

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU
FACULTE DE SCIENCES - DEPARTEMENT DE MATHEMATIQUES

*MEMOIRE DE MASTER DE
MATHEMATIQUES APPLIQUEES*

*Option : Processus Aléatoires et Statistique de la
Décision*

*Algorithmes de simulation et
Introduction au modèle d'Ising*

*sous la Direction de
Mr BOUDIBA MOHAND AREZKI*

présenté le 14 /09 /2015 par

DJEMA HAROUN

devant le Jury :

*Mr MAMOU MOHAMED, Chargé de Recherches, UMMTO, Président
Mr BOUDIBA MOHAND AREZKI, MC, UMMTO, Rapporteur
Mme ZIDI YAMINA, MC, UMMTO, Examineur
Mme LADJIMI FETIMA, Chargée de Recherches, UMMTO, Examineur.*

Remerciements

Je remercie Mr MAMOU MOHAMED pour avoir accepté de présider ce jury. Je remercie également Mme ZIDI YAMINA et Mme LADJIMI FETIMA pour avoir accepté de faire partie de ce jury.

Je remercie mon promoteur Mr BOUDIBA MOHAND AREZKI, pour ses encouragements, ses critiques et ses conseils.

Je remercie ma famille pour ses encouragements tout au long de mes études, ainsi l'ensemble des enseignants qui ont contribué à ma formation tout au long de mon parcours en Master, sans oublier mes camarades et amis.

Table des matières

Introduction	4
1 Chaîne de Markov et Marches aléatoires	6
1.1 Généralités sur les chaînes de Markov	6
1.2 Définitions et généralités sur les groupes	12
1.3 Marche aléatoire sur un groupe	15
1.4 Marche aléatoire sur un graphe	20
2 Algorithmes de simulation d'une chaîne de Markov	23
2.1 Simulation d'une chaîne de Markov	23
2.2 Application : Simulation de l'évolution de la météo à Gothen- burg en hiver sur 100 jours	26
2.3 Algorithme de Metropolis	31
2.4 Etude de La chaîne de Metropolis construite	32
3 Echantillonnage de Gibbs et Modèle d'Ising	39
3.1 Modèle des sphères lourdes (Hard-core)	39
3.2 Modèle d'Ising	44
3.3 Echantillonneur de Gibbs sur le modèle d'Ising	45
3.4 Simulation de modèle d'Ising (Algorithme de Metropolis) . . .	46
4 Algorithme de simulation exacte (Propp-Wilson)	56
4.1 Chaînes de Markov itératives	56
4.2 L'algorithme de Propp-Wilson	57
Conclusion	63
Annexes : Programmes utilisés pour les simulations	64

Introduction

Nous nous intéressons aux algorithmes de simulations. Notre but est de donner des justifications mathématiques aux différents algorithmes pour comprendre les différentes techniques de simulations. Il apparait que c'est un terrain idéal pour voir l'impact profond du Calcul de Probabilités et de ses outils mathématiques dans la vie scientifique.

Nous nous intéressons également au modèle d'Ising qui a donné lieu à de nombreux travaux de recherche depuis son introduction par Wilhelm-Lenz en 1920. Ce modèle a de nombreux domaines d'application : en biologie, sur les transitions de phase et surtout en thermodynamique. Nous donnons une introduction à ce sujet essentiellement pour comprendre les méthodes mathématiques permettant d'appliquer certains algorithmes de simulation.

La littérature est très riche dans ce domaine des algorithmes de simulation. Nous faisons la synthèse de travaux récents qui nous ont semblé importants (Cf.[2],[3],[4],[9]...) par leurs impacts en calcul de probabilités et leurs applications.

Concrètement ce mémoire est organisé en 4 chapitres. Dans le chapitre 1, nous présentons une synthèse sur les chaînes de Markov et de leurs propriétés les plus importantes, ainsi une autre synthèse sur les marches aléatoires. Au Chapitre 2, nous donnons un algorithme de simulation d'une chaîne de Markov et nous synthétisons par l'algorithme de Metropolis pour simuler une loi de Poisson et tirer des observations en comparant avec la méthode théorique. Au Chapitre 3, nous présentons l'algorithme de Gibbs sur le modèle des sphères lourdes (Hard-core) et nous donnons une simulation du modèle d'Ising avec l'algorithme de Metropolis. Dans la littérature les deux algorithmes (Metropolis et Gibbs) sont désignés par les méthodes MCMC. Au

Chapitre 4, nous donnons une synthèse sur la simulation exacte (Algorithme de Propp-Wilson) et son fonctionnement.

Nous terminons notre mémoire par une conclusion sur les perspectives pour développer ce travail. En annexe enfin, les programmes de simulations utilisant les algorithmes étudiés sont récapitulés.

Chapitre 1

Chaîne de Markov et Marches aléatoires

Dans ce chapitre nous présentons les idées de base sur les chaînes de Markov et les marches aléatoires à partir des classiques (Cf [1], [2],...)

1.1 Généralités sur les chaînes de Markov

Dans tout le chapitre E est un ensemble fini ou dénombrable non vide. Les variables aléatoires considérées sont toutes définies sur le même espace de probabilités.

Définition 1.

Soit $(X_n)_n$ une suite de v.a à valeurs dans E . On dit que $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov d'espace des états E si : $\forall n \in \mathbb{N}, \forall x_0, x_1, \dots, x_{n+1} \in E$

$$P[X_{n+1} = x_{n+1} / X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n] = P[X_{n+1} = x_{n+1} / X_n = x_n]$$

Pour x et $y \in E$, les probabilités de transition sont les nombres réels p_{xy} définis par :

$$p_{xy} = P[X_{n+1} = y / X_n = x]$$

Remarque 1.

Si $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov, d'espace des états E , les probabilités de transitions p_{xy} , forment une matrice $P = (p_{xy})_{x,y \in E}$ appelée matrice de

transition de la chaîne. Celle-ci est alors une matrice d'ordre $|E|$ et vérifie :

$$\forall x, y \in E, p_{xy} \geq 0, \text{ et } \sum_y p_{xy} = 1.$$

Définition 2.

Une chaîne de Markov $(X_n)_n$ est dite homogène ou à probabilités de transitions stationnaires si les nombres p_{xy} ne dépendent pas de n .

Si μ est la loi de X_0 , on dit que μ est la loi initiale de la chaîne de Markov $(X_n)_n$.

Exemple 1. (Marche aléatoire sur \mathbb{Z})

Soit $(Y_n)_n$ une suite de v.a. i.i.d tel que

$$P[Y_n = 1] = p, \text{ et } P[Y_n = -1] = q, \text{ } p + q = 1,$$

et X_0 une variable aléatoire indépendante de $(Y_n)_n$, on considère la suite $(X_n)_n$ définie par :

$$X_0, \text{ et } \forall n > 0, X_n = \sum_{k=1}^n Y_k,$$

Alors $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov homogène sur \mathbb{Z} , de probabilités de transitions les nombres $(P_{xy})_{x,y \in \mathbb{Z}}$ définie par :

$$P_{xy} = \begin{cases} p & \text{si } y = x + 1 \\ q & \text{si } y = x - 1 \\ 0 & \text{si } y \neq x \pm 1 \end{cases}$$

Démonstration.

Nous avons, pour $x, y, \dots, x_0 \in \mathbb{Z}$,

$$\begin{aligned} & P(X_{n+1} = y / X_n = x, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_0 = x_0) = \\ & \frac{P(X_n + Y_{n+1} = y, X_n = x, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_0 = x_0)}{P(X_n = x, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_0 = x_0)} = \\ & \frac{P(Y_{n+1} = y - x, X_n = x, \dots, X_0 = x_0)}{P(X_n = x, \dots, X_0 = x_0)} = \\ & \frac{P(Y_{n+1} = y - x)P(X_n = x, \dots, X_0 = x_0)}{P(X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0)}. \end{aligned}$$

Y_{n+1} indépendant de X_n et X_{n-1} donc

$$P(X_{n+1} = y/X_n = x, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_0 = x_0) = P(Y_{n+1} = y-x) \dots \dots \dots (1)$$

D'autre part

$$P(X_{n+1} = y/X_n = x) = \frac{P(Y_{n+1} = y-x, X_n = x)}{P(X_n = x)} = P(Y_{n+1} = y-x) \dots \dots \dots (2)$$

de (1) et (2) la chaîne $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov. En effet nous avons $\forall x, y, X_{n-1} \dots X_0 \in \mathbb{Z}, \forall n \in \mathbb{N}$

$$P[X_{n+1} = y/X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n] = P[Y_{n+1} = y-x] = P[X_{n+1} = y/X_n = x]$$

□

Remarque 2.

Si $p = q = \frac{1}{2}$, on dit que $(X_n)_n$ est une marche aléatoire Symétrique sur \mathbb{Z} .

Proposition 1.

Pour tout entier n, m , et pour x et $y \in E$ soit

$$p_{xy}^{(n)} = P(X_n = y|X_0 = x) = P(X_{m+n} = y|X_m = x)$$

C'est la probabilité de transition de l'état x à l'état y , en n pas. Si P est la matrice de transition, alors on a

$$(p_{xy}^{(n)})_{x,y \in E} = P^n$$

Proposition 2. (Chapman-Kolmogorov)

Si $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov d'espace des états E , de matrice de transition $P = (p_{xy})_{x,y \in E}$.

$\forall m, n \geq 0, \forall x, y \in E$

$$p_{xy}^{(m+n)} = \sum_{z \in E} p_{xz}^{(n)} p_{zy}^{(m)}$$

Démonstration.

$\forall m, n \geq 0, x, y, z \in E$, nous avons

$$\begin{aligned}
p_{xy}^{(m+n)} &= P[X_{n+m} = y / X_0 = x] \\
&= P[\{X_{n+m} = y\} \cup \{\bigcup_z (X_n = z)\} / X_0 = x] \\
&= \sum_z P[\{X_{n+m} = y\} \cap \{X_n = z / X_0 = x\}] \\
&= \sum_z P[X_n = z / X_0 = x] P[X_{n+m} = y / X_n = z, X_0 = x]
\end{aligned}$$

donc

$$p_{xy}^{(m+n)} = \sum_z P[X_n = z / X_0 = x] P[X_m = y / X_0 = z]$$

□

Définition 3.

Soit $\pi = (\pi_x)_{x \in E}$ une famille de nombres réels positifs tel que $\sum_x \pi_x = 1$,

1. π est une loi stationnaire (invariante) pour la chaîne de Markov $(X_n)_n$ tel que $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n)$. Si $\pi = \pi P$, c'est à dire, si pour tout $y \in E$, on a

$$\pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy}$$

2. La loi π est dite réversible ou que la matrice P est π réversible si

$$\forall x, y \in E \quad \pi_x p_{xy} = \pi_y p_{yx}$$

Remarque 3.

Si π est une loi stationnaire pour $(X_n)_n$ alors

$$\pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy} \Leftrightarrow \pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy}^{(n)} ; \forall n.$$

Démonstration.

⇐

n=1 fait
 donc on a

$$\pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy}^{(1)} = \sum_x \pi_x p_{xy},$$

\Rightarrow

On a $\pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy} \forall x, y$
 donc $\pi_x = \sum_z \pi_z p_{zx}$,
 On remplace dans (1)

$$\pi_y = \sum_x \left(\sum_z \pi_z p_{zx} \right) p_{xy} = \sum_z \pi_z \sum_x p_{zx} p_{xy},$$

D'après la propriété de Kolmogorov $p_{zy}^{(2)} = \sum_x p_{zx} p_{xy}$,

On a $\pi_y = \sum_z \pi_z p_{zy}^{(2)}$.

Supposons que c'est vrai à l'ordre n i.e

$$\pi_y = \sum_z \pi_z p_{zy}^{(n)},$$

On doit montrer que c'est vrai à l'ordre $n + 1$

$$\pi_y = \sum_z \pi_z p_{zy}^n,$$

mais $\pi_z = \sum_x \pi_x p_{xz}$,

donc

$$\pi_y = \sum_z \left(\sum_x \pi_x p_{xz} \right) p_{zy}^{(n)} = \sum_x \pi_x \sum_z p_{xz} p_{zy}^{(n)} = \sum_x \pi_x p_{xy}^{(n+1)}$$

Donc

$$\pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy} \Leftrightarrow \pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy}^{(n)} \forall n$$

□

Proposition 3.

Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov d'espace des états E , et de matrice de transition $P = (p_{xy})_{x,y \in E}$ alors on a si π est réversible, π est stationnaire.

Démonstration.

En effet, par hypothèse, π est réversible, donc

$$\pi_x p_{xy} = \pi_y p_{yx}$$

En sommant par rapport à x , on obtient :

$$\sum_{x \in E} \pi_x p_{xy} = \sum_{x \in E} \pi_y p_{yx} = \pi_y \sum_{x \in E} p_{yx} = \pi_y, y \in E$$

car $\sum_x p_{yx} = 1$, c'est à dire $\forall y \in E, \pi_y = \sum_x \pi_x p_{xy}$ \square

Définition 4.

Une chaîne de Markov $(X_n)_n$, est dit irréductible si elle ne possède qu'une unique classe de communication, c'est à dire que tous ses éléments communiquent.

Définition 5.

Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov irréductible. La période d'un état $x \in E$ est le PGCD (plus grand commun diviseur) de $n \in \mathbb{N}^*$; $P_{xx}^n > 0$.

Un état est dit apériodique si sa période est 1, sinon il est dit périodique.

N.B :

la périodicité est une propriété de classe. Si une classe de communication est de période 1, on dit qu'elle est apériodique. une chaîne de Markov irréductible est dite apériodique si elle admet une classe apériodique

Récurrence et Transience

Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov d'espace des états E et de matrice de transition $P = (p_{xy})_{x,y \in E}$, et pour $y \in E$ soit T_y la v.a à valeurs dans \mathbb{N} définie par

$$T_y = \begin{cases} \inf \{n > 0, X_n = y\}, & \text{si } \bigcup_n \{X_n = y\} \neq \emptyset \\ \infty, & \text{sinon} \end{cases}$$

Intuitivement, T_y est le premier instant de visite de y . Si $X_0 = y$, T_y est le premier instant de retour à y .

Définition 6.

Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov sur E de matrice de transition $P = (p_{xy})_{x,y}$.

Pour $y \in E$ soit T_y le premier instant de visite à y .
L'état y est récurrent si $P[T_y < \infty | X_0 = y] = 1$ et transient sinon.

Autrement dit, si

$$f_{xy}^{(n)} = P[T_y = n | X_0 = x] \text{ et si } f_{xy}^* = \sum_n f_{xy}^{(n)},$$

l'état y est récurrent si $f_{yy}^* = 1$ et transient si $f_{yy}^* < 1$

Proposition 4.

Si $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov sur E du matrice de transition $P = (p_{xy})$,

$$p_{xy}^{(n)} = P[X_n = y | X_0 = x]$$

$x \in E$, pour $x, y \in E$ alors

$$\sum p_{xx}^{(n)} = \infty, \quad x \text{ est récurrent.}$$

$$\sum p_{xx}^{(n)} < \infty, \quad x \text{ est transient.}$$

Proposition 5.

Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov irréductible sur E de matrice de transition

$$P = (p_{xy})_{x,y \in E}.$$

Pour $x \in E$, soit T_x le premier instant de retour à x .

