à des évolutions aléatoires où chaque transition dépend de la mesure d'occupation des sites visités dans le passé. Ces processus permettent de représenter des stratégies humaines d'exploration de sites comme des rues, des magasins, des restaurants, ou tout autre endroits d'une ville. Dans ce contexte, un site donné est d'autant plus attractif s'il répond à un certain critère de qualité, ou lorsqu'il a été déjà visité de nombreuses fois par le passé!

Le critère de qualité est représenté par une fonction potentiel $G : E \rightarrow [0, 1]$, sur un espace d'états E . Les valeurs de G en un site x sont d'autant plus grandes que le site est attrayant. Ainsi, notre explorateur se trouvant en $X_n = x$, au temps n , choisit d'y rester avec une probabilité $G(x)$, soit préfère retourner vers l'un des sites précédemment visité X_0, \dots, X_{n-1} . Dans cette situation, il choisit un nouveau site avec une probabilité

$$\sum_{p=0}^{n-1} \frac{G(X_p)}{\sum_{q=0}^{n-1} G(X_q)} \delta_{X_p}$$

Cette sélection aléatoire peut être vue comme une transition élémentaire

$$X_n \rightsquigarrow \widehat{X}_n$$

de probabilités de transitions

$$G(X_n) \delta_{X_n} + (1 - G(X_n)) \sum_{p=0}^{n-1} \frac{G(X_p)}{\sum_{q=0}^{n-1} G(X_q)} \delta_{X_p}$$

Partant du site sélectionné \widehat{X}_n , l'individu effectue une nouvelle exploration de la région $\widehat{X}_n \rightsquigarrow X_{n+1}$, selon une transition de probabilité M_{n+1} . Autrement dit, nous avons

$$\mathbb{P}(X_{n+1} \in dy \mid \widehat{X}_n = x) = M_{n+1}(x, dy)$$

Cette transition M_n peut, par exemple, représenter une exploration uniforme des sites voisins à \widehat{X}_n .

Le lecteur aura certainement noté que X_n n'est pas une chaîne de Markov, mais le processus historique possède toujours la propriété markovienne.

Exercice 2.9.1 *Examiner la situation où le potentiel est constant $G(x) = \epsilon$, avec $\epsilon \in [0, 1]$. Établir une analogie avec la loi des grands nombres.*

2.10 Algorithme de Robbins-Monro

2.10.1 Introduction

Cet algorithme aléatoire permet d'étudier les lignes de niveaux

$$U_a = \{x \in E : U(x) = a\}, \quad a \in \mathbb{R}^d$$

d'une fonction $U : E \rightarrow \mathbb{R}^d$ sur un espace d'états donné E .

Potentiel gradient convexe

Cet exemple correspond au potentiel gradient $U(x) = \nabla V(x)$ d'une fonction $V : E = \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^1 et strictement convexe. Dans ce cas, l'ensemble

$$U_0 = \{x \in \mathbb{R}^2 : \nabla V(x) = 0\}$$

se résume à l'unique minimum x_0 de V .

Fonction de répartition

Un autre exemple plus probabiliste consiste à prendre pour U la fonction de répartition d'une variable aléatoire réelle Y

$$U : x \in E = \mathbb{R} \mapsto U(x) = \mathbb{P}(Y \leq x) = \mathbb{E}(1_{Y \leq x}).$$

Dans ce contexte, l'ensemble $U_{1/2} = \{x \in \mathbb{R}^d : \mathbb{P}(Y \leq x) = 1/2\} = \{x_{1/2}\}$ est à nouveau réduit à un point $x_{1/2}$, appelé le médiane de la distribution de Y .

2.10.2 Description du modèle

Supposons désormais qu'il n'existe qu'un seul point $x_a \in \mathbb{R}^d$ prenant la valeur $U(x_a) = a$, et pour chaque $x \neq x_a$, on a

$$\langle x - x_a, U(x) - U(x_a) \rangle > 0. \quad (2.4)$$

Lorsque $d = 1$, l'inégalité (2.4) indique que les nombres $(x - x_a)$ et $(U(x) - U(x_a))$ ont les mêmes signes. Dans cette situation, la relation (2.4) se traduit par l'une des équivalences suivantes

$$\begin{aligned} x < x_a &\iff U(x) - U(x_a) < 0 \\ x > x_a &\iff U(x) - U(x_a) > 0. \end{aligned}$$

Un algorithme déterministe naturel de recherche du point $x_a \in \mathbb{R}^d$ est donc défini en posant

$$X_{n+1} - X_n = \gamma_n (U(x_a) - U(X_n)) = \gamma_n (a - U(X_n))$$

On choisit $X_0 \in \mathbb{R}^d$, et on utilise une suite de pas positifs $\gamma_n \downarrow 0$ afin de stopper l'évolution de la suite X_n . Les schémas de décroissances de γ_n pour lesquels $\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = x_a$ doivent satisfaire les deux conditions suivantes

$$\sum_n \gamma_n = \infty \quad \text{et} \quad \sum_n \gamma_n^2 < \infty$$

L'introduction de l'aléatoire dans les algorithmes déterministes précédents ne se justifie que dans les deux situations suivantes. Dans les deux cas, le choix de schémas de décroissances de γ_n vérifiant les conditions précédentes entraîne que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = x_a$$

2.10.3 Applications

Évaluation indirecte bruitée

L'évaluation de la fonction $U : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ ne peut être faite directement sinon par des mesures approchées. Plus précisément, chaque tentative d'évaluation de $U(x)$ en un point $x \in \mathbb{R}^d$, donne une valeur approximative

$$x \longrightarrow \boxed{\text{capteur/mesure/évaluation}} \longrightarrow U(x) + \epsilon$$

où ϵ représente une perturbation aléatoire à valeurs dans \mathbb{R}^d . La nature statistique de ces perturbations de mesures dépend de l'instrument de mesure utilisé.

Pour construire l'algorithme de Robbins-Monro, on remplace simplement à chaque étape n la valeur inconnue $U(X_n)$ par son observation bruitée

$$Y_{n+1} =_{\text{déf.}} U(X_n) + \epsilon_{n+1}.$$

La perturbation ϵ_n désigne ici une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{R}^d de loi donnée. Cela conduit à l'algorithme stochastique

$$\begin{aligned} X_{n+1} - X_n &= \gamma_n (U(x_a) - U(X_n)) - \gamma_n \epsilon_{n+1} \\ &= \gamma_n (U(x_a) - Y_{n+1}) = \gamma_n (a - Y_{n+1}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Formulation intégrale

La fonction $U : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ est de forme intégrale

$$U(x) = \int_E \mathcal{U}(x, y) \mu(dy)$$

où μ désigne une distribution de probabilité donnée sur un espace auxiliaire E , et

$$\mathcal{U} : \mathbb{R}^d \times E \longrightarrow \mathbb{R}^d$$

est une fonction bornée. De telles intégrales étant bien souvent difficilement calculables analytiquement, il est parfois plus aisé de simuler une variable aléatoire Z de loi μ sur E . On remarquera que U peut alors s'écrire

$$U(x) = \mathbb{E}(\mathcal{U}(x, Z))$$

Pour construire l'algorithme de Robbins-Monro correspondant à cette situation, on remplace à chaque étape n la valeur difficilement accessible $U(X_n)$ par sa "valeur simulée" $\mathcal{U}(X_n, Z_{n+1})$, où $(Z_n)_{n \geq 1}$ désigne une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi que Z .

Ceci nous conduit à la chaîne de Markov suivante

$$X_{n+1} - X_n = \gamma_n (U(x_a) - \mathcal{U}(X_n, Z_{n+1})) = \gamma_n (a - \mathcal{U}(X_n, Z_{n+1}))$$

où $(Z_n)_{n \geq 1}$ désigne une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi que Z .

2.11 Filtre de Kalman-Bucy

2.11.1 Introduction

Le filtre de Kalman-Bucy est sans nul doute l'algorithme stochastique le plus couramment utilisé en ingénierie, et plus particulièrement en traitement du signal. Le problème du filtrage consiste à estimer les lois conditionnelles des états d'un signal par rapport à une séquence d'observations partielles et bruitées. Plus précisément, les valeurs exactes du X_n ne sont pas directement observées. Néanmoins, Un capteur de mesure nous transmet à chaque étape n certaines informations Y_n sur la valeur de X_n :

$$\begin{array}{ccccccc} X_0 & \rightarrow & X_1 & \rightarrow & X_2 & \rightarrow & X_3 & \rightarrow & \dots & \text{signal} \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \dots & \\ Y_0 & & Y_1 & & Y_2 & & Y_3 & & \dots & \text{observation} \end{array}$$

Le but du filtrage est alors de calculer les lois conditionnelles

$$\text{Loi}(X_n | Y_0, \dots, Y_{n-1}) \quad \text{et} \quad \text{Loi}(X_n | Y_0, \dots, Y_n)$$

ou plus généralement la distribution conditionnelle de toute la trajectoire

$$\text{Loi}((X_0, \dots, X_n) | Y_0, \dots, Y_n)$$

La première distribution est appelée **le prédicteur optimal**, la seconde porte le nom de **filtre optimal**.

2.11.2 Description du modèle

Dans le cadre du filtrage linéaire gaussien, le couple signal/observation (X_n, Y_n) est représenté par une chaîne de Markov à valeurs dans \mathbb{R}^{p+q} , et définie récursivement par

les équations suivantes :

$$\begin{cases} X_n = A_n X_{n-1} + a_n + B_n W_n, & n \geq 1 \\ Y_n = C_n X_n + c_n + D_n V_n, & n \geq 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

Les séquences W_n , et V_n représentent des suites de variables aléatoires indépendantes à valeurs dans \mathbb{R}^{d_w} , et dans \mathbb{R}^{d_v} . On convient que ces séquences sont indépendantes de la variable initiale X_0 . Les lettres (A_n, B_n, C_n, D_n) , et (a_n, c_n) représentent respectivement des matrices, et des vecteurs déterministes de dimensions appropriées.

Les variables W_n , et V_n sont supposées gaussiennes, centrées, et de matrices de covariance respectives

$$R_n^w = \mathbb{E}(W_n W_n') \quad \text{et} \quad R_n^v = \mathbb{E}(V_n V_n')$$

On suppose enfin que la variable initiale X_0 est une variable gaussienne de moyenne et de matrice de covariance données :

$$\hat{X}_0^- = \mathbb{E}(X_0) \quad \text{and} \quad \hat{P}_0^- = \mathbb{E}((X_0 - \mathbb{E}(X_0)) (X_0 - \mathbb{E}(X_0))')$$

Ces hypothèses sur la linéarité des modèles, et la nature gaussienne de toutes les variables en jeu n'est pas anodine. Les mondes linéaires et gaussiens sont très stables : toute opération linéaire et tout type de conditionnement entre variables ont à nouveau une nature gaussienne. Il est donc impossible d'échapper à ces trous noirs gaussiens par des opérations linéaires ou par des conditionnements !

On notera par la suite $\mathcal{N}(m, R)$ la mesure gaussienne sur \mathbb{R}^d de moyenne $m \in \mathbb{R}^d$, et de matrice de covariance $R \in \mathbb{R}^{d \times d}$

$$\mathcal{N}(m, R)(dx) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \sqrt{|R|}} \exp[-2^{-1}(x - m)R^{-1}(x - m)'] dx$$

D'après la discussion précédente le prédicteur et le filtre optimal sont des mesures gaussiennes

$$\text{Loi}(X_n | Y_0, \dots, Y_{n-1}) = \mathcal{N}(\hat{X}_n^-, P_n^-) \quad \text{et} \quad \text{Loi}(X_n | Y_0, \dots, Y_n) = \mathcal{N}(\hat{X}_n, P_n)$$

Les moyennes (\hat{X}_n^-, \hat{X}_n) correspondent aux espérances conditionnelles

$$\hat{X}_n^- = \mathbb{E}(X_n | Y_0, \dots, Y_{n-1}) \quad \text{et} \quad \hat{X}_n = \mathbb{E}(X_n | Y_0, \dots, Y_n)$$

Les matrices (P_n^-, P_n) représentent les matrices de covariance d'erreurs entre les estimateurs conditionnels (\hat{X}_n^-, \hat{X}_n) et le signal X_n observé, c'est à dire

$$P_n^- = \mathbb{E}([X_n - \hat{X}_n^-][X_n - \hat{X}_n^-]') \quad \text{et} \quad P_n = \mathbb{E}([X_n - \hat{X}_n][X_n - \hat{X}_n]')$$

2.11.3 Les équations du filtrage

Examinons brièvement le processus d'apprentissage du filtre.

À chaque instant n , une observation \mathbf{Y}_n est délivrée par un capteur de mesure. Le prédicteur optimal est alors mis à jour. Cette transition est parfois appelée étape de correction. Elle consiste à rajouter une observation dans la formule de conditionnement

$$\text{Loi}(X_n \mid Y_0, \dots, Y_{n-1}) \xrightarrow{\text{mise à jour}} \text{Loi}(X_n \mid Y_0, \dots, Y_{n-1}, \mathbf{Y}_n)$$

Une fois la mise à jour effectuée, le filtre optimal entre dans une étape de prédiction. Cette étape revient à prédire le mieux possible les valeurs de X_{n+1} , avant de recevoir et traiter la nouvelle information Y_{n+1}

$$\text{Loi}(X_n \mid Y_0, \dots, Y_n) \xrightarrow{\text{prédiction}} \text{Loi}(X_{n+1} \mid Y_0, \dots, Y_n)$$

En résumé, les lois conditionnelles gaussiennes évoluent selon deux étapes d'apprentissage naturelles

$$\mathcal{N}(\hat{X}_n^-, P_n^-) \xrightarrow{\text{mise à jour}} \mathcal{N}(\hat{X}_n, P_n) \xrightarrow{\text{prédiction}} \mathcal{N}(\hat{X}_{n+1}^-, P_{n+1}^-)$$

L'idée géniale de Kalman et de Bucy a été de poursuivre d'un cran ce raisonnement naturel, et de montrer que les paramètres recherchés pouvaient à nouveau se calculer récursivement

$$(\hat{X}_n^-, P_n^-) \xrightarrow{\text{mise à jour}} (\hat{X}_n, P_n) \xrightarrow{\text{prédiction}} (\hat{X}_{n+1}^-, P_{n+1}^-)$$

L'étape de prédiction est relativement simple. En effet, il suffit de remarquer que l'on a

$$\begin{aligned} \hat{X}_{n+1}^- &= \mathbb{E}(A_{n+1}X_n + a_{n+1} + B_{n+1}W_{n+1} \mid (Y_0, \dots, Y_n)) \\ &= A_{n+1}\hat{X}_n + a_{n+1} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} P_{n+1}^- &= \mathbb{E}((A_{n+1}(X_n - \hat{X}_n) + B_{n+1}W_{n+1})(A_{n+1}(X_n - \hat{X}_n) + B_{n+1}W_{n+1})') \\ &= A_{n+1} P_n A_{n+1}' + B_{n+1} R_{n+1}^w B_{n+1}' \end{aligned}$$

En résumé, l'étape de prédiction est définie par les formules

$$\begin{aligned}\widehat{X}_{n+1}^- &= A_{n+1}\widehat{X}_n + a_{n+1} \\ P_{n+1}^- &= A_{n+1} P_n A_{n+1}' + B_{n+1} R_{n+1}^w B_{n+1}'\end{aligned}$$

L'étape de mise à jour est essentiellement basée sur le fait suivant, que nous admettrons. La différence $(\widehat{X}_n - \widehat{X}_n^-)$ peut s'écrire sous la forme

$$\widehat{X}_n - \widehat{X}_n^- = \mathbf{G}_n (Y_n - \widehat{Y}_n^-)$$

avec une matrice de gain \mathbf{G}_n convenable, et

$$\widehat{Y}_n^- = \mathbb{E}(Y_n | (Y_0, \dots, Y_{n-1})) = C_n \widehat{X}_n^- + c_n$$

Pour calculer la matrice \mathbf{G}_n , on commence par observer que

$$\mathbb{E}((X_n - \widehat{X}_n)(Y_n - \widehat{Y}_n^-)') = 0$$

et

$$(Y_n - \widehat{Y}_n^-) = C_n(X_n - \widehat{X}_n^-) + D_n V_n$$

Ceci permet de montrer que l'on a

$$\mathbb{E}((X_n - \widehat{X}_n^-)(Y_n - \widehat{Y}_n^-)') = \mathbf{G}_n \mathbb{E}((Y_n - \widehat{Y}_n^-)(Y_n - \widehat{Y}_n^-)')$$

et

$$\begin{aligned}\mathbb{E}((X_n - \widehat{X}_n^-)(Y_n - \widehat{Y}_n^-)') &= \mathbb{E}((X_n - \widehat{X}_n^-)(C_n[X_n - \widehat{X}_n^-] + V_n)') \\ &= P_n^- C_n'\end{aligned}$$

On en déduit alors aisément la formule

$$\mathbf{G}_n = P_n^- C_n' (C_n P_n^- + D_n R_n^v D_n')^{-1}$$

Enfin, en utilisant la décomposition

$$X_n - \widehat{X}_n = (X_n - \widehat{X}_n^-) + (\widehat{X}_n^- - \widehat{X}_n)$$

et par des arguments de symétrie, on obtient

$$\begin{aligned}P_n &= P_n^- - \mathbb{E}((\widehat{X}_n^- - \widehat{X}_n)(\widehat{X}_n^- - \widehat{X}_n)') \\ &= P_n^- - \mathbf{G}_n \mathbb{E}((Y_n - \widehat{Y}_n^-)(Y_n - \widehat{Y}_n^-)') \mathbf{G}_n' \\ &= P_n^- - \mathbf{G}_n C_n P_n^-\end{aligned}$$

En résumé, l'étape de correction est définie par les formules

$$\begin{aligned}\hat{X}_n &= \hat{X}_n^- + \mathbf{G}_n (Y_n - [C_n \hat{X}_n^- + c_n]) \\ P_n &= P_n^- - \mathbf{G}_n C_n P_n^-\end{aligned}$$

avec la matrice de gain \mathbf{G}_n déterminée par l'équation suivante :

$$\mathbf{G}_n = P_n^- C_n' (C_n P_n^- + D_n R_n^v D_n')^{-1}$$

Chapitre 3

Algorithmes stochastiques

3.1 Introduction

Les algorithmes stochastiques sont des techniques de simulation numériques de chaînes de Markov, visant à résoudre des problèmes d'optimisation ou d'estimation complexes. À la différence de leurs homologues déterministes, ces méthodes de recherche aléatoire permettent d'explorer des espaces de grandes dimensions, tout en évitant certains pièges, tels des puits de minima locaux en optimisation globale.

La plupart des modèles que nous allons découvrir sont fondés sur des principes physiques ou biologiques. En d'autres termes, ces algorithmes miment des processus d'évolution ou d'apprentissage dictés par des règles physiques ou issues de l'évolution naturelle.

Ces modèles se formalisent mathématiquement par la donnée d'une chaîne de Markov. Leur convergence vers la solution du problème étudié s'exprime alors le plus souvent par des phénomènes de moyennisation **asymptotique en temps long**, ou par **des moyennisations spatiales** pour les algorithmes fondées sur des dynamiques de population. Ces deux propriétés probabilistes sont le fruit de lois des grands nombres, ou de propriétés ergodiques des systèmes. Ces deux notions seront examinées brièvement dans la section 3.2.

