METHODES NUMERIQUES PAR CHAÎNES DE MARKOV

Xavier GUYON
Université Paris 1 et
Universidad de Los Andes

Ecole d'été de Mathématiques
Mérida, Venezuela
Septembre 1999

Table des matières

Introduction

Les méthodes de Monte Carlo utilisent la simulation de variables aléatoires dans le but de résoudre un problème numérique. Leur développement tient à la fois aux capacités croissantes de calcul informatique et à leur facilité d'adaptation à de très nombreux contextes. Le champ des applications est vaste : statistique, analyse numérique, optimisation, résolution de problèmes inverses, d'équations différentielles, etc......

L'opération de base est la simulation d'une loi π définie sur un espace d'état E. Si l'espace E est complexe, par exemple fini mais de grand cardinal, les méthodes de simulation classiques ne fonctionnent pas. Une alternative est de construire une chaîne de Markov ergodique de transition P et de loi invariante π. Alors, pour n grand et ν une loi initiale, on retiendra νP^n comme réalisation approximative de π. L'étude de ces méthodes, de leurs variantes et de leurs applications est l'objet de ce cours. L'article des frères Geman (IEEE-PAMI, 1984) a initié les développements théoriques autant qu'appliqués sur le sujet.

Le chapitre 1 résume les résultats de base sur les chaînes de Markov à nombre fini d'états. Les deux principales méthodes de simulations sont ensuite présentées au chapitre 2 : (i) l'*échantillonneur de Gibbs*, applicable si l'espace d'état a une structure exponentielle ($E = F^S$) ; (ii) la simulation par *dynamique de Metropolis*. Dans ces deux cas, les chaînes considérées sont homogènes, c'est-à-dire à transition constante dans le temps.

Un *problème d'optimisation*, "minimiser la fonction $U : E \to \mathbb{R}^+$", peut être interprété comme le problème de simulation suivant : "simuler π_∞, la loi uniforme sur l'ensemble E_0 où U atteint son minimum". Pour ce faire, on peut construire une suite de transitions $(P_{T(n)})_{n\geq 0}$, dépendant d'un paramètre $T(n)$, dit de température, telle que la chaîne de Markov inhomogène converge vers π_∞. C'est l'algorithme de *Recuit Simulé* que nous présenterons au chapitre 3. Au préalable, on établira différents résultats d'*ergodicité d'une chaîne inhomogène*.

Le chapitre 4 présente des applications à la *résolution de problèmes inverses* : on veut reconstruire (filtrer) un objet $x \in E$ au vu d'une observation $y = \Phi(x, \mathcal{M})$. $\mathcal{M}$ est un modèle de bruitage et Φ traduit le processus de formation de l'observation y. Pour cela, on va munir E d'une structure de champ de Markov afin de traduire les informations a priori que l'expert a sur l'objet x. Couplée avec la simulation et/ou l'optimisation, cette information permet une reconstruction algorithmique efficace de x.

La question centrale dans la simulation par chaîne de Markov est la suivante : "quand faut-il arrêter la chaîne pour être assré que νP^n est proche de π ?". Nous présentons au chapitre 5 deux approches permettant de répondre à cette question. L'une, liée à l'étude du phénomène de *convergence abrupte (cutoff)* d'une chaîne de Markov, permet de proposer une règle d'arrêt assurant que la chaîne est bien entrée dans son régime stationnaire (B. Ycart). L'autre est la *simulation exacte par couplage depuis le passé* (Coupling From The Past, CFTP). L'idée, simple et très novatrice, revient à Propp et Wilson (1996) : l'algorithme test automatiquement quand il doit s'arrêter, produisant un échantillon sans biais de π. Cette approche a fortement redynamisé les recherches sur la simulation.

Les livres de références sur ces sujets sont nombreux : sur les aspects théoriques, on peut citer M. Duflo (1997), S. Geman (St. Flour, 1990), X. Guyon (1995), G. Winkler (1995) ; et sur les applications, Aarts et Korst (1989), S. Li (1995), B.Chalmond (2000) et B.Ycart (1997).

Je voudrais remercier Carlos Di Prisco et la Société Mathématique Vénézuélienne pour leur invitation à venir donner ce cours dans le cadre de la 12ème école d'été de mathématiques de Merida. Mes remerciements vont aussi à Stella Brasesco, José Leon, Carene Ludena, Joaquim Ortega et Ricardo Rios qui ont eu la lourde tâche de préparer la version espagnole [1]. Un grand merci aussi à J.F. Yao pour ses nombreux conseils et critiques, ses relectures attentives du document initial et son service dépannage informatique ouvert 24 h sur 24 ! Enfin, je remercie à l'avance les lecteurs pour les remarques, critiques, commentaires et/ou détection d'erreurs qu'ils souhaiterais me faire[2].

Paris, Septembre 1999
Xavier Guyon

[1] **Metodos numericos por cadenas de Markov**, 12-esima Escuela Venezolana de Matematicas, Merida, publié par Asociation Matematica Venezolana, IVIC et CONICIT, Caracas, Septembre 1999

[2] guyon@univ-paris1.fr
Université Paris 1, SAMOS, 90 rue de Tolbiac, 75013-Paris

Chapitre 1

Chaînes de Markov à nombre fini d'états

Ce chapitre présente les résultats de base sur les chaînes de Markov à *nombre fini d'états* qui nous seront utiles par la suite. Des références sur le sujet sont : Aldous et Fill [3], Feller [30], Isaacson et Madsen [53], Kemeny et Snell [59], Seneta [92] et Tweedie [102]. Les situations où l'espace d'état n'est pas fini, par exemple $\mathbb{R}^d$, seront toujours précisées.

1.1 Chaîne de Markov

1.1.1 Définitions et notations de base

Soit $E = \{1, 2, \cdots, r\}$ un espace d'états fini. Une *transition* sur E est une matrice P, de taille $r \times r$, à coefficients tous ≥ 0, la somme de chaque ligne valant 1 :

$$P = (p_{ij})_{1 \leq i,j \leq r},\ \forall i, j\ \in E,\ p_{ij} \geq 0 \text{ et } \forall i \in E,\ \Sigma_{j \in E}\, p_{ij} = 1$$

P est encore appelée *matrice stochastique* : chaque ligne de P est une distribution de probabilité sur E.

Une *chaîne de Markov* sur E de transition P est une suite $X = (X_0, X_1, X_2, \cdots)$ de variables aléatoires indexées par $\mathbb{N}$ et à valeurs dans E telle que $\forall n \geq 0$, on a :

$$\left\{ \begin{array}{c} P(X_{n+1} = i_{n+1} \mid\ X_l = i_l, 0 \leq l \leq n) = P(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n) \\ P(X_{n+1} = j \mid X_n = i) = p_{ij} \end{array} \right.$$

La première égalité traduit la *propriété de Markov* : la loi de X_{n+1} conditionnelle au passé $(X_n, X_{n-1}, \cdots, X_1, X_0)$ dépend uniquement de l'état au dernier instant $X_n = i_n$: la i-ème ligne de P n'est autre que la loi $(X_{n+1} \mid X_n = i)$. La deuxième égalité dit que ces transitions sont indépendantes de n ; on dit que la chaîne est *homogène*. On étudiera également dans ce cours des chaînes de Markov *inhomogènes* où la transition P_n au temps n dépend de n.

La formule des probabilités totales montre que la loi de X est complètement caractérisée par P et par la loi initiale μ_0 de X_0 (noté $X_0 \sim \mu_0$), les lois fini-dimensionnelles étant données par :

$$P(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \cdots, X_n = i_n) = \mu_0(i_0)\ p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{n-1} i_n}$$

Réciproquement, il est facile de vérifier que si la loi de X est de cette forme, X vérifie la propriété de Markov et est une chaîne homogène de transition P.

Par convention, nous repérons une loi sur E par un *vecteur ligne* $1 \times r$. Si μ_n est la loi de X_n, alors la loi de X_{n+1} est $\mu_{n+1} = \mu_n P$, produit à gauche du vecteur ligne μ_n par la matrice

P. En effet,

$$P(X_{n+1} = j) = \sum_{i \in E} P(X_{n+1} = j \mid X_n = i) P(X_n = i)$$

En particulier, P^n étant la puissance n-ième de P, on a : $\mu_n = \mu_0 P^n$.

1.1.2 Loi invariante et Ergodicité

Une question importante est la suivante : à quelle condition existe-t-il une loi π sur E telle que $\mu_n \to \pi$ (par exemple pour la norme l_1 sur $\mathbb{R}^r$), ceci indépendamment de la loi initiale ? Si tel est le cas, on dit alors que la chaîne est *ergodique*. Une autre question est de savoir à quelle vitesse cette convergence a lieu.
L'un des objectifs de ce cours étant la simulation de lois π, on va répondre à cette question ainsi reposée : soit π une loi sur E (il est suffisant de connaître π à un facteur multiplicatif près) :

$$\boxed{\text{Déterminer une transition } P \text{ telle que : } \forall \mu_0,\ \ \mu_0 P^n \to \pi.}$$

Dans ce problème, on dispose de beaucoup de liberté pour choisir P. Donc P peut être choisi en fonction de critères, par exemple la facilité de construction (chaîne réversible), la moindre complexité algorithmique, ou encore la vitesse de la convergence. Malheureusement, concernant la vitesse, les réponses théoriques ayant un intérêt pratique pour le choix effectif de P sont rares, sauf dans des cas très particuliers où la vitesse peut être facturée avec précision.

Si une telle convergence a lieu, $\mu_0 P^{n+1} \to \pi P$, mais aussi $\mu_0 P^{n+1} \to \pi$. π vérifie donc nécessairement la condition :

$$\pi = \pi P$$

On dit d'une telle loi π que c'est une *loi invariante* pour P. En effet, si X_0 est de loi π, X_n est aussi de loi π pour tout $n \geq 0$. De plus, la loi de la chaîne est invariante par translation, X est stationnaire. On va voir que si P est irréductible, une telle loi invariante existe et est unique (cas E fini). Mais cela ne suffit pas à garantir l'ergodicité.

1.1.3 Chaîne irréductible : existence et unicité de la loi invariante

La transition P est *irréductible* si, pour tout couple $(i,j) \in E^2$, il existe un entier $n(i,j) \geq 1$ t.q. $P^{n(i,j)}(i,j) > 0$. Dans la pratique, on établira l'irréductibilité en proposant, pour tout (i,j), un chemin $\mathcal{C}(i,j)$ de i vers j ($i \mapsto j$), de longueur $n(i,j)$ réalisable avec une probabilité >0 :

$$\mathcal{C}(i,j) : i = i_1 \mapsto i_2 \mapsto i_3 \mapsto \cdots \mapsto i_{n(i,j)} = j$$

avec $p_{i_l, i_{l+1}} > 0$ pour $l = 1, n(i,j) - 1$. On dit alors que l'état i communique avec l'état j.

Une condition forte d'irréductibilité est celle où on peut choisir un même $k = n(i,j)$ commun aux $(i,j) \in E^2$: tous les états communiquent par des chemins de même longueur k. On dit alors que la transition est *régulière* (ou que P est *primitif*), P^k a tous ses termes >0. On va voir que pour E fini : P régulière $\Leftrightarrow$ P ergodique.

Notation : que A soit un vecteur ou une matrice, on notera $A > 0$ (resp. $A \geq 0$) si tous les coefficients de A sont > 0 (resp. ≥ 0).

Proposition 1.1 *Si P est irréductible et E fini, il existe une unique loi invariante π telle que $\pi > 0$, c'est-à-dire : $\forall i \in E$, $\pi_i > 0$.*

Preuve ([91]) :

1. Si $\mathbf{1} = {}^t(1, 1, \cdots, 1)$ est le vecteur unité de $\mathbb{R}^r$, $P\mathbf{1} = \mathbf{1}$. Il existe donc $v \neq 0$ t.q. $vP = v$.

2. Notons $|v|$ le vecteur de composantes $|v_i|$. Montrons que $|v|\,P = |v|$. Puisque $v_j = \sum_i v_i P_{ij}$, $|v_j| \leq \sum_i |v_i|\,P_{ij}$. Supposons que pour un état j_0, cette inégalité soit stricte. P étant stochastique, $\sum_i |v_i| = \sum_{ij} |v_i|\,P_{ij} > \sum_j |v_j|$ ce qui n'est pas possible. Donc pour tout j, $|v_j| = \sum_i |v_i|\,P_{ij}$ et $|v|$ est vecteur propre à gauche pour P associé à la valeur propre 1. Puisque $\sum_j |v_j| \neq 0$, il existe une loi invariante π associée à P, $\pi_i = \frac{|v_i|}{_j|v_j|}$ (pour l'existence de π, on remarquera que seule la propriété "E fini" a est utilisée).

3. Montrons que chaque $\pi_i > 0$. Puisque P est irréductible, $\exists l$ t.q. $A = (I+P)^l > 0$ (prendre $l = \sup_{i,j} n(i,j)$). Donc $0 < \pi A = 2^l \pi$, c'est à dire $\pi > 0$.

4. Si $uP = u$, vérifions que u a toutes ses coordonnées de même signe. On a vu que pour un tel u, $|u|\,P = |u|$, et donc $u^+ = \frac{1}{2}(u + |u|)$ est aussi vecteur propre de P associée à 1. Deux cas se présentent : (i) $u^+ = 0$ et donc $u \leq 0$; (ii) $u^+ \neq 0$. D'après le point 3, $u^+ > 0$ et donc $u > 0$.

5. Soient π et π' deux lois invariantes ; $u = \pi - \pi'$ est vecteur propre associé à 1, et tel que $\sum_i u_i = 0$. D'après le point 4, ceci n'est possible que si $u = 0$: il y a unicité de la loi invariante. $\square$

1.1.4 Le Théorème de Perron-Frobénius

Le résultat précedent est en partie une conséquence du théorème suivant utile à l'étude du comportement asymptotique des systèmes dynamiques linéaires et à coefficients ≥ 0 ([36] ; [57] ; [69] ; [92]).

Théorème 1.1 *(Perron-Frobénius) Soit A une matrice $r \times r$ à coefficients ≥ 0, $A \neq 0$.*

(1) Il existe $\lambda_0 > 0$ et $u_0 \geq 0$ non nul t.q. $Au_0 = \lambda_0 u_0$.