Si $(X_n)_n$ admet la loi stationnaire $\pi = (\pi_x)_{x \in E}$, alors on a

$$\mathbb{E}[T_x] = \frac{1}{\pi_x}$$

Proposition 6.

(1). Si $y \in E$, C_y est la classe de y alors si y est récurrent les états de C_y sont récurrents. idem pour la transience.

(2). Si $q_{yy} = P[X_k = y, \text{ une infinité de fois } X_0 = y]$ alors si y est récurrent $q_{yy} = 1$.

si y est transient $q_{yy} = 0$.

1.2 Définitions et généralités sur les groupes

Définition 7.

Un groupe est un ensemble d'éléments associé à une loi de composition interne $(*)$ noté $(G, *)$ où il satisfait les conditions suivantes

1-Loi de composition interne :

$$\forall x, y \in G, \quad x * y \in G.$$

2-Associativité :

$$\forall x, y, z \in G, \quad (x * y) * z = x * (y * z).$$

3-Élément neutre :

$$\text{Il existe un élément } e \text{ de } G \text{ tel que } \forall x \in G \quad e * x = x * e = x.$$

4-Symétrique :

Pour tout élément x de G , il existe y dans G tel que : $x * y = y * x = e$, où e est l'élément neutre, y est appelé symétrique de x .

Définition 8.

On dit qu'un groupe $(G, *)$ est abélien, ou commutatif, lorsque la loi de composition interne du groupe est commutative, c'est-à-dire :

$$\forall x, y \in G, \quad x * y = y * x$$

Définition 9.

Soit G un groupe et $S \in G$, on dit que S est un système générateur du groupe G , ou que G est engendré par S , lorsque le sous-groupe engendré par S est G :

$$G = \langle S \rangle$$

Autrement dit, tout élément de G est produit d'éléments de S ou de leurs inverses.

Un système S générateur du groupe G est dit symétrique si tout élément de S a son inverse dans S .

Définition 10.

Soient G un groupe discret, et S un système générateur symétrique de G . On définit une géométrie sur G :

-La longueur d'un élément $x \in G$ est la plus petite longueur d'une suite $s_1, s_2, \dots, s_n \in S$ telle que $\ell_S(x) = \ell_S(x^{-1})$ si $x = s_1.s_2.\dots.s_n \in S$.

-La distance entre deux éléments $x, y \in G$ est la longueur de xy^{-1} notée $\ell_S(xy^{-1})$ telle que

$$\begin{aligned} G \times G &\rightarrow \mathbb{R} \\ (x, y) &\rightarrow \ell_S(xy^{-1}) \end{aligned}$$

Si e désigne l'élément neutre de G , nous poserons $\ell_S(e) = 0$.

Propriétés

1. Soit $d_S(x, y)$ une distance entre x et y , nous avons :
 $d_S(zx, zy) = \ell_S((zx)^{-1}zy) = \ell_S(x^{-1}z^{-1}zy) = \ell_S(x^{-1}y) = d_S(x, y)$.
2. $\ell_S(x) = \ell_S(x^{-1})$.
3. $d_S(e, x) = \ell_S(x)$.

Proposition 7.

L'espace (G, d_S) est un espace métrique.

Démonstration.

Soient $x, y \in G$, en posant $z = x^{-1}y$, on a :

1. $d_S(x, y) = d_S(e, x^{-1}y) = \ell_S(z) \geq 0$, avec égalité si et seulement si $z = e$, si et seulement si $x = y$.
2. $d_S(x, y) = \ell_S(z) = \ell_S(z^{-1}) = d_S(z, e) = d_S(xz, x) = d_S(y, x)$.
3. Pour l'inégalité triangulaire, il suffit de voir que :

$$d_S(x, y) \leq d_S(x, e) + d_S(e, y),$$

pour tout x différent de y et tous les deux sont différents de e . Soient n et m les longueurs, respectivement de x et y , par conséquent

$$x = s_{x_1} \dots s_{x_n}.$$

et

$$y = s_{y_1} \dots s_{y_m}.$$

On obtient alors la décomposition suivante

$$x^{-1}y = (s_{x_1} \dots s_{x_n})^{-1} s_{y_1} \dots s_{y_m}.$$

Par minimalité de la longueur de la décomposition on a

$$d_S(x, y) = \ell_S(x^{-1}y) \leq \ell_S(x) + \ell_S(y) = d_S(x, e) + d_S(e, y).$$

Ces trois points montrent que (G, d_S) est un espace métrique. \square

1.3 Marche aléatoire sur un groupe

-Action d'un groupe et marche aléatoire sur un ensemble :

Définition 11.

Soient E un ensemble et (G, \cdot) un groupe multiplicatif d'élément neutre 1. L'action du groupe G sur l'ensemble E est une application :

$$\begin{aligned} G \times E &\rightarrow E \\ (g, x) &\rightarrow g * x \end{aligned}$$

qui vérifie les propriétés suivantes :

$$1-\forall x \in E, 1 * x = x$$

$$2-\forall g, g' \in G, \forall x \in E, g' * \underbrace{(g * x)}_{\in E} = \underbrace{(g' \cdot g)}_{\in G} * x$$

Dans ce cas on dit également que G opère à gauche sur l'ensemble E .

Définition 12.

Soit E un ensemble et soit (G, \cdot) un groupe. On suppose que G opère à gauche sur E par la loi $(*)$.

Soit $(Y_n)_n$ une suite de variables aléatoires i.i.d sur G , et X_0 une variable aléatoire à valeur dans E . On appelle marche aléatoire à gauche sur E la suite de variable aléatoire $(X_n)_n$ définie par :

$$\begin{cases} X_0 \\ X_n = Y_n * X_{n-1} \quad \text{si } n \geq 1 \end{cases}$$

-Marche aléatoire sur un groupe :

Définition 13.

Soit (G, \cdot) un groupe topologique, \mathcal{B}_G une tribu borélienne et $(Y_n)_n$ une suite de v.a i.i.d à valeur dans G . Soit X_0 une v.a à valeurs dans G indépendante des Y_n , on définit une marche aléatoire à gauche (respect à droite) sur G , la suite $(X_n)_n$ de variable aléatoire définie par :

$$X_0, X_n = Y_n \cdot X_{n-1} ; n > 0$$

(respect $X_0, X_n = X_{n-1} \cdot Y_n ; n > 0$)

On vérifie que $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov d'espace des états G . Soit \mathbb{P} le noyau de transition associé à $(X_n)_n$. \mathbb{P} par définition est :
pour $A \in \mathcal{B}_G$.

$$P[X_{n+1} \in A / X_0, X_1 \dots X_n] = P[X_{n+1} \in A / X_n]$$

Si μ est la loi commune des $(Y_n)_n$ Nous avons alors

Proposition 8. $\forall A \in \mathcal{B}_G, \forall x \in G$ Si le groupe est additif alors :

$$\mathbb{P}(A, x) = \mu(A - x).$$

Si le groupe est multiplicatif alors :

$$\mathbb{P}(A, x) = \mu(A \cdot x^{-1}).$$

Démonstration.

Si $G = \mathbb{R}$, le **groupe additif** Par définition de la probabilité conditionnelle on a

$\forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}}, \forall B \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}}, P[X_{n+1} \in A/X_n]$ est l'unique v.a $\sigma(X_n)$ -mesurable qui vérifie

$$P[X_{n+1} \in A, X_n \in B] = \int_{X_n \in B} P[X_{n+1} \in A/X_n] dP$$

Soit la fonction mesurable sur \mathbb{R} , $\varphi(x)$ (qui existe) tel que

$$\varphi(X_n) = P[X_{n+1} \in A/X_n].$$

Nous avons

$$\varphi(x) = P[X_{n+1} \in A/X_n = x] = P[X_1 \in A/X_0 = x]$$

$$\begin{aligned} P[X_{n+1} \in A, X_n \in B] &= \int_{X_n \in B} P[X_{n+1} \in A/X_n \in B] dP \\ &= \int_{X_n \in B} E[\mathbb{I}_A(X_{n+1}/X_n)] dP \\ &= \int_{X_n \in B} \mathbb{I}_A(X_{n+1}) dP \\ &= \int_{\Omega} \mathbb{I}_{X_{n+1} \in A \cap X_n \in B} dP \\ &= \int_{X_n \in B} \mathbb{I}_A(Y_{n+1} + X_n) dP. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \int_{X_n \in B} P[X_{n+1} \in A/X_n \in B] dP &= \int_B \varphi(x) P[X_n \in dx] \\ &= \int_{X_n \in B} \mathbb{I}_A(Y_{n+1} + X_n) dP \\ &= \int_G \int_B \mathbb{I}_A(y + x) P[X_n \in dx, Y_{n+1} \in dy]. \end{aligned}$$

Par indépendance de Y_{n+1} et X_n nous avons

$$\int_G \int_B \mathbb{I}_A(y+x)P[X_n \in dx, Y_{n+1} \in dy] = \int_G \int_B \mathbb{I}_A(y+x)P[X_n \in dx]P[Y_{n+1} \in dy].$$

Et en appliquant Fubini, nous avons

$$\begin{aligned} \int_G \int_B \mathbb{I}_A(y+x)P[X_n \in dx]P[Y_{n+1} \in dy] &= \int_B P[X_n \in dx] \int_G \mathbb{I}_A(x+y)P[Y_{n+1} \in dy] \\ &= \int_B P[X_n \in dx] \int_G \mathbb{I}_{A-x}(y)P[Y_{n+1} \in dy] \\ &= \int_B P[X_n \in dx]\mu(A-x) \\ &= \int_B P[X_n \in dx]P[Y_{n+1} \in A-x]. \end{aligned}$$

Par unicité de $\varphi(x)$

$$\varphi(x) = P[Y_{n+1} \in A-x].$$

Par conséquent

$$\mathbb{P}(A, x) = P[Y_{n+1} \in A-x].$$

Donc

$$\mathbb{P}(A, x) = \mu(A-x).$$

Si G est un groupe multiplicatif

On suppose que G est un groupe topologique. Par la définition de la probabilité conditionnelle nous avons $\forall A \in \mathcal{B}_G, \forall x \in G, P[X_{n+1} \in A/X_n]$ est l'unique v.a $\sigma(X_n)$ -mesurable qui vérifie

$$P[X_{n+1} \in A, X_n \in B] = \int_{X_n \in B} P[X_{n+1} \in A/X_n]dP$$

Soit la fonction mesurable sur \mathbb{R} , $\varphi(x)$ (qui existe) tel que

$$\varphi(X_n) = P[X_{n+1} \in A/X_n].$$

Nous avons

$$\varphi(x) = P[X_{n+1} \in A/X_n = x] = P[X_1 \in A/X_0 = x]$$

$$\begin{aligned} P[X_{n+1} \in A, X_n \in B] &= \int_{X_n \in B} P[X_{n+1} \in A/X_n \in B]dP \\ &= \int_{X_n \in B} E[\mathbb{I}_A(X_{n+1}/X_n)]dP \\ &= \int_{X_n \in B} \mathbb{I}_A(X_{n+1})dP \\ &= \int_{X_n \in B} \mathbb{I}_A(Y_{n+1} \cdot X_n)dP. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \int_{X_n \in B} P[X_{n+1} \in A/X_n \in B]dP &= \int_B \varphi(x)P[X_n \in dx] \\ &= \int_{X_n \in B} \mathbb{I}_A(Y_{n+1} \cdot X_n)dP \\ &= \int_G \int_B \mathbb{I}_A(y \cdot x)P[X_n \in dx, Y_{n+1} \in dy]. \end{aligned}$$

Par indépendance de Y_{n+1} et X_n nous avons

$$\int_G \int_B \mathbb{I}_A(y \cdot x)P[X_n \in dx, Y_{n+1} \in dy] = \int_G \int_B \mathbb{I}_A(y \cdot x)P[X_n \in dx]P[Y_{n+1} \in dy].$$

Et en appliquant Fubini, nous avons

$$\begin{aligned} \int_G \int_B \mathbb{I}_A(y \cdot x)P[X_n \in dx]P[Y_{n+1} \in dy] &= \int_B P[X_n \in dx] \int_G \mathbb{I}_A(y \cdot x)P[Y_{n+1} \in dy] \\ &= \int_B P[X_n \in dx] \int_G \mathbb{I}_{A \cdot x^{-1}}(y)P[Y_{n+1} \in dy] \\ &= \int_B P[X_n \in dx]\mu(A \cdot x^{-1}) \\ &= \int_B P[X_n \in dx]P[Y_{n+1} \in A \cdot x^{-1}]. \end{aligned}$$

Par unicité de $\varphi(x)$

$$\varphi(x) = P[Y_{n+1} \in A.x^{-1}].$$

Par conséquent

$$\mathbb{P}(A, x) = P[Y_{n+1} \in A.x^{-1}].$$

Donc

$$\mathbb{P}(A, x) = \mu(A.x^{-1}).$$

□

1.4 Marche aléatoire sur un graphe

Définition 14.

Un graphe $G = (V, E)$ est la donnée de deux ensembles V et E , où V est l'ensemble des sommets, et E est l'ensemble des arêtes tel que :

$E = \{(x, y) : x, y \in V, x \neq y\}$. Une arête est un chemin entre deux sommets adjacents.

Si $(x, y) \in E$, on dit que x est le voisin de y , et on note $x \sim y$.

Exemple 2.

Soit G le graphe défini par :

$V = \{1, 2, 3, 4, 5, \}$ et $E = \{(1, 2), (2, 3), (3, 4), (4, 5), (1, 5)\}$.

On représente le graphe simple G par le schéma suivant :

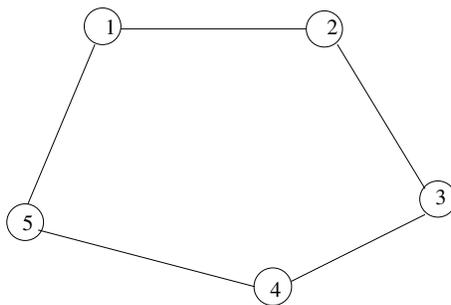


FIGURE 1.1: Exemple d'un graphe simple

Définition 15.

On appelle le degré d'un sommet x noté $\text{deg}(x)$, le nombre des voisins de x ou le nombre d'arêtes incidentes à x (En ne comptant les boucles qu'une seule fois)

Définition 16.

Soit $G = (V, E)$ un graphe simple. On appelle la marche aléatoire sur G , la chaîne de Markov $(X_n)_{n \geq 0}$ d'espace des états V et de la matrice de transition $P = (p_{xy})_{x,y \in V}$ tel que

$$p_{xy} = \begin{cases} \frac{1}{\text{deg}(x)} & \text{si } y \sim x \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Exemple 3.

Si G est par exemple le graphe ci-dessous

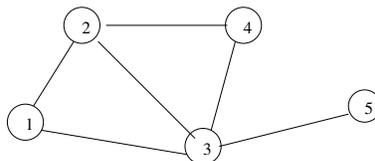


FIGURE 1.2: Graphe simple de sommets $\{1,2,3,4,5\}$ et 06 arêtes

La matrice de transition P de la marche aléatoire simple est :

$$P = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Définition 17.

