

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 :

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

La quantité Z_n représente une constante de normalisation

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

En physique, 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 les 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 à l'ouvrage [2]. 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 côté pile, et par le chiffre 1 le côté 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 au 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 nombres 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 enfin considère 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 tous 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 $|M^n(x, y) - \eta_\infty(y)| \leq (1 - \epsilon)^{\lfloor n/m \rfloor}$, où $\lfloor a \rfloor$ 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.

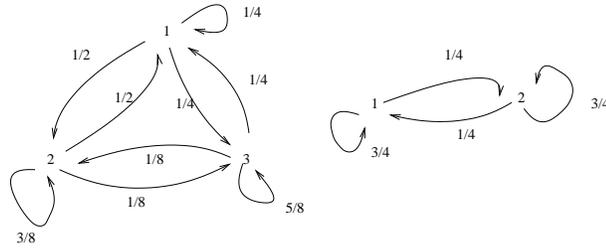


FIG. 3.1 – Chaînes symétriques

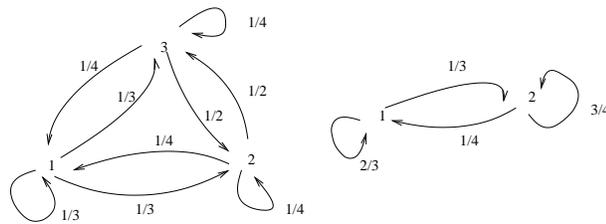


FIG. 3.2 – Chaînes réversibles

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

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

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 $|\mathcal{V}(6)| = |\mathcal{V}(7)| = 2$

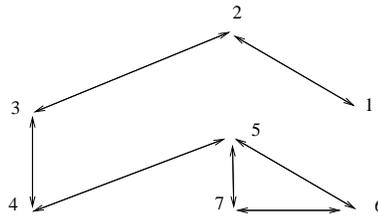


FIG. 3.3 –

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.

3.4. MESURES INVARIANTES ET ALGORITHMES DE SIMULATION 85

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

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

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

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

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.

A 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

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

3.4. MESURES INVARIANTES ET ALGORITHMES DE SIMULATION 91

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 $\eta(x) Q(x, y) = 0$; 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 étape

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

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 .
- A 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'une 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 $p = 1, \dots, d$

$$\begin{aligned} \pi(u_1, u_2, \dots, u_d) \\ &\propto \prod_{i=1}^d e^{-hu_i - J \sum_{j \sim i} u_j} \\ &\propto e^{-hu_p - J \sum_{i \sim p} u_i} \left(\sum_{j \sim i} u_j \right) \times e^{-h \sum_{i \neq p} u_i} \times \prod_{1 \leq i \leq d, i \neq p} e^{-J \sum_{j \sim i} u_j} \end{aligned}$$

On en conclut que

$$\pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); u_p) \propto e^{-hu_p - J \sum_{i \sim p} u_i} \left(\sum_{j \sim i} u_j \right)$$

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

$$\pi^p((u_1, \dots, u_{p-1}, u_{p+1}, \dots, u_d); u_p) \propto e^{-hu_p - 2J \sum_{j \sim p, j \neq p} u_j}$$

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

$$\forall p \in \{1, \dots, d\} \quad \pi K_p = \pi$$

A 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 :

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

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 38, 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 les 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 innoçante. 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 trajectoriel, 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 $\hat{\gamma}_n$ et $\hat{\eta}_n$ définies en termes de produits jusqu'au temps terminal

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_n(f_n) &= \mathbb{E} \left(f_n(X_n) \prod_{p=0}^n G_p(X_p) \right) \\ &= \mathbb{E} \left([f_n(X_n) G_n(X_n)] \prod_{p=0}^{n-1} G_p(X_p) \right) \\ &= \gamma_n(f_n G_n) \end{aligned}$$

et

$$\hat{\eta}_n(f_n) = \frac{\hat{\gamma}_n(f_n)}{\hat{\gamma}_n(1)} = \frac{\gamma_n(f_n G_n)}{\gamma_n(G_n)} = \frac{\gamma_n(f_n G_n)/\gamma_n(1)}{\gamma_n(G_n)/\gamma_n(1)} = \frac{\eta_n(f_n G_n)}{\eta_n(G_n)}$$

Les formules précédentes soulignent le fait que ces mesures s'expriment simplement en terme des précédentes :

$$\hat{\eta}_n(f_n) = \frac{\eta_n(f_n G_n)}{\eta_n(G_n)} \quad \text{et} \quad \hat{\gamma}_n(f_n) = \gamma_n(f_n G_n)$$