(2) Si λ est une autre valeur propre (sur $\mathbb{C}$) de A, $|\lambda| \leq \lambda_0$. De plus si $|\lambda| = \lambda_0$, $\eta = \lambda\lambda_0^{-1}$ est une racine de l'unité et pour $p \in \mathbb{N}$, $\eta^p \lambda_0$ est une valeur propre de A.

(3) S'il existe k t.q. $A^k > 0$, λ_0 est de multiplicité 1 et on peut choisir $u_0 > 0$. Toute autre valeur prope vérifie $|\lambda| < \lambda_0$.

Preuve : Nous nous limiterons au cas $A > 0$. Le point (3) en découlera facilement puisqu'il suffit de remarquer que (λ^k, u) est un couple (valeur,vecteur) propre de A^k dès que (λ, u) l'est pour A.

∘ *Valeur/vecteur propre de Frobénius* : Soit $\mathcal{P}$ l'ensemble des probabilités sur E. Définissons la fonction continue $h : \mathcal{P} \to \mathbb{R}^+$:

$$h(m) = \inf_{i=1,r} \frac{Am(i)}{m(i)}$$

$\mathcal{P}$ étant un sous-ensemble compact de $\mathbb{R}^r$, il exite un plus grand élement λ_0 de $h(\mathcal{P})$ et une probabilité m_0 t.q. $h(m_0) = \lambda_0$. Montrons que m_0 est un λ_0-vecteur propre de A. Par définition de h, $Am_0(i) \geq \lambda_0 m_0(i)$ pour tout i. Si l'inégalité est stricte pour un i, A étant > 0, $A(Am_0 - \lambda_0 m_0) > 0$, c'est-à-dire $h(Am_0) > \lambda_0$, ce qui est en contradiction avec la définition de λ_0. Donc, $Am_0 = \lambda_0 m_0$ et $m_0 > 0$.

∘∘ *L'espace propre de Frobénius est de dimension* 1 : Soit u un λ_0-vecteur propre de A (si u est complexe, $\overline{u}$ est aussi vecteur propre et on retiendra $\mathcal{R}(u)$ et $\mathcal{I}m(u)$ comme vecteurs propres réels). Soit $c = \inf_{i=1,r} \frac{u(i)}{m_0(i)}$. On a pour tout i : $u(i) \geq cm_0(i)$ et il est facile de voir que si, pour un indice, l'inégalité est stricte, ceci contredit la définition de c. En conséquence, $u = cm_0$ et l'espace propre de Frobénius est de dimension 1.

∘ ∘ ∘ Reste à voir que toute autre valeur propre λ vérifie $|\lambda| < \lambda_0$. Soit $v \neq 0$ un λ-vecteur propre et $\delta = \inf_i A_{ii}$, $\delta > 0$. Puisque $(A - \delta I)v = (\lambda - \delta)v$, on a pour tout i :

$$|\lambda - \delta|\,|v(i)| \leq \sum_j (A_{ij} - \delta I_{ij})\,|v(j)|$$

soit encore : $\forall i$, $(\delta + |\lambda - \delta|)\,|v(i)| \leq \sum_j A_{ij}\,|v(j)|$. Revenant à la définition de λ_0, on obtient :

$$\lambda_0 \geq (\delta + |\lambda - \delta|)$$

Si $\lambda \neq \lambda_0$, ceci entraîne bien $|\lambda| < \lambda_0$ (plus précisément, λ est dans la boule ouverte centrée en δ, $0 < \delta < \lambda_0$ et de rayon $\lambda_0 - \delta$). □

Revenons au contexte d'une chaîne de Markov. Si $P = {}^tA$ est une matrice stochastique, $\lambda_0 = 1$. En effet, il suffit d'écrire $Au_0 = \lambda_0 u_0$ et de sommer les coordonnées de chacun de ces deux vecteurs : les colonnes de A se sommant à 1, et puique que $\sum_i u_{0i} \neq 0$, $1 = \lambda_0$. Un résultat important est que toute valeur prope λ de P vérifie $|\lambda| \leq \lambda_0$, cette inégalité étant stricte si $\lambda \neq \lambda_0$ dès que P est régulière.

1.2 Résultats d'ergodicité

1.2.1 Utilisation du théorème de Frobénius

Le théorème de Frobénius joint à la réduction de Jordan de P permettent d'obtenir facilement la condition nécessaire et suffisante d'ergodicité suivante,

Proposition 1.2 *Supposons que P est irréductible. Alors P est ergodique si et seulement si P est régulière.*

Preuve :
$\Rightarrow$ Puisque P est irréductible, P admet une unique loi invariante $\pi > 0$ telle que pour toute loi initiale μ_0, $\mu_0 P^n \to \pi$. En particulier $P^n \to \prod$ où $\prod > 0$ est la matrice dont chaque ligne est π. On en déduit donc que pour un k assez grand, $P^k > 0$: P est régulière.
$\Leftarrow$ P étant irréductible, notons π sa loi invariante.

Nous allons utiliser la réduction de Jordan de P sur $\mathbb{C}$ et à gauche ([44], §35). Soient $\lambda_0 = 1, \lambda_1, \cdots, \lambda_s$ les valeurs propres de P, de multiplicités respectives $1, r_1, \cdots, r_s$. Associée à ces valeurs propres, on peut construire une base de Jordan de $\mathbb{R}^r$, le l-ième espace $\mathcal{E} = \mathcal{E}_l$, associé à $\lambda = \lambda_l$, de multiplicité r_l, étant engendré par des vecteurs $e_1, e_2, \cdots, e_{r_l}$ tels que : $e_1 P = \lambda e_1$et $e_i P = e_{i-1} + \lambda e_i$ pour $i = 2, r_l$. Pour $l = 0$, on prendra π comme vecteur propre. Chaque espace $\mathcal{E}_l$ est stable pour P. Il est alors facile de vérifier que si $u \in \mathcal{E}_l$, $uP^n = \lambda_l^n Q_l(n)$, où $Q_l(n)$ est un vecteur de $\mathcal{E}_l$ à coordonnées polynomiales en n de degrés $\leq r_l - 1$.

Soit alors μ_0 une distribution initiale, et $\mu_0 = \alpha\pi + \sum_{l=1,r} v_l$, où $v_l \in \mathcal{E}_l$ sa décomposition sur la base de Jordan. On a :

$$\mu_0 P^n = \alpha\pi + \sum_{l=1,s} \lambda_l^n Q_l(n) \tag{1.1}$$

D'après le point (3) du théorème de Perron-Frobénius, $|\lambda_l| < 1$ si $l \geq 1$. Donc $\mu_0 P^n \underset{n\to\infty}{\to} \alpha\pi$. Puisque $\mu_0 P^n$ est une probabilité, sa limite aussi, soit $\alpha \sum_i \pi_i = 1 = \alpha$. L'ergodicité de P est démontrée. □

Commentaire : Notons $\rho = \rho(P) = \sup\{|\lambda|, \lambda \text{ valeurs propre de } P,\ \lambda \neq 1\}$, et $p+1$ le plus grand ordre de multiplicité des valeurs propres de module ρ. Si P est ergodique, $\rho < 1$, et (1.1) donne :

$$\|\mu_0 P^n - \pi\|_1 \leq C n^p \rho^n \tag{1.2}$$

Pour être utile, on doit contrôler dans cette formule : ρ, c.a.d. la valeur propre sous dominante ; p son ordre de multiplicité ; et C qui dépend de μ_0 et de l'expression explicite de la base de Jordan. Sauf cas très particulier, le contrôle explicite (1.2) s'avère impossible, ce qui en limite l'intérêt pratique.

D'autres contrôles explicites existent. Ils donnent une majoration géométrique en δ^n, pour une valeur δ très proche de 1. Décrivons deux de ces contrôles.

1.2.2 Lemme de contraction pour P

Proposition 1.3 *(Kemeny et Snell, [59]) Supposons que P est régulière : $\exists k \geq 1$, t.q. $\varepsilon = \inf_{i,j} P_{ij}^k > 0$. Alors, notant $[x]$ la partie entière de x, π la loi invariante de P, et r le cardinal de E, on a :*

$$\|\mu_0 P^n - \pi\|_1 \leq r(1-2\varepsilon)^{[\frac{n}{k}]}$$

Preuve : Il suffit d'établir le résultat pour $k = 1$, le cas régulier $k \geq 1$ s'en déduisant en travaillant avec la transition $Q = P^k$. Supposons donc que $\varepsilon = \inf_{i,j} P_{ij} > 0$. Commençons par établir le lemme de contraction suivant,

Lemme 1.1 *Soit $x \in \mathbb{R}^r$, $M_0 = \max x_i$, $m_0 = \min x_i$, $M_1 = \max(Px)_i$ et $m_1 = \min(Px)_i$. Alors P est une contraction au sens où*

$$m_0 \leq m_1 \leq M_1 \leq M_0 \text{ et } 0 \leq (M_1 - m_1) \leq (1-2\varepsilon)(M_0 - m_0)$$

Preuve du lemme : Soit l un indice t.q. $x_l = m_0$ et $x' \in \mathbb{R}^r$, de même coordonnée l que x, les autres coordonnées de x' valant M_0. Puisque $P \geq 0$,

$$(Px)_i \leq (Px')_i = M_0 - (M_0 - m_0)p_{il} \leq M_0 - (M_0 - m_0)\varepsilon$$

Donc $M_1 = \sup(Px)_i \leq M_0 - (M_0 - m_0)\varepsilon$. Tenant le même raisonnement pour le vecteur $-x$, on obtient : $-m_1 \leq -m_0 - (-m_0 + M_0)\varepsilon$. Le résultat annoncé s'obtient en sommant ces deux inégalités.□

Soit alors $x = {}^t\delta_j$ où δ_j est la loi initiale concentrée en j. Pour M_n et m_n définies comme précedemment, mais associées à P^n, on a :

$$m_n \leq P_{ij}^n = (P^n x)_i \leq M_n \text{ et } 0 < \varepsilon \leq m_1 \leq m_n \leq \; M_n \leq M_1 = 1$$

Les suites (m_n) et (M_n) sont adjacentes, de limite commune π_j vérifiant $m_n \leq \pi_j \leq M_n$. On en déduit que $\left|\pi_j - P_{ij}^n\right| \leq M_n - m_n \leq (1-2\varepsilon)^n$. □

On verra au chapitre 3 que l'utilisation du coefficient de contraction de Dobruschin permet d'obtenir un meilleur contrôle :

$$\|\mu_0 P^n - \pi\|_1 \leq 2(1 - r\varepsilon)^n$$

1.2.3 Ergodicité et couplage de chaîne de Markov

Alors que les approches précédentes sont algébriques, celle qui suit est, elle, purement probabiliste. Elle repose sur la technique de couplage, ici spécialisée dans le contexte de chaînes de Markov (Doeblin, [27] ; Aldous, [3] ; Lindvall, [68] ; Thorisson, [97] ; voir également le chapitre 5 et ses exercices). Commençons par définir la notion générale de couplage de mesures. Après quoi nous construirons un couplage particulier dans le cas de chaînes de Markov, couplage qui nous permettra de contrôler la vitesse d'ergodicité.

Inégalité de Couplage.

Soit $(F, \mathcal{F})$ un espace mesurable, Q une mesure sur $(F^2, \mathcal{F}^{\otimes 2})$, μ et ν deux mesures sur $(F, \mathcal{F})$. On dit que Q est un *couplage* de μ et de ν si μ (resp. ν) est la première (resp. la deuxième) marginale de Q. Il y a de multiple façon de construire des couplages, depuis le couplage indépendant $Q = \mu \otimes \nu$ jusqu'aux couplages avec dépendances. Rappelons que la norme en variation totale pour une mesure μ sur $(F, \mathcal{F})$ de masse totale finie est définie par $\|\mu\|_{VT} = \sup\{\left|\int f d\mu\right|, \|f\|_\infty = 1\}$, valant si $\mu(E) = 0$,

$$\|\mu\|_{VT} = 2\sup\{|\mu(A)| \mid A \; \in \mathcal{F}\} = \sup_{A \; \in \mathcal{F}} \mu(A) - \inf_{A \; \in \mathcal{F}} \mu(A)$$

Si $F = E$ est finie, cette norme coïncide avec la norme l^1 : $\|\mu\|_{VT} = \sum_{i \in F} |\mu_i| = \|\mu\|_1$. On a le résultat fondamental suivant :

Lemme 1.2 *Si Q est un couplage de μ et de ν, si Q est positive et si Δ est la diagonale de F^2, on a :*

$$\|\mu - \nu\|_{VT} \leq Q(\Delta^c)$$

Preuve : $\mu(A) - \nu(A) = Q(A \times E) - Q(E \times A) = Q(A \times A^c) - Q(A^c \times A) \leq Q(\Delta^c)$. Il en est de même pour $\nu(A) - \mu(A)$. On obtient alors l'inégalité annoncée. □

On dit que le couplage est maximal s'il y a égalité. Il existe des conditions assurant l'existence et permettant la construction du couplage maximal.

Un couplage de chaînes de Markov.

On va proposer ici un premier couplage naturel de chaînes de Markov. D'autres couplages plus efficaces seront étudiés au chapitre 5. Soit P une transition sur E, $X = (X_0, X_1, X_2, \cdots)$ et $Y = (Y_0, Y_1, Y_2, \cdots)$ deux chaînes indépendantes de même transition P, $X_0 \sim \mu$ et $Y_0 \sim \nu$. Notons $T = \inf\{n \geq 0 \text{ t.q. } X_n = Y_n\}$ le temps où les deux trajectoires se touchent pour la première fois. Définissons alors le couplage suivant $Q = (X', Y')$:

$$\begin{cases} X' \equiv X \\ \text{si } t < T \text{ , } Y'_t = Y_t \text{ et } Y'_t = X_t \text{ sinon} \end{cases}$$

A partir du temps T, la trajectoire de Y' n'est autre que celle de X : T est le *temps de couplage* des deux chaînes X et Y. Y' étant encore une chaîne de Markov de transition P, $Q = (X', Y')$ est un couplage de (X, Y). A partir de cette construction, on obtient le résultat suivant :

Proposition 1.4 *Supposons que $\varepsilon = \inf_{ij} P_{ij} > 0$ et notons π la loi invariante de P. Alors :*

(1) Inégalité de couplage : $\|\mu P^n - \nu P^n\|_1 \leq \mathbb{P}(T > n)$.

(2) Le couplage est réussi : $\mathbb{P}(T > n) \underset{n \to \infty}{\to} 0$; on a même $\mathbb{P}(T > n) \leq (1 - \varepsilon)^n$.