Soient G un groupe discret, et $S = s_1, \dots, s_k$ un système générateur symétrique de G . On appelle un graphe de Cayley par rapport à ce système noté $\text{Cayley}(G, S)$ le graphe dont l'ensemble des sommets V sont les éléments de groupe G et l'ensemble des arêtes E est défini par :

$$E = \{(x, y) \in V \times V : x^{-1}y \in S\}$$

Marche aléatoire sur le graphe de Cayley

Une marche aléatoire sur un graphe de Cayley d'un groupe revient à se donner une loi de probabilité μ de support S et la chaîne de Markov $(X_n)_{n \geq 0}$ à valeurs dans G avec les probabilités de transition :

$$P[X_{n+1} = y / X_n = x] = \mu(x^{-1}y).$$

Chapitre 2

Algorithmes de simulation d'une chaîne de Markov

2.1 Simulation d'une chaîne de Markov

On veut simuler une chaîne de Markov $(X_n)_{n \geq 0}$ de loi initial μ^0 , d'espace des états $E = \{s_1, s_2, \dots, s_k\}$ et de matrice de transition $P = (p_{s_i, s_j})_{s_i, s_j \in E}$.

Définition 1.

Avec ces données, on appelle fonction d'initialisation la fonction $\psi : [0, 1] \rightarrow E$ définie pour $s_i \in E$ et $x \in [0, 1]$ par

$$\psi(x) = \begin{cases} s_1 & \text{si } x \in [0, \mu^{(0)}(s_1)[\\ s_2 & \text{si } x \in [\mu^{(0)}(s_1), \mu^{(0)}(s_1) + \mu^{(0)}(s_2)[\\ \cdot & \\ \cdot & \\ s_i & \text{si } x \in [\sum_{j=1}^{i-1} \mu^{(0)}(s_j), \sum_{j=1}^i \mu^{(0)}(s_j)[\\ \cdot & \\ \cdot & \\ s_k & \text{si } x \in [\sum_{j=1}^{k-1} \mu^{(0)}(s_j), 1] \end{cases}$$

Proposition 1.

Si U_0 une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ alors

$$P[\psi(U_0) = s_i] = P[X_0 = s_i],$$

Démonstration.

On fixe $X_0 = \psi(U_0)$. $\forall i = 1, 2, \dots, k$

$$\begin{aligned}
 P[\psi(U_0) = s_i] &= \int_0^1 \mathbb{I}_{\{\psi(x)=s_i\}} dx \\
 &= \sum_{j=1}^i \mu^{(0)}(s_j) - \sum_{j=1}^{i-1} \mu^{(0)}(s_j) \\
 &= \mu^{(0)}(s_i) = P[X_0 = s_i]
 \end{aligned}$$

□

Définition 2.

Avec les mêmes données, on appelle fonction de mise-à-jour ϕ la fonction $\phi : E \times [0, 1] \rightarrow E$ définie pour $s_i \in E$ et $x \in [0, 1]$ par

$$\phi(s_i, x) = \begin{cases} s_1 & \text{si } x \in [0, p_{i,1}[\\ s_2 & \text{si } x \in [p_{i,1}, p_{i,1} + p_{i,2}[\\ \cdot & \\ \cdot & \\ \cdot & \\ s_j & \text{si } x \in [\sum_{l=1}^{j-1} p_{i,l}, \sum_{l=1}^j p_{i,l}[\\ \cdot & \\ \cdot & \\ \cdot & \\ s_k & \text{si } x \in [\sum_{l=1}^{k-1} p_{i,l}, 1] \end{cases}$$

Pour $p_{s_i, s_j} = p_{i,j}$

Proposition 2.

Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov de matrice de transition $P = (p_{s_i, s_j})_{s_i, s_j \in E}$ sur $E = \{s_1, s_2, \dots, s_k\}$, et soient ψ et ϕ les fonctions d'initialisation et de mise-à-jour. Soit $(Y_n)_n$ la suite de va définie par

$$Y_0 = \psi(U_0), Y_1 = \phi(Y_0, U_1), \dots, Y_n = \phi(Y_{n-1}, U_n)$$

où $(U_n)_n$ une suite de variables aléatoires iid uniformes sur $[0, 1]$. Alors $(Y_n)_n$ est une chaîne de Markov de même espace des états et de même matrice de transition que $(X_n)_n$.

Démonstration.

$(Y_n)_n$ est la même chaîne de Markov que $(X_n)_n$, et $(Y_n)_n$ est une chaîne de Markov itérative dont on peut facilement simuler les trajectoires $Y_0 = X_0, Y_1 = X_1, \dots, Y_n = X_n$, il suffit donc de se donner une suite $(U_n)_n$ de variables aléatoires iid uniforme sur $[0, 1]$.

On a

$$[Y_{n+1} = s_j / y_n = s_i] = P[X_{n+1} = s_j / X_n = s_i]$$

et

$$\begin{aligned} P[Y_{n+1} = s_j / Y_n = s_i] &= P[\phi(s_i, U_{n+1}) = s_j / Y_n = s_i] \\ &= P[\phi(s_i, U_{n+1}) = s_j] \end{aligned}$$

car U_{n+1} est indépendante de (U_0, \dots, U_n) , et donc aussi de Y_n .
Par suite nous avons

$$\begin{aligned} P[Y_{n+1} = s_j / Y_n = s_i] &= P[\phi(s_i, U_{n+1}) = s_j] \\ &= \int_0^1 \mathbb{I}_{\{\phi(s_i, x) = s_j\}} dx \\ &= \sum_{l=1}^j p_{s_i, l} - \sum_{l=1}^{j-1} p_{s_i, l} = p_{s_i, s_j} \\ &= P[X_{n+1} = s_j / X_n = s_i] \end{aligned}$$

Donc $(Y_n)_n$ est une chaîne de Markov de même espace des états et de même matrice de transition que $(X_n)_n$. \square

Remarque 1.

Cette proposition contient l'algorithme de simulation de la chaîne de Markov $(X_n)_n$. La trajectoire de $(X_n)_{n \geq 0}$ à n pas est donc :

$$\begin{aligned} X_0 &= \psi(U_0) \\ X_1 &= \phi(X_0, U_1) \\ X_2 &= \phi(X_1, U_2) \\ X_3 &= \phi(X_2, U_3) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ X_n &= \phi(X_{n-1}, U_n). \end{aligned}$$

2.2 Application : Simulation de l'évolution de la météo à Gothenburg en hiver sur 100 jours

Pour simplifier, nous caractérisons le temps qu'il fait à Gothenburg par 3 états : s_1 : pluie, s_2 : ensoleillé ou nuageux, s_3 : neige.

Nous supposons que les changements de la météo dans ces trois états sont régis par un modèle Markovien. Les observations conduisent à considérer que ces changements sont régis par la chaîne de Markov homogène $(X_n)_n$ à valeurs dans $E = \{s_1, s_2, s_3\}$ et de matrice de transition $P = (P_{i,j})_{i,j \in E}$ (cf. [2]) tel que

$$P = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.3 & 0.2 \\ 0.15 & 0.7 & 0.15 \\ 0.2 & 0.7 & 0.5 \end{pmatrix}$$

$(X_n)_n$ est une chaîne de Markov irréductible d'après sa matrice de transition P . Sa seule classe essentielle étant finie, elle est donc récurrente positive. Par suite elle admet la loi stationnaire $\pi = (\pi_1, \pi_2, \pi_3)$ unique.

Nous savons que si π est une loi stationnaire, π vérifie les équations :

$$\begin{cases} \pi_j = \sum_{i=1}^3 \pi_i p_{ij} \\ \sum_{i=1}^3 \pi_i = 1 \end{cases}$$

C'est à dire le système d' équations

$$S = \begin{cases} \pi_1 = 0.5\pi_1 + 0.15\pi_2 + 0.2\pi_3 \dots (1) \\ \pi_2 = 0.3\pi_1 + 0.7\pi_2 + 0.3\pi_3 \dots (2) \\ \pi_3 = 0.2\pi_1 + 0.15\pi_2 + 0.5\pi_3 \dots (3) \\ \pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 1 \dots \dots \dots (4) \end{cases}$$

Ce système admet comme solution $\pi = (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$.

La fonction d'initialisation ψ est donc (d'après la définition) :

$$\psi(x) = \begin{cases} s_1 & \text{si } x \in [0, \frac{1}{4}[\\ s_2 & \text{si } x \in [\frac{1}{4}, \frac{3}{4}[\\ s_3 & \text{si } x \in [\frac{3}{4}, 1] \end{cases}$$

D'autre part la fonction de mise-à-jour ϕ est :

$$\phi(s_1, x) = \begin{cases} s_1 & \text{si } x \in [0, 0.5[\\ s_2 & \text{si } x \in [0.5, 0.8[\\ s_3 & \text{si } x \in [0.8, 1] \end{cases}$$

et

$$\phi(s_2, x) = \begin{cases} s_1 & \text{si } x \in [0, 0.15[\\ s_2 & \text{si } x \in [0.15, 0.85[\\ s_3 & \text{si } x \in [0.85, 1] \end{cases}$$

et

$$\phi(s_3, x) = \begin{cases} s_1 & \text{si } x \in [0, 0.2[\\ s_2 & \text{si } x \in [0.2, 0.5[\\ s_3 & \text{si } x \in [0.5, 1] \end{cases}$$

Soit $(U_n)_n$ une suite de variables aléatoires i.i.d, et uniformes sur $[0, 1]$.
Nous avons donc un échantillon de taille n :

$$\begin{aligned} X_0 &= \psi(U_0) \\ X_1 &= \phi(X_0, U_1) \\ X_2 &= \phi(X_1, U_2) \\ X_3 &= \phi(X_2, U_3) \\ X_4 &= \phi(X_3, U_4) \\ X_5 &= \phi(X_4, U_5) \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \\ X_n &= \phi(X_{n-1}, U_n). \end{aligned}$$

Nous donnons çï-après des exemples de simulations de trajectoires de la chaîne de Markov $(X_n)_n$ sur 100 jours :

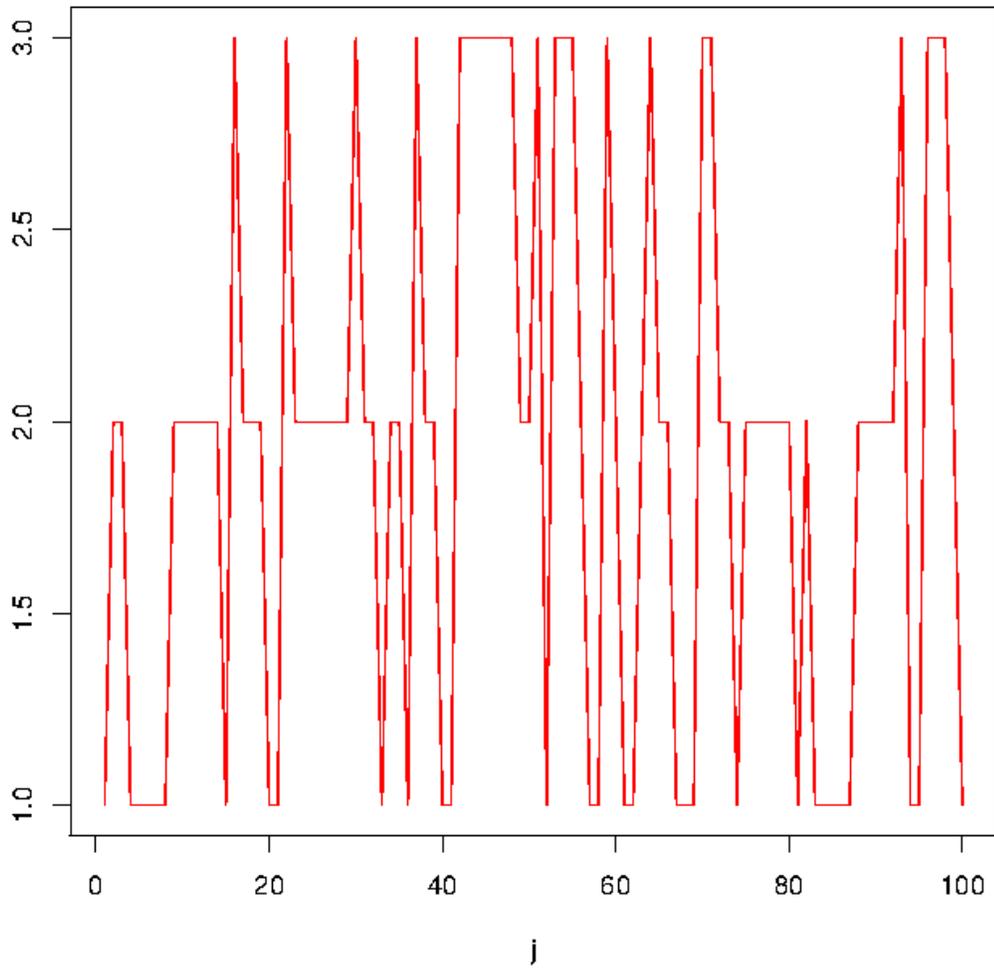


FIGURE 2.1: Trajectoire à 100 jours de la chaîne de Markov $(X_n)_n$, avec $1 = s_1 =$ pluie, $2 = s_2 =$ ensoleillement ou nuageux, $3 = s_3 =$ Neige.

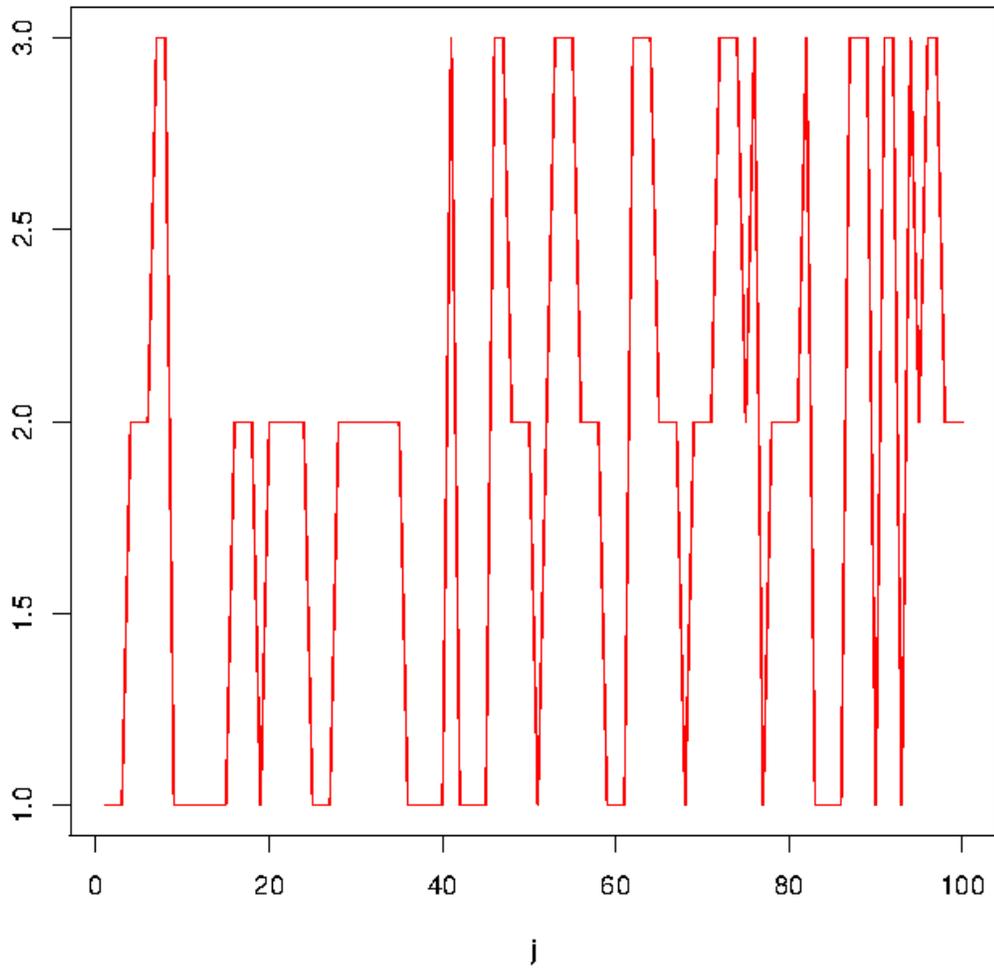


FIGURE 2.2: Trajectoire à 100 jours de la chaîne de Markov $(X_n)_n$, avec $1 = s_1 = \text{pluie}$, $2 = s_2 = \text{ensoleillement ou nuageux}$, $3 = s_3 = \text{Neige}$.