Comme nous l'avons souligné plus haut, les algorithmes stochastiques sont essentiellement des techniques de simulation de lois de probabilités complexes sur des espaces de grandes dimensions. Ces mesures peuvent être rangées en eux classes : **les mesures de Boltzmann-Gibbs**, et **les mesures de Feynman-Kac**. Les premières sont définies sur des espaces homogènes E , en terme d'une fonction énergie $U : E \rightarrow [0, \infty)$, un paramètre de température $\beta \in [0, \infty)$, et d'une mesure de référence λ sur E :

$$\mu_\beta(dx) = \frac{1}{Z_\beta} \exp[-\beta U(x)] \lambda(dx) \quad \text{avec} \quad Z_\beta = \lambda(\exp[-\beta U]).$$

Dans ce contexte, l'espace d'état est souvent difficile à parcourir, et les techniques de

simulation élémentaires de type acceptation-rejet sont prises en défaut. En pratique, les stratégies de simulation utilisées sont fondées sur des explorations markoviennes et locales de ces espaces. Le choix de ces chaînes de Markov exploratoires est souvent dictée par la donnée de topologies de voisinages naturelles. Le problème consiste alors à trouver une chaîne convergeant le plus rapidement possible vers la mesure d'équilibre recherchée. Nous examinerons dans les sections, section 3.4.3, et section 3.4.5, les deux chaînes de Markov les plus utilisées :

- L'algorithme de Metropolis Hastings.
- L'échantillonneur de Gibbs.

Les mesures de Feynman-Kac sont des mesures de type Boltzmann-Gibbs ayant une structure multiplicative particulière. Elles s'expriment en terme d'une séquence de potentiels $G_n : E_n \rightarrow [0, \infty)$ sur des espaces non-homogènes E_n , et de lois trajectorielles \mathbb{P}_n sur des espaces de trajectoires $(E_0 \times \dots \times E_n)$, selon la formule synthétique suivante :

$$\frac{1}{\mathcal{Z}_n} \left\{ \prod_{p=0}^n G_p(x_p) \right\} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

La quantité \mathcal{Z}_n représente une constante de normalisation

$$\mathcal{Z}_n = \int \left\{ \prod_{p=0}^n G_p(x_p) \right\} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

En physique, \mathcal{Z}_n est parfois appelée l'énergie libre, ou encore la fonction de partition du système.

En général, les distributions \mathbb{P}_n correspondent aux lois des trajectoires d'une chaîne de Markov X_n de loi initiale η_0 sur E_0 , et de transitions de probabilités $M_n(x_{n-1}, dx_n)$ de E_{n-1} vers E_n

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n)) &= \mathbb{P}((X_0, \dots, X_n) \in d(x_0, \dots, x_n)) \\ &= \eta_0(dx_0) M_1(x_0, dx_1) \dots M_n(x_{n-1}, dx_n) \end{aligned}$$

Pour des potentiels exponentiels associés à des fonctions $V_n : E_n \rightarrow [0, \infty)$

$$G_n(x_n) = \exp \{-\beta V_n(x_n)\}$$

on notera que ces distributions de Feynman-Kac sont des mesures de Boltzmann-Gibbs non homogènes et trajectorielles

$$\mu_{\beta,n}(d(x_0, \dots, x_n)) = \frac{1}{Z_{\beta,n}} \exp[-\beta U_n(x_0, \dots, x_n)] \lambda_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

avec les constantes de normalisation $Z_{\beta,n} = \lambda_n(\exp[-\beta U_n])$, les mesures de référence $\lambda_n = \mathbb{P}_n$, et le fonctions d'énergie trajectorielle

$$U_n(x_0, \dots, x_n) = \sum_{p=0}^n V_p(x_p)$$

Ces mesures de probabilités permettent de modéliser une variété considérable de problèmes issus de la physique, ou de la biologie : traitement du signal non linéaire, description de macro-polymères et de chaînes auto-évitantes, analyse d'évènements rares, représentation de valeurs propres et d'états fondamentaux d'opérateurs de Schrödinger, ... Nous examinerons un certain nombre de ces questions dans la section 3.5, pour plus de détails nous renvoyons le lecteur aux ouvrages [2], et [3]. Dans la section 3.5.3, nous présentons un algorithme de simulation universel de ces mesures de Feynman-Kac. Ces modèles particuliers sont fondés sur l'évolution d'individus en interaction explorant l'espace selon des mécanismes de mutation et sélection de type génétique.

3.2 Éléments d'analyse asymptotique

3.2.1 Loi des grands nombres

Comme son nom l'indique la loi des grands nombres fait référence à un effet ou une information déterministe induite par l'observation ou la simulation d'un grand nombre de phénomènes aléatoires indépendants. Cette information née du chaos s'obtient simplement par un effet de moyennisation temporelle.

L'exemple le plus simple est le jeu du pile ou face. Par la suite, on désigne par le chiffre 0 le coté pile, et par le chiffre 1 le coté face. Lorsque la pièce n'est par truquée, le résultat du premier lancer est une variable aléatoire X_1 à valeur dans $\{0, 1\}$, et de loi

$$\mathbb{P}(X_1 = 1) = 1 - \mathbb{P}(X_1 = 0) = \frac{1}{2}$$

Par des lancers successifs, on construit une suite de v.a. indépendantes X_1, X_2, \dots de même loi. On s'attend bien entendu, à ce que la fréquence empirique d'apparition du coté pile

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n 1_0(X_p) = \frac{1}{n} \text{Card} \{1 \leq p \leq n : X_p = 0\}$$

converge en un certain sens vers $1/2$, lorsque le nombre d'expérience n augmente et tend vers l'infini. Pour une pièce truquée, les réalisations des cotés pile et face ne sont plus équiprobables. Par exemple, le coté pile peut se réaliser 9 fois plus souvent. Dans ce cas, le résultat d'un lancer est déterminé par une v.a. Y_1 telle que

$$\mathbb{P}(Y_1 = 1) = 1 - \mathbb{P}(Y_1 = 0) = \frac{1}{10}$$

Dans cette situation, les fréquences empiriques de réalisation du coté pile convergeront vers $9/10$

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n 1_0(Y_p) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(1_0(Y_1)) = \mathbb{P}(Y_1 = 0) = \frac{9}{10}$$

Plus généralement, pour toute fonction f sur $\{0, 1\}$, et toujours en un certain sens, nous avons

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n f(X_p) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(f(X_1))$$

La situation précédente correspond au choix de la fonction indicatrice

$$f = 1_0 \implies \mathbb{E}(f(X_1)) = \mathbb{E}(1_0(X_1)) = \frac{1}{2} \times 1_0(1) + \frac{1}{2} \times 1_0(0) = \frac{1}{2}$$

Le cas général se déduit du précédent, en remarquant qu'une fonction f quelconque sur $\{0, 1\}$ peut s'écrire

$$f = f(0) 1_0 + f(1) 1_1 = f(1) + [f(0) - f(1)] 1_0$$

Dans ce cas, la suite empirique

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n f(X_p) = f(1) + [f(0) - f(1)] \frac{1}{n} \sum_{p=1}^n 1_0(X_p)$$

converge clairement, lorsque $n \uparrow \infty$, vers

$$\begin{aligned} f(1) + [f(0) - f(1)] \mathbb{E}(1_0(X_1)) &= \mathbb{E}(f(1) + [f(0) - f(1)] 1_0(X_1)) \\ &= \mathbb{E}(f(0) 1_0(X_1) + f(1) 1_1(X_1)) = \mathbb{E}(f(X_1)) \end{aligned}$$

Dans un langage plus savant, on a coutume de dire que la mesure d'occupation

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n \delta_{X_p}$$

converge au sens faible vers la loi

$$\eta = \frac{1}{2} \delta_0 + \frac{1}{2} \delta_1$$

de la variable X_1 . On note abusivement cette convergence par la formule synthétique suivante :

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n \delta_{X_p} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \eta$$

Cette propriété, connue sous le nom de loi des grands nombres, s'étend à des suites de v.a. i.i.d. $(X_n)_{n \geq 0}$ de même loi η sur un espace abstrait E suffisamment régulier. Dans cette situation, nous avons à nouveau

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n f(X_p) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \eta(f) = \int_E f(x) \eta(dx)$$

pour toute fonction test bornée f sur E .

Pour plus d'informations concernant ces convergences, nous renvoyons le lecteur à un cours élémentaire sur les probabilités. En attendant, l'exercice suivant permettra au lecteur impatient de se convaincre de la qualité de ces approximations. La théorie de probabilités offre bien évidemment des estimations plus fine, mais l'analyse de ces dernières sort du cadre de ce cours.

Exercice 3.2.1 Soit X une v.a. distribuée selon une mesure de probabilité η sur un ensemble E . On se donne une suite de variables aléatoires indépendantes X_n , et de même loi que X . On note η^n la mesure d'occupation

$$\eta^n = \frac{1}{n} \sum_{p=1}^n \delta_{X_p}$$

– Montrer que pour toute fonction bornée f sur E , nous avons

$$\mathbb{E}((\eta^n(f) - \eta(f))^2) = \frac{1}{n} \eta([f - \eta(f)]^2)$$

– Vérifier l'inégalité de Markov

$$\mathbb{P}(Y > a) \leq \mathbb{E}(Y)/a$$

valable pour toute variable réelle positive Y , et pour tout nombre $a > 0$. En déduire que l'on a, pour toute marge d'erreur $\epsilon > 0$, et pour toute fonction bornée f sur E

$$\mathbb{P}(|\eta^n(f) - \eta(f)| > \epsilon) \leq \frac{1}{n \epsilon^2} \eta([f - \eta(f)]^2)$$

Nous terminerons cette discussion par une illustration imagée de la loi des grands nombres. Nous allons supposer que les variables aléatoires $(X_n)_{n \geq 1}$ représentent les visites aléatoires des pixels d'une image. Rappelons qu'un pixel correspond à un petit domaine du plan. On effectue un grand nombre d'itérations, et l'on note le nombre de fois où chaque pixel a été visité. On colorie ensuite chaque pixel par des niveaux de gris proportionnels aux nombre de fois où le pixel a été visité. On obtient ainsi une image en noir et blanc. Les régions plus ou moins grises correspondent à des fréquences empiriques de visite des pixels plus ou moins grandes. Lorsque les v.a. sont i.i.d. de même loi η , la loi des grands nous permet d'interpréter les différents niveaux de gris d'une partie A de l'image en terme de la mesure η

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n 1_A(X_p) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \eta(f) = \int_{\mathbb{R}^2} 1_A(x) \eta(dx) = \eta(A) \in [0, 1]$$

Le niveau de gris d'une région A peut ainsi s'interpréter comme la probabilité de visite de A . Il y a donc en ce sens, une correspondance exacte entre l'image colorée et la mesure de probabilité η .

3.2.2 Théorème ergodique

Le théorème ergodique est l'extension de la loi des grands nombres à des chaînes de Markov $(X_n)_{n \geq 0}$ homogènes et suffisamment régulières. Commençons par un énoncé assez vague de ce théorème :

Lorsque la chaîne de Markov $(X_n)_{n \geq 0}$ est homogène et suffisamment mélangeante sur un espace d'état E , il existe une mesure de probabilité η telle que

$$\text{Loi}(X_n) \longrightarrow \eta \quad \text{et} \quad \frac{1}{n} \sum_{p=1}^n \delta_{X_p} \longrightarrow \eta$$

Les convergences étant entendues au sens faible, lorsque $n \uparrow \infty$. Autrement dit, pour toute fonction bornée f sur E (et avec une probabilité 1), nous avons

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(f(X_n)) = \int_E f(x) \eta(dx) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{p=1}^n f(X_p)$$

La première question venant à l'esprit concerne la mesure η . Quelle est cette mesure mystérieuse ? Cette mesure η dépend clairement de la façon dont la chaîne évolue dans E . Rappelons que cette évolution est dictée par la donnée des probabilités de transition

$$M(x, dy) = \mathbb{P}(X_n \in dy \mid X_{n-1} = x)$$

Les lois des états $\eta_n = \text{Loi}(X_n)$ sont alors donnés par le système dynamique déterministe

$$\eta_n = \eta_{n-1} M \quad (\Rightarrow \eta_n = \eta_0 M^n)$$

Cette simple remarque permet de lever le voile sur la nature de la mesure η . Plus précisément, nous avons pour toute fonction bornée f sur E

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(f(X_n)) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \eta_n(f) = \eta(f) \\ &\Downarrow \\ \eta_n(f) &= \eta_{n-1}(M(f)) \longrightarrow_{n \rightarrow \infty} \eta(f) = \eta(M(f)) \end{aligned}$$

La mesure limite η est donc tout simplement **un point fixe** de l'opérateur intégral M

$$\eta = \eta M$$

Une conséquence immédiate de cette propriété de point fixe est la suivante

$$\eta_0 = \text{Loi}(X_0) = \eta \implies \forall n \geq 0 \quad \eta_n = \text{Loi}(X_n) = \eta$$

Autrement dit, si la chaîne est initialisée par une v.a. X_0 de loi η , alors tous les états aléatoires suivant auront la même loi η . Dans cette situation, on dit que la chaîne est dans un **régime stationnaire**.

Il est important de souligner que bien que ces v.a. X_n ont dans un régime stationnaire la même loi, elles ne sont pas indépendantes! Pour garantir une certaine indépendance entre ces états, la chaîne de Markov doit en un certain sens oublier sa condition initiale

$$M^n(x_1, dy) = \mathbb{P}(X_n \in dy \mid X_0 = x_1) \stackrel{n \gg 1}{\simeq} \mathbb{P}(X_n \in dy \mid X_0 = x_2) = M^n(x_2, dy)$$

pour tout $x_1, x_2 \in E$. Dans cette situation, nous s'attend tout d'abord à ce que la chaîne entre assez rapidement dans le régime stationnaire

$$\eta_n(dy) = \eta_0 M^n(dy) = \int \eta_0(dx_1) M^n(x_1, dy) \stackrel{n \gg 1}{\simeq} \eta(dy)$$

Autrement dit, la chaîne de Markov initialisée par une v.a. X_0 de loi η_0 ou η_0 est asymptotiquement distribuée après des temps assez longs selon la même loi

$$\eta_0 M^n(dy) = \int \eta_0(dx_1) M^n(x_1, dy) \stackrel{n \gg 1}{\simeq} \int \eta'_0(dx_2) M^n(x_2, dy) = \eta'_0 M^n(dy)$$

Dans ces conditions, on notera que la mesure invariante de la chaîne est nécessairement unique. Plus précisément, si η et η' désignent deux mesures invariantes, alors nous avons

$$\begin{aligned} \eta(dy) &= \eta M^n(dy) = \int \eta(dx_1) M^n(x_1, dy) \\ &\stackrel{n \gg 1}{\simeq} \int \eta'(dx_2) M^n(x_2, dy) = \eta' M^n(dy) \\ &= \eta'(dy) \end{aligned}$$

En pratique, on parle de **temps de chauffage**. Pour des temps de chauffage n_0 suffisamment grands $n_0 \gg 1$, la chaîne oublie sa condition initiale, et l'état X_{n_0} est à peu près distribué selon la loi stationnaire

$$\text{Loi}(X_{n_0}) \simeq \eta$$

De plus, après avoir noté que

$$\mathbb{P}(X_{n+n_0} \in dy \mid X_{n_0} = x_1) = M^n(x_1, dy)$$

on en conclut que pour tout $x_1, x_2 \in E$

$$\mathbb{P}(X_{n+n_0} \in dy \mid X_{n_0} = x_1) \stackrel{n \gg 1}{\simeq} \mathbb{P}(X_{n+n_0} \in dy \mid X_{n_0} = x_2)$$

Autrement dit, entre ces temps de chauffe n_0 , les variables $X_{n_0}, X_{2n_0}, X_{3n_0}, \dots$ sont presque i.i.d. de loi η .

La formalisation de ces idées naturelles et intuitives conduit à la démonstration mathématique du théorème ergodique. Bien que cette dernière sorte du cadre du cours, nous recommandons au lecteur d'appliquer le théorème ergodique avec modération. On doit notamment s'assurer, du moins intuitivement, que la chaîne de Markov sous jacente est relativement stable.

3.2.3 Exemple, les fonctions itérées stochastiques

Les fonctions itérées stochastiques sont des chaînes de Markov explorant un espace métrique (E, d) , en choisissant aléatoirement à chaque instant une des transformations $(S_i)_{i \in I}$ indexées par un ensemble fini I . Lorsque ces explorations locales sont suffisamment régulières, on s'attend à ce que la chaîne oublie son point de départ, et se concentre sur certaines régions attractives.

On supposera que pour chaque indice $i \in I$ la fonction $S_i : E \rightarrow E$ est globalement Lipschitz, en ce sens où il existe une suite de nombres non négatifs $(k(i))_{i \in I}$ tels que

$$\forall i \in I, \quad \forall x, y \in E, \quad d(S_i(x), S_i(y)) \leq k(i) d(x, y). \quad (3.1)$$

On en finit de considérer sur I , une distribution de probabilité $(p(i))_{i \in I}$.

On construit récursivement une chaîne de Markov $X = (X_n)_{n \geq 0}$ sur E en faisant évoluer chaque état

$$X_{n-1} \rightsquigarrow X_n = S_i(X_{n-1})$$

selon une transformation S_i choisie au hasard avec la probabilité $p(i)$.

Autrement dit, on commence par initialiser la chaîne en simulant une variable aléatoire X_0 selon une distribution initiale choisie η_0 . A chaque étape $n \geq 1$ on simule tout d'abord une variable aléatoire ϵ_n suivant la loi p . Autrement dit on choisit un indice i dans I avec la probabilité $p(i)$, et on pose $\epsilon_n = i$. Puis on passe de l'état X_{n-1} à l'état X_n en posant

$$X_n = S_{\epsilon_n}(X_{n-1})$$

Les fonctions itérées stochastiques sont donc définies récursivement par les équations suivantes :

$$X_n = S_{\epsilon_n}(X_{n-1}) = S_{\epsilon_n} \circ S_{\epsilon_{n-1}} \circ \dots \circ S_{\epsilon_1}(X_0)$$

où ϵ_n désigne une suite de variables indépendantes et identiquement distribuées sur I de loi p .

Les probabilités de transitions de cette chaîne sont données par

$$M(x, dy) = \sum_{i \in I} p(i) \delta_{S_i(x)}(dy).$$

D'après les propriétés Lipschitz (3.1) des transformations $(S_i)_{i \in I}$, les transformations aléatoires $x \in E \mapsto X_n^x \in E$ sont continues. En effet, si on note

$$\alpha(k) = \sum_{i \in I} p(i) k(i) = \mathbb{E}(\epsilon_1)$$

la valeur moyenne des constantes de Lipschitz $(k(i))_{i \in I}$ alors on vérifie sans peine que

$$\forall (x, y) \in E^2, \quad \forall n \geq 0, \quad \mathbb{E}(d(X_n^x, X_n^y)) \leq \alpha^n(k) d(x, y).$$

Lorsque $\alpha(k) < 1$, les états de la chaîne deviennent indépendants de leur condition initiale

$$\alpha(k) < 1 \implies \forall (x, y) \in E^2, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(d(X_n^x, X_n^y)) = 0.$$

Intuitivement parlant après un temps assez long, la chaîne de Markov oublie ses excursions passées, et semble toujours entrer dans le même régime d'évolution. Ce régime d'évolution est appelé le régime stationnaire de la chaîne X .

3.3 Exercices

Dans la section 1.2.3, nous avons vu que le calcul des probabilités de transitions, ainsi que celui des lois des états d'une chaîne de Markov discrète, se "réduisent" à des compositions "élémentaires" de matrices. Inversement, on peut noter que toute matrice à entrées positives dont la somme des éléments de chaque ligne vaut 1, peut être interprétée comme la matrice de transition d'une chaîne de Markov. De telles matrices sont appelées des **matrices stochastiques**.

Cette modélisation en semigroupes matriciels offre ainsi un point de contact très fructueux entre l'algèbre matricielle et la théorie des processus. Dans certains cas, l'algèbre matricielle apporte des outils pour calculer, ou analyser, les probabilités de transitions. Dans d'autre cas, les matrices sont trop complexes pour faire des calculs explicites, et l'on doit avoir recours à des méthodes de simulation.