(3) En particulier, pour le choix $\nu = \pi$, on a : $\|\mu P^n - \pi\|_1 \leq (1 - \varepsilon)^n$.

Preuve :

(1) se déduit de l'inégalité de couplage puisque $(T > n) = (X'_n \neq Y'_n) = \Delta^c$.

(2) Reste à évaluer $\mathbb{P}(T > n)$. On a la description :

$$(T > n) = \bigcup_{a \in E^{n+1}} \{X_j = a_j, Y_j \neq a_j, j = 0, n\}$$

Les variables X_j et Y_j étant indépendantes, on a :

$$\mathbb{P}(T > n) = \sum_{a \in E^{n+1}} P(X_0 = a_0, \cdots, X_n = a_n) \times A(a)$$

avec $A(a) = \mathbb{P}(Y_0 \neq a_0, \cdots, Y_n \neq a_n) = [1 - \nu_{a_0}] \prod_{j=1,n} \mathbb{P}(Y_j \neq a_j \mid Y_{j-1} \neq a_{j-1})$. Mais, pour tout $B \subset E$ non vide, on a :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_j \neq a_j \mid Y_{j-1} \in B) &= \frac{\mathbb{P}(Y_j \neq a_j \text{ et } Y_{j-1} \in B)}{\mathbb{P}(Y_{j-1} \in B)} \\ &= \frac{\sum_{b \in B} \mathbb{P}(Y_j \neq a_j \mid Y_{j-1} = b)\mathbb{P}(Y_{j-1} = b)}{\mathbb{P}(Y_{j-1} \in B)} \leq (1 - \varepsilon) \end{aligned}$$

puisque, en effet, $\mathbb{P}(Y_j \neq a_j \mid Y_{j-1} = b) \leq (1 - \varepsilon)$. Ce qui conduit au résultat annoncé.

(3) Il suffit de remarquer que si $Y_0 \sim \pi$, alors $Y_n \sim \pi$ pour tout $n \geq 0$. □

On verra au chapitre 5 (cf. ex.5.9) que d'autres couplages plus fins sont permettant d'améliorer le contrôle de la vitesse de convergence.

1.3 Réversibilité et mesure invariante

Les transitions π-réversibles vont jouer un rôle important dans la construction des algorithmes de simulation.

On dit que la transition P sur E est *π-réversible* si elle vérifie l'*équation de bilan détaillé* :

$$\forall i, j \in E : \pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji} \tag{1.3}$$

La première conséquence est que π est loi invariante pour P. En effet, on a pour tout j : $\sum_i \pi_i p_{ij} = \sum_i \pi_j p_{ji} = \pi_j \sum_i p_{ji} = \pi_j$, c'est à dire $\pi P = \pi$. Aussi, chaque fois que l'on construira une transition vérifiant (2.3), on saura que π est invariante pour cette transition.

La deuxième remarque concerne la loi de (X_0, X_1) : si la loi initiale est $X_0 \sim \pi$ et si la transition de la chaîne est P, alors la loi du couple (X_0, X_1) est *symétrique* ; en effet :

$$P(X_0 = j, X_1 = i) = \pi_j p_{ji} = \pi_i p_{ij} = P(X_0 = i, X_1 = j)$$

En particulier, la transition de X_1 à X_0 est encore P

$$P(X_0 = i \mid X_1 = j) = \frac{P(X_0 = i, X_1 = j)}{P(X_1 = j)} = p_{ji}$$

La chaîne X, de loi initiale π, est réversible.

1.4 Ergodicité pour un espace d'état général

Nous présentons ici les résultats d'ergodicité qui nous semblent à la fois les plus utiles et les plus faciles à manipuler. Dans le contexte de ce cours, on supposera toujours connue la loi invariante de la transition (on veut simuler π donnée, et on aura construit P de telle sorte que π soit invariante pour P). Aussi l'objectif visé est très différent de celui en modélisation aléatoire où la question préliminaire qui se pose est de reconnaître quand une chaîne de transition P admet une loi invariante et une solution stationnaire (cf. Meyn-Tweedie [75],Duflo [29], Tweedie [102]).

Les résultats d'ergodicité pour un espace discret sont exposés dans Feller ([30], tome 1) et Isaacson et Madsen [53] ; ceux relatifs à un espace d'état général (du type $E = \mathbb{R}^p$) sont étudiés par Tierney ([98], [99]).

La notion d'irréductibilité reste inchangée pour un espace discret infini. Par contre, elledoit être redéfinie pour un espace d'état général. Modulo cette notion, on dira que le noyau de transition P, π-irréductible, est *périodique* si il existe un entier $d \geq 2$ et une suite $\{E_1, E_2, \cdots, E_d\}$ de d événements non vides t.q., pour $i = 0, 1, \cdots, d-1$ et $x \in E_i$,

$$P(x, E_j) = 1 \text{ pour } j = i + 1 \pmod d$$

Sinon, on dira que P est *apériodique*.

1.4.1 Espace d'état discret

C'est le cas où E est fini ou dénombrable, muni de la tribu de toutes ses parties. Considérons une chaîne de transition P.

Proposition 1.5 *([30], tome 1, p. 394 ; [53], Théorème III.2.2)*

Soit P une transition irréductible et apériodique sur un espace discret E. Alors les deux propositions suivantes sont équivalentes :

(i) Il existe une loi invariante π pour P.

(ii) P est ergodique : $\forall \nu$, $\nu P^n \to \pi$

De plus, la loi invariante est unique et $\pi > 0$.

L'existence d'une loi invariante étant assurée si E est fini, on a les équivalences :

Cas E fini : P ergodique $\Leftrightarrow$ P apériodique et irréductible $\Leftrightarrow$ P régulière

1.4.2 Espace d'état général

Soit $(E, \mathcal{E})$ un espace mesurable, $\mathcal{E}$ admettant une famille génératrice dénombrable (i.e. $(\mathbb{R}^p, B(\mathbb{R}^p))$. Un noyau de transition sur $(E, \mathcal{E})$ est une fonction $P : E \times \mathcal{E} \to [0, 1]$ telle que :

(i) Pour tout $x \in E$, $P(x, .)$ est une probabilité sur $\mathcal{E}$

(ii) Pour tout $A \in \mathcal{E}$, $x \mapsto P(x, A)$ est mesurable.

La transition de la chaîne est alors définie par : $P(X_{n+1} \in A \mid X_n = x) = P(x, A)$.

Le noyau P, de mesure invariante π, est dit *π-irréductible* si pour tout $A \in \mathcal{E}$ t.q. $\pi(A) > 0$, et tout $x \in E$, il existe un entier $n = n(x, A)$ t.q. $P^n(x, A) > 0$. On note P_x la loi de la chaîne partant de x. On dit que la chaîne est *récurrente* si pour tout A t.q. $\pi(A) > 0$, on a :

$\circ$ $P_x(X_n \in A \text{ i.s.}) > 0$ pour tout x

$\circ\circ$ $P_x(X_n \in A \text{ i.s.}) = 1$ π-p.s. en x

La chaîne est *Harris-récurrente* si la deuxième égalité a lieu pour tout x.

On a alors le résultat suivant ([98], Théorème 1), où $\|.\|_{VT}$ est la norme en variation totale,

Proposition 1.6 *([98],[99]) Soit P une transition de loi invariante π, π-irréductible. Alors, P est récurrente et π est l'unique loi invariante. Si de plus P est apériodique, alors π-p.s. en x :*

$$\|P^n(x, .) - \pi(.)\|_{VT} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0$$

Tierney établit également un résultat qui sera utile pour l'étude de l'échantillonneur d'un modèle de Gibbs sur $\mathbb{R}^d$,

Corollary 1 *([98]). Soit une P une transition π-irréductible telle que $\pi P = P$. Si pour tout x $P(x, .)$ est absolument continue par rapport à $\pi(.)$, alors P est Harris-récurrente.*

1.5 Exercices

Exercice 1.1 *Calcul de A^n pour une matrice diagonalisable*

On suppose que A est une matrice $r \times r$ diagonalisable, de vecteurs propres à gauche $x_1, x_2, \cdots, x_r$, associés aux valeurs propres $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_r$. On note C la matrice dont les lignes sont dans cet ordre $x_1, x_2, \cdots, x_r$, et D la matrice diagonale, $D_{ii} = \lambda_i$, $i = 1, r$.

(i) Vérifier que $A = C^{-1}DC$. En déduire l'expression de A^n.

(ii) Démontrer que si on écrit $C^{-1} = ({}^ty_1, {}^ty_2, \cdots, {}^ty_r)$, ${}^ty_i$ est vecteur propre à droite de A pour λ_i. En déduire que $A^n = \sum_{i=1,r} \lambda_i^n \, {}^ty_i x_i$.

(iii) Application : Vérifier que la transition P,

$$P = \begin{pmatrix} 1/2 & 7/24 & 1/6 & 1/24 \\ 1/6 & 11/24 & 1/6 & 5/24 \\ 1/2 & 7/24 & 1/6 & 1/24 \\ 1/6 & 5/24 & 1/6 & 11/24 \end{pmatrix}$$

admet pour valeurs/vecteurs propres

Valeur propre	Vecteur propre à gauche	Vecteur propre à droite
1	$\pi = x_1 = (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6})$	$y_1 = (1, 1, 1, 1)$
1/3	$x_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, -1)$	$y_2 = (1, -1, 1, -1)$
1/4	$x_3 = (0, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2})$	$y_3 = (-\frac{5}{3}, \frac{7}{3}, -\frac{5}{3}, \frac{1}{3})$
0	$x_4 = (\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, 0)$	$y_4 = (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, -\frac{5}{3}, \frac{1}{3})$

Donner la valeur de P^5 avec quatre décimales. Pour la loi initiale $\mu_0 = (1,0,0,0)$, de combien $\mu_0 P^{10}$ diffère-t-elle de π ?

Exercice 1.2 *Irréductible et apériodique ⇒ régulière*

Montrer directement que si P est une matrice de transition finie, irréductible et apériodique, P est régulière.

Exercice 1.3 *Transition particulière sur un espace produit*

Soit une chaîne de transition P sur $E = \{0,1,2,3,\cdots\}$. On définit la transition R sur $E \times E$:

$$r_{(i,j),(k,l)} = p_{ik}p_{jl}$$

(i) Montrer que $r^{(n)}_{(i,j),(k,l)} = p^{(n)}_{ik}p^{(n)}_{jl}$.

(ii) Montrer que si P est irréductible et apériodique, il en est de même pour R.

Exercice 1.4 *Un modèle de météorologie markovien*

Un régime météorologique est décrit par les trois états : s =soleil, n =nuageux et p =pluie, et, pour les états pris dans cet ordre, par la matrice de transition :

$$P = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0.5 & 0.25 & 0.25 \\ 0 & 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$$

La chaîne est-elle irréductible ? apériodique ? régulière ? Déterminer sa loi invariante π. La chaîne est-elle π réversible ? Sur la base des divers contrôles de la vitesse d'ergodicité (diagonalisation, contraction, coefficient de contraction (cf. chapitre 3)), évaluer $\|\nu P^n - \pi\|$. Déterminer N t.q., pour toute loi initiale ν :

$$\sup_{n \geq N, \nu, j} \mid \nu P^n(j) - \pi(j) \mid < 10^{-3}$$

Exercice 1.5 *Irréductibilité et apériodicité sur un espace dénombrable*

Vis à vis de l'irréductibilité, de l'apériodicité et de la régularité, que penser d'une matrice de transition P dont la première ligne et la première colonne sont > 0 ?

Exercice 1.6 *Transition ayant "le mal du pays"*

(1) Une matrice de transition est doublement stochastique (D.S.) si la somme de chacune de ses colonnes est 1. Vérifier que si P est D.S., la loi uniforme est invariante pour P. Si π est l'unique loi invariante de P, démontrer l'équivalence : P est D.S. et réversible⇔ P est symétrique.

(2) Soit la marche aléatoire sur $E = \{1,2,3,4\}$ à barrières réfléchissantes, de transition

$$P = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$$

P est-elle réversible ? P est-elle régulière ?

(3) On dit d'une transition qu'elle "a le mal du pays" si elle vérifie $(\mathcal{R})$

$$(\mathcal{R}) : \forall i, j,\ p_{ii} \geq p_{ij}$$

D'autre part, on dit qu'une transition est invariante par permutations si tout couple de lignes s'échange par permutation des colonnes, $(\mathcal{P}) : \forall i \neq l,\ \exists \sigma$ t.q.$\forall k,\ p_{l,k} = p_{i,\sigma(k)}$.

(3-1) Vérifier que pour P définie en (2), P et P^2 vérifient $(\mathcal{P})$.

(3.2) Démontrer que si P est symétrique et vérifie $(\mathcal{P})$, P^2 vérifie $(\mathcal{R})$ (utiliser l'inégalité du produit scalaire). Pour P définie en (2), montrer que P^4 vérifie $(\mathcal{R})$.

Exercice 1.7 *Ergodicité sur un espace dénombrable*

(i) Soit une transition P sur $E = \{0, 1, 2, 3, \cdots\}$ vérifiant

$$\begin{cases} p_{0j} \neq 0 \;\Leftrightarrow\; j = 0, 1 \\ \text{Si } i \geq 1 : p_{ij} \neq 0 \;\Leftrightarrow\; j = i - 1 \text{ ou } i + 1 \end{cases}$$

P est elle irréductible ? apériodique ?

(ii) On spécifie P par : $p_{00} = p_{01} = \frac{1}{2}$ et pour $i \geq 1$, $p_{i,i-1} = \frac{2^{i+1}-1}{2^{i+1}}$, $p_{i,i+1} = \frac{1}{2^{i+1}}$. Déterminer la probabilité invariante π de P si elle existe. P est elle ergodique ?

Exercice 1.8 *Chaîne de Markov, retournement du temps et réversibilité*

Soit $X = (X_0, X_1, \cdots, X_n)$ une chaîne de Markov sur E^n (E fini et n fixé), de loi initiale μ_0, de transitions (inhomogènes) P_k, $k = 0, n-1$. On note μ_k la loi de X_k, $k = 0, n$.