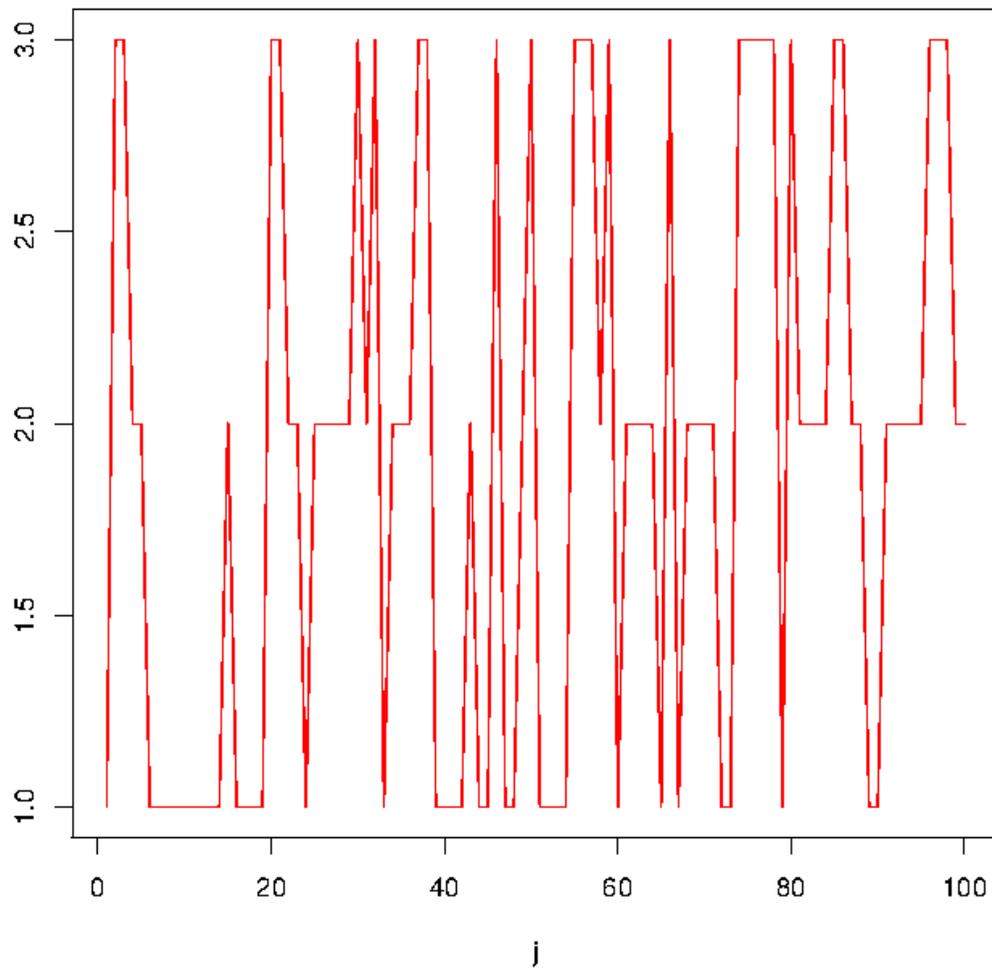


FIGURE 2.3: Trajectoire à 100 jours de la chaîne de Markov $(X_n)_n$, avec $1 = s_1 =$ pluie, $2 = s_2 =$ ensoleillement ou nuageux, $3 = s_3 =$ Neige.

Analyse et caractérisation de temps à Gothenburg

Soit T_i le 1^{er} instant de retour à l'état s_i , $\pi = (\pi_1, \pi_2, \pi_3)$ étant la loi stationnaire. Nous savons que :

$$\mathbb{E}_{s_i}[T_i] = \frac{1}{\pi_i} \text{ avec } i = 1, 2, 3$$

Pour l'état s_1 : pluie, le temps moyen de retour à l'état s_1

$$\mathbb{E}_{s_1}[T_1] = 4 \text{ jours.}$$

Pour l'état s_2 : ensoleillement ou nuages, le temps moyen de retour à l'état s_2

$$\mathbb{E}_{s_2}[T_2] = 2 \text{ jours.}$$

Pour l'état s_3 : neige, le temps moyen de retour à l'état s_3

$$\mathbb{E}_{s_3}[T_3] = 4 \text{ jours.}$$

Conclusion à ces observations

D'après ces résultats et la stationarité de la chaîne de Markov, nous constatons que Gothenburg est une ville froide en hiver vue la dominance de la pluie et la neige malgré que le temps moyen de retour chaque fois à un état pluvieux ou neigeux est de 4 jours.

D'autre part des plages de beau temps ou nuageuses apparaissent souvent et reviennent en moyenne chaque 2 jours.

2.3 Algorithme de Metropolis

Soit π une loi de probabilité sur un ensemble fini E . On cherche à construire une chaîne de Markov qui admet π comme loi stationnaire (Cf.[6])

On se donne une matrice de transition $\Psi = (\psi_{xy})_{x,y \in E}$ appelée matrice de selection tel que

$$\psi_{xy} > 0 \Rightarrow \psi_{yx} > 0, \forall x, y \in E$$

Soit $h :]0, \infty[\rightarrow]0, 1[$ une fonction tel que

$$h(u) = \frac{1}{u} h(u)$$

Note : On peut prendre : $h(u) = \min(u, 1)$ Pour $x \neq y$, on pose :

$$\alpha(x, y) = \begin{cases} h\left(\frac{\pi_y \psi_{yx}}{\pi_x \psi_{xy}}\right) & \text{si } \psi_{xy} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Donc si $h(u) = \min(u, 1)$ alors on a :

$$\alpha(x, y) = \begin{cases} \min\left(\frac{\pi_y \psi_{yx}}{\pi_x \psi_{xy}}, 1\right) & \text{si } \psi_{xy} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

L'algorithme de Metropolis correspondant est le suivant

Etape0 : Initialiser X_0 .

Etape $n + 1$:

(Selection) Choisir y avec la loi $\Psi(X_n, y)$

Tirer un nombre U au hasard dans $[0, 1]$

Si $U < \alpha(X_n, y)$ accepter la selection :

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

Sinon, refuser la selection :

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

2.4 Etude de La chaîne de Metropolis construite

Théorème 1.

Soit E un ensemble fini et π une loi de probabilité sur E , $(X_n)_n$ une chaîne de Markov sur E de matrice de transitions $(\psi(x, y))_{x, y \in E}$. (Cf. [2])

1) Si ψ est symétrique alors la chaîne de Markov $(Y_n)_n$ sur E de matrice de transition $P = (P(x, y))_{x, y \in E}$ tel que

$$P(x, y) = \begin{cases} \psi(x, y) \min\left\{\frac{\pi_y}{\pi_x}, 1\right\} & \text{si } x \neq y \\ 1 - \sum_{z \neq x} \psi(x, z) \min\left\{\frac{\pi_z}{\pi_x}, 1\right\} & \text{si } x = y \end{cases}$$

admettant π comme loi stationnaire.

2) Si ψ est quelconque, la chaîne de Markov $(Y_n)_n$ sur E de matrice de transition $P = (P(x, y))_{x, y \in E}$ tel que

$$P(x, y) = \begin{cases} \psi(x, y) \min\left\{\frac{\pi_y \psi(y, x)}{\pi_x \psi(x, y)}, 1\right\} & \text{si } x \neq y \\ 1 - \sum_{z \neq x} \psi(x, z) \min\left\{\frac{\pi_z \psi(z, x)}{\pi_x \psi(x, z)}, 1\right\} & \text{si } x = y \end{cases}$$

admettant π comme loi stationnaire.

Démonstration.

Pour montrer que π est une loi stationnaire pour P , on montre que π est réversible pour P .

π est réversible si $\pi_x P(x, y) = \pi_y P(y, x)$

1) Si ψ est symétrique :

Pour $y \neq x$ on a

$$\pi_x P(x, y) = \psi(x, y) \min\left\{\frac{\pi_y}{\pi_x}, 1\right\} \dots (1)$$

$$\pi_y P(y, x) = \pi_y \psi(y, x) \min\left\{\frac{\pi_x}{\pi_y}, 1\right\} \dots (2)$$

Si $\frac{\pi_y}{\pi_x} < 1$, nous avons

$$(1) = \pi_x \psi(x, y) \frac{\pi_y}{\pi_x} = \psi(x, y) \pi_y$$

et (2) = $\pi_y \psi(y, x) 1$ car $\frac{\pi_y}{\pi_x} < 1 \Rightarrow \frac{\pi_x}{\pi_y} > 1$.

Si $\frac{\pi_y}{\pi_x} > 1$, nous avons

$$(1) = \pi_x \psi(x, y)$$

et

$$(2) = \pi_y \psi(y, x) \frac{\pi_x}{\pi_y} = \psi(y, x) \pi_x$$

car

$$\frac{\pi_y}{\pi_x} > 1 \Rightarrow \frac{\pi_x}{\pi_y} < 1$$

donc (1) = (2) car $\psi(x, y) = \psi(y, x)$ et donc π est réversible.

2) Si ψ est quelconque :

π est réversible si $\pi_x P(x, y) = \pi_y P(y, x)$. Nous avons, pour $x \neq y$

$$\pi_x P(x, y) = \pi_x \psi(x, y) \min\left\{\frac{\pi_y \psi(y, x)}{\pi_x \psi(x, y)}, 1\right\} \dots (*)$$

et

$$\pi_y P(y, x) = \pi_y \psi(y, x) \min\left\{\frac{\pi_x \psi(x, y)}{\pi_y \psi(y, x)}, 1\right\} \dots (**)$$

Si $\frac{\pi_y \psi(y, x)}{\pi_x \psi(x, y)} < 1$, nous avons

$$(*) = \pi_x \psi(x, y) \frac{\pi_y \psi(y, x)}{\pi_x \psi(x, y)} = \pi_y \psi(y, x)$$

et

$$(**) = \pi_y \psi(y, x) 1$$

car

$$\frac{\pi_y \psi(y, x)}{\pi_x \psi(x, y)} < 1 \Rightarrow \frac{\pi_x \psi(x, y)}{\pi_y \psi(y, x)} > 1$$

Donc $(*) = (**)$ dans ce cas.

Si

$$\frac{\pi_y \psi(y, x)}{\pi_x \psi(x, y)} > 1$$

alors on a un calcul analogue au précédent établi l'égalité recherchée et montre donc que π est réversible par rapport à la matrice P . \square

Exemple : Chaîne de Metropolis sur un graphe

On veut simuler une distribution de probabilités π sur un ensemble $S = \{s_1, s_2, \dots, s_k\}$. Pour cela nous construisons la chaîne de Metropolis à partir de la marche aléatoire sur un graphe [cf.page20]

Soit $G = (V, E)$ un graphe où $V = S$ est l'ensemble des sommets et E est l'ensemble des arêtes.

D'après le théorème [cf.page34], la chaîne de Metropolis sur les sommets S

du graphe G , a pour probabilités de transitions $P(x, y)$ tel que

$$P(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{deg(x)} \min\{\frac{\pi(x)deg(x)}{\pi(y)deg(y)}, 1\} & \text{si } x \neq y \text{ et } x \sim y \\ 0 & \text{si } x \neq y \text{ et } x \text{ n'est pas voisin de } y \\ 1 - \sum_{z \neq x} \frac{1}{deg(x)} \min\{\frac{\pi(z)deg(x)}{\pi(x)deg(z)}, 1\} & \text{si } x = y \end{cases}$$

Supposons maintenant que l'état actuel de $X_n = x$, et soit disant le choix tombe sur y selon une répartition uniforme sur l'ensemble des voisins de x de sorte que chaque voisin est choisi avec une probabilité $\frac{1}{deg(x)}$, on a

$$X_{n+1} = \begin{cases} y & \text{avec une probabilité } \min\{\frac{\pi(y)deg(x)}{\pi(x)deg(y)}, 1\} \\ X_n = x & \text{avec une probabilité } 1 - \min\{\frac{\pi(y)deg(x)}{\pi(x)deg(y)}, 1\} \end{cases}$$

π est une distribution stationnaire pour la chaîne de Markov, d'après le théorème.

Exemple 1. (*Simulation d'une loi de Poisson*)

Utilisons l'algorithme de Metropolis à marche aléatoire equiprobable pour simuler une loi de Poisson de paramètre λ et comparons le résultat avec la simulation théorique .

Dans le cas de la marche aléatoire, $\Psi(x, y) = \psi(y - x)$; donc :

$$\alpha = \min(1, \frac{\pi_y(\psi(x - y))}{\pi_x\psi(y - x)})$$

Notons que ψ est symétrique, On cherche ici à simuler la loi de poisson

$$\pi(x) = \exp(-\lambda) \frac{\lambda^x}{x!} \text{ pour } x \in \mathbb{N}$$

On considère ici le cas de la marche aléatoire dont la matrice de transition est donnée alors par

$$\psi(x, y) = \frac{1}{2}\sigma_{x-1}(y) + \frac{1}{2}\sigma_{x+1}(y)$$

i.e. on passe de x à $y = x + 1$ avec une probabilité $\frac{1}{2}$, et de x à $y = x - 1$ avec une probabilité $\frac{1}{2}$.

L'algorithme de Metropolis s'écrit alors sous la forme suivante :

Etape 0 : Initialiser X_0 .

Etape $n+1$:

On pose $y = x_n - 1$ ou $y = x_n + 1$ avec une probabilité $\frac{1}{2}$;

Tirer un nombre U au hasard dans $[0, 1]$

Si $U \leq \min\{\lambda^{y-x_n} \frac{x_n!}{y!}, 1\}$ accepter la selection :

$$X_{n+1} = y;$$

Sinon, refuser la selection :

$$X_{n+1} = X_n.$$

Nous donnons ci-après l'histogramme de la loi de X_n de paramètre $\lambda = 10$ avec l'algorithme de Metropolis et la loi théorique d'une loi de Poisson.