Les exercices suivants permettrons au lecteur d'apprécier ces quelques remarques, tout en aiguisant son intuition, ainsi que sa curiosité d'approfondir théoriquement ces questions.

Exercice 3.3.1 On considère une chaîne de Markov homogène sur un espace à deux points $E = \{1, 2\}$, et associée à la matrice de transition $M = \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{2,2} \end{pmatrix}$. Les entrées $p_{i,j} \in [0, 1]$ sont telles que $p_{1,1} + p_{1,2} = 1 = p_{2,1} + p_{2,2}$. On conviendra que $p_{2,2} \geq p_{1,1}$, et $(p_{1,2} \geq) p_{2,1} > 0$.

1. Proposer un schéma décrivant l'évolution de cette chaîne. Montrer (par récurrence sur le paramètre temporel) que les itérées M^n de la matrice M sont données par la formule

$$M^n = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} p_{2,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{1,2} \end{pmatrix} + \frac{(1-c)^n}{c} \begin{pmatrix} p_{1,2} & -p_{1,2} \\ -p_{2,1} & p_{2,1} \end{pmatrix}$$

avec $c = p_{1,2} + p_{2,1} > 0$. Montrer que $(1-c) \in [-1, 1)$. Lorsque $p_{1,1} > 0$, vérifier que $(\forall i, j \ p_{i,j} > 0)$, et $|1-c| < 1$.

2. On suppose que les entrées de la matrice sont telles que $|1-c| < 1$. Montrer dans ce cas que l'on a

$$\begin{aligned} \eta_\infty(1) &=_{\text{déf.}} \lim_{n \rightarrow \infty} M^n(1, 1) = \lim_{n \rightarrow \infty} M^n(2, 1) = \frac{p_{2,1}}{p_{2,1} + p_{1,2}} \\ \eta_\infty(2) &=_{\text{déf.}} \lim_{n \rightarrow \infty} M^n(1, 2) = \lim_{n \rightarrow \infty} M^n(2, 2) = \frac{p_{1,2}}{p_{2,1} + p_{1,2}} \end{aligned}$$

Vérifier que la mesure de probabilité $\eta_\infty = [\eta_\infty(1), \eta_\infty(2)]$ est un point fixe à gauche de la matrice M , c'est à dire $\eta_\infty M = \eta_\infty$. En déduire que pour toute fonction f sur E , nous avons

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(f(X_n)) = \eta_\infty f$$

Exercice 3.3.2 On se donne une chaîne de Markov homogène sur un espace fini E . On note M sa matrice de transition. On suppose que tout les états de E sont ϵ -accessibles après un nombre fixé $m \geq 1$ de transitions, et pour un certain $\epsilon \in (0, 1]$

$$\forall (x, y) \in E^2 \quad \mathbb{P}(X_m = y \mid X_0 = x) = M^m(x, y) \geq \epsilon \quad (3.2)$$

On associe à chaque état $y \in E$, les quantités

$$a_n(y) = \inf_{x \in E} M^n(x, y) \quad \text{et} \quad b_n(y) = \sup_{x \in E} M^n(x, y)$$

1. Vérifier que les suites de nombres $(a_n(y))_{n \geq 0}$, et $(b_n(y))_{n \geq 0} \in [0, 1]^{\mathbb{N}}$, sont respectivement croissantes, et décroissantes. Montrer que pour tout $n \geq 0$, on a la formule

$$M^{n+m}(x, y) = \sum_{z \in E} [M^m(x, z) - \epsilon M^n(y, z)] M^n(z, y) + \epsilon M^{2n}(y, y)$$

En conclure que

$$(1 - \epsilon) a_n(y) + \epsilon M^{2n}(y, y) \leq M^{n+m}(x, y) \leq (1 - \epsilon) b_n(y) + \epsilon M^{2n}(y, y)$$

En déduire que $0 \leq [b_{n+m}(y) - a_{n+m}(y)] \leq (1 - \epsilon) [b_n(y) - a_n(y)]$.

2. Vérifier que $\lim_{n \rightarrow \infty} [b_n(y) - a_n(y)] = 0$. On introduit les quantités

$$\eta_\infty(y) = \lim_{n \rightarrow \infty} b_n(y) = \lim_{n \rightarrow \infty} a_n(y) \in [0, 1]$$

Montrer que $|M^n(x, y) - \eta_\infty(y)| \leq (1 - \epsilon)^{[n/m]}$, où $[a]$ désigne la partie entière d'un réel a . En conclure que pour toute mesure η_0 sur E , on a la convergence vers le point fixe (à gauche) de la matrice M

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \eta_0 M^n(y) = \eta_\infty(y) \quad \text{et} \quad \eta_\infty = \eta_\infty M$$

En déduire que pour toute fonction f sur E , nous avons

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(f(X_n)) = \eta_\infty f$$

Une mesure de probabilité η_∞ telle que $\eta_\infty = \eta_\infty M$, est appelée une **mesure invariante** de la chaîne de Markov de transition M .

Exercice 3.3.3 On considère une matrice stochastique $M(x, y)$, ainsi qu'une mesure de probabilité η , sur un ensemble au plus dénombrable E . On dit que la transition M est **η -réversible**; ou encore que la mesure η est **M -réversible**, lorsque la condition de symétrie suivante est satisfaite

$$\forall (x, y) \in E^2 \quad \eta(x)M(x, y) = \eta(y)M(y, x)$$

Montrer qu'une mesure η M -réversible est nécessairement une mesure M -invariante, en ce sens où $\eta M = \eta$. Supposons par la suite que l'espace E soit fini.

1. Sous les hypothèses du théorème ergodique, montrer qu'une matrice stochastique n'admet qu'une seule mesure invariante.
2. Supposons de plus que la matrice M est symétrique, en ce sens où $M(x, y) = M(y, x)$. Vérifier que la mesure uniforme $\eta_\infty(x) = 1/|E|$, sur E , est M -invariante.
3. Sans faire de calculs, trouver les mesures invariantes des chaînes de Markov décrites par les schémas suivants. Retrouver ces résultats, à l'aide de la formule obtenue dans la deuxième question de l'exercice 3.3.1. Enfin, vérifier que l'hypothèse d'accessibilité (3.2), du théorème ergodique étudié dans l'exercice 3.3.2, est satisfaite dans les quatre cas.

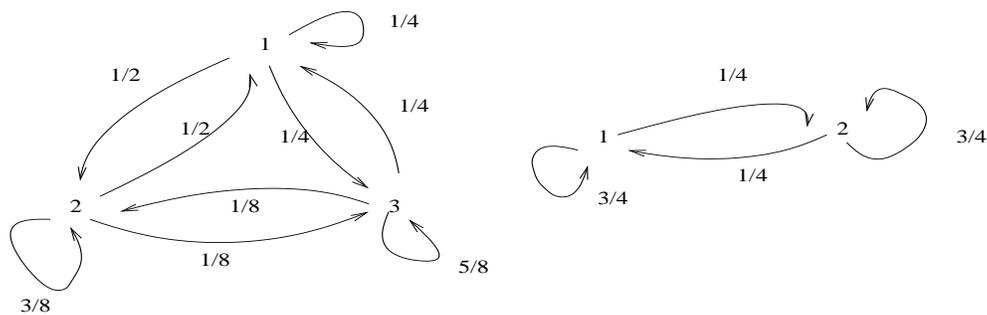


FIG. 3.1 – Chaînes symétriques

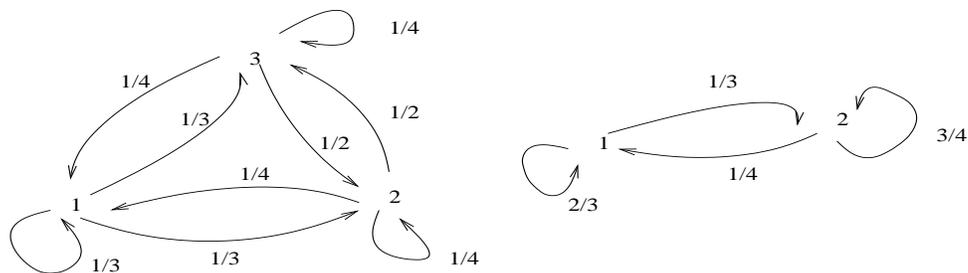


FIG. 3.2 – Chaînes réversibles

Exercice 3.3.4 On munit l'ensemble $E = \{0, 1\}^d$, avec $d \geq 1$, de la distance de Hamming

$$d(x, y) = \sum_{i=1}^n (1 - 1_{x^i}(y^i))$$

On note $\mathcal{V}(x) = \{y \in E : d(x, y) \leq 1\}$, l'ensemble des d -uplets ne différant de x que de, au plus, une seule coordonnée. On considère la transition de probabilités

$$M(x, y) = \frac{1}{|\mathcal{V}(x)|} 1_{\mathcal{V}(x)}(y) = \frac{1}{d+1} 1_{\mathcal{V}(x)}(y)$$

Vérifier que pour tout couple de points $(x, y) \in E^2$, on a $M^d(x, y) \geq 1/(d+1)^d$. En déduire que la mesure uniforme $\eta_\infty(x) = 2^{-d}$ sur E est l'unique mesure invariante de M .

Exercice 3.3.5 (Exploration d'un graphe fini) Soit $E = (I, V(I))$ un graphe fini symétrique et connexe. Plus précisément l'ensemble des sommets I est un ensemble fini, et l'ensemble des arêtes $V(I)$ est une partie de $(I \times I)$ telle que $(x, y) \in V(I) \iff (y, x) \in V(I)$ (dans ce cas, on identifie les arêtes $(x, y) = (y, x)$). D'autre part, la propriété de connexité exprime le fait suivant. Pour tout $x, y \in I$, il existe un chemin $(x_p)_{0 \leq p \leq n}$ d'une certaine longueur $n \geq 1$ tel que $x_0 = x$, $x_n = y$, et $(x_p, x_{p+1}) \in V(I)$, pour tout $0 \leq p < n$. On associe à chaque point $x \in E$, un voisinage

$$\mathcal{V}(x) = \{y \in E : (x, y) \in V(I)\}.$$

On note $|\mathcal{V}(x)|$ le cardinal de l'ensemble $\mathcal{V}(x)$, et $|V(I)|$ le cardinal de l'ensemble de toutes les arêtes. La figure suivante présente un exemple de graphe fini symétrique et connexe, avec $I = \{1, \dots, 7\}$, $|V(I)| = 7$, $|\mathcal{V}(1)| = 1$, $|\mathcal{V}(2)| = |\mathcal{V}(3)| = |\mathcal{V}(4)| = 2$, $|\mathcal{V}(5)| = 3$, et $|\mathcal{V}(6)| = |\mathcal{V}(7)| = 2$

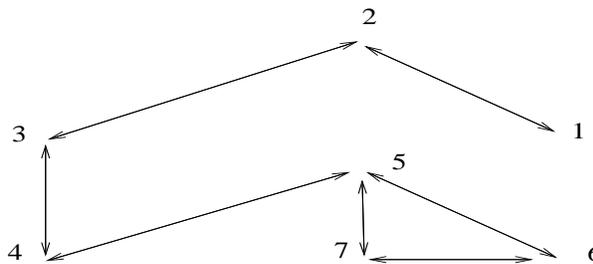


FIG. 3.3 –

1. Vérifier que $(x \in \mathcal{V}(y)) \iff (y \in \mathcal{V}(x))$, et montrer que $2|V(I)| = \sum_{x \in I} |\mathcal{V}(x)|$. En déduire que la mesure $\eta_\infty(x) = \frac{|\mathcal{V}(x)|}{2|V(I)|}$, est bien une mesure de probabilité sur E .
2. Soit $M(x, y)$ la transition de probabilités de la marche aléatoire simple sur E donnée par

$$M(x, y) = \frac{1}{|\mathcal{V}(x)|} 1_{\mathcal{V}(x)}(y).$$

Montrer que M est bien un noyau de Markov sur E , et décrire schématiquement cette chaîne. Vérifier que la mesure η_∞ est M -réversible, en ce sens où

$$\forall (x, y) \in I^2 \quad \eta_\infty(x) M(x, y) = \eta_\infty(y) M(y, x)$$

En déduire que η_∞ est M -invariante, en ce sens où l'on a $\eta_\infty = \eta_\infty M$.

Exercice 3.3.6 On considère la chaîne de Markov réelle définie par la formule

$$X_n = a X_{n-1} + W_n$$

La suite W_n désigne une suite de variables gaussiennes centrées normées et indépendantes, $a \in [0, 1)$, et $X_0 = 0$. Déterminer les lois des variables X_n , et vérifier que cette chaîne de Markov est réversible par rapport à la mesure gaussienne

$$\mu(dx) = \sqrt{\frac{1-a^2}{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1-a^2}{2} x^2\right\} dx$$

3.4 Mesures invariantes et algorithmes de simulation

Dans la section 3.2.2, nous avons analysés les manifestations moyennes, et le comportement asymptotique d'une chaîne de Markov en terme d'un point fixe d'un opérateur intégral.

Plus précisément, lorsque qu'une chaîne de Markov X_n est homogène et suffisamment mélangeante, alors le théorème ergodique nous montre que l'on a

$$\text{Loi}(X_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \eta \quad \text{et} \quad \frac{1}{n} \sum_{p=1}^n \delta_{X_p} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \eta$$

où η désigne l'unique point fixe $\eta = \eta M$ de l'opérateur intégral induit par les probabilités de transitions $M(x, y)$ de X_n . Cette mesure de probabilité η est appelée **la mesure invariante**, ou **la loi stationnaire** de la chaîne de Markov de transitions M .

Après des temps de chauffage n assez longs les états X_n de la chaîne sont approximativement distribués selon la loi stationnaire η . Par analogie avec les systèmes dynamiques déterministes, cette mesure joue le rôle d'un attracteur.

Nous allons dans ce qui suit préciser deux types de situations importantes rencontrées en pratique :

1. La chaîne de Markov étudiée est un modèle probabiliste représentant l'évolution aléatoire d'un phénomène physique ou biologique. Dans ce contexte, la mesure invariante permet d'analyser le comportement en temps long du système. Ces mesures limites ont rarement une description explicite, et leur description nécessite souvent d'avoir recours à la simulation. Dans ce cas, le théorème ergodique nous permet d'approcher ces mesures en simulant les mesures d'occupations de la chaîne. Dans la section 3.2.3, nous avons illustré cette première situation dans le cadre de la formation d'image fractales par des fonctions itérées stochastiques.
2. La chaîne de Markov étudiée est un algorithme stochastique permettant de résoudre **un problème d'optimisation**, ou de **simuler une loi cible** complexe. Dans le cadre de l'optimisation, il est bien entendu souhaitable que l'exploration aléatoire de la chaîne se concentre asymptotiquement, et le plus rapidement possible sur l'ensemble des solutions du problème. Dans ce contexte, il est bien plus judicieux de commencer par choisir une mesure limite concentrée sur les régions désirées. Parmi ces mesures stationnaires, les plus connues sont sans nul doute les mesures de Boltzmann-Gibbs.

Ces mesures de Boltzmann-Gibbs de probabilités sont définies par la formule suivante :

$$\mu_\beta(dx) = \frac{1}{Z_\beta} \exp[-\beta U(x)] \lambda(dx) \quad \text{avec} \quad Z_\beta = \lambda(\exp[-\beta U]),$$

Dans la définition ci-dessus, λ désigne une mesure de probabilité sur l'espace E , β un paramètre de température inverse, et enfin

$$U : E \rightarrow [0, \infty)$$

une fonction énergie. On notera qu'à basse température la mesure μ_β se concentre sur les régions de faible énergie.

Une fois la mesure invariante fixée, il reste à choisir judicieusement une transition de probabilité une chaîne de Markov ayant un tel comportement asymptotique. Il existe essentiellement deux techniques universelles permettant de construire une transition de probabilité M ayant une mesure invariante donnée : La transition de Métropolis-Hastings, et l'échantillonneur de Gibbs. Nous décrivons respectivement ces deux algorithmes de simulation dans la section 3.4.3, et dans la section 3.4.5.

Dans les deux sections suivantes, on examine deux exemples académiques de mesures de Boltzmann-Gibbs. Le premier concerne la représentation d'un problème d'optimisation numérique en terme de mesure de Boltzmann-Gibbs. Le second correspond au modèle d'Ising. Ce modèle probabiliste est utilisé en mécanique statistique pour étudier des configurations ferromagnétiques d'aimants.

3.4.1 Plus court chemin

On se donne un ensemble fini $\mathcal{E}_m = \{e_1, \dots, e_m\}$, muni d'une métrique d . Cet ensemble abstrait peut représenter un ensemble de villes sur une carte, une collection d'étoiles dans l'espace. Ces modèles ne sont pas restreint à des familles de points dans \mathbb{R}^d , muni de la distance euclidienne. Ils peuvent aussi représenter des politiques de contrôle, ou des séquence d'objectifs à atteindre, muni d'une distance reflétant le degré de difficulté de passage d'un état à un autre, etc.

L'un des problèmes d'optimisation globale les plus connus consiste à chercher un circuit de longueur minimale, et reliant tous les points de \mathcal{E}_m . Un circuit dans \mathcal{E}_m correspond clairement au choix d'une permutation des indices des points de \mathcal{E}_m . Plus formellement, l'application

$$\sigma \in \mathcal{G}_m \mapsto (e_{\sigma(1)}, e_{\sigma(2)}, \dots, e_{\sigma(m)}, e_{\sigma(m+1)}) \in \mathcal{C}_m$$

avec la convention $\sigma(m+1) = \sigma(1)$, permet d'identifier l'ensemble des circuits \mathcal{C}_m dans \mathcal{E}_m avec le le groupe symétrique \mathcal{G}_m sur $\{1, \dots, m\}$.

La longueur d'un circuit $\sigma \in \mathcal{G}_m$ est donnée par la fonction U définie par :

$$U(\sigma) = \sum_{p=1}^m d(e_{\sigma(p)}, e_{\sigma(p+1)})$$

L'exercice suivant montre que la mesure de Gibbs sur \mathcal{G}_m associée à cette fonction d'énergie, et la mesure uniforme $\lambda(\sigma) = \frac{1}{m!}$, se concentre à basse température sur les circuits les plus courts.

Exercice 3.4.1 Vérifier que pour tout $\sigma \in \mathcal{G}_m$, on a la convergence

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mu_\beta(\sigma) = \frac{1}{|U^*|} 1_{U^*}(\sigma)$$

avec $U^* = \{\sigma \in \mathcal{G}_m : U(\sigma) = \inf_{\mathcal{G}_m} U\}$.

3.4.2 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising utilisé en traitement d'images, en électromagnétisme et en mécanique statistique correspond à la situation où l'espace d'état est un espace de configuration produit

$$E = \{-1, +1\}^S \quad S = \{1, \dots, L\} \times \{1, \dots, L\}.$$

On munit l'ensemble de sites S de la structure de graphe en considérant les 4 voisins

$$j^1 = (i_1, i_2 + 1), \quad j^2 = (i_1 + 1, i_1), \quad j^3 = (i_1, i_2 - 1), \quad j^4 = (i_1 - 1, i_2)$$

d'un point $i = (i_1, i_2) \in S$, autrement dit

$$\begin{array}{c} j^1 \\ \downarrow \\ j^4 \leftrightarrow i \leftrightarrow j^2 \\ \downarrow \\ j^3 \end{array}$$

On note aussi $i \sim i'$ lorsque $i, i' \in S$ sont voisins (chaque site i est voisin avec lui même).