En reprenant les notations précédentes, on peut ainsi considérer les estimateurs particuliers

$$\hat{\eta}_n^N(f_n) = \frac{\eta_n^N(f_n G_n)}{\eta_n^N(G_n)} = \sum_{i=1}^N \frac{G_n(\xi_n^i)}{\sum_{j=1}^N G_n(\xi_n^j)} f_n(\xi_n^i)$$

et

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_n^N(f_n) &= \gamma_n^N(f_n G_n) = \eta_n^N(f_n G_n) \times \prod_{p=0}^{n-1} \eta_p^N(G_p) \\ &= \hat{\eta}_n^N(f_n) \times \prod_{p=0}^n \eta_p^N(G_p) \end{aligned}$$

Enfin, si l'on souhaite simuler des variables aléatoires de loi $\hat{\eta}_n$, il suffit de considérer l'algorithme particulière après la $n^{\text{ième}}$ sélection

$$\forall i \quad \text{Loi}(\hat{\xi}_n^i) \longrightarrow \hat{\eta}_n \quad \text{et} \quad \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\hat{\xi}_n^i} \longrightarrow \hat{\eta}_n$$

Dans le cadre trajectorien, la loi d'une quelque ligne ancestrale après l'étape de sélection

$$\hat{\xi}_n^i = (\hat{\xi}_{0,n}^i, \dots, \hat{\xi}_{n,n}^i)$$

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 incatrices 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

$$\begin{aligned} \gamma_n(f_n) &= \mathbb{E} \left(f_n(X_n) \prod_{p=0}^{n-1} 1_{A_p}(X_p) \right) \\ &= \mathbb{E} (f_n(X_n) 1_{X_0 \in A_0, \dots, X_{n-1} \in A_{n-1}}) \\ &= \mathbb{E} (f_n(X_n) ; (X_0 \in A_0, \dots, X_{n-1} \in A_{n-1})) \end{aligned}$$

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 trajectoriel 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

$$\eta_n = \text{Loi}((X'_0, \dots, X'_n) \mid X'_0 \in A, \dots, X'_{n-1} \in A)$$

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 déterminées 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

$$\hat{\eta}_n(d(x_0, \dots, x_n)) = \mathbb{P}(X_{[0,n]} \in d(x_0, \dots, x_n) \mid Y_{[0,n]} = (y_0, \dots, y_n))$$

s'expriment sous la forme synthétique suivante :

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

avec les fonctions potentiels non homogènes, dépendant des observations courantes, et définis par la formule

$$G_n(x_n) = g_n(y_p - h_p(x_p))$$

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

$$\frac{1}{Z_{\beta,n}} \exp\left(-\beta \sum_{0 \leq p < q \leq n} 1_{x_p=x_q}\right) \mathbb{P}_n(d(x_0, \dots, x_n))$$

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

$$\widehat{\eta}_n(f_n) = \widehat{\gamma}_n(f_n) / \widehat{\gamma}_n(1)$$

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

$$\hat{\gamma}_n(1) = \mathbb{P}(\forall 0 \leq p < q \leq n, X'_p \neq X'_q) > 0$$

$$\hat{\eta}_n = \text{Loi}((X'_0, \dots, X'_n) \mid \forall 0 \leq p < q \leq n, X'_p \neq X'_q)$$

Dans l'exercice 3.5.1, nous montrerons que la constante de normalisation $\hat{\gamma}_n(1)$ est donnée par

$$\hat{\gamma}_n(1) = a(n)/(2d)^n$$

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 . Cet expression asymptotique de $a(n)$ à été démontrée il y a une quinzaine d'années par T. Hara, et G. Slade ([3]). En dimension $d = 2$, le problème reste toujours ouvert. Beaucoup d'autres questions restent en suspend 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

$$\mathbf{A}_n = \{(x_0, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^d)^{n+1} : (\forall 0 \leq p < q \leq n) |x_{p+1} - x_p| = 1, x_p \neq x_q\}$$

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

$$\begin{aligned} \eta_n(G_n) &= \mathbb{P}(X_n \notin \{X_0, \dots, X_{n-1}\} \mid \forall 0 \leq p < q < n, X'_p \neq X'_q) \\ &= |\mathbf{A}_n| / (|\mathbf{A}_{n-1}| (2d)) \end{aligned}$$

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. Dédurre 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 .