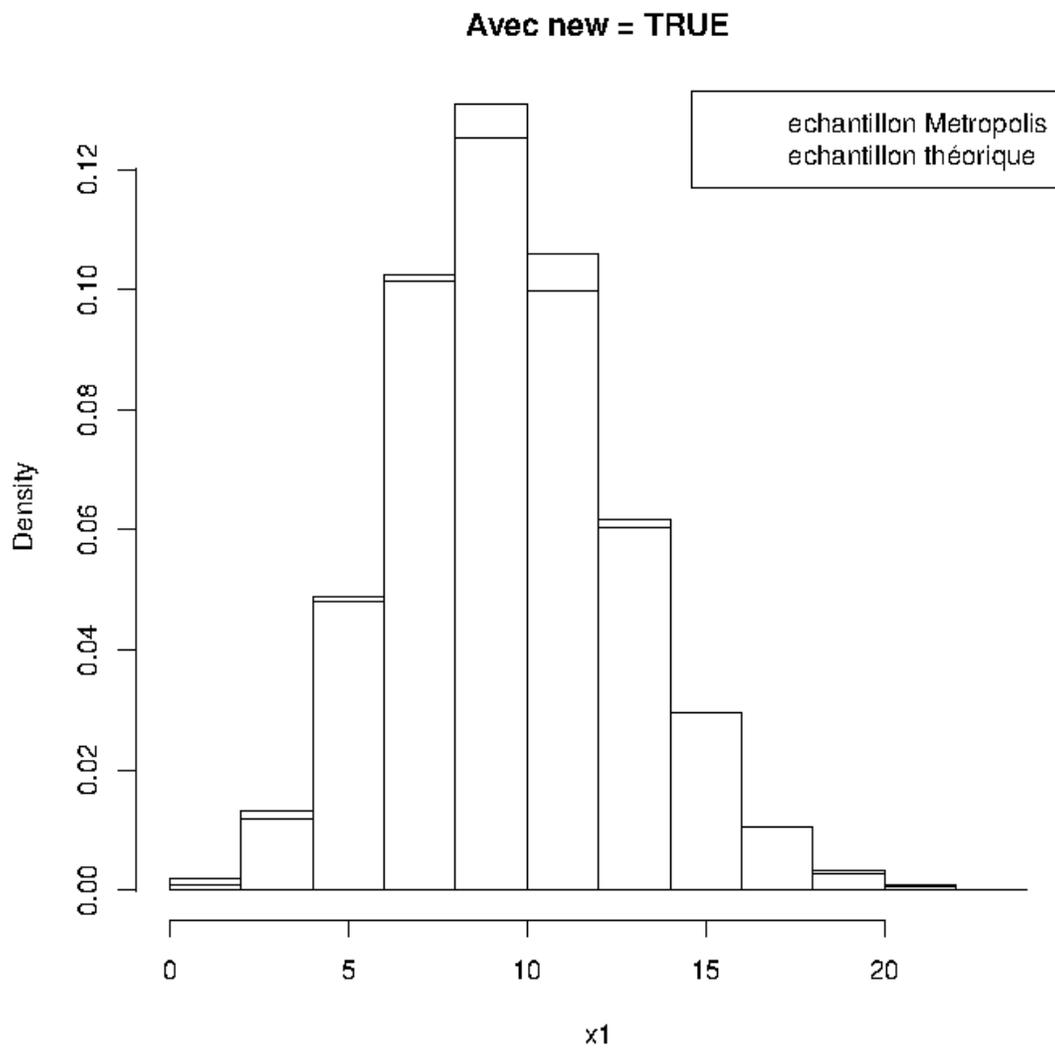


FIGURE 2.4: Histogramme de la loi de X_n avec $\lambda = 10$

Conclusion à ces observations

Nous constatons que la simulation de la loi de poisson avec l'algorithme de Metropolis donne une bonne approximation des résultats par rapport à la simulation théorique.

Chapitre 3

Echantillonnage de Gibbs et Modèle d'Ising

3.1 Modèle des sphères lourdes (Hard-core)

Soit $G = (V, E)$ un graphe. Le modèle de Hard-core nous attribue de manière aléatoire la valeur 0 ou 1 pour chacun des sommets, suivant que les sommets présentent oui ou non une propriété donnée (c'est le cas où si les sommets sont occupés ou pas par des particules d'un type donné). La règle est que deux sommets voisins (i.e. reliés par une arête) ne peuvent pas avoir la propriété ou être occupés tous les deux. On veut connaître le nombre moyen des sommets occupés.

Définition 1.

Soit $G = (V, E)$ un graphe et $S = \{0, 1\}$. Une configuration est une application

$$x : V \rightarrow \{0, 1\}.$$

Soit $\{0, 1\}^V = \{x : V \rightarrow \{0, 1\}\}$, l'ensemble des configurations

Si $x \in \{0, 1\}^V$ est tel que $\forall v \in V$ si w est le voisinage de v noté par $w \sim v$ alors $x(v) = 1$ et $x(w) = 0$ on dit que x est une configuration réalisable, ou observable .

Soit Z_G le nombre de configurations réalisables associé au graphe G . Si $\xi \in \{0, 1\}^V$, soit μ_G la loi uniforme sur l'ensemble des configurations réalisables dans $\{0, 1\}^V$, définie par

$$\mu_G(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{Z_G} & \text{si } \xi \text{ est réalisable} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Exemple 1.

Soit $G = (V, E)$ le graphe constitué par une grille de 8×8

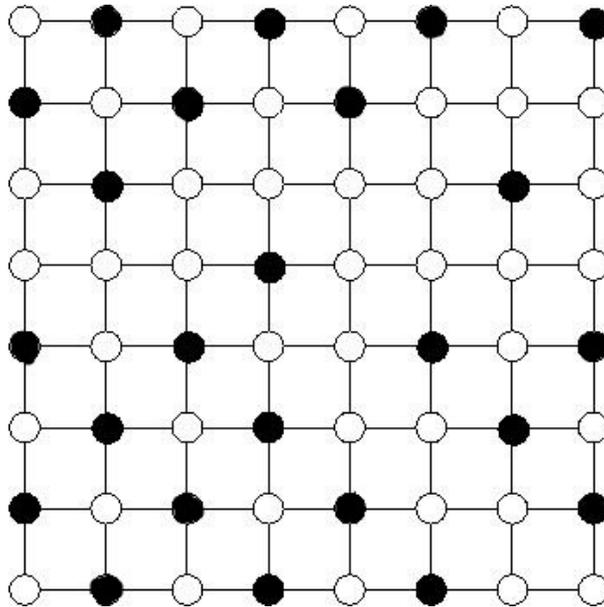


FIGURE 3.1: Exemple d'une configuration réalisable sur le graphe définie par la grille 8×8

Problème

Si nous choisissons une configuration réalisable, quel est le nombre moyen de 1 dans cette configuration ?

Soit $N(\xi)$ = le nombre de 1 détecté sur la configuration ξ , et X une configuration choisie selon la répartition uniforme μ_G .

La valeur moyenne

$$\mathbb{E}[N(X)] = \sum_{\xi} N(\xi) \mu_G(\xi) = \frac{1}{Z_G} \sum_{\xi \text{ réalisable}} N(\xi)$$

Si le graphe est 8×8 il ya $1,8 \times 10^{19}$ configurations ce qui fait l'impossibilité de ce calcul. On recourt alors aux simulations. Si on sait simuler une configuration aléatoire X qui suit μ_G . On simule (X_1, \dots, X_n) on calcule $N(X_1), N(X_2), \dots, N(X_n)$ on sait d'après la loi des grands nombres que :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n N(X_i) \rightarrow \mathbb{E}(N(X)) \text{ (} N \rightarrow \infty \text{) ps}$$

une estimation de $\mathbb{E}[N(X)]$ et donc $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n N(X_i)$, le problème est donc revient à simuler une configuration aléatoire X .

Proposition 1.

Soit X une v.a à valeurs dans $E = \{s_1, \dots, s_n\}$ et de loi π tel que $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_n)$, et soit U est une v.a uniforme sur $[0, 1]$ tel que $\psi : [0, 1] \rightarrow E$ la fonction définie par

$$\psi(x) = \begin{cases} s_1 & si & x \in [0, \pi_1[; \\ s_2 & si & x \in [\pi_1, \pi_1 + \pi_2[\\ \vdots & & \\ s_j & si & x \in [\sum_{i=1}^{j-1} \pi_i, \sum_{i=1}^j \pi_i] \\ \vdots & & \end{cases}$$

Alors la v.a $Y = \psi(U)$ est de même loi que X et donc $Y = X$ ps

Démonstration.

$$P[\psi(U) = s_j] = P[\sum_{i=1}^{j-1} \pi_i \leq U \leq \sum_{i=1}^j \pi_i] = \pi_j = P[X = s_j]$$

□

Remarque 1.

En pratique cette méthode est défficilement utilisable sauf si l'espace S est petit. Pour construire ψ déjà sur ce modèle c'est trop long, car l'espace $S = \{0, 1\}^V$ est très important.

Soit $G = \{V, E\}$ un graphe et $S = \{\xi \in \{0, 1\}^V, \xi \text{ est réalisable}\}$. Notre but est de construire une chaîne de Markov $(X_n)_n$ d'espace des états S et admettant comme loi stationnaire la loi μ_G (loi uniforme) sur S . Ce problème est resolu par la proposition suivante.

Proposition 2. (Algorithme de Gibbs)

Soit $(X_n)_n$ la chaîne de Markov sur $S = \{\xi \in \{0, 1\}^V, \xi \text{ est réalisable}\}$, définie par :

1. On choisit un sommet $v \in V$.
2. On jette une pièce régulière.
3. Si face sort, et tous les voisins w de v sont tel que $X_n(w) = 0$, alors on pose $X_{n+1}(v) = 1$, sinon $X_{n+1}(v) = 0$.
4. Enfin $\forall w \neq v, X_{n+1}(w) = X_n(w)$.

Alors $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov apériodique, irréductible et admettant la loi stationnaire $\mu_G = \frac{1}{Z_G}$ où Z_G le nombre total de configurations réalisables.

Démonstration.

Pour toute configuration réalisable ξ

$$\xi \rightarrow \xi \text{ donc, } P_{\xi\xi} > 0$$

donc $(X_n)_n$ apériodique.

$(X_n)_n$ est irréductible car chaque transition ne touche qu'un sommet. Donc si ξ et ξ' sont deux configurations réalisables, on cherche tous les sommets v où $\xi(v) \neq \xi'(v)$ et on change tous les sommets un à un par la chaîne $(X_n)_n$. La chaîne va donc passer de ξ à ξ' . Cela montre que tous les états communiquent.

Enfin μ_G est une loi stationnaire car μ_G est réversible par rapport à $(X_n)_n$.

En effet, soit ξ et ξ' deux configurations observables et $d = d(\xi, \xi')$ le nombre de sommets v où $\xi(v) \neq \xi'(v)$

Cas $d = 0$

$P_{\xi, \xi'} = P_{\xi', \xi}, \mu_G(\xi) = \mu_G(\xi')$ Donc immédiatement nous avons

$$\mu_G(\xi)P_{\xi, \xi'} = \mu_G(\xi')P_{\xi', \xi} \dots (1)$$

Cas $d \geq 2$:

On ne peut pas aller en un pas de ξ à ξ' et inversement et donc $P_{\xi, \xi'} = P_{\xi', \xi} = 0$. Donc (1) est valable.

Cas $d = 1$:

Soit v tel que $\xi(v) \neq \xi'(v)$

Pour passer de ξ à ξ' (ou de ξ' à ξ). On choisit un sommet dans V suivant la loi uniforme, avec $|V| = n$ et on tire un pile ou face sont exactement tous

les sommets voisin de v sont tel que $\xi(v) = 0$. Le choix de v se fait avec la probabilité

$$\frac{1}{n}$$

et Face à la probabilité

$$\frac{1}{2}$$

Donc la transition de ξ à ξ' se fait avec la probabilité

$$\frac{1}{2n}.$$

Par suite (1) devient

$$\frac{1}{Z_G} \frac{1}{2n} = \frac{1}{Z_G} \frac{1}{2n}$$

car $P_{\xi, \xi'} = P_{\xi', \xi}$. Donc (1) est vérifiée et $\mu_G = \frac{1}{Z_G}$ est bien réversible et donc stationnaire pour $(X_n)_n$. \square

3.2 Modèle d'Ising

Définition 2.

Soit $G = (V, E)$ un graphe et $S = \{-1, 1\}^V$. Si $\sigma \in S$, σ est une configuration. Pour $v \in V$, si $\sigma \in S$, $\sigma(v) = \pm 1$. On interprète la valeur $\sigma(v) = 1$ lorsque le spin est orienté vers le haut, et $\sigma(v) = -1$ lorsque le spin est orienté vers le bas.

On appelle modèle d'Ising la répartition des spins sur le graphe G .

Exemple 2. Nous présentons ci-après un exemple de modèle d'Ising :

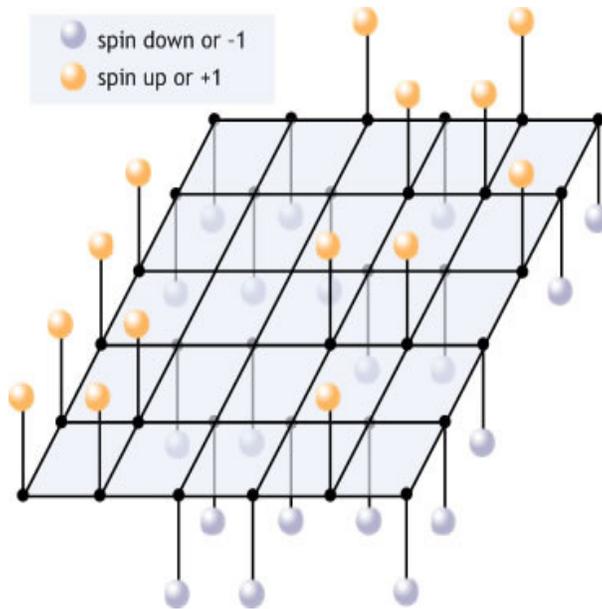


FIGURE 3.2: Modèle d'Ising avec une grille de 6×6

On se limite au cas dit du "modèle du voisin le plus proche" (nearest neighboring model). Pour $\sigma \in S$, l'énergie interne associée à σ , H_σ est définie par

$$H_\sigma = - \sum_{v,w \in V, v \sim w} \sigma(v)\sigma(w).$$

Dans ce modèle la loi de Gibbs est la mesure de probabilité μ_G , définie sur S par

$$\mu_G(\sigma) = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta H_\sigma}.$$

où Z_β est une constante de normalisation et $\beta = \frac{1}{kT}$ où T est la température et k = constante de Boltzmann. On se restereint donc au cas de modèle d'Ising du voisin le plus proche.

Nous avons $\sum_{\sigma \in S} \mu_G(\sigma) = 1$ et donc Z_β est définie par

$$Z_\beta = \sum_{\sigma \in S} e^{-\beta H_\sigma}.$$

3.3 Echantillonneur de Gibbs sur le modèle d'Ising

Soient $G = (V, E)$ et $S = \{-1, 1\}^V$, et $\sigma \in \{-1, 1\}^V$ une configuration, et $v \in V$ on a

$$\begin{aligned} \frac{\mu_G(\sigma(V|v)1_v)}{\mu_G(\sigma(V|v)(-1)_v)} &= \exp(-\beta(H_{\sigma(V|v)1_v} - \beta(H_{\sigma(V|v)(-1)_v})) \\ &= \exp(2\beta \sum_{i: ||i-v||=1} \sigma_i) \end{aligned}$$

On peut maintenant décrire la dynamique de l'échantillonneur de Gibbs du modèle d'Ising.