Pour ce modèle d'Ising, λ est la mesure uniforme produit sur $\{-1, +1\}^S$ et la fonction énergie U est définie par

$$U(x) = h \sum_{i \in S} x(i) - J \sum_{i \sim j} x(i)x(j), \quad (3.3)$$

Le paramètre h est un nombre réel quelconque représentant un champ magnétique extérieur, et J un nombre fixé et lié au degré d'interaction entre les sites.

En mécanique statistique, ces mesures sont aussi appelées des modèles d'aimantation de verres de spin. Un simple aimant de frigidaire est un assemblage de spins qui interagissent de façon ferromagnétique.

D'un point de vue microscopique, l'aimantation est le résultat des spins des atomes. Un spin est en quelque sorte une rotation interne conférant à l'atome un moment cinétique particulier. Comme la terre, l'axe de rotation interne est dirigé vers un pôle nord magnétique. En simplifiant à l'extrême ces modèles, on suppose que le spin peut prendre deux valeurs $+1$ ou -1 , suivant si cet axe est dirigé vers le haut ou vers le bas. Le terme ferromagnétique fait référence au fait que les spins souhaitent tous avoir leur axe de rotation pointé vers le même pôle. Ces configurations ferromagnétiques correspondent aux minima d'une fonction énergie U , parfois appelée fonction potentiel, ou l'hamiltonien du système.

À haute température, les propriétés ferromagnétiques de l'aimant sont détruites, et d'autres configurations de spins sont tout aussi probables. Ces différents états de magnétisation possibles sont représentés par des mesures de Boltzmann-Gibbs associés à des paramètres de température.

L'interaction ferromagnétique souligne la propriété que deux spins voisins souhaitent avoir la même orientation. Dans le cas contraire, on parle d'anti-ferromagnétisation. On représente mathématiquement ces interactions par la fonction d'énergie

$$U_J(x) = -J \sum_{i \sim j} x(i)x(j)$$

Lorsque deux spins voisins $x(i)$ et $x(j)$ ont la même valeur, on a clairement $x(i)x(j) = 1$ (faible énergie), dans le cas contraire $x(i)x(j) = -1$ (grande énergie). Le paramètre J témoigne du caractère ferromagnétique $J > 0$ ou anti-ferromagnétique du modèle $J < 0$. Le cas $J = 1$ est le modèle ferromagnétique la plus simple.

Ces modèles de verres de spin et leurs généralisations sont aussi utilisés en **sciences économiques** pour modéliser des systèmes de coopération ou non entre individus. Dans ce contexte, les valeurs $+1$ et -1 permettent de quantifier si deux individus sont d'accord ou non sur une opinion, ami ou ennemis, etc. La fonction d'interaction U_J correspond à la qualité "libre" d'un système social, et le champ extérieur h s'interprète comme un degré de persistance et d'entêtement des individus dans un climat social donné.

3.4.3 Transition de Métropolis-Hastings

Introduction

L'algorithme de Métropolis-Hastings est une chaîne de Markov X_n homogène ayant une mesure invariante prescrite η sur un espace d'état E . Cette chaîne évolue

selon un mécanisme de proposition, et un mécanisme d'acceptation-rejet. L'étape de proposition vise à explorer l'espace, en proposant des états aléatoires selon une transition markovienne Q . Cette exploration aléatoire est le plus souvent dictée par une topologie de voisinages sur l'espace d'état. L'algorithme propose alors aléatoirement un état voisin au précédent. Comme son nom l'indique, l'étape d'acceptation-rejet consiste à accepter la proposition précédente avec une certaine probabilité, dans le cas contraire l'algorithme retourne à son état précédent la proposition.

Pour décrire avec précision la probabilité d'acceptation de l'algorithme, il convient d'introduire les mesures de probabilités $(\eta \times Q)_0$ et $(\eta \times Q)_1$ sur l'espace produit $(E \times E)$ définies par les formules suivantes

$$\begin{aligned}(\eta \times Q)_0(d(x, y)) &= \eta(dx) Q(x, dy) \\(\eta \times Q)_1(d(x, y)) &= \eta(dy) Q(y, dx).\end{aligned}$$

Dans de nombreux problèmes pratiques, l'espace d'état E est soit un ensemble discret, soit l'espace \mathbb{R}^d . Si E est discret, on utilise plutôt la notation

$$\begin{aligned}(\eta \times Q)_0(x, y) &= \eta(x) Q(x, y) \\(\eta \times Q)_1(x, y) &= \eta(y) Q(y, x).\end{aligned}$$

Lorsque $E = \mathbb{R}^d$, il arrive souvent que les mesures η et les transitions Q soient absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue dx sur \mathbb{R}^d . Dans cette situation, on utilisera les notations abusives suivantes :

$$\eta(dx) = \eta(x) dx \quad \text{et} \quad Q(x, dy) = Q(x, y) dy$$

Avec ce système de notations, les mesures $(\eta \times Q)_0$ et $(\eta \times Q)_1$ s'expriment sous la forme

$$\begin{aligned}(\eta \times Q)_0(d(x, y)) &= \eta(x) Q(x, y) dx dy \\(\eta \times Q)_1(d(x, y)) &= \eta(y) Q(y, x) dx dy.\end{aligned}$$

Nous conviendrons par la suite que les $(\eta \times Q)_0$ et $(\eta \times Q)_1$ sont absolument continues.

Dans les deux situations examinées précédemment, cette propriété est équivalente à la suivante

$$\eta(x) Q(x, y) = 0 \iff \eta(y) Q(y, x) = 0$$

Après cette série de notations, notre prochain objectif est de construire une transition de probabilité M sur E ayant la mesure η comme point fixe

$$\eta = \eta M$$

La stratégie de Metropolis-Hastings est fondée sur une interprétation particulière des dérivées de Radon-Nykodim

$$g(x, y) = \frac{d(\eta \times Q)_1}{d(\eta \times Q)_0}(x, y).$$

Dans le cas où E est discret, ou bien si $E = \mathbb{R}^d$, cette dérivée s'exprime plus simplement sous la forme d'un rapport de densités

$$g(x, y) = \frac{\eta(y) Q(y, x)}{\eta(x) Q(x, y)}.$$

On notera que cette définition est incomplète lorsque $\eta(x) Q(x, y) = 0$. Dans ce cas, notre hypothèse d'absolue continuité des mesures entraîne que l'on a aussi $\eta(y) Q(y, x) = 0$; on pose alors dans ce cas $g(x, y) = 0$.

Description du modèle

La transition de Metropolis-Hastings est la composée de deux transitions markoviennes. La première consiste, en partant d'un état x à proposer aléatoirement un nouveau point y' selon la transition $Q(x, dy')$. La seconde étape consiste à accepter ou à refuser cette proposition. Plus précisément, on accepte y' avec la probabilité

$$h(x, y') = 1 \wedge g(x, y')$$

En cas de refus, on revient sur l'état initial x .

Le lecteur attentif aura noté que le taux d'acceptation ne dépend pas uniquement de l'état proposé y' , sinon du couple d'états (x, y') . Cette double transition peut donc s'exprimer schématiquement par une évolution d'un état $x \in E$ vers un couple $(y, y') \in (E \times E)$ avec $y = x$, puis une opération d'acceptation/rejet de la transition $(x, y') \in (E \times E)$ vers un état $z \in E$, avec $z = x$ (rejet) ou bien $z = y'$ (acceptation).

La transition de la chaîne correspondante X_n est s'exprime donc schématiquement sous la forme suivante :

$$X_n \xrightarrow{\text{proposition}} (X_n, Y_n) \xrightarrow{\text{acceptation/rejet}} X_{n+1} = (X_n \text{ ou } Y_n)$$

La première étate

$$X_n \xrightarrow{\text{proposition}} (X_n, Y_n)$$

est déterminée formellement par une transition de probabilité $K(x, d(y, y'))$ de E dans $(E \times E)$ définie par

$$K(x, d(y, y')) = \delta_{\{x\}}(dy) Q(y, dy')$$

La seconde étape

$$(X_n, Y_n) \xrightarrow{\text{acceptation}} X_{n+1} = (X_n \text{ ou } Y_n)$$

est déterminée formellement par une transition de probabilité $H((y, y'), dz)$ de $(E \times E)$ dans E définie par

$$H((y, y'), dz) = h(y, y') \delta_{\{y'\}}(dz) + (1 - h(y, y')) \delta_{\{y\}}(dz).$$

La mesure de probabilité η est une mesure invariante

$$\eta = \eta M \tag{3.4}$$

de la transition de Metropolis-Hastings $M = KH$ définie par

$$\begin{aligned} M(x, dz) &= \int K(x, d(y, y')) H((y, y'), dz) \\ &= h(x, z) Q(x, dz) + \left(1 - \int h(x, y) Q(x, dy)\right) \delta_x(dz). \end{aligned}$$

Exercice 3.4.2 Vérifier (3.4)

Examinons la situation où la mesure η est la mesure de Boltzmann-Gibbs

$$\eta(dx) = \frac{1}{Z} \exp[-U(x)] \lambda(dx) \quad Z = \lambda(\exp[-U])$$

avec une fonction énergie $U : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ et une mesure de probabilité de référence λ sur E . Pour toute transition de probabilité Q qui soit λ -réversible, c'est à dire

$$(\lambda \times Q)_0 = (\lambda \times Q)_1,$$

on a bien

$$\begin{aligned} \frac{d(\eta \times Q)_1}{d(\eta \times Q)_0}(x, y) &= \frac{e^{-U(y)}}{e^{-U(x)}} \times \frac{d(\lambda \times Q)_1}{d(\lambda \times Q)_0}(x, y) \\ &= e^{-(U(y)-U(x))}. \end{aligned}$$

Dans cette situation, le taux d'acceptation de l'algorithme de Metropolis-Hastings est simplement donné par la formule exponentielle

$$h(x, y) = 1 \wedge e^{-(U(y)-U(x))} = \exp[(U(y) - U(x))^+]$$

avec pour tout $a, b \in \mathbb{R}$ où $a \vee b = \max(a, b)$ et $a^+ = a \vee 0$.

Il est essentiel de souligner que la transition de Metropolis-Hastings est indépendante de la constante de normalisation Z , impossible à calculer dans la plupart des problèmes intéressants.

3.4.4 Recuit simulé

L'algorithme de recuit simulé que nous allons présenter est une méthode de recherche aléatoire des **extrema globaux** d'une fonction numérique bornée $U : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, définie sur un ensemble E . L'exploration aléatoire de l'espace d'état E est définie en terme d'une transition de probabilités $Q(x, dy)$ sur E , réversible par rapport à une mesure λ sur E . C'est à dire, telle que

$$\lambda(dx) Q(x, dy) = \lambda(dy) Q(y, dx)$$

On notera que λ est nécessairement une mesure invariante de Q . L'algorithme de recuit simulé est un algorithme markovien non homogène. Il se présente sous la forme d'une chaîne de Markov dont le noyau de transition à chaque étape $n \geq 1$ dépend d'un paramètre de température $T(n) \in \mathbb{R}_+$.

- Pour $n = 0$, on simule une variable aléatoire X_0 , selon une distribution initiale η_0 .
- À l'étape n , la transition $X_n \rightarrow X_{n+1}$ est décomposée en une étape d'exploration, et une étape d'acceptation.

1. L'étape d'exploration consiste à proposer un état Y_n de loi $Q(X_n, \cdot)$.
2. L'étape d'acceptation se décompose à nouveau en deux sous-étapes :
 - Si $U(Y_n) \leq U(X_n)$ on accepte l'état Y_n et on pose

$$X_{n+1} = Y_n$$

- Si $U(Y_n) > U(X_n)$, alors on effectue un choix aléatoire suivant :

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_n & \text{avec une probabilité } e^{-\frac{1}{T(n)} (U(Y_n)-U(X_n))} \\ X_n & \text{avec une probabilité } 1 - e^{-\frac{1}{T(n)} (U(Y_n)-U(X_n))} \end{cases}$$

Au cours du temps, on fera décroître convenablement la température de sorte que l'algorithme de recherche se "gèle" sur l'un des extrema globaux de la fonction U . Le réglage de la décroissance de $T(n)$, lorsque n tend vers l'infini, sera donc inversement lié aux possibilités de mouvement de l'algorithme. Plus $T(n)$ est faible, plus l'algorithme aura tendance à ne plus changer d'état.

Selon ces quelques remarques, une trop brusque variation de température pourrait conduire et figer l'algorithme dans des états non désirés tels que les extrema locaux de la fonction U . Cette idée naturelle provient de la physique.

Le mot *recuit* désigne une opération qui consiste tout d'abord à fondre un métal à très haute température puis à le refroidir lentement pour améliorer ses qualités et obtenir des états plus stables et plus robustes. Dans ce cadre, un refroidissement trop brutal pourrait conduire ce métal dans des états instables n'ayant plus les propriétés de solidité recherchées.

On notera que la transition de la chaîne homogène, à température fixée $T(n) = T$, correspond exactement à la transition de Metropolis-Hasting décrite dans la section précédente. La mesure stationnaire du recuit homogène (à température constante T) est donc donnée par la mesure de Boltzmann-Gibbs

$$\eta^{[T]}(dx) = \frac{1}{\lambda(e^{-\frac{1}{T}U})} e^{-\frac{1}{T}U(x)} \lambda(dx)$$

L'un des difficultés majeure du recuit simulé est de trouver un bon schéma de décroissance de température.

D'un point de vue théorique, la décroissance de la température doit être logarithmique

$$T(n) = C / \log(n)$$

avec une constante suffisamment grande ($C \geq \text{osc}(U)$ convient) pour éviter de piéger l'algorithme dès le départ.

Dans ces conditions, on est assuré de trouver asymptotiquement un optimum global de la fonction U . Autrement dit, avec des notations quelque peu abusives

$$\lim_{n \rightarrow \infty} U(X_n) \simeq \inf_E U$$

3.4.5 Echantillonneur de Gibbs

Introduction

Comme son homologue l'algorithme de Métropolis-Hastings, l'échantillonneur de Gibbs est une chaîne homogène ayant une mesure invariante prescrite. À la différence du précédent, ce nouveau modèle est intrinsèquement liée à nature de la mesure cible π sur un espace produit $E = S^d$.

On notera par la suite

$$U = (U_1, \dots, U_d)$$

un vecteur aléatoire de loi π sur un espace produit S^d

$$\mathbb{P}((U^1, \dots, U^d) \in d(u_1, \dots, u_d)) = \pi(d(u_1, u_2, \dots, u_d))$$

Exemple 3.4.3 *Pour illustrer cette définition abstraite, reprenons le modèle d'Ising décrit à la fin de la section 3.4. En numérotant l'ensemble des L^2 sites $\{1, \dots, L\}^2$ de 1 à $d = L^2$, on peut identifier l'ensemble $E = \{-1, +1\}^{\{1, \dots, L\} \times \{1, \dots, L\}}$ avec l'ensemble produit $E = \{-1, +1\}^d$. La mesure de Boltzmann-Gibbs associée au potentiel*

$$V : u = (u_1, u_2, \dots, u_d) \in E \mapsto V(u) = h \sum_{i=1}^d u_i + J \sum_{i \sim j} u_i u_j,$$

s'exprime alors sous la forme

$$\pi(u) = \pi(u_1, u_2, \dots, u_d) = \frac{e^{-V(u)}}{Z} = \frac{1}{Z} \exp \left\{ -h \sum_{i=1}^d u_i - J \sum_{i \sim j} u_i u_j \right\}$$

où Z désigne la constante de normalisation.

Pour chaque indice $p = 1, \dots, d$, on note U_p le vecteur aléatoire à valeurs dans S^{d-1} , déduit de U en ôtant la $p^{\text{ième}}$ coordonnée

$$U_p = (U^1, \dots, U^{p-1}, U^{p+1}, \dots, U^d)$$

Autrement dit, nous avons

$$\begin{aligned} U_1 &= (U^2, U^3, \dots, U^d), \quad U_2 = (U^1, U^3, U^4, \dots, U^d) \\ U_3 &= (U^1, U^2, U^4, U^5, \dots, U^d), \dots \end{aligned}$$

On note enfin π_p , la loi du vecteur U_p :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}((U^1, \dots, U^{p-1}, U^{p+1}, \dots, U^d) \in d(u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d)) \\ &= \pi_p(d(u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d)) \end{aligned}$$

et π^p la loi conditionnelle de la v.a. U^p sachant le vecteur U_p

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(U^p \in du_p \mid (U^1, \dots, U^{p-1}, U^{p+1}, \dots, U^d) = (u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d)) \\ &= \pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); du_p) \end{aligned}$$

Autrement dit, la mesure π_p correspond à la marginale de π sur les toutes les coordonnées autres que p , c'est à dire

$$\begin{aligned} & \pi_p(d(u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d)) \\ &= \int_{u_p \in S} \pi(d(u_1, \dots, u_{p-1}, u_p, u_{p+1}, \dots, u_d)) \end{aligned}$$

et pour chaque indice p , nous avons la formule de désintégration

$$\begin{aligned} & \pi(d(u_1, \dots, u_{p-1}, u_p, u_{p+1}, \dots, u_d)) \\ &= \pi_p(d(u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d)) \times \pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); du_p) \end{aligned}$$

Exemple 3.4.4 *En reprenant le modèle d'Ising examiné dans l'exemple 3.4.3, nous avons pour chaque $p = 1, \dots, d$*

$$\begin{aligned} & \pi(u_1, u_2, \dots, u_d) \\ & \propto \prod_{i=1}^d e^{-hu_i - J \sum_{j \sim i} u_j} \\ & \propto e^{-hu_p - J \sum_{i \sim p} u_i} (\sum_{j \sim i} u_j) \times e^{-h \sum_{i \neq p} u_i} \times \prod_{1 \leq i \leq d, i \neq p} e^{-J \sum_{j \sim i} u_j} \end{aligned}$$

On en conclut que

$$\pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); u_p) \propto e^{-hu_p - J \sum_{i \sim p} u_i} (\sum_{j \sim i} u_j)$$

On notera que

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \sim p} u_i \left(\sum_{j \sim i} u_j \right) \\
&= u_p \left(u_p + \sum_{j \sim p, j \neq p} u_j \right) + \sum_{i \sim p, i \neq p} u_i \left(u_p + \sum_{j \sim i, j \neq p} u_j \right) \\
&= 1 + 2u_p \sum_{j \sim p, j \neq p} u_j + \sum_{i \sim p, i \neq p} u_i \sum_{j \sim i, j \neq p} u_j
\end{aligned}$$

de sorte que

$$\pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); u_p) \propto e^{-hu_p - 2J u_p (\sum_{j \sim p, j \neq p} u_j)}$$

Description du modèle

Pour chaque indice p , on note K_p la transition de probabilités de S^p dans S^p correspondant simplement au changement de la $p^{\text{ième}}$ coordonnée. Autrement dit, partant d'un vecteur (u_1, \dots, u_d) , on conserve toutes les coordonnées, sauf la $p^{\text{ième}}$ choisie aléatoirement selon la loi $\pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); du_p)$.

Cette transition peut s'exprimer de façon synthétique par le diagramme suivant :

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{p-1} \\ \mathbf{u}_p \\ u_{p+1} \\ \vdots \\ u_d \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{transition } K_p} \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{p-1} \\ \mathbf{v}_p \\ u_{p+1} \\ \vdots \\ u_d \end{pmatrix}$$

La $p^{\text{ième}}$ coordonnée \mathbf{v}_p est choisie aléatoirement selon la loi conditionnelle de la v.a. U^p sachant que $U_p = (u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d)$. Plus formellement cette transition de probabilité s'exprime sous la forme intégrale

$$\begin{aligned}
& K_p(f)(u_1, \dots, u_d) \\
&= \int_E \pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); du_p) f((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d))
\end{aligned}$$

pour tout fonction bornée f sur S^d , ou plus synthétiquement sous la forme de mesures

$$\begin{aligned}
& K_p((u_1, \dots, u_d); d(v_1, \dots, v_d)) \\
&= \delta_{(u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d)}(d(v_1, \dots, v_{p-1}, v_{p+1}, \dots, v_d)) \\
&\quad \times \pi^p((v_1, \dots, v_{p-1}, v_{p+1}, \dots, v_d); dv_p)
\end{aligned}$$

Par construction, nous avons

$$\begin{aligned} & \pi(d(u_1, \dots, u_d)) K_p((u_1, \dots, u_d); d(v_1, \dots, v_d)) \\ &= \pi(d(v_1, \dots, v_d)) K_p((v_1, \dots, v_d); d(u_1, \dots, u_d)) \end{aligned}$$

pour chaque indice $p = 1, \dots, d$.