(i) Démontrer que, après retournement du temps, et si $X_n \sim \mu_n$, le processus retourné $X^r = (X_n, X_{n-1}, \cdots, X_0)$ vérifie la propriété de Markov, et que c'est une chaîne de Markov de transitions $(Q_k, k = n, 1)$:

$$Q_k(i_k, i_{k-1}) = P(X_{k-1} = i_{k-1} \mid X_k = i_k) = \frac{\mu_{k-1}(i_{k-1})}{\mu_k(i_k)} P_{k-1}(i_{k-1}, i_k)$$

(ii) Préciser Q si la chaîne est homogène, de transition P, la loi initiale étant la loi invariante π. A quelle condition a-t-on $Q(j, i) = P(i, j)$?

Exercice 1.9 *Chaîne de Markov et champ de Markov*

On se place dans le contexte de l'exercice précédent.

(i) Démontrer que $X = (X_0, X_1, \cdots, X_n)$ possède la propriété de Markov bilatérale suivante (on parle alors d'un champ de Markov) : pour tout k, $0 < k < n$:

$$P(X_k = i_k \mid X_l = i_l, 0 \leq l \leq n \text{ et } l \neq k) = B_k(i_k \mid i_{k-1}, i_{k+1}) = \frac{P_{k-1}(i_{k-1}, i_k) P_k(i_k, i_{k+1})}{[P_{k-1} P_k](i_{k-1}, i_{k+1})}$$

(ii) Réciproquement, si X possède cette propriété de Markov bilatérale, plus les deux propriétés de Markov naturelles “de bordure”, montrer que X est une chaîne de Markov (sur un sous-intervalle de $\mathbb{N}$, il y a donc équivalence entre la propriété de Markov causale (chaîne) et non-causale (champ) ; cette équivalence tombera sur $\mathbb{N}^2$).

(iii) On considère la chaîne homogène et stationnaire sur $E = \{-1, +1\}$ de transition $p = P(X_n = 1 \mid X_{n-1} = 1)$ et $q = P(X_n = -1 \mid X_{n-1} = -1)$, $0 < p, q < 1$. Déterminer la transition bilatérale $Q(y \mid x, z)$, pour x, y et z dans E. Montrer que cette transition peut s'écrire

$$Q(y \mid x, z) = Z^{-1}(x, y) \exp\{x(h + \beta(y + z))\}$$

où $h = \frac{1}{2} \log \frac{p}{q}$ et $h = \frac{1}{4} \log \frac{pq}{(1-p)(1-q)}$ ($Z^{-1}(x, y)$ est la constante de normalisation faisant de Q une probabilité en x). Interpréter les situations : $h = 0$ ($p = q$) ; $\beta = 0$ ($p + q = 1$).

Exercice 1.10 *Chaîne de Markov à régime markovien et chaîne de Markov cachée*

Soit P_1, P_2 deux transitions régulières sur $E = \{a, b, c\}$ de lois invariantes π_1, π_2. Soit $X = (X_n)$ un processus sur E ainsi défini :

• $I = (I_n), I_n \in \{1, 2\}$ est une chaîne de Markov homogène de transition déterminée par : $P(I_n \neq I_{n-1} \mid I_{n-1}) = p$. I est le *régime* de X,

•• Sachant I_n, $((X_n \mid I_n), n \geq 0)$ est une chaîne de Markov inhomogène de transitions (P_{I_n}) $((X \mid I)$ est donc une chaîne de Markov inhomogène).

(1) Montrer que $(X, I) = (X_n, I_n)_n$ est une chaîne de Markov dont on déterminera la transition P. Vérifier que si $0 < p < 1$, P est régulière.

(2) Vérifier que $X = (X_n)$ n'est pas une chaîne de Markov.

Exercice 1.11 *Processus de Markov de mémoire 2*

Soit le processus de Markov sur $\{0,1\}$, de mémoire deux, et de transition :

$$p_{ab,c} = P(X_{n+2} = c \mid X_n = a, X_{n+1} = b), a, b, c \in \{0,1\}$$

Montrer que $Y_n = (X_n, X_{n+1})$ est une chaîne de Markov. Déterminer sa transition P. Si chaque $p_{ab,c} > 0$, vérifier que $P^2 > 0$ et donc que P est régulière. Comment se généralisent ces résultats au cas d'une mémoire d'ordre p ?

Exercice 1.12 *Perte de la propriété de Markov par agrégation d'états*

Soit X un chaîne de Markov de transition P sur $E = \{a, b, c\}$ et Y le processus à deux états $\{\{a,b\}, c\}$ (on a agrégé les deux états a et b) :

$$Y = \{a,b\} \text{ si } X \in \{a,b\}, Y = c \text{ si } X = c$$

Montrer que en général, Y n'est plus une chaîne de Markov. (voir que $P(Y_2 = c \mid Y_0 = x_0, Y_1 = \{a,b\})$ dépend en général de x_0 pour $x_0 = c$).

Les exercices suivants portent sur la simulation de variables aléatoires de base. Sur ce sujet, on pourra consulter Devroye [19], Jonhson et Kotz [54] et Robert [88].

Exercice 1.13 *Simulation d'une variable de fonction de répartition F connue*

Soit X une v.a. de fonction de répartition F connue, et

$$F^-(u) = \inf\{x \in R; F(x) \geq u\}$$

($F^- = F^{-1}$, la fonction réciproque de F, si F est continue). Montrer que si U est la loi uniforme sur $[0,1]$, $F^-(U)$ est de loi F.
Applications : obtenir la simulation des lois : exponentielle ; exponentielle symétrique ; loi de Cauchy ; loi de Pareto ; loi Gamma $\Gamma(\kappa, \lambda)$ dans le cas où l'index κ est entier.

Exercice 1.14 *Simulation d'une loi discrète*

(1) Soient $p_1, p_2, \cdots, p_k$, k probabilités de somme 1, et $x_i = \sum_{j=1,i} p_j$, $i = 1, k$. Vérifier que si U est uniforme sur $[0,1]$, $P(x_i \leq U < x_{i+1}) = p_i$.

(2) En déduire une méthode de simulation de la loi discrète $P(X = a_i) = p_i, i = 1, k$.

(3) *Applications.* Simuler les lois suivantes : Bernoulli $B(p)$; binomiale $B(n,p)$ (proposer deux méthodes) ; géométrique $G(p)$ (proposer deux méthodes) ; de Poisson $P(\lambda)$.

Exercice 1.15 *Simulation de la loi gaussienne et lois déduites*

(1) Justifier le fait que $X = \sum_{i=1,12}(U_i - 0.5)$ est approximativement une loi normale réduite si les U_i sont i.i.d. uniformes sur $[0,1]$.

(2) *Méthode de Box-Muller* : vérifier analytiquement que si U_1 et U_2 sont uniformes sur $[0,1]$ et indépendantes, alors les deux variables X_1 et X_2 définies ci-dessous sont (exactement) $\mathcal{N}(0,1)$ et indépendantes :

$$X_1 = \sqrt{-2\log U_1}\cos(2\pi U_2), X_1 = \sqrt{-2\log U_1}\sin(2\pi U_2)$$

(3) En déduire la simulation des lois $\chi^2_n, T_n, F_{n,m}$?

Exercice 1.16 *Génération d'une loi de Poisson, processus de Poisson et lois exponentielles*

(1) Démontrer que si $X_1, X_2, \cdots$ sont des lois exponentielles i.i.d. de paramètre λ, et si N est une loi de Poisson de paramètre λ,

$$P(N = k) = P(X_1 + \cdots X_k \leq 1 < X_1 + \cdots + X_k + X_{k+1})$$

En déduire une procédure de simulation de la loi de Poisson.

Notant $S_k = \sum_{j \leq} X_j$, $S_0 = 0$, le *processus de Poisson* d'intensité λ sur $\mathbb{R}^+$ est donné par la suite $\mathcal{P} = \{S_k, k \geq 0\}$.

(2) *Processus de Poisson effacé* : Montrer que si on efface de façon i.i.d. avec la probabilité p (et indépendemment de $\mathcal{P}$) les points du processus $\mathcal{P}$, on obtient un processus de Poisson d'intensité λp dont les intervalles de séparation constituent une suite i.i.d. d'exponentielles de paramètre λp.

Exercice 1.17 *Méthode de simulation par acceptation-rejet*

(1) On veut simuler X une v.a. réelle de densité f concentrée sur $[0,1]$. Soit g la densité sur $[0,1]$ d'une *loi aisée à simuler* (par exemple la loi uniforme), et M une constante telle que sur $[0,1]$: $f(x) \leq Mg(x)$. On définit l'algorithme suivant :

```
1-Simuler z suivant g et, indépendamment, u suivant la loi U([0,1])
2-Accepter x=z si Mg(z)×u≤ f(z)
3-Sinon répéter 1.
```

Montrer que x suit la loi de densité f.

(2) Comment généraliser ce résultat si X est concentrée sur un intervalle $)\alpha, \beta($, intervalle éventuellement de longueur infinie ?

(3) *Applications* : construire un simulateur de

$\rightarrow$ la loi $\Gamma(\lambda, \kappa)$, $\kappa \geq 1$, de densité, $f(x) = \Gamma(\kappa)^{-1}\lambda^{\kappa}e^{-\lambda x}x^{\kappa-1}1(x > 0)$

$\rightarrow$ la loi $\beta(a,b), a \geq 1$ et $b \geq 1$, de densité $\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}x^{a-1}(1-x)^{b-1}1(x \in]0,1[)$

Chapitre 2

Simulation par Chaîne de Markov

2.1 Le problème et la méthode

Soit $E = \{1, 2, \cdots, r\}$ un espace d'état fini, et π une loi de probabilité sur E : comment obtenir une réalisation de la variable X de loi π ?

Si r, le cardinal de E, n'est pas trop grand (de l'ordre du millier), on simule π par la méthode classique : on forme la suite croissante de $[0, 1]$ définissant la fonction de répartition de $X \sim \pi$,

(i) $F_0 = 0$ et pour $0 < i \leq r$, $F_i = \sum_{j \leq i} \pi_j$;

(ii) on tire une loi uniforme U sur $[0, 1]$, et

(iii) on retient la réalisation $x = x(U)$ si $F_{x-1} < U \leq F_x$

Si cette méthode de simulation est directe et exacte, elle est inapplicable dès que le cardinal de E est très grand. Par exemple pour l'espace produit $E = \{0, 1\}^{10 \times 10}$, ($x \in E$ est la réalisation d'une variable de présence ou d'absence sur le réseau carré $\{1, 2, \cdots, 10\}^2$ à 100 points), $r = 2^{100} \simeq 1.27 \times 10^{30}$: il n'est pas question de pouvoir mettre en mémoire 1.27×10^{30} valeurs F_j. Notons au passage que cet exemple est de “petite taille” : la réalisation est binaire et la taille de la fenêtre petite. Un problème réel en imagerie fera plutôt intervenir une valeur de $r = 256^{512 \times 512}$! (256 niveaux de gris, image à 512×512 pixels).

La méthode de simulation par chaîne de Markov.

L'idée est de simuler approximativement π comme loi limite d'une chaîne de Markov ergodique X de transition P. Ceci implique :

(1) de proposer une transition P sur E telle que $\pi P = \pi$ (P est π invariante).

(2) de s'assurer de l'ergodicité de la chaîne : $\nu P^n \to \pi$.

(3) de savoir à partir de quelle valeur n_0 on peut dire que pour $n \geq n_0$, νP^n est proche de π.

Ainsi, pour une loi initiale ν arbitraire, et si n_0 est assez grand, νP^{n_0} réalise approximativement π. Si on veut un échantillon approximatif de π, on recommence indépendamment cette opération (on a alors des chaînes indépendantes) ; ou encore, sur la même chaîne, on espace d'une valeur K grande les réalisations successives, νP^{n_0}, νP^{n_0+K}, νP^{n_0+2K}, et ainsi de suite.

Beaucoup de choix de P sont possibles : du point de vue purement paramétrique, P dépend de $r(r-1)$ paramètres, et l'invariance de π impose $(r-1)$ contraintes d'égalité : on dispose donc de $(r-1)^2$ degré de liberté dans le choix de P et l'ensemble des transitions ergodiques convergeant vers π contient un ouvert non-vide de $\mathbb{R}^{(n-1)^2}$.

Relativement aux points (1) et (2), le choix de P doit répondre à la *commodité de mise en oeuvre pratique* et à une *bonne efficacité algorithmique*. A ce niveau, le *savoir faire* prend toute son importance.

Le point (3) est difficile : quand pourra-t-on accepter que la chaîne démarrant suivant la loi ν *est entrée dans son régime stationnaire* ? Comme nous l'avons vu au premier chapitre, le contrôle théorique sur la vitesse d'ergodicité est inopérant dans la pratique de la plupart des exemples réels. Il existe des approches empiriques pour tester si la chaîne est entrée dans son régime stationnaire ([86] ; [43]) : le savoir-faire et l'expérience seront plus utiles que des résultats théoriques inexplicites, où, s'ils sont explicites, inefficaces parce que donnant une majoration en ρ^n pour une valeur de ρ si proche de 1 qu'elle est inutilisable.

Ce point (3) et la difficulté à y répondre sont à l'origine de plusieurs développements théoriques :

(i) l'étude du phénomène de *cutoff* pour une chaîne de Markov ([24], [91], [109] ; cf. chapitre 5) : la convergence vers π se fait de façon abrupte autour d'un instant de coupure (cutoff). Avant cet instant, $\|\nu P^n - \pi\|$ reste grand, alors que cette norme devient exponentiellement petite au-delà.

(ii) la *simulation exacte par couplage depuis le passé* ([84], [61], [78] ; cf chapitre 5) : la simulation se fait depuis un passé $-T$ et la procédure permet de s'assurer que X_0 suit *exactement* la loi π si T est assez grand.

Avant de passer aux deux grandes familles de procédures de simulation (Gibbs, Métropolis), résumons les propriétés que la transition P doit vérifier :

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{(1) } P \text{ est } \pi\text{-invariante}\\ \text{(2) } P \text{ est irréductible et apériodique}\\ \text{Alors, } \forall\, \nu,\ \nu P^n \to \pi\end{array}}$$

Un façon simple de vérifier (1) est de construire P qui soit π-réversible,

$$\boxed{(1') \quad P \text{ est } \pi\text{-réversible} : \forall i, j \in E,\ \pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}}$$

Quant à (2) elle est équivalente au fait que P est régulière,

$$\boxed{(2') : \exists k \geq 1 \text{ tel que } P^k > 0}$$

Notons dès à présent que dans les procédures de construction de P que nous allons développer, il suffit de *connaître π à un facteur multiplicatif près,* c'est-à-dire de connaître pour tout $i \in E$ la forme $\pi_i = c\, e_i$, où les e_i sont explicites, mais pas la constante de normalisation $c = (\sum_i e_i)^{-1}$.