Voilà comment on passe de l'état au temps n à l'étape au temps $n + 1$:
On note σ la configuration au temps n .

1. Choisir uniformément $v \in V$.
2. Choisir U suivant la loi uniforme sur $[0, 1]$.
3. Définir la configuration σ' au temps $n + 1$ par

$$\sigma'(w) = \begin{cases} \sigma(w) & \text{si } v \neq w \\ 1 & \text{si } v = w \text{ et } U < 1/(1 + \exp(-2\beta \sum_{i: ||i-v||=1} \sigma_i)) \\ -1 & \text{sinon} \end{cases}$$

Proposition 3.

Soit $G = (V, E)$ un graphe et $S = \{-1, 1\}^V$, la chaîne de Markov $(X_n)_n$ sur

S de matrice de transition $(P(\sigma, \sigma'))_{\sigma, \sigma' \in S}$ tel que

$$P(\sigma, \sigma') = \frac{1}{n} \sum_{v \in V} \frac{e^{\beta \sigma'(v) S(\sigma, v)}}{e^{\beta \sigma'(v) S(\sigma, v)} + e^{-\beta (\sigma'(v) S(\sigma, v))}} \times \mathbb{I}_{\{\sigma(w) = \sigma'(w) \text{ pour } v \neq w\}}$$

où $S(\sigma, v) = \sum_{w: w \sim v} \sigma(w)$.

admet la distribution de Gibbs μ_G comme loi stationnaire.

Démonstration.

Nous avons déjà vu le cas de cette preuve dans le modèle de Hard-core sur (la page 44), il est donc facile de constater que

$$\forall \sigma, \sigma' \in S \times S, \quad \mu_G(\sigma) P(\sigma, \sigma') = \mu(\sigma') P(\sigma', \sigma),$$

c'est à dire que μ_G est réversible sous cette dynamique, donc invariante.
et

$$\mu_G(\sigma) P(\sigma, \sigma) > 0$$

pour tout σ , la chaîne est apériodique.

Si la chaîne est irréductible, alors c'est une chaîne irréductible apériodique.

Donc la loi de Gibbs est stationnaire sur S \square

3.4 Simulation de modèle d'Ising (Algorithme de Metropolis)

Soit le graphe $G = (V, E)$ représenté par la grille $\{0, \dots, N-1\}^2$. Les points sont repérés par leurs coordonnées (abscisses et ordonnées). La relation de voisinage est définie par

$$\forall v, w \in V \quad v \sim w.$$

Nous considérons que la configuration σ a un spin unique (i.e $S = \{0, 1\}^V = \{\sigma : V \rightarrow \{0, 1\}\}$) tel que

$$\forall v = (i, j) \in V, \quad \sigma(v) = \sigma(i, j) \in S$$

Pour ce modèle l'énergie interne associée à σ , H_σ est définie par

$$H_\sigma = \sum_{v,w \in V, v \sim w} (\sigma(v) - \sigma(w))^2.$$

La configuration σ se transforme en une nouvelle configuration notée t en construisant une chaîne de Metropolis à partir de la marche aléatoire sur un graphe (Voir.[page 36]).

Soit cette marche aléatoire, la chaîne de Markov $(X_n)_n$ d'espace des états S et de probabilités de transition $\psi(\sigma, t)$ qui est symétrique (i.e. $\psi(\sigma, t) = \psi(t, \sigma)$). Soit $(Y_n)_n$ la chaîne Metropolis construite de matrice de transition $P(\sigma, t)_{\sigma, t \in S}$ admettant la distribution de Gibbs μ_G comme loi stationnaire sur S tel que

$$\frac{\mu_G(t)}{\mu_G(\sigma)} = \exp(2\beta(2 - \#\{w \in V : v \sim w, \sigma(w) = \sigma(v)\}))$$

On peut maintenant décrire la dynamique de P en utilisant l'algorithme de Metropolis (Voir.[page 33])

Voici comment on passe de l'état d'une configuration X_k au temps k à l'état d'une autre configuration X_{k+1} au temps $k + 1$ tel que $k = \{0, \dots, n\}$

Etape $k = 0$:

-Initialiser suivant une loi uniforme la configuration X_0 au temps $k = 0$

-Choisir uniformément un sommet de la grille $d \in V$ sur cette configuration.

Etape $k := k + 1$:

-Choisir le voisinage de d selon une répartition uniforme sur l'ensemble V (Cf.[page 22]. Notons $w \sim d$.

-Tirer un nombre U suivant une loi uniforme sur $[0, 1]$

-Si $U \leq \exp(2\beta(2 - \#\{w \in V : w \sim d, \sigma(w) = \sigma(d)\}))$ accepter la sélection :

$$X_k(d) = 1 - X_{k-1}(d).$$

Sinon, refuser la selection :

$$X_k(d) = X_{k-1}(d).$$

-Si $k < n$:Aller à l'étape $k := k + 1$, sinon on génère les configurations (X_0, \dots, X_n) .

Nous donnons ci-après des exemples de simulations de modèle d'Ising permettant d'afficher des configurations sous la distribution stationnaire pour différents choix de $\beta \in \{-1, 0, 0.5, 1, 2, 10\}$ sur une grille de 60×60 :

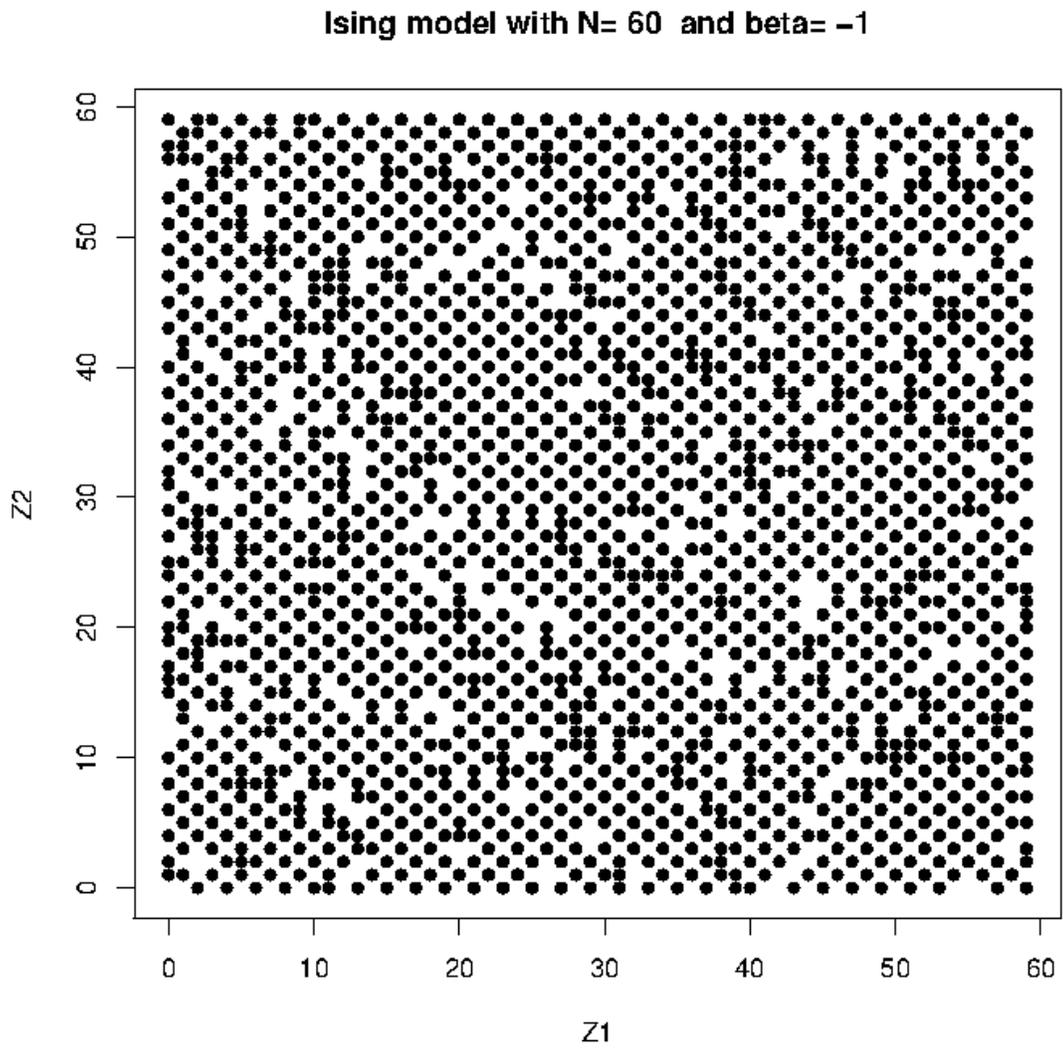


FIGURE 3.3: Simulation du modèle d'Ising.

Ising model with N= 60 and beta= 0

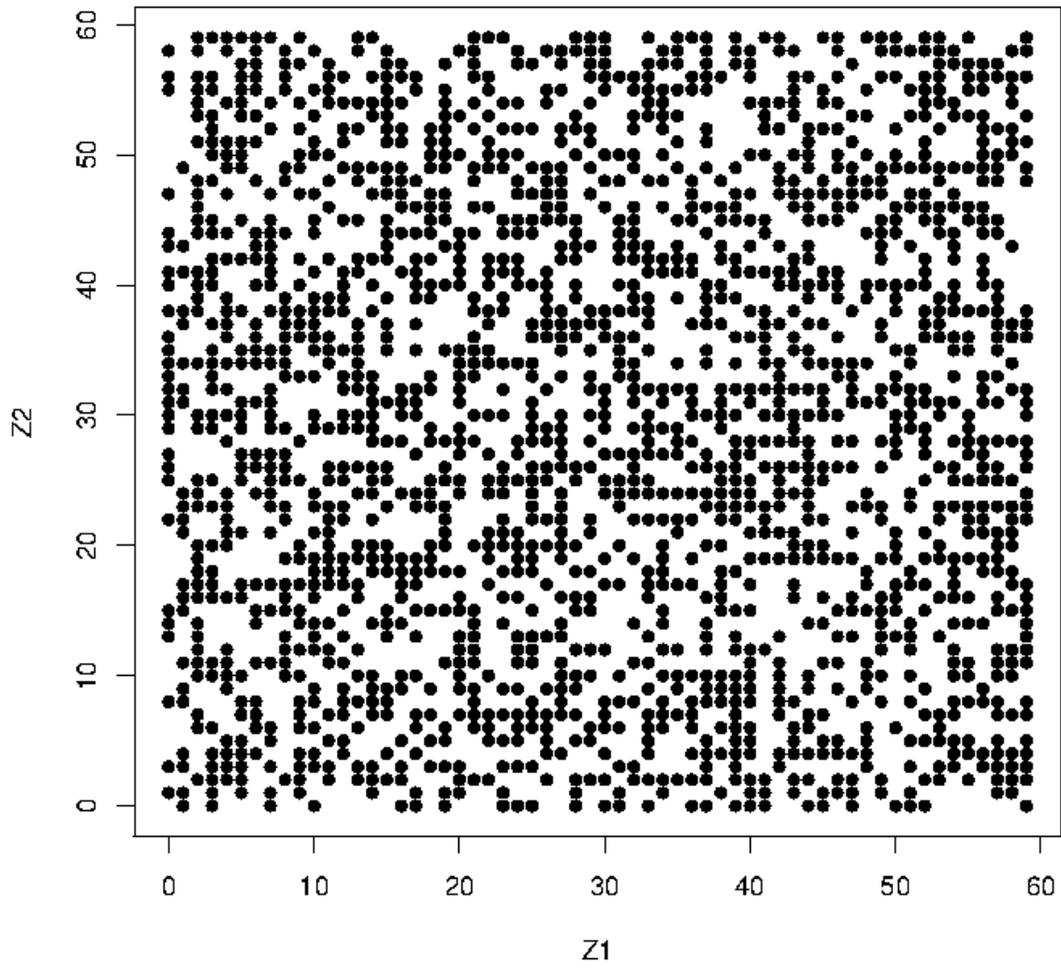


FIGURE 3.4: Simulation du modèle d'Ising.

Ising model with $N= 60$ and $\beta= 0.5$

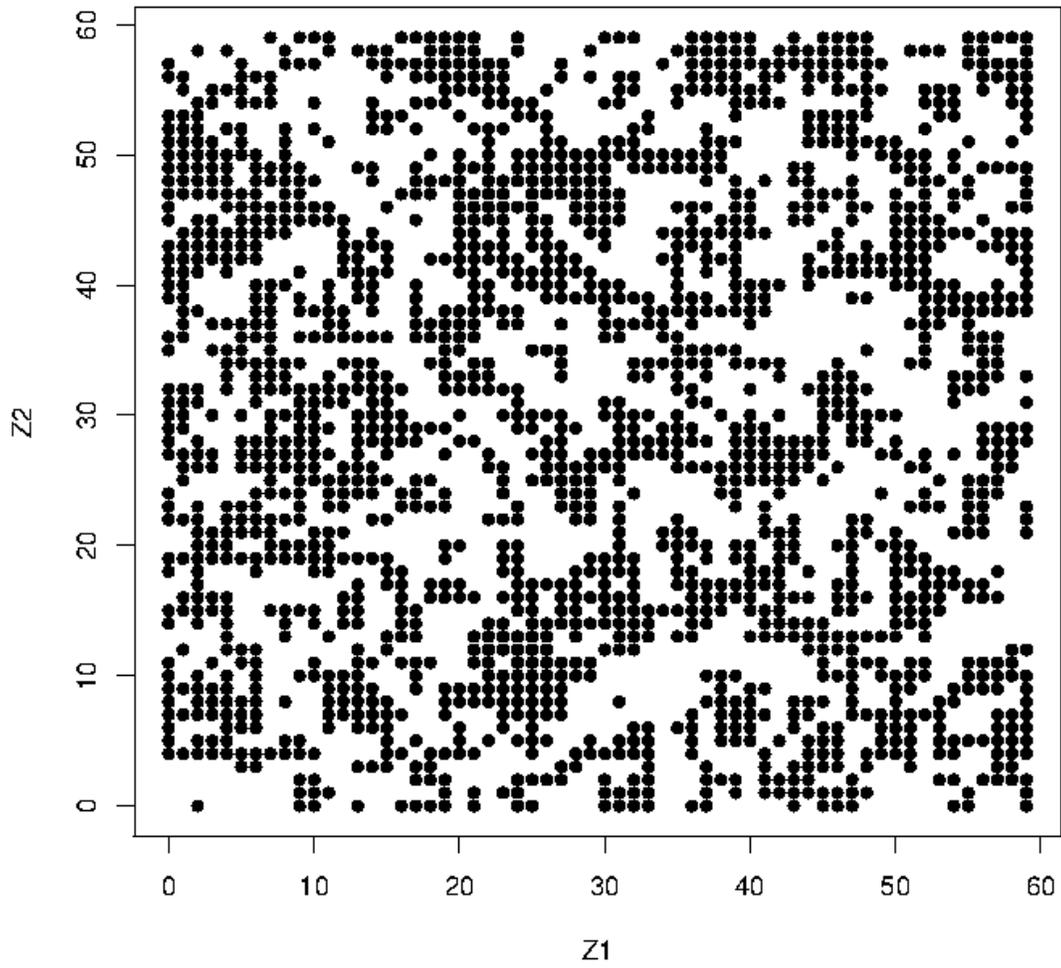


FIGURE 3.5: Simulation du modèle d'Ising.