Autrement dit, la mesure cible π est une mesure réversible par rapport aux transitions de probabilités K_p . Ceci entraîne que π est une mesure invariante pour chaque K_p

$$\forall p \in \{1, \dots, d\} \quad \pi K_p = \pi$$

À première vue, la chaîne de Markov homogène de transitions K_p semble être candidate pour avoir la mesure cible comme mesure invariante. Ainsi après une période de chauffage, on pourrait penser que les états sont à peu de choses près distribués selon π . **Ceci est loin d'être vrai.** En effet, une chaîne ne modifiant que la $p^{\text{ième}}$ coordonnée serait loin d'être mélangeante. Elle garderait perpétuellement en mémoire ses autres coordonnées !

Afin de palier à ces problèmes, l'échantillonneur de Gibbs est défini en modifiant successivement toutes les coordonnées. Plus précisément, la transition de probabilités correspondante est définie par

$$M = K_1 K_2 \dots K_d$$

On vérifie sans trop de peine que la mesure cible est bien invariante pour cette transition

$$\pi M = \pi(K_1 \dots K_d) = \pi(K_2 \dots K_d) = \dots = \pi K_d = \pi$$

Une transition élémentaire de l'échantillonneur de Gibbs

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_d \end{pmatrix} \xrightarrow{M} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_3 \\ \vdots \\ \mathbf{v}_d \end{pmatrix}$$

peut s'exprimer de façon synthétique par le diagramme suivant :

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_d \end{pmatrix} \xrightarrow{K_1} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_d \end{pmatrix} \xrightarrow{K_2} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_d \end{pmatrix} \xrightarrow{K_3} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_3 \\ \vdots \\ u_d \end{pmatrix} \xrightarrow{K_4} \dots \xrightarrow{K_d} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_3 \\ \vdots \\ \mathbf{v}_d \end{pmatrix}$$

3.5 Mesures de Feynman-Kac et algorithmes de simulation

3.5.1 Introduction

La simulation de mesure de probabilités complexes sur des espaces de grandes dimensions est l'un des problèmes majeurs de l'ingénierie stochastique.

Dans la section 3.4 nous avons interprété ces mesures cibles comme des points fixes de probabilités de transitions. En utilisant le théorème ergodique, une simulation suffisamment longue de la chaîne de Markov associée nous permettait de construire des séquences de v.a. asymptotiquement indépendantes, et approximativement distribuées selon la loi cible désirée. Nous avons examiné deux types d'algorithmes : l'algorithme de Metropolis-Hastings, et l'échantillonneur de Gibbs.

En pratique, le principal avantage de ces deux algorithmes de simulation provient de leur simplicité, avec une formulation particulière élémentaire pour l'algorithme de Metropolis-Hastings. Depuis leur origine, au milieu du siècle dernier, ces modèles sont ainsi devenus très célèbres et d'un usage très courant en physique numérique, en biologie, et plus particulièrement en statistique bayésienne.

Ces techniques de simulation souffrent néanmoins de **deux inconvénients majeurs**. Le premier concerne les temps de calculs nécessaires pour “chauffer” l'algorithme, et obtenir à **une** réalisation à peu près satisfaisante de la loi cible. On notera que ce même temps de calcul sera de plus nécessaire pour simuler une seconde variable plus ou moins indépendante de la première, etc. Le second inconvénient est fondamental si la loi cible dépend d'un paramètre temporel. C'est par exemple le cas des lois conditionnelles en filtrage de signaux. Dans cette situation, les lois cibles dépendent des séquences d'observations délivrées au cours du temps par le capteur de mesure.

Pour illustrer cette situation, supposons que le signal soit modélisé par une chaîne de Markov X_n à valeurs dans un espace d'état E , de loi initiale η_0 et de transitions de probabilités M_n . Autrement dit, nous avons

$$\mathbb{P}(X_0 \in dx_0) = \eta_0(dx_0) \quad \text{et} \quad \mathbb{P}(X_n \in dx_n \mid X_{n-1} = x_{n-1}) = M_n(x_{n-1}, dx_n)$$

Comme nous l'avons souligné dans la section 2.11 consacrée au filtre de Kalman, les valeurs exactes de la chaîne X_n ne sont pas directement observées. Un capteur de mesure nous fournit à chaque étape n certaines informations Y_n sur la valeur de X_n :

$$\begin{array}{ccccccccc} X_0 & \rightarrow & X_1 & \rightarrow & X_2 & \rightarrow & X_3 & \rightarrow & \dots & \text{signal} \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \dots & \\ Y_0 & & Y_1 & & Y_2 & & Y_3 & & \dots & \text{observation} \end{array}$$

Pour fixer les idées, nous conviendrons que ces v.a. Y_n sont réelles et déterminées par une équation de la forme suivante :

$$Y_n = h_n(X_n) + V_n$$

La fonction h_n désigne une fonction d'observation de E dans \mathbb{R} . Les perturbations de mesure V_n seront supposées indépendantes du signal, indépendantes entre elles, gaussiennes, centrées, et normées. Dans le modèle de radar examiné dans la section 2.3, page 32, l'état X_n représente les trois coordonnées de position, vitesse, et accélération d'une cible; la fonction d'observation du radar h_n ne mesure que les coordonnées de positions.

Pour poursuivre notre discussion, il convient de rappeler que les lois a priori des trajectoires de la chaîne

$$X_{[0,n]} = (X_0, \dots, X_n)$$

sont données par les mesures

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n)) &= \mathbb{P}((X_0, \dots, X_n) \in d(x_0, \dots, x_n)) \\ &= \eta_0(dx_0)M_1(x_0, dx_1) \dots M_n(x_{n-1}, dx_n) \end{aligned}$$

Connaissant une trajectoire du signal

$$X_{[0,n]} = (x_0, \dots, x_n)$$

les séquences d'observations forment un vecteur gaussien

$$Y_{[0,n]} = (Y_0, \dots, Y_n) = (h_0(x_0) + V_0, \dots, h_n(x_n) + V_n)$$

distribué selon la loi

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}(Y_{[0,n]} \in d(y_0, \dots, y_n) \mid X_{[0,n]} = (x_0, \dots, x_n)) \\ &\propto \prod_{p=0}^n \exp \left\{ -\frac{1}{2}(y_p - h_p(x_p))^2 \right\} dy_0 \dots dy_n \end{aligned}$$

Sous une forme quelque peu abusive, la formule de Bayes permet de vérifier que l'on a :

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(X_{[0,n]} \in d(x_0, \dots, x_n) \mid Y_{[0,n]} = (y_0, \dots, y_n)) \\ & \propto \mathbb{P}(Y_{[0,n]} \in d(y_0, \dots, y_n) \mid X_{[0,n]} = (x_0, \dots, x_n)) \mathbb{P}(X_{[0,n]} \in d(x_0, \dots, x_n)) \end{aligned}$$

Il devient alors assez facile de se convaincre que les lois conditionnelles recherchées

$$\mathbb{P}(X_{[0,n]} \in d(x_0, \dots, x_n) \mid Y_{[0,n]} = (y_0, \dots, y_n))$$

s'expriment sous la forme synthétique suivante :

$$\frac{1}{\mathcal{Z}_n} \left\{ \prod_{p=0}^n G_p(x_p) \right\} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

avec les fonctions potentiels définies par

$$G_n(x_n) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} (y_n - h_n(x_n))^2 \right\}$$

Les paramètres \mathcal{Z}_n correspondent aux constantes de normalisation

$$\mathcal{Z}_n = \mathbb{E} \left(\prod_{p=0}^n G_p(x_p) \right)$$

Dans ce contexte du filtrage, tenter de simuler ces mesures conditionnelles par des algorithmes de type Metropolis-Hastings ou de Gibbs est une pure folie ! A chaque observation reçue, ces lois conditionnelles cibles changent, et il conviendrait de changer à chaque instant d'algorithme de simulation. Les périodes d'échantillonnage radar entre deux observation ne laissent aucune place à la lenteur de telles stratégies.

Bien entendu, la simulation dynamique de telles mesures trajectorielles est un problème délicat qui doit par essence nécessiter pas mal de puissance de calcul. Conduites par l'évolution technologique, de récentes avancées en ingénierie, et en probabilités appliquées, ont permis de développer **de nouveaux type d'algorithmes d'apprentissage**.

Ces méthodes sont essentiellement fondées sur une interprétation particulière des formules trajectorielles.

Les lois a priori des trajectoires sont utilisées pour élaborer aléatoirement des propositions d'évolution locale de la chaîne de Markov de référence. Lorsque les observations sont reçues, les propositions les plus pertinentes sont conservées au détriment des autres, de sorte à raffiner nos recherches dans les régions les plus vraisemblables.

3.5.2 Description des modèles

Les mesures de Feynman-Kac sont construites suivant une règle qui consiste à assigner à chaque trajectoire d'un processus aléatoire un nombre représentant son degré d'adaptation ou non dans un milieu donné. Ces idées sont dues à Richard Feynman qui proposa après la seconde guerre mondiale une nouvelle théorie quantique selon laquelle une particule emprunte toutes les trajectoires possibles avec des "vraisemblances" plus ou moins grandes. Pour les objets macroscopiques, les contributions de toutes les trajectoires se combinent et s'annulent sauf pour la plus "vraisemblable" d'entre elles.

Ce concept feynmanien d'histoires multiples peut s'étendre à de nombreuses situations rencontrées en physique, en biologie, dans les sciences sociales, et dans les sciences de l'ingénieur :

- **En filtrage**, chaque trajectoire possible du signal est plus ou moins vraisemblable selon les observations reçues par le capteur de mesure.
- **En biologie**, ces histoires multiples entre individus s'interprètent plutôt comme des évolutions d'arbres généalogiques reflétant les degrés d'adaptation de lignes de descendance.
- **En physique statistique**, les trajectoires multiples d'une particule évoluant dans un milieu absorbant peuvent s'interpréter comme des stratégies de survie.
- **En mathématiques financières**, les évolutions multiples de portefeuilles d'actions sont pondérées par les successions de pertes et de gains dans un marché boursier.

D'un point de vue mathématique, les mesures de Feynman-Kac sont des mesures positives sur des espaces E_n . Ces mesures γ_n sont définies pour toutes fonctions bornées f_n par des formules multiplicatives de la forme :

$$\gamma_n(f_n) = \mathbb{E} \left(f_n(X_n) \prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p) \right)$$

Le processus X_n représente une chaîne de Markov à valeurs dans les espaces E_n , de loi initiale η_0 , et de transitions de probabilités M_n de E_{n-1} vers E_n

$$\mathbb{P}(X_0 \in dx_0) = \eta_0(dx_0) \quad \text{et} \quad \mathbb{P}(X_n \in dx_n \mid X_{n-1} = x_{n-1}) = M_n(x_{n-1}, dx_n)$$

Les fonctions G_n représentent des fonctions potentiels de E_n vers $[0, \infty)$. Pour simplifier la présentation, nous conviendrons que ces fonctions G_n sont à valeurs dans $[0, 1]$.

On notera par la suite η_n les mesures de probabilités normalisées définies pour toutes fonctions bornées f_n

$$\eta_n(f_n) = \frac{\gamma_n(f_n)}{\gamma_n(1)} = \frac{\mathbb{E}\left(f_n(X_n) \prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p)\right)}{\mathbb{E}\left(\prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p)\right)}$$

Ces mesures sont bien entendue définies uniquement lorsque la constante de normalisation est non nulle

$$\gamma_n(1) = \mathbb{E}\left(\prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p)\right) > 0$$

Cette formulation abstraite est particulièrement utile si l'on considère des processus historiques

$$X_n = (X'_0, \dots, X'_n)$$

associés à des chaînes auxiliaires sur des espaces E' . Dans cette situation, la formulation précédente permet de décrire sans d'autres efforts des mesures de Feynman-Kac trajectorielles

$$\gamma_n(f_n) = \mathbb{E}\left(f_n(X'_0, \dots, X'_n) \prod_{p=0}^{n-1} G_p(X'_0, \dots, X'_p)\right)$$

3.5.3 Méthodes particulières

Bien que les mesures de Feynman-Kac soient d'un aspect très complexes, leur nature multiplicative permet de les simuler assez simplement. L'idée clé est la suivante. Les variations de masses de probabilités de ces mesures sont dictées par des fonctions potentiels qui se multiplient dans le temps. Ces multiplications rendent plus probables les trajectoires les mieux adaptées, visitant des régions à fort potentiel.

Nous avons déjà rencontré de tels phénomènes de sélection trajectorielle dans notre étude sur les algorithmes génétiques et leurs arbres généalogiques. Dans ce contexte biologique, les lignes ancestrales sont sélectionnées en fonction du degré d'adaptation des individus. La qualité de l'environnement visité est à nouveau mesurée par des fonctions potentiels. Nous terminerons en observant qu'entre les sélections les individus explorent l'espace selon une transition markovienne.

Cette analogie entre les algorithmes génétiques et les formules de Feynman-Kac n'est pas innocente. On considère dans ce qui suit, un algorithme génétique

$$\xi_n = (\xi_n^i)_{1 \leq i \leq N} \in E_n^N \xrightarrow{\text{sélection}} \widehat{\xi}_n = (\widehat{\xi}_n^i)_{1 \leq i \leq N} \in E_n^N \xrightarrow{\text{mutation}} \xi_{n+1}$$

dont les mutations et les sélections sont déterminées à chaque instant n respectivement par les transitions de probabilités M_n , et par les fonctions potentiel G_n . On convient que les individus initiaux $\xi_0 = (\xi_0^i)_{1 \leq i \leq N} \in E_0^N$ forment une suite de v.a. i.i.d. de même loi η_0 .

Dans cette situation, on peut montrer que

$$\forall i \quad \text{Loi}(\xi_n^i) \longrightarrow \eta_n \quad \text{et} \quad \eta_n^N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\xi_n^i} \longrightarrow \eta_n$$

où η_n désigne la mesure de Feynman-Kac associée au couple (G_n, M_n) , et à la loi initiale η_0 . Les convergences précédentes sont entendues lorsque la taille de la population $N \rightarrow \infty$, et pour tout indice temporel $n \in \mathbb{N}$.

Des résultats plus précis permettent de quantifier l'indépendance entre les individus. Intuitivement, lorsque la taille de la population est suffisamment élevée, les individus deviennent indépendants.

Autrement dit, les v.a. $(\xi_n^1, \dots, \xi_n^N)$ sont approximativement indépendantes et de même loi η_n . Cette propriété est appelée **la propagation du chaos**, en ce sens où l'indépendance et l'adéquation initiale des individus se propage au fil du temps.

Nous terminerons cette section par une série de remarques :

- Dans le cadre trajectorien, nous avons vu que les algorithmes génétiques coïncident avec des modèles d'arbres généalogiques. Les résultats de convergence précédents restent valables. Dans ce contexte, la loi d'une quelque ligne ancestrale après l'étape de mutation

$$\xi_n^i = (\xi_{0,n}^i, \dots, \xi_{n,n}^i)$$

ainsi que leur mesures d'occupation

$$\eta_n^N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{(\xi_{0,n}^i, \dots, \xi_{n,n}^i)}$$

convergent vers les mesures de Feynman-Kac trajectorielles correspondantes

$$\eta_n(f_n) = \frac{\mathbb{E} \left(f_n(X'_0, \dots, X'_n) \prod_{p=0}^{n-1} G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}{\mathbb{E} \left(\prod_{p=0}^{n-1} G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}$$

- Est-il possible d'estimer les constantes de normalisation

$$\gamma_n(1) = \mathbb{E} \left(\prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p) \right)$$

et plus généralement les mesures Feynman-Kac non normalisées

$$\gamma_n(f_n) = \mathbb{E} \left(f_n(X_n) \prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p) \right) ?$$

Pour répondre à cette question, il convient de noter que l'on a

$$\gamma_{n+1}(1) = \gamma_n(G_n) = \frac{\gamma_n(G_n)}{\gamma_n(1)} \times \gamma_n(1) = \eta_n(G_n) \times \gamma_n(1)$$

Ceci nous amène à la formule multiplicative suivante

$$\gamma_n(1) = \mathbb{E} \left(\prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p) \right) = \prod_{p=0}^{n-1} \eta_p(G_p)$$

En un certain sens, nous avons réussi par un simple artifice à inverser le signe de l'espérance \mathbb{E} avec le produit. Cette formule magique nous permet d'écrire les mesures non normalisées en terme du flot de mesures normalisées

$$\gamma_n(f_n) = \eta_n(f_n) \times \prod_{p=0}^{n-1} \eta_p(G_p)$$

Cette remarque élémentaire nous permet de définir de façon naturelle des estimateurs γ_n^N des mesures γ_n , en remplaçant dans la formule précédente, les lois η_n par les mesures empiriques

$$\gamma_n^N(f_n) = \eta_n^N(f_n) \times \prod_{p=0}^{n-1} \eta_p^N(G_p)$$

Cette recette élégante permet de définir des estimateurs non biaisés des mesures non normalisées

$$\mathbb{E}(\gamma_n^N(f_n)) = \gamma_n(f_n) \quad \text{et} \quad \gamma_n^N \longrightarrow \gamma_n$$

- Les mesures γ_n et η_n ne font intervenir que des produits de potentiel de $p = 0$ à $p = (n - 1)$. Dans de nombreuses situations, on est plutôt intéressé par les mesures

$\widehat{\gamma}_n$ et $\widehat{\eta}_n$ définies en termes de produits jusqu'au temps terminal

$$\begin{aligned}\widehat{\gamma}_n(f_n) &= \mathbb{E} \left(f_n(X_n) \prod_{p=0}^n G_p(X_p) \right) \\ &= \mathbb{E} \left([f_n(X_n) G_n(X_n)] \prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p) \right) \\ &= \gamma_n(f_n G_n)\end{aligned}$$

et

$$\widehat{\eta}_n(f_n) = \frac{\widehat{\gamma}_n(f_n)}{\widehat{\gamma}_n(1)} = \frac{\gamma_n(f_n G_n)}{\gamma_n(G_n)} = \frac{\gamma_n(f_n G_n)/\gamma_n(1)}{\gamma_n(G_n)/\gamma_n(1)} = \frac{\eta_n(f_n G_n)}{\eta_n(G_n)}$$

Les formules précédentes soulignent le fait que ces mesures s'expriment simplement en terme des précédentes :

$$\widehat{\eta}_n(f_n) = \frac{\eta_n(f_n G_n)}{\eta_n(G_n)} \quad \text{et} \quad \widehat{\gamma}_n(f_n) = \gamma_n(f_n G_n)$$

En reprenant les notations précédentes, on peut ainsi considérer les estimateurs particuliers

$$\widehat{\eta}_n^N(f_n) = \frac{\eta_n^N(f_n G_n)}{\eta_n^N(G_n)} = \sum_{i=1}^N \frac{G_n(\xi_n^i)}{\sum_{j=1}^N G_n(\xi_n^j)} f_n(\xi_n^i)$$

et

$$\begin{aligned}\widehat{\gamma}_n^N(f_n) &= \gamma_n^N(f_n G_n) = \eta_n^N(f_n G_n) \times \prod_{p=0}^{n-1} \eta_p^N(G_p) \\ &= \widehat{\eta}_n^N(f_n) \times \prod_{p=0}^n \eta_p^N(G_p)\end{aligned}$$

Enfin, si l'on souhaite simuler des variables aléatoires de loi $\widehat{\eta}_n$, il suffit de considérer l'algorithme particulière après la $n^{\text{ième}}$ sélection

$$\forall i \quad \text{Loi}(\widehat{\xi}_n^i) \longrightarrow \widehat{\eta}_n \quad \text{et} \quad \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\widehat{\xi}_n^i} \longrightarrow \widehat{\eta}_n$$

Dans le cadre trajectorien, la loi d'une quelque ligne ancestrale après l'étape de sélection

$$\widehat{\xi}_n^i = (\widehat{\xi}_{0,n}^i, \dots, \widehat{\xi}_{n,n}^i)$$

ainsi que leur mesures d'occupation

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{(\hat{\xi}_{0,n}^i, \dots, \hat{\xi}_{n,n}^i)}$$

convergent vers les mesures de Feynman-Kac trajectorielles correspondantes

$$\hat{\eta}_n(f_n) = \frac{\mathbb{E} \left(f_n(X'_0, \dots, X'_n) \prod_{p=0}^n G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}{\mathbb{E} \left(\prod_{p=0}^n G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}$$

La complexité temporelle des techniques de simulation par chaînes de Markov ayant une mesure invariante prescrite est ici remplacée par **une complexité spatiale**. On n'a plus besoin d'attendre une quelconque période de chauffage, mais on doit avoir une certaine capacité de mémoire pour faire évoluer de grandes population d'individus. Comme nous l'avons déjà noté, les performances de ces algorithmes adaptatifs augmentent avec les développements technologiques modernes.