2.2 L'échantillonneur de Gibbs

La construction de l'*échantillonneur de Gibbs* (encore appelé dynamique de Glauber) *n'est possible que pour un espace d'état produit,* $E = F_1 \times F_2 \times \cdots \times F_n$ ou puissance $E = F^n$. Cette méthode de simulation a été introduite par les frères Geman ([37], [39]) afin de résoudre des problèmes de reconstruction en imagerie. Pour simplifier la présentation, nous supposerons que $E = F^n$ est un espace puissance fini. Rien n'est fondamentalement changé pour un espace produit général $E = \prod_{i=1,n} F_i$ de composantes F_i finies.

Quelques notations : on définit $S = \{1, 2, \cdots, n\}$ comme l'espace des *sites ;* $E = F^S = F^n$; F l'espace des états en chaque site ; $x = (x_i, i \in E)$ une *configuration* sur l'ensemble des sites (c'est à dire un élément de E) ; pour une partie non vide $A \subset S$ de l'ensemble des sites, $x_A = (x_i, i \in A$) et si $A \neq S$, $x^A = (x_i, i \notin A)$ (de façon simplifiée, on notera x_i pour $x_{\{i\}}$et x^i pour $x^{\{i\}}$). Enfin, on note $\pi_i(. \mid x^i\ )$ la loi conditionnelle à x^i au site i :

$$\pi_i(x_i \mid x^i) = \frac{\pi(x_i, x^i)}{\pi^i(x^i)}$$

$\pi^i(x^i) = \sum_{a_i \in F} \pi(a_i, x^i)$ étant la loi marginale sur $S \backslash \{i\}$. On supposera connues explicitement ces lois conditionnelles. Ainsi, le cadre dans lequel l'échantillonneur de Gibbs peut être construit est le suivant :

Cadre requis pour l'Echantillonneur de Gibbs :
(1) $E = F^n$ (ou esp. produit)
(2) $\forall i \in S$, les lois $\pi_i(. \mid x^i)$ sont connues

2.2.1 Echantillonneur de Gibbs

Considérons la suite de visites $1 \mapsto 2 \mapsto \cdots \mapsto (n-1) \mapsto n$ correspondant à un *balayage* de l'ensemble des sites S. Soit $x = (x_i)$ une configuration initiale, $y = (y_i)$ une configuration finale. La transition P de l'échantillonneur de Gibbs pour ce balayage qui fait passer de x à y est définie par :

$$P(x,y) = \prod_{i=1,n} \pi_i(y_i \mid y_1, y_2, \cdots, y_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots, x_n)$$

Au i-ième pas de ce balayage, on *relaxe* la valeur x_i au site i en y_i suivant la loi conditionnelle $\pi_i(. \mid y_1, \cdots, y_{i-1}, x_{i+1}, \cdots, x_n)$: dans le conditionnement, les $(i-1)$ premières valeurs x ont déjà été relaxées, alors que les $(n-i-1)$ dernières ne l'ont pas encore étées. Cet algorithme est *séquentiel* ou *asynchrone*. Il se distingue fondamentalement des *algorithmes simultanés* ou *synchrones,* ou *parallèles* que nous étudierons plus loin.

Proposition 2.1 *Supposons que $\pi > 0$. Alors π est invariante pour P et $P > 0$. Plus précisément, pour $\varepsilon = \inf_{i,x} \pi_i(x_i \mid x^i)$, on a, pour tout x, y : $P(x,y) \geq \delta = \varepsilon^n > 0$. En particulier, pour toute loi initiale ν, $\nu P^k \to \pi$ pour $k \to \infty$.*

Preuve :
Invariance de π : pour montrer que π est P-invariante, il suffit de constater que $P = \prod_{i\in S} P_i$ et que π est P_i-invariante, P_i correspondant au i-ième pas du balayage. En effet, si deux transitions P et Q admettant π comme loi invariante, la transition composée PQ admet également π comme loi invariante puisque $\pi(PQ) = (\pi P)Q = \pi Q = \pi$. Montrons donc que π est invariante pour P_i. P_i fait passer d'un état u à un état v où seule la coordonnée i a été relaxée, cela avec la probabilité $\pi_i(v_i \mid u^i)$,

$$P_i(u,v) = \begin{cases} \pi_i(v_i \mid u^i) \text{ si } u^i = v^i \\ \quad 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

A v fixé, seules les configurations u où $u^i = v^i$ peuvent mener à v :

$$\sum_u \pi(u) P_i(u,v) = \sum_{u_i} \pi(u_i, v^i)\pi_i(v_i \mid v^i) = \sum_{u_i} \pi(v_i, v^i)\pi_i(u_i \mid v^i) = \pi(v)$$

π est invariante pour P_i.
Régularité de P : pour chaque x, $\pi(x) > 0$. Donc, $\varepsilon = \inf_{i\in S, x\in E} \pi_i(x_i \mid x^i) > 0$: pour tout $x, y \in E$, $P(x,y) \geq \delta = \varepsilon^n > 0$. □

Commentaires.

(i) Il suffit que π soit connue à un facteur près pour construire P : si $\pi(x) = ce(x)$, la probabilité conditionnelle $\pi_i(. \mid .)$ ne dépend pas de c.

(ii) P n'est pas π-réversible bien que chaque P_i le soit (une composition de transitions π-réversibles n'est pas nécessairement π-réversible, cf. exercice 2.6).

(iii) Tout autre balayage de S, $\sigma(1) \mapsto \sigma(2) \mapsto \cdots \mapsto \sigma(n)$ visitant tous les sites (σ est alors une permutation de $\{1, 2, \cdots, n\}$) donne le même résultat. Il est facile de voir qu'on obtient le même résultat d'ergodicité pour un balayage de longueur N, visitant tous les sites, certains sites pouvant être visités plusieurs fois.

(iv) On démontrera au chapitre 3 que l'on peut s'autoriser des balayages successifs qui changent au cours du temps, la transition au k-ième balayage étant $P(k)$: une condition suffisante d'ergodicité de la chaîne inhomogène $(P(k))$ est que le k-ième balayage satisfasse (iii), le nombre $N(k)$ étant uniformément borné en k.

(v) Dans la pratique, il paraît raisonnable d'itérer environ 100 fois les balayages pour simuler π.

Exemple 2.1 *Simulation d'un modèle d'Ising*

Considérons l'ensemble de sites consitués par la grille carrée $S = \{1, 2, \cdots, n\}^2$, $F = \{-1, +1\}, E = F^S$. Le modèle d'Ising aux 4-plus proches voisins (noté p.p.v.) est défini de la façon suivante : notons pour $x \in E$, $U(x) = h\sum_{i\in S} x_i + \beta\sum_{\langle i,j\rangle} x_i x_j$, où h, β sont deux paramètres réels, et $\langle ., .\rangle$ est la relation de voisinage aux 4-p.p.v. : pour $i, j \in S$, $\langle i, j\rangle \Leftrightarrow \|i - j\|_1 = 1$. La loi π d'énergie U est définie par

$$\pi(x) = Z^{-1}\exp\{h\sum_{i\in S} x_i + \beta\sum_{\langle i,j\rangle} x_i x_j\} \tag{2.1}$$

où $Z = Z(h, \beta) = \sum_{y\in E}\exp U(y)$ est la constante de normalisation qui fait de π une probabilité. La condition de positivité de π est bien vérifiée et il est facile de s'assurer que la loi conditionnelle en i, dépend seulement des voisins $\partial i = \{j \in S : \langle i, j\rangle\}$ de i par l'intermédiaire de $v_i = \sum_{j\in\partial i} x_j$ (cf. le chapitre 4 sur les champs de Markov) :

$$\pi_i(x_i \mid x^i) = \pi_i(x_i \mid x_{\partial i}) = Z^{-1}(h, \beta, v_i)\exp\{x_i(h + \beta v_i)\}$$

avec $Z_i(h, \beta, v_i) = 2\cosh(h + \beta v_i)$. On notera que si la constante globale Z est incalculable (et inutile dans la construction de l'algorithme), les constantes Z_i sont explicites (et indispensables pour la construction de l'algorithme).

La situation $h = 0$ donne une distribution où toutes les marginales X_i sont équidistribuées sur $F = \{-1, +1\}$. Si de plus $\beta > 0$, il y a corrélation spatiale, d'autant plus importante que β est grand. Dans ce cas, on peut prendre $\varepsilon = (1 + e^{8\beta})^{-1}$; pour $\beta = 1$, $\varepsilon \simeq 3.4 \times 10^{-4}$; on comprend que si la positivité de cette constante est essentielle pour assurer l'ergodicité, elle est inopérante pour un réel contrôle de la vitesse d'ergodicité.

Exemple 2.2 *Texture de niveau de gris et Φ-modèle*

Plus généralement, l'échantillonneur de Gibbs permet la simulation d'une large classe de densités associées à un modèle de Gibbs sur $E = F^N$ où $F \subset \mathbb{R}$, par exemple $F = \{0, 1, 2, \cdots, 255\}$

$$\pi(x) = Z^{-1}\exp U(x)$$

En analyse d'image, F est un ensemble de niveaux de gris ; une modélisation classique de texture de niveaux de gris est la suivante ([40], [39]) :

$$U(x) = \theta V_d(x) \text{ où } V_d(x) = \sum_{\langle i,j\rangle}\Phi_d(x_i - x_j),\ \Phi_d(u) = \frac{1}{1 + (\frac{u}{d})^2}$$

L'avantage de ces Φ-modèles par rapport aux modèles gaussiens est de permettre des contrastes $|x_i - x_j|$ importants en des sites voisins, là où un modèle gaussien ne le permet pas (parce que donnant un poids $\exp -(x_i - x_j)^2$ trop faible). θ et d sont deux paramètres qui règlent le type de texture : des contrastes plus importants sont permis si d augmente, θ contrôlant la corrélation spatiale. Pour ce modèle, la loi conditionnelle au site i est

$$\begin{aligned}\pi_i(x_i \quad | \quad x_{\partial i}) &= Z^{-1}(x_{\partial i})\exp\{\theta\sum_{j:\langle i,j\rangle}\Phi_d(x_i - x_j)\}\\ \text{avec } Z(x_{\partial i}) &= \sum_{x_i\in F}\exp\{\theta\sum_{j:\langle i,j\rangle}\Phi_d(x_i - x_j)\}\end{aligned}$$

2.2.2 Echantillonneur de Gibbs à balayage aléatoire

Soit ν une probabilité sur S. L'échantillonneur de Gibbs à *balayage aléatoire* correspond à l'algorithme suivant : soit x l'état initial,

(1) ochoisit un site i, indépendamment du passé, suivant ν

(2) orelaxe la valeur x_i en ce site en proposant y_i suivant $\pi_i(. \mid x^i)$

La nouvelle configuration est $y = (y_i, x^i)$. La transition Q associée est concentrée sur les changements en au plus un site :

$$Q(x,y) = \sum_{i=1,n} \nu_i \mathbf{1}(x^i = y^i)\pi_i(y_i \mid x^i)$$

Proposition 2.2 *L'échantillonneur de Gibbs aléatoire est ergodique convergeant vers π dès que ν et π sont > 0.*

Preuve : Comme dans la démonstration précédente, il est facile de voir que π est invariante pour Q. Montrons que $Q^n > 0$. Soit $\varepsilon = \inf_{i,x} \pi_i(x_i \mid x^i), \varepsilon > 0$. Soient $x, y \in E$ arbitraires. Dans le calcul de la transition $Q^n(x,y)$, il existe un choix de balayage aléatoire visitant successivement tous les sites $1 \mapsto 2 \mapsto 3 \to \cdots \mapsto n$, ceci avec la probabilité $\nu_1\nu_2\cdots\nu_n > 0$, la i-ème relaxation changeant x_i en y_i. Notons $\Delta = \nu_1\nu_2\cdots\nu_n$. On obtient donc la minoration :

$$Q^n(x,y) \geq \Delta \prod_{i=1,n} \pi_i(y_i \mid y_1, y_2, \cdots, y_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots, x_n) \geq \Delta\varepsilon^n > 0$$

En fait, la minoration peut être affinée puisque l'argument est valable pour tout balayage défini par une permutation de $\{1, 2, \cdots, n\}$. On obtient alors $Q^n(x,y) \geq \Delta n! \varepsilon^n$; par exemple, pour un balayage aléatoire uniforme de S, $Q(x,y) \geq n!(\frac{\varepsilon}{n})^n$. □

Comparaison des stratégies de balayages.
Amit et Grenander [4] comparent les stratégies de balayage pour le cas spécifique gaussien (voir ci-dessous l'échantillonneur d'un loi continue sur $\mathbb{R}^p$) et pour le critère de la vitesse d'ergidicité $\nu P^n \to \pi$. Ce contexte permet d'obtenir un contrôle des valeurs propres de la transition d'un balayage à partir de la covariance de la variable et de la matrice de visite des sites. Leur conclusion est la suivante : (1) le balayage aléatoire semble préférable au balayage systématique ; (2) il existe de mauvais balayages sytématiques. Cela ne permet pas pour autant de rejeter les balayages systématiques périodiques : plus simples d'un point de vue algorithmique, ils sont probablement efficaces si les sites successifs visités sont éloignés (ce que fait bien, en moyenne, un balayage aléatoire).

2.2.3 Echantillonneur avec balayages synchrones

Une façon d'accélérer la simulation est d'effectuer les n relaxations simultanément et indépendamment : on parle alors de relaxations *synchrones* ou *simultanées*. La transition $R(x,y)$ est donnée par :

$$R(x,y) = \prod_{i \in S} \pi_i(y_i \mid x^i)$$

Soulignons la différence avec l'échantillonneur de Gibbs séquentiel : ici le conditionnement au site i est en $(x_1, x_2, \cdots, x_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots, x_n)$ alors qu'il était en $(y_1, y_2, \cdots, y_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots, x_n)$ pour l'algorithme séquentiel.

Pour que ces relaxations soient réalisées simultanément, il faut disposer d'une machine à architecture parallèle : un microprocesseur est attaché à chaque site i, $i \in S$, ces processeurs réalisant simultanément et indépendamment les relaxations $x_i \mapsto y_i$ suivant les lois $\pi_i(. \mid x^i)$.