Ising model with N= 60 and beta= 1

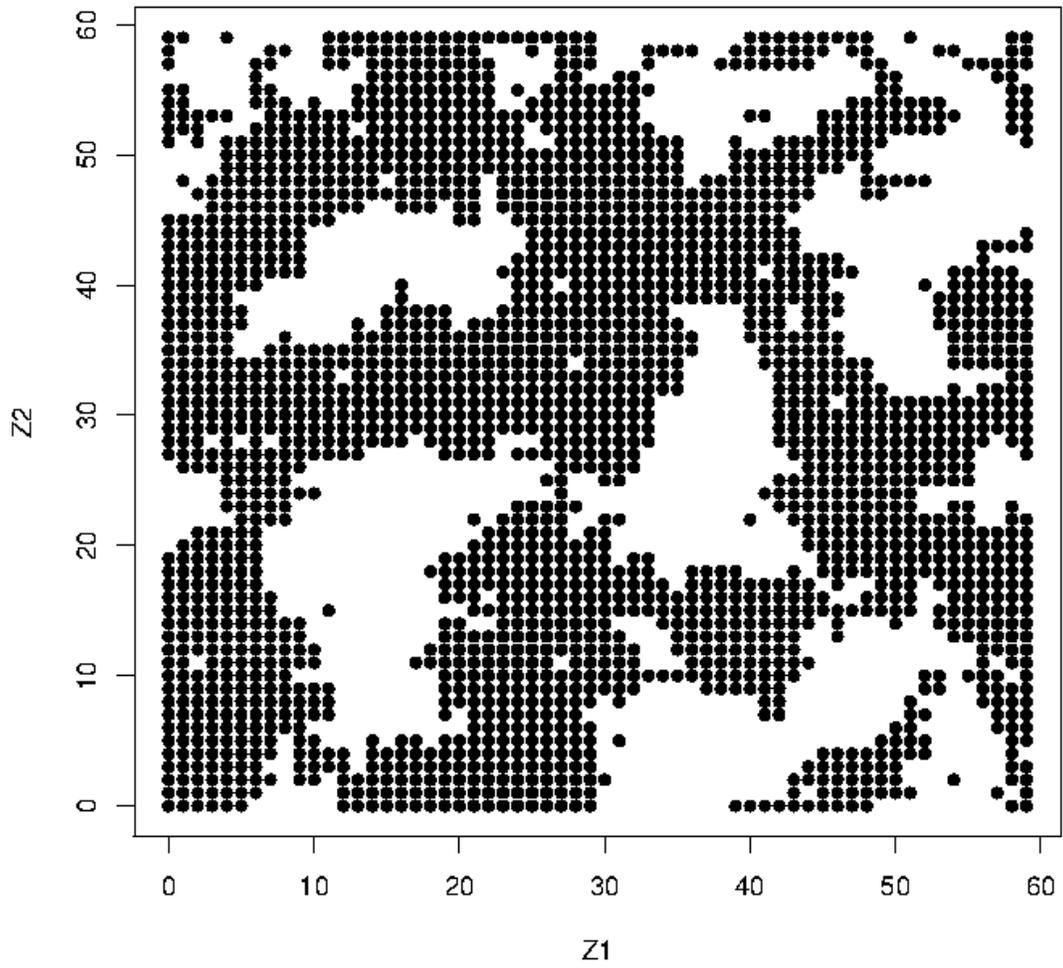


FIGURE 3.6: Simulation du modèle d'Ising.

Ising model with $N= 60$ and $\beta= 2$

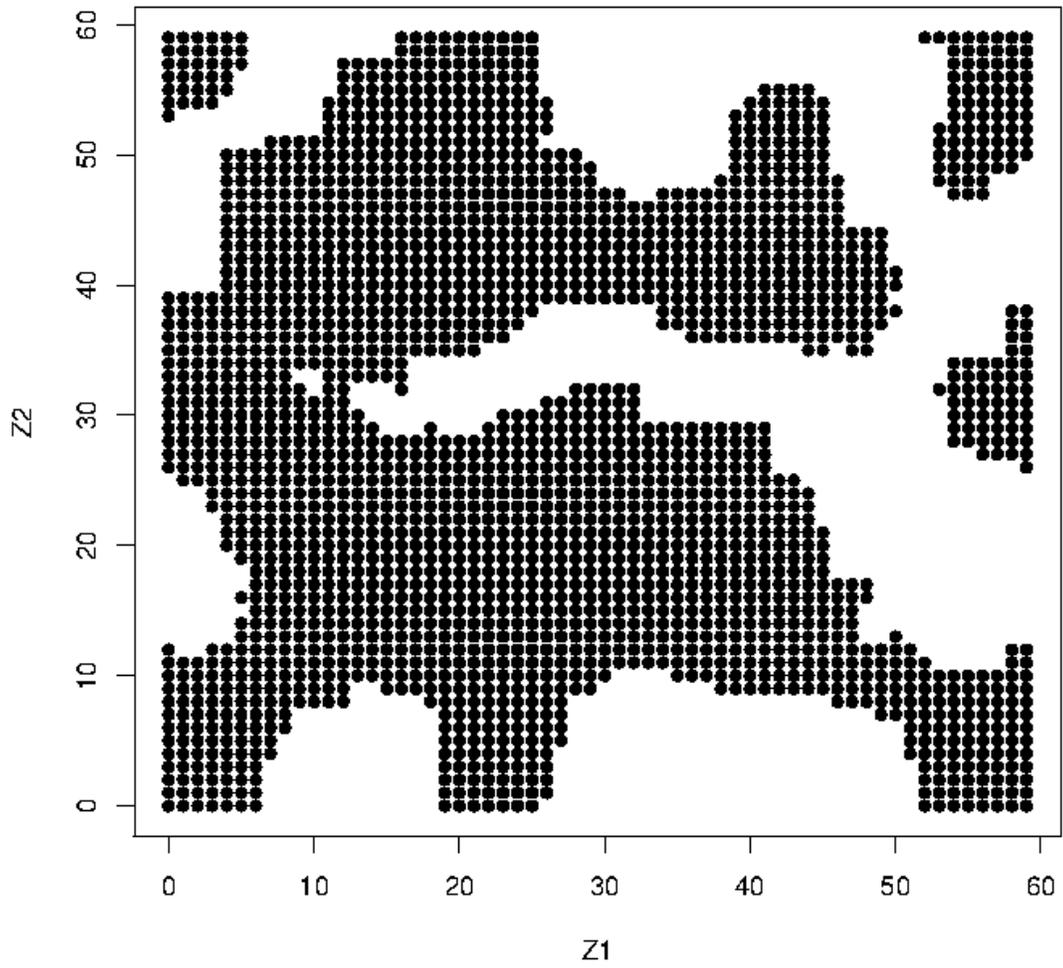


FIGURE 3.7: Simulation du modèle d'Ising.

Ising model with N= 60 and beta= 10

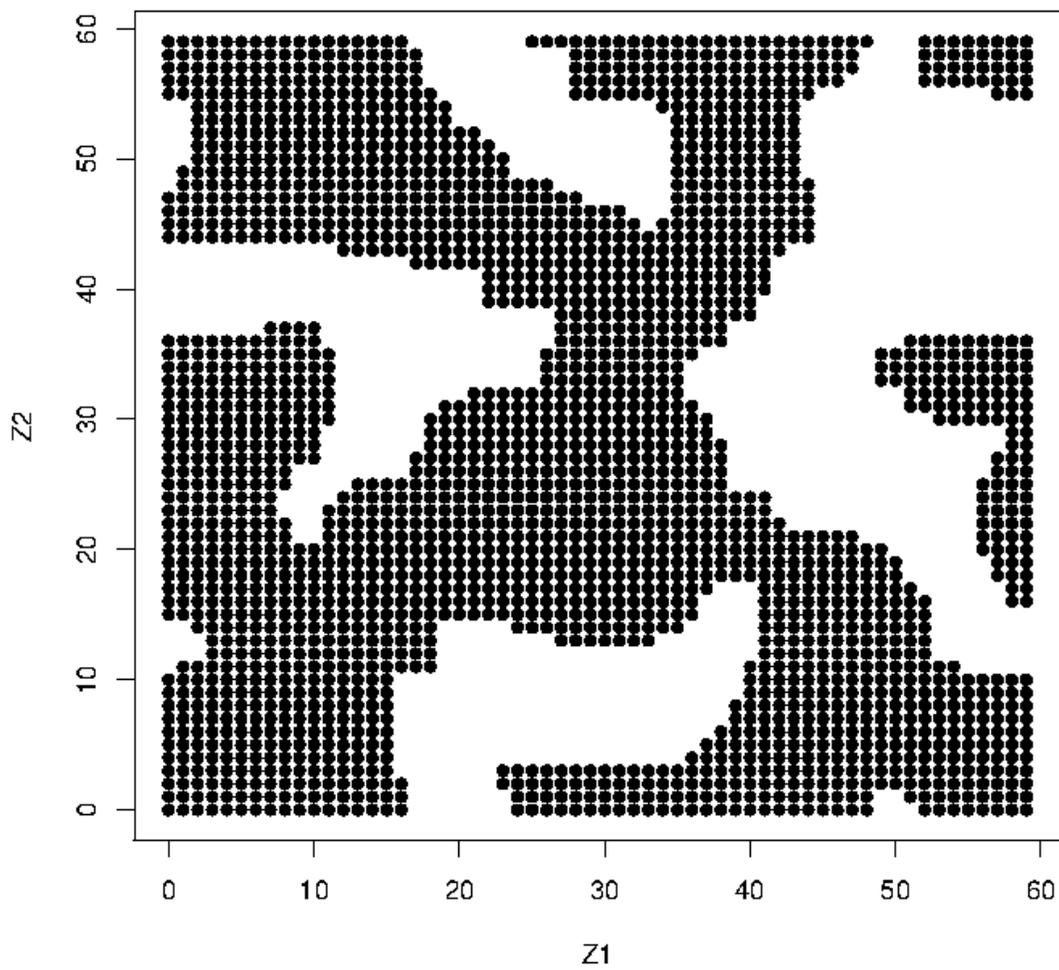


FIGURE 3.8: Simulation du modèle d'Ising.

Analyse des résultats

Nous constatons que l'affichage typiques des configurations sous la distribution stationnaire pour différents choix de $\beta \in \mathbb{R}$ est comme suit :

Pour les valeurs négatives de β : les types différents s'attirent, et les types égaux se repoussent.

Pour les valeurs positives de β : les types différents se repoussent, et les types égaux s'attirent.

Exemple 3. (*Un métal ferromagnétique*)

C'est un métal qui est aimanté à une température ambiante T .

Si $T > T_c$ on aura une perte brutale de l'aimantation, et si $T = \infty$, β tend vers 0 où le métal sera dans un état équilibré des spins avec aucune aimantation (Voir la Figure.3.4).

Si $T < T_c$ On aura un retour à l'aimantation.

T_C est la température critique ou la température de curie

Chapitre 4

Algorithme de simulation exacte (Propp-Wilson)

4.1 Chaînes de Markov itératives

Soit E un ensemble fini et soit f une fonction :

$$f : E \times E \rightarrow E$$

$$(x, y) \rightarrow f(x, y) = f_y(x)$$

Soit $(Y_n)_n$ une suite de variables aléatoires i.i.d à valeurs dans E , et $(X_n)_n$ la chaîne de Markov d'espace des états E définie par :

$$\begin{cases} X_0 \\ X_n = f_{Y_n}(X_{n-1}) \quad \text{si } n > 0 \end{cases}$$

Si $X_0 = x \in E$, on note $(X_n^x)_n$ la chaîne de Markov itérative $(X_n)_n$ et on a donc :

$$\begin{cases} X_0 = x \\ X_n^x = f_{Y_n}(X_{n-1}^x) = f_{Y_n} \circ f_{Y_{n-1}} \circ \dots \circ f_{Y_1}(x), \quad \text{si } n > 0 \end{cases}$$

Exemple 1.

Soit $(Y_n)_n$ une suite de variables aléatoires i.i.d à valeurs dans \mathbb{Z} , X_0 une variable aléatoire indépendante des Y_n et $X_n = \sum_{k=1}^n Y_k$.

Si $X_0 = x$, $X_n^x = X_{n-1}^x + Y_n$, avec donc la procédure $f(x, y) = f_y(x) = x + y$, pour $x, y \in \mathbb{Z}$.

$(X_n^x)_n$ est une chaîne de Markov itérative d'espace des états \mathbb{Z} , sur le modèle ci-dessus.

Proposition 1.

Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov d'espace des états E fini de matrice de transition P . Si ϕ est la fonction de mise-à-jour et $(U_n)_n$ une suite de var i.i.d uniformes dans $[0, 1]$, alors $(X_n)_n$ peut se mettre sous la forme itérative, en posant

$$\forall n > 0, X_n = \phi(U_n, X_{n-1}).$$

Démonstration.

Il suffit de montrer que si $(Y_n)_n$ est tel que $Y_0 = X_0$, $Y_n = \phi(X_{n-1}, U_n)$ alors $(Y_n)_n$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P et donc $(Y_n)_n$ est la même chaîne de Markov que $(X_n)_n$ [Cf. page 26]. \square

4.2 L'algorithme de Propp-Wilson

Définition 1.

Soit $(X_n^x)_n$ une chaîne de Markov itérative sur E de la forme $X_n^x = f_{Y_n}(X_{n-1}^x)$.

On appelle "backward process" associé à $(X_n^x)_n$, le processus $(H_n^x)_n$ définie par :

$$\begin{cases} H_0 = x \\ H_n^x = f_{Y_1} \circ f_{Y_2} \dots \circ f_{Y_n}(x), \quad \text{si } n > 0 \end{cases}$$

Conditions sur le processus H

Soit E un ensemble fini et π une loi de probabilité sur E . On veut simuler π . Nous savons associer à π une chaîne de Markov sur E dont elle est la loi

stationnaire. Les algorithmes classiques de simulation (Metropolis, ...) utilisent une approximation de π . L'algorithme de P-W propose une simulation exacte c'est à dire sans approximation. Ce qui établit une rupture avec la simulation classique.

Il est basé sur les résultats suivants, dont la validation mathématique est reprise largement dans la littérature par exemple dans Diaconis (Cf. [8] pp 53.). Dans les conditions de Diaconis, nous avons :

1. $\lim_n H_n^x$ est une constante.
2. Si $(X_n)_n$ admet la loi stationnaire π , alors $\lim_n H_n^x$ est une variable aléatoire de loi π .
3. Si T est la variable aléatoire définie par :

$$T = \inf_n \{n \in \mathbb{N}, H_n^x = cte\},$$

alors T est fini, p.s.

Remarque 1.

Le processus $(H_n^x)_n$ à valeurs dans E n'est pas une chaîne de Markov, en général.