Ces algorithmes évolutionnaires d'apprentissage sont en adéquation parfaite avec **les mécanismes d'adaptation biologique**. Ils sont d'un usage courant en ingénierie et plus particulièrement en intelligence artificielle. Ils permettent d'élaborer des machines s'adaptant de manière automatique, et sans intervention extérieure, en fonction d'observations.

3.5.4 Chaîne de Markov restreintes

Examinons pour conclure la situation où les fonctions potentiels sont des indicatrices d'ensembles

$$G_n = 1_{A_n} \quad \text{avec} \quad A_n \subset E_n$$

Dans ce cas, γ_n correspond aux lois des états de la chaîne de Markov restreinte à l'évènement

$$\{X_0 \in A_0, \dots, X_{n-1} \in A_{n-1}\}$$

Plus précisément, nous avons

$$\begin{aligned} \gamma_n(f_n) &= \mathbb{E} \left(f_n(X_n) \prod_{p=0}^{n-1} 1_{A_p}(X_p) \right) \\ &= \mathbb{E} \left(f_n(X_n) 1_{X_0 \in A_0, \dots, X_{n-1} \in A_{n-1}} \right) \\ &= \mathbb{E} \left(f_n(X_n) ; (X_0 \in A_0, \dots, X_{n-1} \in A_{n-1}) \right) \end{aligned}$$

Lorsque la fonction test est la fonction constante $f_n = 1$, on a aussi

$$\gamma_n(1) = \mathbb{P}(X_0 \in A_0, \dots, X_{n-1} \in A_{n-1})$$

Par conséquent, après avoir pris le soin de vérifier que l'évènement en question est bien probable $\gamma_n(1) > 0$, les mesures de probabilités normalisées

$$\eta_n(f_n) = \gamma_n(f_n)/\gamma_n(1)$$

coincident avec les lois conditionnelles du processus de Markov

$$\eta_n = \text{Loi}(X_n \mid X_0 \in A_0, \dots, X_{n-1} \in A_{n-1})$$

Dans le même registre, mais dans le cadre trajectorien examiné ci-dessus, le choix des fonctions potentiels

$$G_n(X'_0, \dots, X'_n) = 1_A(X'_n) \quad \text{avec} \quad A \subset E'$$

conduit aux lois conditionnelles des trajectoires restreintes à l'ensemble A

$$\eta_n = \text{Loi}((X'_0, \dots, X'_n) \mid X'_0 \in A, \dots, X'_{n-1} \in A)$$

Il existe de nombreuses variantes, et divers raffinements de ces modèles de Markov restreints. L'idée suivante m'a été communiquée par F. Le Gland, directeur de recherches à l'Irisa de Rennes. Dans certains cas, la contrainte $X_k \in A_k$ portant sur l'état X_k de la chaîne de Markov doit être remplacée par une contrainte du type $(X_{k-1}, X_k) \in B_k$, où $B_k \subset E_{k-1} \times E_k$, portant sur la transition entre les deux états successifs X_{k-1} et X_k . Par exemple, pour modéliser le déplacement d'un mobile (robot mobile, utilisateur humain ou humanoïde, etc.) à l'intérieur d'un bâtiment, il faut tenir compte que certaines transitions de X_{k-1} à X_k sont impossibles, même si séparément les positions X_{k-1} et X_k sont admissibles : c'est en particulier le cas si le segment reliant X_{k-1} à X_k rencontre un obstacle (typiquement, une cloison intérieure). Dans ce cas, il suffit simplement de considérer une nouvelle chaîne de Markov formée par les transitions entre deux états successifs de la chaîne de Markov originale, et on se ramène au cas précédent.

Pour prendre en compte automatiquement la contrainte due à la présence d'obstacles, une autre approche consiste à considérer un modèle de Markov simplifié, à valeurs dans un espace d'état hybride : dans ce modèle, le mobile se déplace sur un graphe représentant schématiquement les couloirs du bâtiment et les différents embranchements permettant de passer d'une pièce à l'autre, avec un modèle de déplacement markovien particulier, de type marche aléatoire sur chaque arête du graphe, et avec un choix aléatoire entre les différents embranchements possibles à chaque nœud du graphe.

3.5.5 Filtre, et prédicteur optimal

Nous allons étendre légèrement le modèle de filtrage décrit dans l'introduction, section 3.5.1. Le signal X_n est à nouveau une chaîne de Markov abstraite à valeurs dans un espace d'état E , de loi initiale η_0 et de transitions de probabilités M_n . Un capteur de mesure nous fournit à chaque instant une observation partielle et bruitée à valeurs dans \mathbb{R}^d . On conviendra que ces observations Y_n sont déterminée par une équation de la forme

$$Y_n = h_n(X_n) + V_n$$

La fonction h_n désigne une fonction d'observation de E dans \mathbb{R}^d , et les perturbations de mesure V_n seront supposées indépendantes du signal, indépendantes entre elles, et distribuées selon une loi absolument continue de densité g_n .

$$\mathbb{P}(V_n \in dv_n) = g_n(v_n) dv_n$$

Le modèle scalaire examiné dans l'introduction correspond à la situation où les perturbations de mesures sont gaussiennes

$$g_n(v_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v_n^2}{2}} dv_n$$

Connaissant une trajectoire du signal

$$X_{[0,n]} = (x_0, \dots, x_n)$$

les séquences d'observations forment une suite de variables indépendantes

$$Y_{[0,n]} = (Y_0, \dots, Y_n) = (h_0(x_0) + V_0, \dots, h_n(x_n) + V_n)$$

distribués selon la loi

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(Y_{[0,n]} \in d(y_0, \dots, y_n) \mid X_{[0,n]} = (x_0, \dots, x_n)) \\ & \propto \prod_{p=0}^n g_n(y_p - h_p(x_p)) dy_0 \dots dy_n \end{aligned}$$

Par des raisonnements analogues à ceux utilisés dans l'introduction, on peut vérifier que les lois conditionnelles recherchées

$$\widehat{\eta}_n(d(x_0, \dots, x_n)) = \mathbb{P}(X_{[0,n]} \in d(x_0, \dots, x_n) \mid Y_{[0,n]} = (y_0, \dots, y_n))$$

s'expriment sous la forme synthétique suivante :

$$\widehat{\eta}_n(d(x_0, \dots, x_n)) = \frac{1}{\mathcal{Z}_n} \left\{ \prod_{p=0}^n G_p(x_p) \right\} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

avec les fonctions potentiels non homogènes, dépendant des observations courantes, et définis par la formule

$$G_n(x_n) = g_n(y_n - h_n(x_n))$$

Les paramètres \mathcal{Z}_n correspondent aux constantes de normalisation

$$\mathcal{Z}_n = \mathbb{E} \left(\prod_{p=0}^n G_p(x_p) \right)$$

Autrement dit, pour toute fonction borné f_n sur l'espace des trajectoires du signal nous avons

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(f_n(X_0, \dots, X_n) \mid Y_{[0,n]} = (y_0, \dots, y_n)) \\ &= \frac{\mathbb{E}(f_n(X_0, \dots, X_n) \prod_{p=0}^n G_p(X_p))}{\mathbb{E}(\prod_{p=0}^n G_p(X_p))} \end{aligned}$$

On pourra remarquer que les marginales de ces mesures sur l'instant terminal sont données pour toute fonction borné φ_n sur E par la formule

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(\varphi_n(X_n) \mid Y_{[0,n]} = (y_0, \dots, y_n)) \\ &= \frac{\mathbb{E}(\varphi_n(X_n) \prod_{p=0}^n G_p(X_p))}{\mathbb{E}(\prod_{p=0}^n G_p(X_p))} \end{aligned}$$

3.5.6 Polymères dirigés

En biologie, et en chimie industrielle, les mesures de Feynman-Kac permettent de modéliser des formations cinétiques de chaînes de polymères et de macro-molécules dans un solvant.

Un polymère de longueur n peut s'interpréter comme une suite de variables aléatoires

$$X_n = (X'_0, \dots, X'_n) \in E_n = \underbrace{E' \times \dots \times E'}_{(n+1)\text{-termes}}$$

à valeurs dans un espace d'état E' muni d'une métrique d . Le paramètre de longueur n représente le degré de polymérisation entre les différents monômes X'_p , $0 \leq p \leq n$.

Ces derniers sont connectés deux à deux par des liaisons chimiques. Les formations cinétiques de ces macro-molécules conduisent à agencements chimique, et à des formes géométriques dictées par un potentiel d'énergie

$$G_n(X_n) = G_n(X'_0, \dots, X'_n)$$

mesurant les degrés d'interaction à chaque étape de la polymérisation

$$X_{n-1} = (X'_0, \dots, X'_{n-1}) \rightsquigarrow X_n = (X'_0, \dots, X'_n)$$

Ces potentiels d'interaction sont le plus souvent de la forme

$$G_n(x_0, \dots, x_n) = \exp(-\beta V_n(x_0, \dots, x_n)) \quad (3.5)$$

Le paramètre $\beta \in \mathbb{R}_+$ représente la température du solvant. Les fonctions d'énergie $V_n(x_0, \dots, x_n)$ représentent les forces d'attraction, ou de répulsion physico-chimique de chaque polymérisation.

A basse température $\beta \uparrow \infty$, les interactions entre monômes à longue ou courte distance sont généralement de nature soit répulsive, soient attractive. On modélise ces situations par des effets d'inclusions, ou d'exclusions volumique, de sorte à ce que les monômes subissent des forces d'exclusions ou d'attractions.

A haute température $\beta \downarrow 0$, les interactions inter-moléculaires disparaissent, et la formation cinétique des "macro-molécules" se réduit à une évolution libre et chaotique. On représente cette évolution par la donnée d'une chaîne de Markov en évolution libre dans E' , de loi initiale η'_0 , et de transitions M'_n

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n)) &= \mathbb{P}((X'_0, \dots, X'_n) \in d(x_0, \dots, x_n)) \\ &= \eta'_0(dx_0) M'_1(x_0, dx_1) \dots M'_n(x_{n-1}, dx_n) \end{aligned}$$

La formation cinétique de macro-molécules liées à des potentiels d'interaction G_n peut se représenter par une mesure de Feynman-Kac

$$\frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta,n}} \left\{ \prod_{p=0}^n G_p(x_0, \dots, x_p) \right\} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

Pour les potentiels d'interaction exponentiels (3.5), cette mesure s'exprime sous la forme d'une mesure de Boltzmann-Gibbs

$$\frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta,n}} \exp \left\{ -\beta \sum_{p=0}^n V_p(x_0, \dots, x_n) \right\} \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

Avant de présenter deux situations pratiques, on notera que ces mesures trajectorielles s'expriment alternativement par la formule

$$\frac{\mathbb{E} \left(f_n(X'_0, \dots, X'_n) \prod_{p=1}^n G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}{\mathbb{E} \left(\prod_{p=1}^n G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}$$

pour toute fonction test bornée f_n sur E_n . On peut ainsi les estimer, et les simuler par les techniques d'arbres généalogiques décrites précédemment.

3.5.7 Chaînes auto-évitantes

Les deux modèles suivants représentent des formations de polymères dirigés dans le réseau $E' = \mathbb{Z}^d$. Dans les deux cas, la chaîne de Markov de référence correspond à une marche aléatoire simple, initialisée en l'origine ($\eta'_0 = \delta_0$), et de transitions de probabilités données par

$$M'_n(x, dy) = \frac{1}{2d} \sum_{u \in \mathcal{U}} \delta_{x+u}(dy) \quad \text{avec} \quad \mathcal{U} = \{u \in \mathbb{Z}^d : |u| = 1\}$$

Le modèle d'Edwards

Le modèle d'auto-évitement d'Edwards correspond à la situation où chaque polymérisation d'un nouveau monôme

$$\forall p \in \{1, \dots, n\} \quad X_{p-1} = (X'_0, \dots, X'_{p-1}) \rightsquigarrow X_p = (X'_0, \dots, X'_p)$$

est pénalisée par le nombre de ses points de contact avec la chaîne précédente

$$\forall p \in \{1, \dots, n\} \quad V_p((x_0, \dots, x_{p-1}), x_p) = \sum_{k=0}^{p-1} 1_{x_k}(x_p)$$

Pour $p = 0$, on convient que $V_0 = 0$. On a clairement

$$\sum_{q=1}^n \sum_{p=0}^{q-1} 1_{x_p=x_q} = \sum_{0 \leq p < q \leq n} 1_{x_p=x_q}$$

Par conséquent, la mesure de Feynman-Kac correspondante s'exprime sous la forme suivante

$$\frac{1}{Z_{\beta,n}} \exp(-\beta \sum_{0 \leq p < q \leq n} 1_{x_p=x_q}) \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

En terme d'intégrales multiplicatives, ces mesures ont la forme

$$\frac{\mathbb{E} \left(f_n(X'_0, \dots, X'_n) \prod_{p=1}^n G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}{\mathbb{E} \left(\prod_{p=1}^n G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)}$$

avec les fonctions potentiel

$$G_p(X'_0, \dots, X'_p) = \exp \left\{ -\beta \sum_{k=0}^{p-1} 1_{X'_k}(X'_p) \right\}$$

Chaînes auto-évitantes

Les chaînes auto-évitantes correspondent à la situation où les polymérisations d'un nouveau monôme

$$\forall p \in \{1, \dots, n\} \quad X_{p-1} = (X'_0, \dots, X'_{p-1}) \rightsquigarrow X_p = (X'_0, \dots, X'_p)$$

ne peuvent avoir de contact avec les précédentes valeurs. Ce modèle s'exprime à nouveau par des mesures de Feynman-Kac trajectorielles

$$\hat{\eta}_n(f_n) = \hat{\gamma}_n(f_n) / \hat{\gamma}_n(1)$$

avec

$$\hat{\gamma}_n(f_n) = \mathbb{E} \left(f_n(X'_0, \dots, X'_n) \prod_{p=1}^n G_p(X'_0, \dots, X'_p) \right)$$

et des fonctions potentiel indicatrices

$$G_p(x_0, \dots, x_p) = 1_{\{x_0, \dots, x_{p-1}\}}(x_p)$$

Par définition des mesures $\hat{\gamma}_n$ et $\hat{\eta}_n$, nous avons

$$\hat{\gamma}_n(1) = \mathbb{P}(\forall 0 \leq p < q \leq n, \quad X'_p \neq X'_q) > 0$$

$$\hat{\eta}_n = \text{Loi}((X'_0, \dots, X'_n) \mid \forall 0 \leq p < q \leq n, \quad X'_p \neq X'_q)$$

Dans l'exercice 3.5.1, nous montrerons que la constante de normalisation $\widehat{\gamma}_n(1)$ est donnée par

$$\widehat{\gamma}_n(1) = a(n)/(2d)^n$$

où $a(n)$, désigne le nombre de marches auto-évitantes de longueur n sur le réseau \mathbb{Z}^d . Le calcul exact de cette constante est un problème de combinatoire très complexe, qui n'a à ce jour toujours pas été résolu. Il semble plus ou moins clair que l'on a

$$a(n) = a n^b e^{nc} (1 + o(1))$$

pour un paramètre d'amplitude a , un exposant d'entropie b , et une constante de connectivité c . Cette expression asymptotique de $a(n)$ a été démontrée il y a une quinzaine d'années par T. Hara, et G. Slade ([4]). En dimension $d = 2$, le problème reste toujours ouvert. Beaucoup d'autres questions restent en suspens dans \mathbb{Z}^d , comme l'existence de la limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a(n+1)}{a(n)} \simeq \lim_{n \rightarrow \infty} e^c \left(1 + \frac{1}{n}\right)^b \rightarrow e^c ?$$

Les meilleures estimations connues issues d'algorithmes de simulation sont à peu près les suivantes :

$$e^c \simeq 2,638158 \quad \text{et} \quad b \simeq 0,34372$$

Les méthodes de Monte-Carlo utilisées en physique numérique sont de la même mouture que les interprétations particulières des formules de Feynman-Kac sous-jacentes.

Exercice 3.5.1 On note $|\mathbf{A}_n|$ le cardinal de l'ensemble

$$\mathbf{A}_n = \{(x_0, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^d)^{n+1} : (\forall 0 \leq p < q \leq n) |x_{p+1} - x_p| = 1, \quad x_p \neq x_q\}$$

formé par les marches aléatoires auto-évitantes sur \mathbb{Z}^d , initialisées en l'origine.

1. Montrer que l'on a

$$\widehat{\gamma}_n(1) = |\mathbf{A}_n|/(2d)^n$$

et

$$\begin{aligned} \eta_n(G_n) &= \mathbb{P}(X_n \notin \{X_0, \dots, X_{n-1}\} \mid \forall 0 \leq p < q < n, \quad X'_p \neq X'_q) \\ &= |\mathbf{A}_n|/(|\mathbf{A}_{n-1}|(2d)) \end{aligned}$$

2. Vérifier les inégalités suivantes

$$|\mathbf{A}_{p+q}| \leq |\mathbf{A}_p| |\mathbf{A}_q| \quad \text{et} \quad d^n \leq |\mathbf{A}_n| \leq 2d (2d - 1)^n$$

en conclure que

$$c = \lim_{n \rightarrow \infty} |\mathbf{A}_n|^{1/n} \in [d, (2d - 1)]$$

3. Dédire des questions précédentes que l'on a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \widehat{\gamma}_n(1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n+1} \sum_{p=0}^n \log \eta_n(G_n) = \log(c/2d)$$

et proposer un schéma particulière permettant de calculer la constante c .

3.5.8 Mesures de Boltzman-Gibbs

Les méthodes de simulation particulières décrites dans les sections précédentes sont aussi utiles pour simuler des mesures de Boltzman-Gibbs de la forme

$$\Psi_G(\mu)(dx) = \frac{1}{\mu(G)} G(x) \mu(dx) \quad \text{avec} \quad \mu(G) = \int G(x) \mu(dx)$$

Dans la définition précédente, μ désigne une mesure de probabilité sur un espace d'états E , et G une fonction potentiel bornée à valeurs dans $[0, 1]$. L'application Ψ_G est une transformation dans l'espace des probabilités. Elle associe à une mesure de probabilité μ , telle que $\mu(G) > 0$, une nouvelle probabilité déduite de μ par une opération de multiplication par la fonction G , suivie d'une simple normalisation. Cette formulation abstraite permet de couvrir de nombreuses situations.