Malheureusement, bien que R soit ergodique, π n'est en général pas invariante pour R et cette méthode par parallélisation totale ne permet pas de simuler π. On a le résultat suivant :

Proposition 2.3 *Echantillonnage avec balayages synchrones.*

La transition R est régulière. Il existe donc une loi μ telle que pour toute loi initiale ν, $\nu R^n \to \mu$. En général, π n'est pas invariante pour R, et donc $\mu \neq \pi$. μ est appelée loi virtuelle associée à π.

Preuve : Pour $\varepsilon = \inf_{i,x} \pi_i(x_i \mid x^i)$, $\inf_{x,y} R(x,y) \geq \varepsilon^n$: R est régulière. D'autre part, il est facile de voir que π n'est en général pas invariante pour R (cf. exercice). □

En général, on ne sait pas expliciter analytiquement μ : les relations entre μ et la loi d'origine π ne sont donc pas connues. Dans l'un des exercices, on étudie un cas particulier de modèle d'Ising (2.1) où μ peut être explicitée : on constate que π et μ sont très dissemblables. Par exemple, si les voisins de i pour π sont les 4-p.p.v., ceux pour μ sont les 4 voisins diagonaux. Ceci incite à penser que loi virtuelle et loi d'origine sont "assez différentes".

Simulation de π par parallèlisation partielle.
On peut proposer des algorithmes partiellement parallèles pour la simulation de π. Pour préciser cela, reprenons le contexte de l'exemple (2.1) du modèle d'Ising.

Sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}^2$, n pair, considérons la partition en deux couleurs : $S = B \cup N$, $B = \{i = (i_1, i_2) \text{ t.q. } i_1 + i_2 \text{ est pair}\}$, $N = S \backslash B$ (dans le cadre où S est un échiquier $n \times n$, B est l'ensemble des $\frac{n^2}{2}$ cases blanches, N est l'ensemble des $\frac{n^2}{2}$ cases noires). Il est aisé de voir que la loi de $(X_B \mid x_N)$ (resp. de $(X_N \mid x_B)$) est $P_B(x_B \mid x_N) = \prod_{i \in B} \pi_i(x_i \mid x_{\partial i})$ (resp. $P_N(x_N \mid x_B) = \prod_{i \in N} \pi_i(x_i \mid x_{\partial i})$).

Considérons alors l'échantillonneur de Gibbs pour le balayage suivant de S : on commence par visiter les $\frac{n^2}{2}$ sites de N, puis on termine par la visite des $\frac{n^2}{2}$ sites de B. Notons P la transition de cet échantillonneur ; puisque la relaxation des sites de N (resp de B) ne fait intervenir que x_B (resp. y_N), on a :

$$P(x, y) = P_N(y_N \mid x_B) P_B(y_B \mid y_N)$$

Cet échantillonneur réalise bien la simulation de π. Disposant d'une machine parallèle, cet algorithme est réalisable en deux itérations, chacune effectuant $\frac{n^2}{2}$ relaxations synchrones. On dispose là d'un algorithme de simulation de π partiellement parallèle.

Il est facile de généraliser cette construction pour un ensemble S muni d'un graphe de voisinage pour lequel il est possible d'obtenir une *partition de S en k couleurs*, avec les propriétés d'indépendances précédentes. Si tel est le cas, on dispose d'un algorithme partiellement parallèle réalisable en k itérations.

2.2.4 Echantillonneur de Gibbs sur $E = \mathbb{R}^n$ (ou $(\mathbb{R}^d)^n$)

Les résultats de Tierney [98] présentés au premier chapitre se mettent facilement en oeuvre dans la situation suivante, l'absolue continuité étant définie par rapport à la mesure de Lebesgue sur $E = (\mathbb{R}^d)^n$:

∘ π est une loi a densité $\pi(x) > 0$

∘∘ la transition $P(x, y)$ admet une densité $p(x, y) > 0$ pour tout $x, y \in E$.

∘ ∘ ∘ π est la loi invariante pour P.

Dans ce cas, la chaîne de transition P est π-irréductible, apériodique et Harris récurrente. On en déduit que, pour la norme en variation totale et pour toute loi initiale ν, $\nu P^n \to \pi$.

Exemple 2.3 *Simulation d'un vecteur gaussien*

Supposons que $F = \mathbb{R}$, la loi de $X = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$ étant gaussienne de moyenne 0 et de matrice de covariance Σ, inversible. Si la moyenne est m, il suffira de simuler une gaussienne de moyenne 0 et de lui ajouter ensuite m.

L'échantillonneur de Gibbs de X consiste à visiter séquentiellement les sites $1 \mapsto 2 \mapsto \cdots \mapsto n$, la i-ième relaxation se faisant suivant la loi conditionnelle $(X_i \mid y_1, \cdots, y_{i-1}, x_{i+1}, \cdots, x_n)$. Cette loi conditionnelle est gaussienne, explicitable lorsque $Q = \Sigma^{-1}$ l'est. La transition $P(x, y)$ admet donc une densité, positive partout, tout comme la densité de X. L'échantillonneur de Gibbs fournit bien une simulation de π.

Rappelons que la loi conditionnelle au site i est donnée en fonction des coefficients (q_{ij}) de Q par :

$$\mathcal{L}oi(X_i \mid x^i) \sim \mathcal{N}_1(-q_{ii}^{-1} \sum_{j:j\neq i} q_{ij}x_j \,;\, q_{ii}^{-1})$$

Dans le cas d'un *champ gaussien et markovien* (cf. chapitre 4), $Q = \Sigma^{-1}$ prend une forme simplifiée, $\pi_i(x_i \mid x^i)$ dépendant de x^i par l'intermédiaire de $x_{\partial i}$, ∂i le voisinage de i pour le graphe markovien. En particulier, $q_{ij} \neq 0 \Leftrightarrow j \in \partial i$. Plaçons nous sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}^2$ et considérons la variable gaussienne X sur S de densité :

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp U(x) \text{ où } U(x) = -\frac{1}{2}\, {}^t xQx, \text{ avec } {}^t xQx = a \sum_{i\in S} x_i^2 + b \sum_{\|i-j\|_1=1} x_i x_j$$

Si $\left|\frac{b}{a}\right| < \frac{1}{2}$, Q est définie positive et

$$\mathcal{L}oi(X_i \mid x^i) \sim \mathcal{N}_1(-\frac{b}{a} \sum_{j:\|i-j\|_1=1} x_j ; \frac{1}{a}).$$

Cette méthode de simulation peut être comparée à la méthode classique. Soit $\Sigma = T\,{}^tT$ une décomposition de Cholesky de Σ, ε un échantillon gaussien réduit de taille $N = n^2$: alors, $X = T\varepsilon$ est alors $\mathcal{N}_N(0, \Sigma)$. Pour la décomposition de Cholesky et pour un champ sur $\{1, 2, \cdots, 100\}^2$, Σ est de dimension $10^4 \times 10^4$. Pour la simulation par l'échantillonneur de Gibbs, il faut réaliser 100 balayages, soit 100×10^4 visites successives des sites, avec à chaque visite la simulation d'une gaussienne, mais sans recherche de la forme de Cholesky de Σ.

Exemple 2.4 *Espace d'état mixte* $E = (\Lambda \times \mathbb{R})^n$

L'échantillonneur de Gibbs est aussi adapté à la simulation de modèle markovien à espace d'état $E = (\Lambda \times \mathbb{R})^n$ mixte : $\Lambda = \{1, 2, \cdots, r\}$ est un espace qualitatif repérant le *label* λ_i du site i, alors que $\mathbb{R}$ repère le niveau de gris x_i en ce même site i. Ces modèles, très utiles en analyse d'images ou en théorie du signal, seront précisés au chapitre 4.

2.3 La dynamique de Metropolis-Hastings

Proposée par Métropolis en 1953 ([74]), l'algorithme a pris sa forme générale avec Hastings en 1970 ([51]). A la différence de l'échantillonneur de Gibbs, l'algorithme de Metropolis-Hastings (noté dorénavant M.H.) est utilisable sur un espace d'état E général (pour l'échantillonneur de Gibbs, E doit être un ensemble produit).

2.3.1 Construction de la transition de M.H.

Soit $E = \{1, 2, \cdots, r\}$ un espace d'état fini, $\pi > 0$ une loi sur E. Deux familles de lois sont à la base de l'algorithme,

(i) Q une transition irréductible sur E, dite *proposition de changement :* $Q(x, y)$ est la probabilité de proposer le changement $x \mapsto y$

(ii) $a : E \times E \to]0, 1]$ la fonction d'*acceptation du changement* : $a(x, y)$ est la probabilité d'accepter le changement $x \mapsto y$. On supposera que pour tout x, $a(x, x) = 1$: si on ne bouge pas, on l'accepte.

L'algorithme de M.H. est alors le suivant : soit x l'état initial :

(1) on propose le changement $x \mapsto y$ suivant $Q(x,.)$

(2) on accepte ce changement avec la probabilité $a(x,y)$. Sinon, on ne modifie pas la valeur x.

La transition P de cet algorithme est donc :

$$P(x,y) = \begin{cases} Q(x,y)a(x,y) \text{ si } x \neq y \\ Q(x,x) + \sum_{y:y\neq x} Q(x,y)[1-a(x,y)] \text{ sinon} \end{cases} \tag{2.2}$$

Il y a deux tirages aléatoires indépendants à effectuer : le premier suivant la loi $Q(x,.)$ sur E ; le second suivant une loi uniforme U sur $[0,1]$: si $U \leq a(x,y)$, on accepte le changement $x \mapsto y$. Sinon on reste en x.

Comme on peut le constater, à ce stade, Q et a sont libres de π. On va imposer à P d'être π-réversible, auquel cas π sera automatiquement P-invariante. Sous condition d'irréductibilité et d'apériodicité, P sera alors ergodique, νP^n convergeant vers π pour toute loi initiale ν.

2.3.2 π-réversibilité de M.H. et ergodicité

La condition de réversibilité s'écrit :

$$\forall x,y \in E, x \neq y : \pi(x)q(x,y)a(x,y) = \pi(y)q(y,x)a(y,x) \tag{2.3}$$

Puisque $\pi > 0$ et $a > 0$, $q(x,y) \neq 0 \Leftrightarrow q(y,x) \neq 0$: sous (2.3), Q est "*faiblement symétrique*". En d'autres termes, on peut aller de x vers y, si et seulement si on peut aller de y vers x. Ceci est réalisé, par exemple, si Q est symétrique. Dans la construction de l'algorithme de M.H., on commence par choisir Q ; a devra donc vérifier :

$$\frac{a(x,y)}{a(y,x)} = \frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)} \triangleq r(x,y) \tag{2.4}$$

On remarque que pour vérifier (2.4), il suffit de connaître π à un facteur multiplicatif près.

Donnons deux exemples de choix classiques de a. Soit$F :]0,+\infty[\to]0,1]$, une fonction vérifiant la condition :

$$\forall z > 0 : F(z) = zF(\frac{1}{z})$$

Pour r définie en (2.4), si a vérifie :

$$a(x,y) = F(r(x,y))$$

alors a vérifie la condition de réversibilité (2.4).

Exemple 2.5 *Dynamique de Barker,* $F(z) = \frac{z}{1+z}$ *[8]*

$a(x,y) = \frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)+\pi(y)q(y,x)}$. Si Q est symétrique, $a(x,y) = \frac{\pi(y)}{\pi(x)+\pi(y)}$.

Exemple 2.6 *Dynamique de Metropolis,* $F(z) = \min\{1,z\}$*[74]*

$a(x,y) = \min\{1, \frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)}\}$. Si Q est symétrique, $a(x,y) = \min\{1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)}\}$. L'algorithme de Métropolis prend alors la forme suivante :

Algorithme de Metropolis, le cas Q symétrique

(i) Soit x l'état initial : choisir y suivant $Q(x,.)$
(ii) Si $\pi(y) \geq \pi(x)$, garder y. Revenir en (i).
(iii) Si $\pi(y) < \pi(x)$, tirer une loi uniforme U sur $[0,1]$:
• si $U \leq p = \frac{\pi(y)}{\pi(x)}$,garder y.
•• si $U > p$, garder la valeur initiale x.
(iv) Revenir en (i).

Ergodicité de P.
Puisque $a > 0$, P est ergodique si Q est régulière. De même, P est irréductible si Q est irréductible. Restera à s'assurer de l'apériodicité de P.

Proposition 2.4 *Ergodicité de l'algorithme de M.H.*
Supposons que Q soit irréductible et que a vérifie la condition de réversibilité (2.4). L'ergodicité de P, et donc la convergence $\nu P^n \to \pi$ pour toute loi initiale ν, est assurée sous l'une des conditions suivantes :
(i) Q est régulière.
(ii) $\exists x_0$ t.q. $Q(x_0, x_0) > 0$.
(iii) $\exists (x_0, y_0)$ t.q. $r(x_0, y_0) < 1$.
(iv) Q est symétrique et π n'est pas la loi uniforme.

Preuve : (i) est bien suffisante puisque $a > 0$. Pour les trois autres conditions, montrons qu'il existe x_0 t.q. $P(x_0, x_0) > 0$. Cette condition garantit l'apériodicité de P. Sous (ii) ou (iii), utilisant l'expression (2.2) donnant $P(x,x)$ en fonction de Q et de a, il est facile de voir que $P(x_0, x_0) > 0$.

Examinons (iv). Q étant irréductible, tous les états communiquent. Notons $x \sim y$ si $q(x,y) > 0$ ($\Leftrightarrow q(y,x) > 0$). Puisque π n'est pas uniforme et que tous les états communiquent, il existe $x_0 \sim y_0$ tels que $\pi(x_0) > \pi(y_0)$. On a donc :

$$P(x_0, x_0) \geq q(x_0, y_0)[1 - \frac{\pi(y_0)}{\pi(x_0)}] > 0$$

□

2.3.3 Exemples

Exemple 2.7 *Loi π issue d'une énergie U : $\pi(x) = Z^{-1} \exp U(x)$*

Si Q est symétrique, la dynamique de Metropolis dépend des ratios $p = \frac{\pi(y)}{\pi(x)} = \exp\{U(y) - U(x)\}$ et donc du signe de $\Delta U = \{U(y) - U(x)\}$: si $\Delta U \geq 0$, on retient y ; sinon, y est retenue avec la probabilité $\exp \Delta U$. Notant $a^+ = \sup\{0, a\}$, la transition s'écrit pour $x \neq y$,

$$P(x,y) = Q(x,y) \exp -[U(x) - U(y)]^+.$$

Exemple 2.8 *Dynamique d'échange de spins pour un modèle d'Ising*

Considérons le modèle d'Ising (2.1) sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}^2$, la valeur du spin en i étant $x_i \in \{-1, +1\}$, la loi jointe sur $E = \{-1, +1\}^S$ étant donnée par l'énergie $U(x) = h \sum_{i \in S} x_i + \beta \sum_{\|i-j\|_1 = 1} x_i x_j$. Soit x une configuration initiale.