Cependant si on définit $(H_n)_n$ sur $E^E = \{f : E \rightarrow E\}$ et en posant

$$H_0 = id_E, H_1 = f_{Y_1}, \dots, H_n = f_{Y_1} \circ f_{Y_2}, \dots, f_{Y_n} = H_{n-1} \circ f_{Y_n}.$$

alors $(H_n)_n$ est une chaîne de Markov sur E^E .

Si π est une loi stationnaire pour $(X_n)_n$ et $(H_n)_n$ la chaîne de Markov associée à $(X_n)_n$ alors on a la proposition suivante

Proposition 2.

Soit E fini et $(X_n)_n$ une chaîne de Markov itérative sur E sur le modèle $X_n^x = f_{Y_n}(X_{n-1}^x)$ avec f_{Y_n} définie par la fonction "update". On suppose que $(X_n)_n$ est irréductible, apériodique et de loi stationnaire π . Soit $(H_n)_n$ la chaîne de Markov "backward" associée. Alors les seules classes récurrentes pour $(H_n)_n$ sont les ensembles $\{h_a\}$ où $h_a(x) = a, \forall x \in E$ et $a \in E$ et de plus la loi des h_a est π .

Démonstration.

Nous signalons qu'une démonstration de cette proposition est dans Benaim (Cf. [4]) et Ycart (Cf. [9]). De nombreux travaux sont consacrés à la recherche des conditions sur les f_{Y_n} pour assurer cette convergence vers les fonctions constantes (Cf. [4],cf. [8]). \square

Nous remarquons cependant que si $h : E \rightarrow E$ est constante, avec : $h = h_a$, et $a \in E$, et $h_a(x) = a, \forall x \in E$, alors si : $H_n = h_a$, on a :

$$H_{n+1} = h_a \circ H_n = h_a;$$

d'où $\{h_a\}$ est un ensemble fermé, donc h_a est un point absorbant.

Donc : Si $H_n = h_a$, alors $H_{n+k} = h_a, \forall k \geq 1$.

Comme la chaîne de Markov $(H_n)_n$ est finie, donc elle est absorbée dans une classe récurrente au bout d'un temps fini. Ce qui donne une implication valide dans un sens. L'algorithme de Propp-Wilson consiste donc à construire un échantillon (Z_1, Z_2, \dots, Z_n) de loi stationnaire π , en considérant :

$$\begin{aligned} Z_1 &= \lim_n H_n^{x_1}, \\ Z_2 &= \lim_n H_n^{x_2}, \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ Z_n &= \lim_n H_n^{x_n}, \end{aligned}$$

avec les Z_n distribués suivant la loi π , car si π est une loi stationnaire pour X_n^x , c'est aussi la loi de H_n^x , car les processus $(X_n^x)_n$ et $(H_n^x)_n$ sont de même loi. Il en résulte que $\lim_n H_n^x$ est une variable aléatoire de loi π .

Fonctionnement de l'algorithme Propp-Wilson

D'après Hägström (Cf. [2]). Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov d'espace des états $E = \{s_1, \dots, s_n\}$, de loi stationnaire π . Nous voulons un échantillon de la loi π sur l'ensemble fini $E = \{s_1, \dots, s_n\}$. Nous construisons une chaîne de Markov $(H_n)_n$ réversible, irréductible et apériodique d'espace des états E associée à $(X_n)_n$ admettant π comme loi stationnaire.

Soient P la matrice de transition de $(X_n)_n$, et $\phi : E \times [0, 1] \rightarrow E$ la fonction de mise-à-jour, tel que définie dans le chapitre 2.

Par ailleurs, soit $(N_1, N_2, \dots) = (1, 2, 4, 8, \dots)$ une suite croissante d'entiers positifs, on utilise les nombres négatifs $-N_1, -N_2, \dots$ dans notre algorithme comme "les temps de départ" pour les chaînes de Markov, et finalement, supposons que $U_0, U_{-1}, U_{-2}, \dots$ est une suite de variables aléatoires i.i.d. uniformes sur $[0, 1]$. L'algorithme fonctionne maintenant comme suit :

1. Poser $m = 1$.
2. Pour chaque $s \in \{s_1, \dots, s_n\}$, simuler la chaîne de Markov à partir de moment $-N_m$ de l'état s , et en cours d'exécution jusqu'à le temps 0 en utilisant la fonction de mise-à-jour et les variables aléatoires $U_{-N_{m+1}}, U_{-N_{m+2}}, \dots, U_{-1}, U_0$. (ceux-ci sont les mêmes pour chacun des chaînes n).
3. Si toutes les chaînes de n à l'étape 2 finissent dans le même état x au temps 0, alors s sort et il s'arrête. Sinon passez à l'étape 4.
4. Augmenter m par 1, et passer à l'étape 2.

Exemple 2.

Dans la figure suivante nous donnons un exemple sur le déroulement de l'algorithme Propp-Wilson pour une chaîne de Markov à trois états $E = \{s_1, s_2, s_3\}$ avec $(N_1, N_2, \dots) = (1, 2, 4, 8, \dots)$.

NB : Les transitions qui sont menées dans le déroulement de l'algorithme sont indiqués par des traits continus ; et d'autres discontinus.

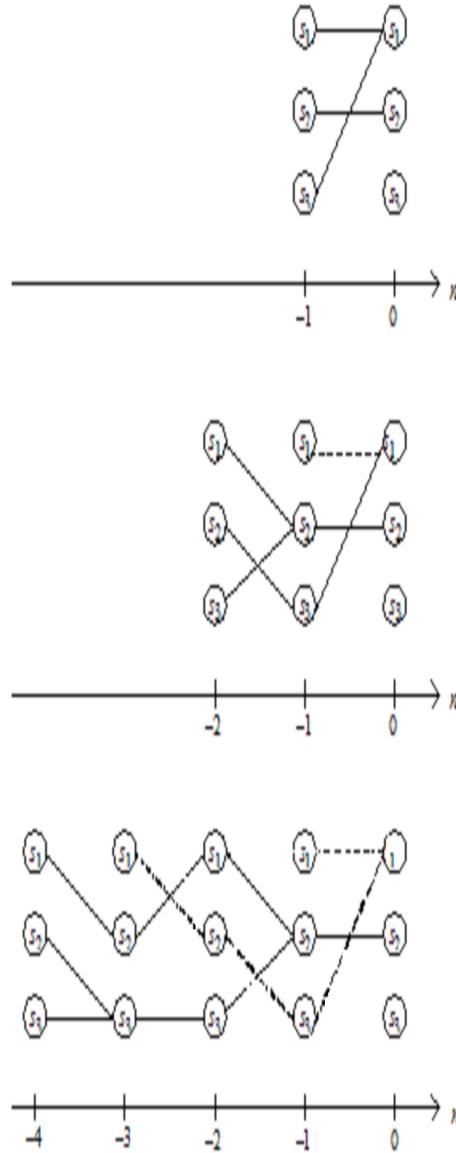


FIGURE 4.1: Une exécution de l'algorithme Propp-Wilson avec $N_1 = 1, N_2 = 2, N_3 = 4$, et de l'espace des états $S = \{s_1, s_2, s_3\}$.

Observations et commentaires sur le déroulement de l'algorithme Propp-Wilson (Figure 4.1) :

Depuis $N_1 = 1$, nous commençons par l'exécution de la chaîne de temps -1 au temps 0 .

On a

$$\begin{cases} \phi(s_1, U_0) = s_1 \\ \phi(s_2, U_0) = s_2 \\ \phi(s_3, U_0) = s_1 \end{cases}$$

Ainsi l'état au temps 0 peut prendre deux valeurs différentes (s_1 ou s_2) en fonction de l'état au temps -1 , et nous essayons donc à nouveau avec le temps $-N_2 = -2$ comme le temps de départ et on aura :

$$\begin{cases} \phi(\phi(s_1, U_{-1}), U_0) = \phi(s_2, U_0) = s_2 \\ \phi(\phi(s_2, U_{-1}), U_0) = \phi(s_3, U_0) = s_1 \\ \phi(\phi(s_3, U_{-1}), U_0) = \phi(s_2, U_0) = s_2 \end{cases}$$

qui produit à nouveau deux valeurs différentes au temps 0 . Nous sommes donc à nouveau forcés de commencer la chaîne à partir d'un temps de démarrage $-N_3 = -4$, ce qui donne :

$$\begin{cases} \phi(\phi(\phi(\phi(s_1, U_{-3}), U_{-2}), U_{-1}), U_0) = \dots = s_2 \\ \phi(\phi(\phi(\phi(s_2, U_{-3}), U_{-2}), U_{-1}), U_0) = \dots = s_2 \\ \phi(\phi(\phi(\phi(s_3, U_{-3}), U_{-2}), U_{-1}), U_0) = \dots = s_2 \end{cases}$$

Cette fois, nous arrivons à l'état s_2 au temps 0 , indépendamment de la valeur de départ au moment -4 . L'algorithme s'arrête donc avec une sortie égale à s_2 . Notons que si nous poursuivons à exécuter la chaîne à partir des temps de départ $(-8, -16, \dots)$, on aura la même sortie (état s_2) pour toujours au temps 0 .

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons synthétisé, en tenant compte de travaux récents, les fondements des algorithmes de simulation : Simulation des trajectoires d'une chaîne de Markov, algorithme de Metropolis et l'algorithme de Gibbs. Nous avons donné aussi quelques exemples d'application (Météo d'hiver à Gothenburg, modèle des sphères lourdes, modèle d'ising). Enfin nous nous sommes intéressés aux méthodes de simulation exactes, plus particulièrement l'algorithme de Propp-Wilson.

Les problèmes qui apparaissent sont nombreux et nécessitent un investissement important. C'est le cas pour le test d'arrêt dans l'algorithme de Propp-Wilson. Plus généralement cet algorithme nous ramène à l'étude des conditions d'existence d'une loi stationnaire unique pour une chaîne de Markov itérative. Ce qui est une question de fond dans l'étude des chaînes de Markov itératives et qui constitue une direction de recherche tout à fait d'actualité (Cf. par exemple les travaux de Diaconis [8]).

Annexes : Programmes utilisés pour les simulations

Programme R sur la simulation du temps à Gothenburg

```
temps <- NULL;
n <- 100;
U<-runif(1,0,1/4);
if(U < 1/4){temps[1] <- 1}
for(i in 1 :n){
  U<-runif(n,0,1);
  if(temps[i]== 1){
    if(U < 0.5){temps[i+1] <- 1}
    else{
      if(U >=0.8 ) {temps[i+1]<- 3}
      else {temps[i+1] <- 2}
    }
  }
  if(temps[i] == 2){
    if(U >=0.85){temps[i+1]<- 3}
    else{
      if(U < 0.15){temps[i+1] <- 1}
      else{temps[i+1]<-2}
    }
  }
  if(temps[i] == 3){
    if (U < 0.2){temps[i+1] <-1}
    else {
      if(U >= 0.5){temps[i+1]<-3}
      else{temps[i+1] <-2}
    }
  }
}
```

```

j = (1 :n)
z=temps[j]
plot(j,z,,type="l", ylab="", col="red")
}

```

Programme R sur la simulation théorique de la loi de poisson et par l'algorithme de Metropolis

```

fact = fonction(n)gamma(n+1)
PoissonMetropolis = fonction(n,lambda, x0){
X = x0; xn = x0
for (i in 1 :n) {
xnCandidat = xn + (2 * rbinom(1,1,0.5) - 1)
critere = min(1,lambda ^ (xnCandidat-xn)*fact(xn) / fact(xnCandidat))
if ((runif(1)) < critere){ xn = xnCandidat }
X = c(X,xn)
}
X
}
x1 = PoissonMetropolis(10000,10,3)
x2 <- rpois(10000,10)
xlim <- range(c(x1, x2))
h1 <- hist(x1, plot = FALSE)
h2 <- hist(x2, plot = FALSE)
col1 <- rgb(1, 1, 0, 0.5)
col2 <- rgb(0, 1, 1, 0.5)
hist(x1, xlim = xlim, ylim = ylim, col = col1, main = "Avec new = TRUE",
prob=T)
par(lend = "butt")
hist(x2, col = col2, xlim = xlim, ylim = ylim, main = "", xlab = "", ylab =
"", prob=T, add=T)
legend("topright", legend = c("echantillon Metropolis", "echantillon theo-
rique"),lwd = 10, col = c(col1, col2))

```

Programme R sur la simulation de modèle d'Ising

```
N<-60;
beta <-{-1,0,0.5,1,2,10}
X <- matrix(rbinom((N+2)*(N+2),1,1/2),N+2,N+2)

connect<-function(N,A) {
A[1,] <- A[N+1,];A[,1] <- A[,N+1];A[N+2,] <- A[2,];A[,N+2] <- A[,2];A }

n <- 100000
for (k in 1:n) {
X <- connect(N,X)
V1 <- floor(N*runif(1))+2;
V2 <- floor(N*runif(1))+2;
U<-runif(1)
if (U < exp(2*beta*(2-(X[V1,V2]==X[V1-1,V2])-(X[V1,V2]==X[V1+1,V2])-
(X[V1,V2] == X[V1,V2-1])-(X[V1,V2] == X[V1,V2+1])))) {
X[V1,V2] <- 1-X[V1,V2]}
}

Z1 <- rep(NA,N ^2);Z2 <- rep(NA,N ^2)
k <- 1
for (i in 1:N) {
for (j in 1:N) {
if (X[i+1,j+1]==1){
Z1[k] <- i-1;Z2[k] <- j-1; k <- k+1 }}}
plot(Z1,Z2,pch=16,main=paste("Ising model with N=",N," and beta=",beta))
```

Bibliographie

- [1] CHUNG, K.L. *Markov Chains with stationary probabilities transitions*
Springer-Verlag (1967).
- [2] Hägström, M.O. *Finite Markov chaîne and algorithmic application*
Cambridge University Press, 2002.
- [3] David A. Levin , Yuval Peres, Elizabeth L. Wilmer *Markov chaînes and Mixing Times*
Univesity of Oregon, 2005.
- [4] M.Benaïm , N.El-Karoui. *Promonade aléatoire, Chaînes de Markov et simulations ; martingales et stratégies*
Editions de l'école Polytechnique - Novembre 2007.
- [5] A. Benakkouche, Mémoire de Master. *Chaîne de Markov et Algorithme de Simulation*
Département de Maths, UMMTO, 2011.
- [6] K.Tedlout, Mémoire de Master. *Marches aléatoires et chaîne de Markov dans un groupe*
Département de Maths, UMMTO, 2011.
- [7] B.De.Loynes.Thèse de doctorat. *Graphes et marches aléatoires*
Institut de Recherches Mathématique, Université de Renne 1, Juillet 2012.

- [8] P.Diaconis and D.Freeman, *Iterated Random Functions*
SIAM R EVIEW Vol. 41, No. 1, pp. 45-76, 1999.

- [9] B. Ycart, DEA Statistiques et modèles aléatoires en économie et en finance. *Méthodes de Monte-Carlo*
Université Denis Diderot, 2000.

- [10] W.Matthias . *Part a Simulation*
Department of Statistics, University of Oxford 2011.

- [11] Alex.Monnard. - Projet de semestre en mathématiques. *Marche aléatoire sur les groupes*
Juin 2008.