Queues de distributions

Pour illustrer la méthodologie particulière sous-jacente, commençons par l'exemple élémentaire des queues de distributions. Lorsque $E = \mathbb{R}$, le choix des fonctions indicatrices

$$G = G_a = 1_{[a, \infty[}$$

de demi droites $[a, \infty[$, conduit à fonction de répartition conditionnelle d'une variable aléatoire X de loi μ

$$\begin{aligned} \Psi_{G_a}(\mu)(dx) &= \frac{1}{\mu(G_a)} G_a(x) \mu(dx) \\ &= \frac{1}{\mu([a, \infty[)} 1_{[a, \infty[}(x) \mu(dx) = \mathbb{P}(X \in dx \mid X \geq a) \end{aligned}$$

Cette définition n'a de sens que si $\mu(G_a) > 0$. La plupart des méthodes de simulation de Monte-carlo s'effondrent lorsque le paramètre a est trop élevé. Notons $M_a(x, dy)$ une transition markovienne de mesure invariante

$$\Psi_{G_a}(\mu)(dx) = \frac{1}{\mu([a, \infty[)} 1_{[a, \infty[}(x) \mu(dx)$$

Lorsque la mesure de référence μ est réversible par rapport à une transition $M(x, dy)$, on peut choisir la transition de Metropolis-Hastings

$$\begin{aligned} M_a(x, dy) &= M(x, dy) G_a(y) + (1 - M(G_a)(x)) \delta_x(dy) \\ &= M(x, dy) 1_{[a, \infty[}(y) + (1 - M(x, [a, \infty[)) \delta_x(dy) \end{aligned}$$

Simuler une variable de loi $M_a(x, dy)$ partant d'un état x revient à proposer tout d'abord une transition de loi $M(x, dy)$. On accepte ensuite cette transition lorsque qu'elle tombe dans l'ensemble désiré $[a, \infty[$. Dans le cas contraire, on reste au point de

départ x . Lorsque le niveau a est trop élevé, cet algorithme reste bloqué pendant de nombreuses itérations, en attendant que par chance l'on propose un point au delà de a .

Pour palier à ce problème, une idée naturelle consiste à introduire une suite d'intervalles emboîtés conduisant aux extrêmes désirés. Ces derniers peuvent par exemple être choisis de la forme suivante

$$[a_0, \infty[\supset [a_1, \infty[\supset \dots \supset [a_{n-1}, \infty[\supset [a_n, \infty[\quad \text{avec} \quad a_n = a$$

Intuitivement, la stratégie consiste à choisir la suite croissante $(a_k)_{k=0, \dots, n}$ de sorte que chaque intervalle $[a_k, \infty[$ soit plus facile d'accès partant de $[a_{k-1}, \infty[$. Pour préciser cette approche, il convient tout d'abord de remarquer que l'on a les formules suivantes :

$$\mu_{a_k} = \mu_{a_k} M_{a_k} \quad \text{et} \quad \Psi_{G_{a_k}}(\mu_{a_{k-1}}) = \mu_{a_k}$$

Le second résultat provient simplement du fait que l'on a la propriété multiplicative

$$G_{a_{k-1}} \times G_{a_k} = G_{a_k} \quad (\Leftrightarrow 1_{[a_{k-1}, \infty[} \times 1_{[a_k, \infty[} = 1_{[a_k, \infty[})$$

Modèles de Feynman-Kac

D'après les observations précédentes, le flot de mesures de probabilités définies par

$$\eta_k = \mu_{a_k}, \quad k = 0, \dots, n$$

satisfait l'équation récursive

$$\eta_k = \Psi_{g_{k-1}}(\eta_{k-1}) M_{a_k} \quad \text{avec} \quad g_{k-1} = G_{a_k} \quad (3.6)$$

La solution de cette équation est à nouveau donnée par la mesure de Feynman-Kac définie pour toute fonction test bornée f par la formule suivante

$$\eta_k(f) = \gamma_k(f) / \gamma_k(1)$$

avec

$$\gamma_k(f) = \mathbb{E} \left(f(X_k) \prod_{p=0}^{k-1} g_p(X_p) \right) \quad \text{et les fonctions potentiel} \quad g_p = G_{a_{p+1}}$$

Dans la définition précédente, la séquence $(X_k)_{k=0, \dots, n}$ désigne une chaîne de Markov non homogène de loi initiale $\text{Loi}(X_0) = \mu$, et de transitions de probabilités données par

$$\mathbb{P}(X_k \in dy \mid X_{k-1} = x) = M_{a_k}(x, dy)$$

Pour vérifier que ces mesures sont bien la solution du système (3.6), on commence par noter que l'on a

$$\begin{aligned}\gamma_k(f) &= \mathbb{E} \left(\mathbb{E}(f(X_k) \mid (X_0, \dots, X_{k-1})) \prod_{p=0}^{k-1} g_p(X_p) \right) \\ &= \mathbb{E} \left(M_{a_k}(f)(X_k) g_{k-1}(X_{k-1}) \times \prod_{p=0}^{k-2} g_p(X_p) \right) = \gamma_{k-1}(g_{k-1} M_{a_k}(f))\end{aligned}$$

On obtient ainsi la formule récursive recherchée

$$\eta_k(f) = \frac{\gamma_{k-1}(g_{k-1} M_{a_k}(f))}{\gamma_{k-1}(g_{k-1})} = \frac{\eta_{k-1}(g_{k-1} M_{a_k}(f))}{\eta_{k-1}(g_{k-1})} = \Psi_{g_{k-1}}(\eta_{k-1}) M_{a_k}(f)$$

Pour conclure cette discussion, on peut noter que l'on a

$$\eta_k(g_k) = \mu(g_k) / \mu(g_{k-1})$$

pour tout $0 \leq k < n$. Par conséquent, nous avons la formule télescopique

$$\gamma_n(1) = \prod_{p=0}^{n-1} \eta_p(g_p) = \prod_{p=0}^{n-1} \frac{\mu(g_p)}{\mu(g_{p-1})} = \frac{\mu(G_{a_n})}{\mu(G_{a_0})}$$

Les interprétations particulières de ces formules décrites dans la section 3.5.3 peuvent s'interpréter comme des algorithmes de Metropolis-Hastings en interaction. Les étapes de mutations correspondent à des propositions de transitions selon les noyaux de Markov M_{a_k} . L'étape de rejet est remplacée par une étape de sélection. Dans l'exemple précédent, les mauvaises propositions sont automatiquement remplacées par des transitions ayant réussi à passer le niveau supérieur. L'estimation des queues de probabilités coïncide avec celle des constantes de normalisation. L'approximation numérique s'effectue donc en multipliant les proportions de réussites et de passage entre chaque niveau.

Extensions

Les modèles précédents peuvent s'étendre à des mesures de Boltzman-Gibbs de la forme

$$\Psi_G(\mu)(dx) = \frac{1}{\mu(G)} G(x) \mu(dx) \quad \text{avec} \quad \mu(G) = \int G(x) \mu(dx)$$

où G désigne une fonction potentiel à valeurs dans $[0, 1]$. Pour ce faire, il suffit de s'assurer que les fonctions potentiel G peuvent se factoriser en terme d'une séquence de fonctions g_k de longueur quelconque

$$G = g_0 \times g_1 \times \dots \times g_n$$

Examinons deux situations classiques rencontrées en pratique.

- Pour des fonctions exponentielles

$$G = e^{-\beta U}$$

associées à une fonction énergie U , et un paramètre de température β , on peut choisir

$$g_0 = e^{-(\beta_1 - \beta_0) U}, \quad g_1 = e^{-(\beta_2 - \beta_1) U}, \quad \dots, \quad g_n = e^{-(\beta_n - \beta_{n-1}) U}$$

où $(\beta_k)_{k=0, \dots, n}$ désigne un schéma de température inverse sur une durée quelconque n , d'origine $\beta_0 = 0$, et terminant en la température désirée $\beta_n = \beta$

- Pour des fonctions indicatrices d'ensembles

$$G_n = 1_A$$

on peut choisir des fonctions indicatrices

$$g_0 = 1_{A_0}, \quad g_1 = 1_{A_1}, \quad \dots, \quad g_n = 1_{A_n}$$

où $(A_k)_{k=0, \dots, n}$ désigne une suite d'ensembles emboîtés de longueur quelconque

$$A_0 \supset A_1 \supset \dots \supset A_n \quad \text{avec} \quad A_n = A$$

Comme précédemment, les fonctions potentiel

$$G_n = e^{-\beta_n U} \quad \text{et} \quad G_n = 1_{A_n}$$

associées aux températures inverses β_n , ou aux ensembles A_n vérifient la formule multiplicative

$$G_{n-1} \times g_n = G_n \tag{3.7}$$

On note par la suite η_n la mesure de Boltzman-Gibbs

$$\eta_n(dx) = \frac{1}{\mu(G_n)} G_n(x) \mu(dx) \quad \text{avec} \quad \mu(G_n) = \int G_n(x) \mu(dx)$$

On considère des transitions markoviennes $M_n(x, dy)$ de mesure invariante η_n , autrement dit

$$\eta_n = \eta_n M_n$$

Lorsque la mesure de référence μ est réversible par rapport à une transition $M(x, dy)$, on peut choisir la transition de Metropolis-Hastings donnée par

$$M_n(x, dy) = M(x, dy) G_n(y) + (1 - M(G_n)(x)) \delta_x(dy)$$

Simuler une variable de loi $M_n(x, dy)$ partant d'un état x revient à proposer tout d'abord une transition $x \rightsquigarrow y$ de loi $M(x, dy)$. On accepte ensuite cette transition avec

une probabilité $G(y)$. Dans le cas contraire, on reste au point de départ x . On vérifie que η_n est invariante par l'action de M_n , en remarquant que pour toute fonction test bornée f , nous avons

$$\begin{aligned}\mu(G_n M_n(f)) &= \mu(G_n M(f G_n)) + \mu(G_n [1 - M(G_n)]f) \\ &= \mu(M_n(G_n)(f G_n)) + \mu(G_n f) - \mu(G_n M(G_n)f) = \mu(G_n f)\end{aligned}$$

En normalisant ces mesures, on obtient le résultat recherché

$$\eta_n M_n(f) = \frac{\mu(G_n M_n(f))}{\mu(G_n)} = \frac{\mu(G_n f)}{\mu(G_n)} = \eta_n(f)$$

Il reste alors à utiliser la propriété multiplicative (3.7) pour s'assurer que le flot de mesures η_n satisfait l'équation suivante

$$\eta_n = \eta_n M_n = \Psi_{g_n}(\eta_{n-1}) M_n$$

Les modèles de Feynman-Kac et leurs interprétations particulières sont identiques aux modèles décrits précédemment. Dans les deux cas, l'algorithme de simulation peut s'interpréter comme des évolutions de chaînes de Metropolis-Hastings en interaction. Dans le cas des mesures de Boltzmann-Gibbs associées à des potentiels exponentiels, ces modèles correspondent plutôt à des algorithmes de recuit simulé en interaction. On pourra noter que l'interaction diminue lorsque les variations des températures inverses décroissent $(\beta_n - \beta_{n-1}) \downarrow 0$.

Chapitre 4

Corrections

Exercice 2.6.1 :

1. Par construction, nous avons

$$\sum_{i=1}^{\hat{p}_n} f(\hat{\mathcal{X}}_n^i) = \sum_{i=1}^{p_n} g_n^i(\mathcal{X}_n^i) f(\mathcal{X}_n^i) \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^{p_{n+1}} f(\mathcal{X}_{n+1}^i) = \sum_{i=1}^{\hat{p}_n} f(\mathcal{X}_{n+1}^i)$$

2. On commence par noter que

$$s(\hat{\mathcal{X}}_{n+1}) = 1_{\hat{p}_n > 0} \sum_{i=1}^{\hat{p}_n} \delta_{\hat{\mathcal{X}}_n^i}$$

Par conséquent, nous avons

$$\mathbb{E}(s(\hat{\mathcal{X}}_n)(f_n) \mid \mathcal{X}_n) = s(\mathcal{X}_n)(G_n f_n)$$

et

$$\mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f_{n+1}) \mid \hat{\mathcal{X}}_n) = s(\hat{\mathcal{X}}_n)M_{n+1}(f_{n+1})$$

Il en découle que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f_{n+1}) \mid \mathcal{X}_n) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f_{n+1}) \mid \mathcal{X}_n, \hat{\mathcal{X}}_n) \mid \mathcal{X}_n) \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f_{n+1}) \mid \hat{\mathcal{X}}_n) \mid \mathcal{X}_n) \\ &= \mathbb{E}(s(\hat{\mathcal{X}}_n)M_{n+1}(f_{n+1}) \mid \mathcal{X}_n) \\ &= s(\mathcal{X}_n)(G_n M_{n+1}(f_{n+1})) \end{aligned}$$

3. D'après les formules précédentes, nous avons

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n+1})(f)) &= \mathbb{E}(s(\mathcal{X}_n)(G_n M_{n+1}(f))) \\
 &= \mathbb{E}(s(\mathcal{X}_{n-1})(G_{n-1} M_n(G_n M_{n+1}(f)))) \\
 &= \dots \\
 &= G_0(x_0) M_1(G_1 M_1(\dots(G_{n-1} M_n(G_n M_{n+1}(f)))))) \\
 &= \mathbb{E}_{x_0} \left(f(X_{n+1}) \prod_{k=0}^n G_k(X_k) \right)
 \end{aligned}$$

■

Exercice 3.3.1 :

1. Le schéma d'évolution associé à la matrice de transition

$$M = \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{2,2} \end{pmatrix}$$

est clairement donné par

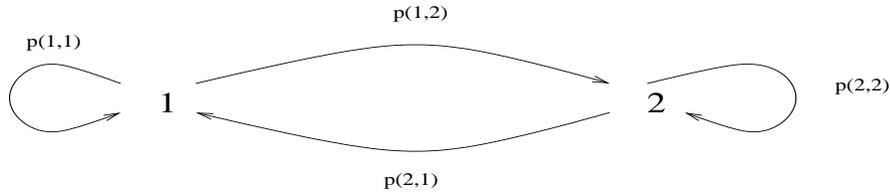


FIG. 4.1 –

On remarque que

$$\begin{aligned}
 1 - c &= (1 - p_{1,2}) - p_{2,1} = p_{1,1} - p_{2,1} \\
 &= (1 - p_{2,1}) - p_{1,2} = p_{2,2} - p_{1,2} \in [-1, 1]
 \end{aligned}$$

D'autre part, lorsque $p_{1,1} > 0$, on a

$$\begin{aligned}
 (p_{2,2} \geq p_{1,1} > 0 \text{ et } p_{1,2} \geq p_{2,1} > 0) &\Rightarrow 1 - c \leq p_{1,1} \wedge p_{2,2} \\
 &= (1 - p_{1,2}) \wedge (1 - p_{2,1}) \\
 &= (1 - p_{1,2}) < 1
 \end{aligned}$$

De même, on vérifie que

$$(p_{2,2} \geq p_{1,1} \text{ et } p_{1,2} \geq p_{2,1} > 0) \Rightarrow 1 - c \geq (-p_{1,2}) \vee (-p_{2,1}) = -p_{1,2}$$

D'après nos hypothèses, lorsque $p_{1,1} > 0$, on a bien

$$p_{2,2} \geq p_{1,1} > 0 \text{ et } p_{1,2} \geq p_{2,1} > 0$$

De plus, nous avons dans cette situation

$$p_{1,2} = 1 - p_{1,1} < 1 \Rightarrow (1 - c) = -p_{1,2} > -1$$

On vérifie la formule

$$M^n = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} p_{2,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{1,2} \end{pmatrix} + \frac{(1-c)^n}{c} \begin{pmatrix} p_{1,2} & -p_{1,2} \\ -p_{2,1} & p_{2,1} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

par récurrence sur n . Pour $n = 1$ on a

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \begin{pmatrix} p_{2,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{1,2} \end{pmatrix} + \left(\frac{1}{c} - 1\right) \begin{pmatrix} p_{1,2} & -p_{1,2} \\ -p_{2,1} & p_{2,1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 - p_{1,2} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & 1 - p_{2,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{2,2} \end{pmatrix} = M \end{aligned}$$

Supposons la formule (4.1) vraie au rang n . Dans ce cas, nous avons

$$\begin{aligned} M^{n+1} &= \frac{1}{c} \begin{pmatrix} p_{2,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{1,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{2,2} \end{pmatrix} \\ &+ \frac{(1-c)^n}{c} \begin{pmatrix} p_{1,2} & -p_{1,2} \\ -p_{2,1} & p_{2,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{2,2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{c} \begin{pmatrix} p_{2,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{1,2} \end{pmatrix} \\ &+ \frac{(1-c)^n}{c} \begin{pmatrix} p_{1,2}(p_{1,1} - p_{2,1}) & -p_{1,2}(p_{2,2} - p_{1,2}) \\ -p_{2,1}(p_{1,1} - p_{2,1}) & p_{2,1}(p_{2,2} - p_{1,2}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Il reste à remarquer que

$$(1 - c) = (1 - p_{1,2} - p_{2,1}) = (p_{1,1} - p_{2,1}) = (p_{2,2} - p_{1,2})$$

La fin de la preuve par récurrence est désormais claire.

2. Lorsque $|1 - c| < 1$, on a la convergence entrées par entrées

$$\lim_{n \rightarrow \infty} M^n = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} p_{2,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_\infty(1) & \eta_\infty(1) \\ \eta_\infty(2) & \eta_\infty(2) \end{pmatrix}$$

Enfin, on observe que

$$\begin{aligned}\eta_\infty M &= \frac{1}{c} \times [p_{2,1}, p_{1,2}] \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} \\ p_{2,1} & p_{2,2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{c} [p_{2,1}(p_{1,1} + p_{1,2}), p_{1,2}(p_{2,1} + p_{2,2})] \\ &= \frac{1}{c} [p_{2,1}, p_{1,2}] = \eta_\infty\end{aligned}$$

Pour vérifier la dernière assertion, on remarque que

$$\mathbb{E}(f(X_n)) = \eta_0 M^n f = \sum_{x,y \in E} \eta_0(x) M^n(x,y) f(y) \rightarrow \eta_\infty f \quad \text{lorsque } n \uparrow \infty$$

■

Exercice 3.3.2.

1. On vérifie la croissance de la suite à l'aide de la formule $M^n = M M^{n-1}$. Plus précisément, nous avons

$$M^n(x,y) = \sum_{z \in E} M(x,z) M^{n-1}(z,y) \geq a_{n-1}(y) \sum_{z \in E} M(x,z) = a_{n-1}(y)$$

En prenant l'infimum sur les $x \in E$, on en conclut que $a_n(y) \geq a_{n-1}(y)$. De même, on a

$$M^n(x,y) = \sum_{z \in E} M(x,z) M^{n-1}(z,y) \leq b_{n-1}(y) \sum_{z \in E} M(x,z) = b_{n-1}(y)$$

En prenant le supremum sur les $x \in E$, on en conclut que $b_n(y) \leq b_{n-1}(y)$.