On choisit la proposition de changement Q suivante : on commence par choisir au hasard uniforme deux sites i et j de S ; on propose alors la configuration y identique à x partout à ceci près que les valeurs x_i et x_j ont été interchangées :

$$y^{\{i,j\}} = x^{\{i,j\}}, y_i = x_j \text{ et } y_j = x_i$$

Q est symétrique. U ne faisant intervenir que les interactions $x_i x_j$ pour des sites voisins, $\Delta U(x,y)$ prend une forme simple locale. Si les deux sites choisis pour la permutation des spins sont i et j, il est facile de vérifier que, en posant $v_k = \sum_{l:\langle l,k\rangle} x_l$, on a :

$$\Delta U(x,y) = U(y) - U(x) = \begin{cases} \beta(x_j - x_i)(v_i - v_j) \text{ si } \|i-j\|_1 > 1 \\ \beta(x_j - x_i)(v_i - v_j) - \beta(x_j - x_i)^2 \text{ si } \|i-j\|_1 = 1 \end{cases}$$

Un pas de l'algorithme de Metropolis d'échange de spins requiert donc :

(i) le tirage de deux lois uniformes indépendantes sur $\{1, 2, \cdots, n\}$

(ii) le calcul de $\Delta U(x,y)$

(iii) Si $\Delta U(x,y) < 0$, le tirage d'une variable Z uniforme sur $[0,1]$, indépendante de (i) ; on accepte la permutation des spins si $Z < \exp \Delta U(x,y)$. Sinon, on ne permute pas les spins.

Soit $x(0)$ la configuration initiale au pas 0. La proposition de changement Q fait rester dans l'espace des configurations

$$E_0 = E_{x(0)} = \{x \in E \text{ t.q. } \sum_{i\in S} x_i = N(0) = \sum_{i\in S} x_i(0)\}$$

A chaque proposition de changement, le nombre de spins d'un signe donné est invariant. Sur E_0, Q est irréductible : en effet deux configurations de E_0 se correspondent par (au moins) une permutation de S et toute permutation est un produit fini de transpositions. D'autre part, si $x(0)$ n'est pas une configuration constante et si $\beta \neq 0$, π n'est pas constante sur E_0, la transition de l'algorithme est apériodique. L'algorithme de Metropolis d'échange de spins est donc ergodique sur E_0, fournissant une simulation de $\pi\,|_{E_0}$, la loi π restreinte à E_0.

Exemple 2.9 *L'échantillonneur de Gibbs à balayage aléatoire*

L'échantillonneur de Gibbs à balayage aléatoire sur $E = F^S$ est un algorithme de M.H. pour la dynamique de Metropolis suivante :

(1) Choisir un site $i \in S$ au hasard suivant la loi ν ($\nu > 0$) ; la transition Q fait passer de $x = (x_i, x^i)$ à $y = (y_i, x^i)$, où y_i est choisie suivant la loi $\pi_i(. \mid x^i)$.

(2) On retient toujours y : pour x et y du type précédent, $a(x,y) = 1$.

Ce choix correspond bien à la dynamique de Metropolis, $a(x,y) = \sup\{1, r(x,y)\}$; en effet :

$$r(x,y) = \frac{\nu_i \pi(y_i, x^i)\pi_i(x_i \mid x^i)}{\nu_i \pi(x_i, x^i)\pi_i(y_i \mid x^i)} \equiv 1$$

Exemple 2.10 *Simulation sur un espace muni d'un graphe irréductible*

Supposons que E (non nécessairement espace produit) est muni d'une structure de graphe $\mathcal{G}$ symétrique, c'est-à-dire d'une relation de "voisinage" $x \sim y$ symétrique pour $x \neq y$. On définit le voisinage de x comme $\mathcal{V}(x) = \{y \mid y \sim x\}$ et on suppose que pour tout x, $v(x) = |\mathcal{V}(x)| > 0$, où $|A|$ est le cardinal de A. On dira que le graphe $\mathcal{G}$ est irréductible si pour tout $x, y \in E$, il existe un chemin allant de x à y.

Considérons alors la proposition de changement uniforme de x vers l'un de ses voisins,

$$q(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{v(x)} \text{ si } y \sim x \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

Q est une transition symétrique, irréductible si $\mathcal{G}$ est irréductible.

Exemple 2.11 *Un problème de coupe maximale d'un graphe*

Spécifions E et π dans le contexte d'un problème de coupe maximale d'un graphe. Soit $S = \{1, 2, \cdots, n\}$ un ensemble de n sites, et $w = \{w_{ij}, i, j \in S\}$ un ensemble de poids réels et symétriques sur $S \times S$: pour tout $i, j \in S$, $w_{ij} \in \mathbb{R}$ et $w_{ij} = w_{ji}$. Posons $E = \mathcal{P}(S)$ l'ensemble des parties de S, et pour $A \in E$,

$$U(A) = \sum_{i \in A, j \notin A} w_{ij}$$

Le problème posé est le suivant : trouver A minimisant $U(A)$. On utilisera pour cela un algorithme de recuit simulé (cf. chapitre 3). Nous allons décrire ici l'algorithme de simulation de la loi π_β suivante :

$$\pi_\beta(A) = Z^{-1}(\beta) \exp\{-\beta U(A)\}$$

Le rapport entre la simulation de π_β et la minimisation de U est le suivant, c'est l'heuristique du recuit simulé : l'ensemble M_β des modes de π_β tend, lorsque $\beta \to +\infty$, vers l'ensemble M où U atteint son minimun. Ainsi, la simulation de π_β pour β grand se concentre approximativement autour de M.

Algorithme de Metropolis pour la simulation de π_β.

(1) Les seuls changements autorisés sont $A \mapsto B$ où B diffère de A en exactement un site ; deux cas se présentent :

$$\begin{cases} \text{(i) } B = A \cup \{s\} \text{ si } |A| < n \text{ et si } s \notin A \text{ ou} \\ \text{(ii) } B = A \backslash \{s\} \text{ si } |A| \geq 1 \text{ et } s \in A \end{cases}$$

On remarquera que $B \mapsto A$ est possible si $A \mapsto B$ l'est : le graphe de communication associé $A \sim B$ est symétrique.

(2) On choisit s uniformément sur S : si $s \in A$, on prend $B = A \backslash \{s\}$; si $s \notin A$, on prend $B = A \cup \{s\}$. Dans ces deux cas, $q(A, B) = \frac{1}{n}$; sinon, $q(A, B) = 0$.
Q est symétrique et irréductible. Notons que Q n'est pas régulière, puisque là où elle n'est pas nulle, elle change la parité d'un sous-ensemble.

(3) Evaluer $\Delta U = U(B) - U(A)$: pour (i), $\Delta U = \sum_{j \notin B} w_{sj} - \sum_{i \in A} w_{is}$; pour (ii), $\Delta U = \sum_{i \in B} w_{is} - \sum_{j \notin A} w_{sj}$.

(4) π_β est associée à l'energie $-\beta U$. Donc, si $\Delta U \leq 0$, on garde B. Sinon, on garde B avec la probabilité $p = \exp -\beta \Delta U$.

Q étant symétrique, l'algorithme est ergodique dès que U n'est pas constante.

2.3.4 Quelques résultats généraux sur les transitions π-réversibles

Soit P une transition ergodique et π-réversible sur $E = \{1, 2, \cdots, r\}$, $X = (X_0, X_1, X_2, \cdots)$ une chaîne homogène de transition P. Notons $l^2(\pi) = l^2_{\mathbb{C}}(\pi)$ l'espace des fonctions réelles définies sur E muni du produit scalaire $\langle f, g \rangle = \sum f(x)\overline{g}(x)\pi(x)$. Pour toute loi initiale ν et tout $f \in \Omega$, on a [58] :

$$v(f, \pi, P) = \lim_{T \to \infty} \text{Var}(T^{-\frac{1}{2}} \sum_{t=0}^{T-1} f(X_t)) \text{ existe et est indépendante de } \nu.$$

Proposition 2.5 *Spectre d'une transition réversible et valeur de $v(f, \pi, P)$*

(1) Si P est π-réversible et ergodique, P est auto-adjointe sur $l^2(\pi)$. P est donc diagonalisable de valeurs propres réelles vérifiant

$$\lambda_1 = 1 < \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_r \leq -1$$

$\lambda_r = -1$ *correspondant au cas d'une chaîne 2-périodique.*

(2) Choisissons les vecteurs propres associés $\{e_1 = \mathbf{1}, e_2, \cdots, e_r\}$ *orthonormaux dans* $l^2(\pi)$. *Alors :*

$$v(f, \pi, P) = \sum_{k=2}^{r} \frac{1 + \lambda_k(P)}{1 - \lambda_k(P)} \langle f, e_k \rangle_\pi^2 \tag{2.5}$$

Commentaires :

(1) λ_2 est appelée la *valeur propre sous dominante* de P : elle permet d'identifier le facteur de variance asymptotique $v(f, \pi, P)$ dans le T.C.L. portant sur $T^{-\frac{1}{2}} \sum_{t=0}^{T-1} f(X_t)$ et, pour ce critère, permet de comparer deux transitions.

(2) $\rho_2 = \sup\{|\lambda_2|, |\lambda_r|\}$ contrôle quant à lui la vitesse d'ergodicité puisque $\|\nu P^n - \pi\| \leq C(\nu)\rho_2(P)^n$.

(3) Les contrôles explicites de λ_2 ou de ρ_2 sont en général impossibles. Des majorations et des minorations du trou spectral $(1 - \lambda_2)$ de P sont données dans ([29], Ch. 6.II.4, p. 250).

Preuve :

(1) Posant $Ph(x) = \sum P(x, y)h(y)$, on vérifie facilement, en utilisant la réversibilité pour la deuxième inégalité, que

$$\langle f, Pg \rangle = \sum f(x) P\overline{g}(x) \pi(x) = \sum \overline{g}(x) P f(x) \pi(x) = \langle Pf, g \rangle$$

(2) Décomposons f sur la base propre : $f = \sum_{i=1,r} a_i e_i$, où $a_i = \langle f, e_i \rangle$. Si f est réelle, $a_i \in \mathbb{R}$. On a : (i) $\pi(f) = a_1$; (ii) $P^n f = \sum_{i=1,r} a_i \lambda_i^n e_i$. On en déduit la covariance entre $f(X_0)$ et $f(X_n)$, en régime stationnaire, et pour f réelle :

$$\begin{aligned} E(f(X_0)f(X_n)) &= \sum_{i=1,r} \overline{a}_i \lambda_i^n \langle f, e_i \rangle = \sum_{i=1,r} \lambda_i^n |a_i|^2 = \sum_{i=1,r} \lambda_i^n a_i^2 \\ Var(f(X_0)) &= \sum_{i=2,r} a_i^2, \text{ et } Cov(f(X_0), f(X_n)) = \sum_{i=2,r} a_i^2 \lambda_i^n \end{aligned}$$

On en déduit alors facilement (2). □

2.3.5 Comparaison de différentes dynamiques de M.H.

Définitions et résultats préliminaires.

Fixant la transition de proposition, on va comparer les dynamiques de M.H. correspondant à des choix différents de la fonction d'acceptation a.

Si P et Q sont deux transitions sur $E = \{1, 2, \cdots, r\}$, on dit que P *domine* Q en *dehors de la diagonale* (on note $P \succ Q$) si pour tout $i \neq j$, $p_{ij} \geq q_{ij}$. Soit $\pi > 0$ une loi sur E. Un opérateur M sur $\Omega = \mathbb{R}^E$ (c'est à dire une matrice $r \times r$) est positif si pour tout $f \in \Omega$,

$$\langle Mf, f \rangle_\pi = \sum_{i,j} M_{ij} f_i f_j \pi_i \geq 0$$

avec $(Mf)_i = \sum_j M_{ij} f_j$.

Le résultat suivant est dû à Peskun [82]. Il permet d'établir l'optimalité de la dynamique de Metropolis dans la famille des différents choix possibles de a (2.4) conduisant à une transition P réversible (à Q fixé), optimalité pour le critère de la plus petite variance $v(f, \pi, P)$. Ces résultats ont été généralisés par Tierney [100] dans le cas d'un espace d'état général.

Proposition 2.6 *Soient P et Q deux transitions π-réversibles telles que $P \succ Q$.*
(1) $(Q-P)$ est un opérateur positif. En particulier :

$$Cov_P(f(X_0), f(X_1)) \leq Cov_Q(f(X_0), f(X_1))$$

(2) Pour tout $f \in \Omega$, $v(f, \pi, P) \leq v(f, \pi, Q)$.
(3) En particulier, $\lambda_2(P) \leq \lambda_2(Q)$.