2. On a clairement la première formule

$$\begin{aligned}M^{n+m}(x,y) &= \sum_{z \in E} [M^m(x,z) - \epsilon M^n(y,z)] M^n(z,y) \\ &\quad + \sum_{z \in E} \epsilon M^n(y,z) M^n(z,y) \\ &= \sum_{z \in E} [M^m(x,z) - \epsilon M^n(y,z)] M^n(z,y) + \epsilon M^{2n}(y,y)\end{aligned}$$

En utilisant l'encadrement $a_n(y) \leq M^n(z,y) \leq b_n(y)$, et après avoir noté que

$$M^m(x,z) \geq \epsilon \geq \epsilon M^n(y,z)$$

on obtient

$$(1 - \epsilon) a_n(y) + \epsilon M^{2n}(y,y) \leq M^{n+m}(x,y) \leq (1 - \epsilon) b_n(y) + \epsilon M^{2n}(y,y)$$

En prenant les infimum et supremum sur les $x \in E$, on en déduit les majoration

$$\begin{aligned} a_{n+m}(y) &\geq (1 - \epsilon) a_n(y) + \epsilon M^{2n}(y, y) \\ b_{n+m}(y) &\leq (1 - \epsilon) b_n(y) + \epsilon M^{2n}(y, y) \end{aligned}$$

Une simple soustraction montre alors que

$$0 \leq [b_{n+m}(y) - a_{n+m}(y)] \leq (1 - \epsilon) [b_n(y) - a_n(y)]$$

3. D'après ce qui précède, on a

$$0 \leq [b_{nm}(y) - a_{nm}(y)] \leq (1 - \epsilon)^n \rightarrow 0$$

lorsque $n \uparrow \infty$. La suite $(b_n(y) - a_n(y))_{n \geq 1}$ étant décroissante, on en conclut que $\lim_{n \rightarrow \infty} [b_n(y) - a_n(y)] = 0$. D'autre part, en utilisant la croissance de a_n , et les estimées précédentes, nous avons la majoration

$$|M^n(x, y) - \eta_\infty(y)| \leq b_n(y) - \lim_{p \rightarrow \infty} a_p(y) \leq (b_n(y) - a_n(y)) \leq (1 - \epsilon)^{\lfloor n/m \rfloor}$$

On en conclut que

$$\eta_0 M^n(y) - \eta_\infty(y) = \sum_{x \in E} \eta_0(x) (M^n(x, y) - \eta_\infty(y)) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

De même, en utilisant le fait que $\eta_0 M^n = (\eta_0 M^{n-1})M$, on obtient l'équation du point fixe recherchée, c'est à dire $\eta_\infty = \eta_\infty M$. On vérifie la dernière assertion en utilisant la même démarche que celle utilisée à la fin de l'exercice 3.3.1. ■

Exercice 3.3.3. On a

$$\begin{aligned} \eta \text{ } M\text{-reversible} &\Rightarrow \eta(x)M(x, y) = \eta(y)M(y, x) \\ &\Rightarrow \sum_{x \in E} \eta(x)M(x, y) = \eta(y) \sum_{x \in E} M(y, x) = \eta(y) \\ &\Leftrightarrow \eta M(y) = \eta(y) \end{aligned}$$

Autrement dit, si η est M -réversible, alors elle est nécessairement M -invariante. Le contraire est en général faux.

1. On se place sous les hypothèses du théorème ergodique. Supposons qu'il existe deux mesures invariantes η_1 , et η_2 . Dans ce cas, on a

$$\forall i = 1, 2 \quad \eta_i = \eta_i M^n \rightarrow \eta_\infty$$

où η_∞ est la mesure de probabilité décrite dans le théorème ergodique. On en conclut que $\eta_1 = \eta_2 = \eta_\infty$.

2. La mesure uniforme $\eta_\infty(x) = 1/|E|$ est toujours réversible par rapport à une matrice symétrique. Autrement dit, on a

$$\eta_\infty(x)M(x,y) = \frac{1}{|E|}M(x,y) = \frac{1}{|E|}M(y,x) = \eta_\infty(y)M(y,x)$$

Par conséquent, on obtient $\eta_\infty = \eta_\infty M$.

3. Les chaînes de Markov décrites dans les deux schémas suivants, sont symétriques.

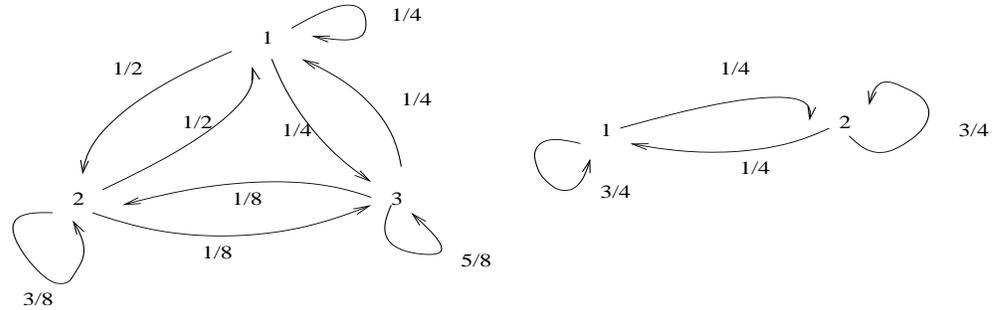


FIG. 4.2 – Chaînes symétriques

Les mesures invariantes sont respectivement données par les mesures uniformes $\eta_\infty = [1/3, 1/3, 1/3]$ dans l'exemple à trois points, et $\eta_\infty = [1/2, 1/2]$ dans l'exemple à deux points.

Dans l'exemple à deux points, l'hypothèse d'accessibilité (3.2) du théorème ergodique est satisfaite pour $m = 1$, et $\epsilon = 1/4$. Pour l'exemple à trois points, l'hypothèse d'accessibilité (3.2) du théorème ergodique est satisfaite pour $m = 1$, et $\epsilon = 1/8 (= M(2,3) = M(3,2))$.

Dans les deux exemples suivants, les chaînes sont réversibles par rapport à la mesure

$$\eta_\infty = \frac{1}{1/4 + 1/3 + 1/3} [1/4, 1/3, 1/3]$$

dans l'exemple à trois points, et

$$\eta_\infty = \frac{1}{1/4 + 1/3} [1/4, 1/3]$$

dans l'exemple à deux points.

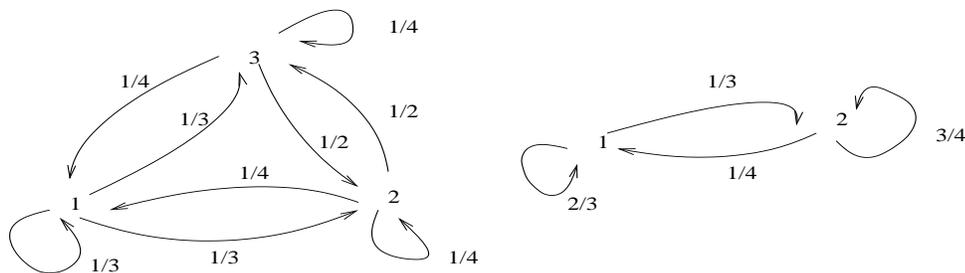


FIG. 4.3 – Chaînes réversibles

Dans l'exemple à deux points, l'hypothèse d'accessibilité (3.2) du théorème ergodique est satisfaite pour $m = 1$, et $\epsilon = 1/4 (= M(2, 1))$. Pour l'exemple à trois points, l'hypothèse d'accessibilité (3.2) du théorème ergodique est satisfaite pour $m = 1$, et $\epsilon = 1/4 (= M(3, 3) = M(3, 1) = M(2, 2) = M(2, 1))$.

■

Exercice 3.3.4. On remarque simplement que l'on peut passer de tout point x à tout point y , en modifiant ou non x , “coordonnée par coordonnée”. Par exemple, pour $d = 4$, $x = (0, 0, 0, 0)$, et $y = (1, 1, 1, 1)$, on a

$$x \rightarrow x_1 = (1, 0, 0, 0) \rightarrow x_2 = (1, 1, 0, 0) \rightarrow x_3 = (1, 1, 1, 0) \rightarrow y$$

Chaque transition élémentaire se produit avec une probabilité $1/(d+1)$. Par conséquent, nous avons la minoration suivante

$$\begin{aligned} M^d(x, y) &= \sum_{x_1, \dots, x_{d-1} \in E} M(x, x_1) M(x_1, x_2) \dots M(x_{d-1}, y) \\ &\geq 1/(d+1) \times \dots \times 1/(d+1) = 1/(d+1)^d \end{aligned}$$

D'après le théorème ergodique, il existe une unique mesure invariante. Comme la mesure uniforme $\eta_\infty(x) = 2^{-d}$ est M -réversible, on en conclut qu'elle est l'unique mesure invariante de M .

■

Exercice 3.3.5.

1. Le graphe étant symétrique, on a

$$x \in \mathcal{V}(y) \Leftrightarrow (x, y) \in V(I) \Leftrightarrow (y, x) \in V(I) \Leftrightarrow y \in \mathcal{V}(x)$$

Par conséquent, on obtient

$$\begin{aligned} 2|V(I)| &= \sum_{(x,y) \in I} 1_{V(I)}(x, y) \\ &= \sum_{x \in I} \sum_{y \in I} 1_{\mathcal{V}(x)}(y) = \sum_{x \in I} |\mathcal{V}(x)| \end{aligned}$$

On en déduit que

$$\sum_{x \in I} \eta_\infty(x) = \sum_{x \in I} \frac{|\mathcal{V}(x)|}{2|V(I)|} = 1$$

2. Le fait que $M(x, y)$ est une transition de probabilités est immédiat. La marche aléatoire associée peut être décrite par le schéma suivant

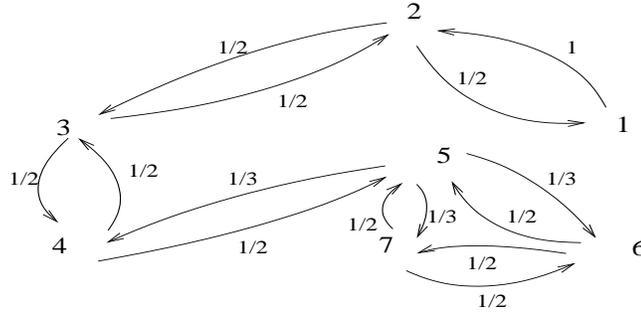


FIG. 4.4 –

En utilisant la symétrie du graphe, on trouve que

$$\begin{aligned} \eta_\infty(x)M(x, y) &= \frac{|\mathcal{V}(x)|}{2|V(I)|} \frac{1}{|\mathcal{V}(x)|} 1_{\mathcal{V}(x)}(y) \\ &= \frac{1}{2|V(I)|} 1_{\mathcal{V}(x)}(y) = \frac{1}{2|V(I)|} 1_{\mathcal{V}(y)}(x) \\ &= \eta_\infty(y)M(y, x) \end{aligned}$$

On a donc montré que la mesure η_∞ est M -réversible. Il en découle que

$$\sum_{x \in I} \eta_\infty(x)M(x, y) = \eta_\infty(y) \sum_{x \in I} M(y, x) = \eta_\infty(y) \Leftrightarrow \eta_\infty = \eta_\infty M$$

■

Exercice 3.3.6 : On a clairement

$$\begin{aligned} X_n &= a(a X_{n-2} + W_{n-1}) + W_n \\ &= a^2 X_{n-2} + a^1 W_{n-1} + a^0 W_n \\ &= \dots \\ &= a^n X_0 + a^{n-1} W_1 + a^{n-2} W_2 + \dots + a^2 W_{n-2} + a^1 W_{n-1} + a^0 W_n \end{aligned}$$

Lorsque $X_0 = 0$, les états de la chaîne

$$X_n = a^{n-1} W_1 + a^{n-2} W_2 + \dots + a^2 W_{n-2} + a^1 W_{n-1} + a^0 W_n$$

forment des variables gaussiennes centrées, et de variances

$$\sigma_n^2 = \mathbb{E}(X_n^2) = a^{2(n-1)} + a^{2(n-2)} + \dots + a^2 + 1 = \frac{1 - a^{2n-1}}{1 - a^2}$$

On note M la transition de probabilité de la chaîne

$$M(x, dy) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} (y-ax)^2} dy$$

En utilisant la formule élémentaire

$$\begin{aligned} (1 - a^2) x^2 + (y - a x)^2 &= x^2 + y^2 - 2axy \\ &= (x - a y)^2 + (1 - a^2) y^2 \end{aligned}$$

on vérifie que

$$\begin{aligned} \mu(dx)M(x, dy) &= \sqrt{\frac{1-a^2}{2\pi}} e^{-\frac{1-a^2}{2} x^2} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} (y-ax)^2} \\ &= \frac{\sqrt{1-a^2}}{2\pi} e^{-\frac{1}{2} \{(1-a^2) x^2 + (y-ax)^2\}} \\ &= \frac{\sqrt{1-a^2}}{2\pi} e^{-\frac{1}{2} \{(x-ay)^2 + (1-a^2) y^2\}} \\ &= \sqrt{\frac{1-a^2}{2\pi}} e^{-\frac{1-a^2}{2} y^2} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} (x-ay)^2} \\ &= \mu(dy)M(y, dx) \end{aligned}$$

■

Exercice 3.4.2 : Pour toute fonction test f sur E nous avons

$$M(f)(x) = \int h(x, y)Q(x, dy)f(dy) + \left(1 - \int h(x, y) Q(x, dy)\right) \times f(x)$$

On en conclut que

$$\begin{aligned} \eta M(f) &= \int \eta(dx) M(x, dz) f(z) \\ &= \int \eta(dx) f(x) - \int \eta(dx) h(x, y) Q(x, dy) f(x) \\ &\quad + \int \eta(dx) h(x, y) Q(x, dy) f(dy). \end{aligned}$$

Pour vérifier le résultat demandé, il suffit de montrer que

$$\int \eta(dx) h(x, y) Q(x, dy) f(dy) = \int \eta(dx) h(x, y) Q(x, dy) f(x)$$

Si on pose

$$D = \{(x, y) \in E^2 : g(x, y) \leq 1\},$$

alors on a les implications logiques suivantes

$$\begin{aligned} (x, y) \in D &\iff (y, x) \in D^c (= E^2 - D) \\ &\implies h(y, x) = 1. \end{aligned}$$

Ainsi, après avoir noté que

$$g(x, y) = \frac{(\eta \times Q)_1}{(\eta \times Q)_0}(x, y) = \frac{(\eta \times Q)_0}{(\eta \times Q)_1}(y, x) = \frac{1}{g(y, x)}$$

et

$$\begin{aligned} \eta(dx)g(x, y)Q(x, dy) &= g(x, y) \times (\eta \times Q)_0(d(x, y)) \\ &= (\eta \times Q)_1(d(x, y)) = \eta(dy)Q(y, dx) \end{aligned}$$

on obtient

$$\begin{aligned} &\int \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(x) \\ &= \int_D \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(x) + \int_{D^c} \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(x) \\ &= \int_D \eta(dx)g(x, y)Q(x, dy)f(x) + \int_{D^c} \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(x) \\ &= \int_D \eta(dy)Q(y, dx)f(x) + \int_{D^c} \eta(dx)Q(x, dy)f(x) \end{aligned}$$

On montre de même que

$$\begin{aligned} &\int \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(y) \\ &= \int_D \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(y) + \int_{D^c} \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(y) \\ &= \int_D \eta(dx)g(x, y)Q(x, dy)f(y) + \int_{D^c} \eta(dx)Q(x, dy)f(y) \\ &= \int_D \eta(dy)Q(y, dx)f(y) + \int_{D^c} \eta(dx)Q(x, dy)f(y) \\ &= \int_{D^c} \eta(dx)Q(x, dy)f(x) + \int_D \eta(dy)Q(y, dx)f(x). \end{aligned}$$

En comparant nos deux résultats, on en conclut que

$$\int \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(y) = \int \eta(dx)h(x, y)Q(x, dy)f(x)$$

Il en découle que pour toute fonction bornée f , nous avons

$$(\eta M)(f) = \eta(f)$$

et donc la mesure η est bien M -invariante. ■

Exercice 3.5.1 :

1. On commence par noter que

$$\begin{aligned} \widehat{\gamma}_n(1) &= \mathbb{E}\left(\prod_{p=1}^n 1_{\{X'_0, \dots, X'_{p-1}\}}(X'_p)\right) \\ &= \sum_{(x_0, \dots, x_n) \in \mathbf{A}_n} M'(x_0, x_1) \dots M'(x_{n-1}, x_n) \\ &= \sum_{(x_0, \dots, x_n) \in \mathbf{A}_n} \frac{1}{2d} \times \dots \times \frac{1}{2d} = \frac{|\mathbf{A}_n|}{(2d)^n} \end{aligned}$$

On observe ensuite que

$$\eta_n(G_n) = \frac{\gamma_n(G_n)}{\gamma_n(1)} = \frac{\widehat{\gamma}_n(1)}{\widehat{\gamma}_{n-1}(1)}$$

D'après ce qui précède, on obtient

$$\eta_n(G_n) = \frac{|\mathbf{A}_n|}{(2d)^n} \times \frac{(2d)^{n-1}}{|\mathbf{A}_n|} = \frac{1}{2d} \frac{|\mathbf{A}_n|}{|\mathbf{A}_{n-1}|}$$

2. En utilisant le fait qu'une marche aléatoire sans intersection de longueur $(p+q)$ est nécessairement la concaténation d'une marche sans intersection de longueur p , et d'une de longueur q , on montre que

$$|\mathbf{A}_{p+q}| \leq |\mathbf{A}_p| |\mathbf{A}_q|$$

Pour vérifier le second encadrement, on note qu'une marche ne choisissant que des vecteurs unitaires de la forme

$$u = (0, \dots, 0, +1, 0, \dots, 0)$$

et ignorant les vecteurs unitaires opposés

$$v = (0, \dots, 0, -1, 0, \dots, 0)$$

ne peut s'intersecter. On montre ainsi la minoration recherchée

$$d^n \leq |\mathbf{A}_n|$$

Enfin, une marche sans intersection est un chemin évitant nécessairement à chaque étape le dernier point visité. Par exemple, si la marche choisit à un temps donné un vecteur unitaire

$$u = (1, 0, \dots, 0)$$

elle ne peut choisir immédiatement après le vecteur opposé

$$u = (-1, 0, \dots, 0)$$

On a donc la majoration suivante

$$|\mathbf{S}_n| \leq 2d (2d - 1)^n$$

3. D'après le théorème de limite sous-additive, nous avons

$$c = \lim_{n \rightarrow \infty} |\mathbf{S}_n|^{1/n} = \inf_{n \geq 1} |\mathbf{S}_n|^{1/n} \in [d, (2d - 1)]$$

En utilisant les premières formules, on en déduit que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \widehat{\gamma}_n(1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \log \frac{|\mathbf{A}_n|^{\frac{1}{n}}}{(2d)} = \log(c/2d)$$

et

$$\widehat{\gamma}_n(1) = \prod_{p=1}^n \eta_p(G_p) \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{p=1}^n \log \eta_p(G_p) = \log(c/2d)$$

■

Bibliographie

- [1] Bartoli N. et Del Moral P. *Simulation et Algorithmes Stochastiques*, Cépaduès éditions (2001).
- [2] Del Moral P., *Feynman-Kac formulae. Genealogical and interacting particle systems with applications*, Springer New York, Probability and its applications (2004).
- [3] A. Doucet, N. de Freitas, and N. Gordon, editors. *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*. Statistics for engineering and Information Science. Springer, New York (2001).
- [4] Hara T. and Slade G. (1992), Self-avoiding walks in five or more dimensions : I. The critical behaviour. *Communications in Mathematical Physics*, **147**, pp. 101-136.
- [5] Haight F.A., *Handbook of the Poisson distribution*, John Wiley and Sons, New York (1967).
- [6] Stewart I., *Dieu joue-t-il aux dès, les mathématiques du chaos*, Champs Flammarion (1992).