Preuve :
(1) Posons, pour δ_{ij} la fonction de Dirac, $h_{ij} = \pi_i(\delta_{ij} + p_{ij} - q_{ij})$. $h \geq 0$ et

$$\begin{cases} \sum_j h_{ij} = \pi_i \text{ (P et Q sont des transitions)} \\ \sum_i h_{ij} = \pi_j \text{ (P et Q sont π-réversibles)} \end{cases}$$

En particulier, $\sum_{ij} h_{ij} = 1$. On a la suite d'égalités :

$$\begin{aligned} \langle (Q-P)f, f\rangle_\pi &= \sum_{i,j}(q_{ij} - p_{ij}) f_i f_j \pi_i = \sum_{i,j}[\pi_i \delta_{ij} - h_{ij}] f_i f_j \\ &= \sum_i f_i^2 \pi_i - \sum_{i,j} f_i f_j h_i \\ &= \frac{1}{2}\{\sum_{i,j} f_i^2 h_{ij} + \sum_{i,j} f_j^2 h_{ij} - 2\sum_{ij} f_i f_j h_{ij}\} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i,j}(f_i - f_j)^2 h_{ij} \geq 0 \end{aligned}$$

La relation entre les covariances est une conséquence directe de cette positivité en prenant f centrée.
(2) cf. [82], [58].
(3) D'après (2) et (2.5), et choisissant $f = e_2(P)$,

$$v(f, \pi, P) = \frac{1+\lambda_2(P)}{1-\lambda_2(P)} \leq \sum_{k=2}^{r} \frac{1+\lambda_k(Q)}{1-\lambda_k(Q)} \langle e_2(P), e_k(Q)\rangle^2 \leq \frac{1+\lambda_2(Q)}{1-\lambda_2(Q)}$$

puisque $\lambda_2(Q) \geq \lambda_k(Q)$ pour $k \geq 2$ et $\|e_2(P)\|_\pi^2 = 1$. □

Conséquences.
(1) Optimalité de la dynamique de Metropolis.
Fixons la transition de proposition Q. Les choix de la probabilité d'acceptation a rendant la transition de M.H. P réversible sont ceux pour lesquels

$$a(x,y) = a(y,x) r(x,y) \text{ où } r(x,y) = \frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)}$$

la dynamique de Metropolis correspondant au choix $a_M(x,y) = \min\{1, r(x,y)\}$. Donc,

$$\begin{cases} \text{si } r(x,y) < 1, a_M(x,y) = r(x,y) \geq a(x,y) \\ \text{si } r(x,y) \geq 1, a_M(x,y) = 1 \geq a(x,y) \end{cases}$$

Si $x \neq y$,

$$P_M(x,y) = Q(x,y) a_M(x,y) \geq P_{MH}(x,y) = Q(x,y) a(x,y)$$

Pour le critère de la variance $v(f, \pi, P)$, la dynamique P_M de Metropolis est optimale.
(2) Amélioration de l'échantillonneur de Gibbs : Gibbs Métropolisé [70].

Dans l'échantillonneur de *Gibbs à balayage aléatoire*, imposons le changement (si le site i est choisi pour la relaxation) $x = (x_i, x^i) \to y = (y_i, x^i)$, pour la loi $\pi_i(. \mid x^i)$ avec $y_i \neq x_i$. La probabilité de transition est

$$P_1(x,y) = \nu_i \frac{\pi_i(y_i \mid x^i)}{1 - \pi_i(x_i \mid x^i)}$$

Pour l'échantillonneur de *Gibbs Métropolisé* et les mêmes propositions de changement $x \mapsto y$

$$q(x,y) = \frac{\pi_i(y_i \mid x^i)}{1 - \pi_i(x_i \mid x^i)}$$

(si $F = \{a, b\}$ est à deux états, on change systématiquement x_i en l'autre valeur). On acceptera y avec la probabilité

$$a_M(x,y) = \min\{1, r(x,y)\} = \min\{1, \frac{1 - \pi_i(x_i \mid x^i)}{1 - \pi_i(y_i \mid x^i)}\}$$

Pour un balayage aléatoire et pour $x \neq y$, la transition est

$$P_2(x,y) = \nu_i \min\{\frac{\pi_i(y_i \mid x^i)}{1 - \pi_i(x_i \mid x^i)}, \frac{\pi_i(y_i \mid x^i)}{1 - \pi_i(y_i \mid x^i)}\} \geq \nu_i \pi_i(y_i \mid x^i) = P_1(x,y)$$

P_2 domine P_1 : l'échantillonneur de Gibbs Métropolisé est préférable à l'échantillonneur de Gibbs habituel.

Comparaison des algorithmes de Gibbs et de Metropolis.
Lorsque E est un espace produit, on peut définir simultanément l'échantillonneur de Gibbs (G) et l'algorithme de Metropolis (M). Plus généralement Frigessi et al [33] étudient la famille des algorithmes π-réversibles relaxant les configurations site par site, et ils en comparent les valeurs propres sous dominantes ρ_2. Pour un balayage aléatoire, les auteurs établissent que $\rho_2 = \lambda_2$ pour les deux algorithmes. Ils montrent que si la relaxation de Metropolis est itérée deux fois (ou un nombre *pair* de fois k) en chaque site (algorithmes (Mk)), (G) est préférable à (Mk). La description complète de ces algorithmes de relaxation site par site pour le modèle d'Ising est proposée en exercice.

2.3.6 Algorithme de M.H. pour un espace d'état général [98]

Soit un E un espace d'état général, λ une mesure de référence sur E. Typiquement, $E = \mathbb{R}^d$ et λ est la mesure de Lebesgue. On étudiera aussi le cas d'espaces du type $E = \oplus_{d=1,N} \mathbb{R}^d$ dans le contexte de la simulation des processus ponctuels de Gibbs, N correspondant à un majorant du nombre de points de la réalisation du processus. Soit π la loi à simuler : on suppose que π admet une densité par rapport à λ, encore notée π et que $\pi(x) > 0$ pour toute configuration x.

Considérons alors Q une transition de proposition à densité q, $Q(x, dy) = q(x,y)\lambda(dy)$. Pour les choix y possibles (c.a.d. tels que $q(x,y) > 0$), le ratio de M.H. est

$$r(x,y) = \frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)}$$

Par exemple, la dynamique de Metropolis est associée à la probabilité $a(x,y) = \min\{1, r(x,y)\}$. De façon plus générale, pour une probabilité a assurant la condition de réversibilité (2.4) et en posant $p(x,y) = q(x,y)a(x,y)$ si $x \neq y$, 0 sinon, la transition de M.H. est

$$P(x,dy) = p(x,y)\lambda(dy) + [1 - \int p(x,z)\lambda(dz)]\delta_x(dy)$$

π est invariante pour P. Il faut donc s'assurer de la π-irréductibilité et de l'apériodicité de P pour avoir la convergence

$$\forall x \in E, \; \|P^n(x,.) - \pi(.)\|_{VT} \to 0$$

Le fait que la convergence ait lieu pour tout x tient au fait qu'une transition de M.H. est Harris récurrente (cf. Corollaire 2 de [98]).

Si Q est π-irréductible, P l'est aussi. Une condition suffisante d'apériodicité est

$$\lambda\{x : 1 - \int p(x,z)\lambda(dz) > 0\} > 0$$

C'est à dire, sur un ensemble de λ-mesure > 0, on ne change pas la configuration avec une probabilité > 0.

Exemple 2.12 *Simulation d'un Processus Ponctuel de Gibbs sur* $S = [0,1]^2$

Nous présenterons au chapitre 4 les processus markoviens d'objets. Lorsque les objets sont réduits à un point de $\mathbb{R}^d$, on parlera de processus ponctuels. Nous présentons ici ces processus ponctuels ainsi que leur simulation.

Un processus ponctuel (noté par la suite P.P.) sur $S = [0,1]^2$ est une variable aléatoire qui prend ses états x dans l'espace exponentiel des configurations $E = \cup_{n \geq 0} S^n$. Si $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$, il y a $n = n(x)$ points de S dans la réalisation du P.P., l'ordre d'énumération des points étant gardé (il y aura donc chaque fois $n!$ réalisations équivalentes). Pour une présentation générale des modèles de P.P., on pourra consulter ([14], [94]).

Le P.P. (la mesure) de référence est le P.P. de Poisson (P.P.P.). Le P.P.P. d'intensité 1 sur S est caractérisé par :

(i) la probabilité qu'il y ait n points dans la réalisation est $(n! \times e)^{-1}$.

(ii) s'il y a n points, ceux-ci sont répartis au hasard uniforme sur S.

Ainsi, la densité du P.P.P. est

$$p(x) = \frac{1}{e} \sum_{n \geq 0} \frac{\mathbf{1}(n(x) = n)}{n!} \, dx_1 \, dx_2 \cdots dx_n$$

Une façon classique de définir d'autres P.P. est de définir leur densité par rapport au P.P.P.. Soit $U : E \to R$ une fonction d'énergie invariante par permutation des coordonnées de x ($U(x) = U(\sigma(x))$ pour toute permutation σ des coordonnées de x), vérifiant la condition d'admissibilité,

$$Z = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \int_{x \in S^n} \exp U(x) dx < \infty$$

Alors la densité $f(x) = Z^{-1} \exp U(x)$ définit un P.P. sur S. Par exemple, $U(x) \equiv 0$ redonne le P.P.P. de paramètre 1, $U(x) \equiv a$ celle du P.P.P. d'intensité e^a. Présentons quelques modèles classiques.

Exemple : *Modèle uniforme à noyau dur* (Hardcore model)

Soit $r > 0$ un rayon fixé. Un processus à noyau dur est un P.P.P. conditionné au fait que deux points quelconques de la réalisation sont toujours à une distance $\geq r$. La densité d'un tel modèle est, si $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$:

$$f(x) = c\mathbf{1}(\forall i \neq j, \|x_i - x_j\| \geq r)$$

Par exemple en écologie, ce conditionnement traduit l'existence de zones d'influence des plantes situées aux sites x_i. En physique, on parle encore de modèle de sphères non-pénétrables : il existe un rayon d'encombrement irréductible.

Exemple : *Modèle de Strauss*
Pour une réalisation à $n = n(x)$ points et pour deux constantes réelles a et b, le modèle de Strauss (Strauss, [95] ; [87]) est un modèle d'énergie

$$U(x) = an(x) + bs(x)$$

où $s(x) = \sum_{i \neq j} \mathbf{1}(\|x_i - x_j\| < r)$, pour une valeur donnée r. Il s'agit d'un modèle de Gibbs de potentiels de singletons $\Phi_{\{i\}}(x) = a$, et de potentiels de paires $\Phi_{\{i,j\}}(x) = b\mathbf{1}(\|x_i - x_j\| < r)$. a est un paramètre d'intensité, et b un paramètre d'interaction. Sous forme exponentielle, la densité est

$$f(x) = Z^{-1}\beta^{n(x)}\gamma^{s(x)}, \text{ avec } a = \log\beta \text{ et } b = \log\gamma$$

Si on impose $n(x) \leq N < \infty$, U est admissible. Sans borner $n(x)$, U est admissible si et seulement si $b \leq 0$ ($\gamma \leq 1$) ([63]). Pour $\gamma = 0$, on retrouve le modèle à noyau dur, $\gamma = 1$ est le P.P.P., $\gamma > 1$ (et n fixé) favorise les configurations d'agrégats, alors que $\gamma < 1$ favorise des configurations plus régulières.

Exemple : *Modèles d'interaction d'aires* (cf. Chapitre 4)
Ces modèles, d'une utilisation plus souple que le modèle de Strauss, ont été introduits par Baddeley et van Lieshout [6]. Soit $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ une réalisation. Plaçons des disques de rayons r centrés en x_i, $i = 1, n$. Notons $A(x)$ l'aire de la réunion de ces disques. Les modèles à interaction d'aires ont pour densité

$$f(x) = Z^{-1}\beta^{n(x)}\gamma^{A(x)}$$

Ces modèles sont admissibles sans limitation sur $\gamma > 0$: β règle l'intensité et γ discrimine entre les situations plus régulières ($\gamma < 1$) et celles avec formation d'agrégats ($\gamma > 1$).

Ces différents modèles de P.P. gibbssiens se prêtent bien à la simulation par dynamique de Metropolis ([78], [48], [34]). On examinera séparément la situation où $n(x) = n$ est fixé ou non.

(1) Dynamique de Metropolis : le cas $n(x) = n$ fixé.
$f(x)$ est concentrée sur $E = S^n$. Soit $E^+ = \{x \in E, f(x) > 0\}$ le support de f.

`Simulation d'un Processus Ponctuel`

(i) `Proposition de changement : soit` $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \in E^+$
- `Choisir` $\eta = x_i \in x$ `avec la probabilité uniforme` $\frac{1}{n}$.
- •• `Remplacer` η `par` ξ `choisi uniformément sur` $S^+(x, \eta)$

`où` $S^+(x, \eta)$ `est tel que` $f((x\backslash\eta) \cup \xi) > 0$ `où` $(x\backslash\eta) \cup \xi = (x\backslash\{\eta\}) \cup \{\xi\}$. `La proposition de changement est`

$$x \mapsto y = (x\backslash\eta) \cup \xi$$

`Si` $E = E^+$, `la densité de transition est, pour` $x \mapsto y$, $q(x, y) = \frac{1}{n|S|}$, `0 sinon.`

`(ii) Accepter` y `avec la probabilité` $a(x, y) = \min\{1, \frac{f(y)}{f(x)}\}$. `Sinon, rester en` x.

La transition de Metropolis est ergodique dès que q est irréductible et apériodique. Ce qui est assuré si $f > 0$ partout. En n pas, on peut passer de tout x à tout y et puisque $a > 0$, la chaîne est apériodique. Il peut exister des situations où q n'est pas irréductible (cf. exercice).

(2) *Dynamique de Metropolis : le cas non-contraint.*
Pour simplifier la présentation, on supposera que $E = E^+$. E est de dimension variable. On dira que la densité f du P.P. est *héréditaire* si pour $x \in E$ et $\xi \in S$, : $f(x \cup \xi\ ) > 0 \Rightarrow f(x) > 0$.
(i) Proposition de changement : soit $x \in E$

• Avec une probabilité $p(x)$, on ajoute un point ξ choisi sur S avec une densité $b(x,.)$: $y = x \cup \xi$.

• Avec la probabilité $1 - p(x)$, on retire l'un des points η de x avec la probabilité $d(x\backslash\eta, \eta)$, $\eta \in X$: $y = x\backslash\eta$.

Cela laisse un très grand choix pour la transition de proposition.

(ii) La probabilité d'acceptation de y est $a(x,y) = \min\{1, r(x,y)\}$ où

$$\begin{cases} r(x, x\cup\xi) = \frac{f(x\cup\xi)}{f(x)}\frac{1-p(x)}{p(x)}\frac{d(x,\xi)}{b(x,\xi)} \text{ si } y = x\cup\xi \\ r(x,y) = \frac{1}{r(y,x\backslash\eta)} \text{ si } y = x\backslash\eta \text{ avec } \eta \in x \end{cases}$$

Par exemple, si $p(x) = 1 - p(x) \equiv \frac{1}{2}$, si $b(x,\xi) \equiv \frac{1}{|S|}$ et $d(x,\xi) = \frac{1}{n}$ si $n(x) = n$, on a

$$\begin{cases} r(x, x\cup\xi) = \frac{f(x\cup\xi)}{f(x)}\frac{|S|}{n} \text{ si } y = x\cup\xi \\ r(x,y) = \frac{f(x)}{f(x\backslash\eta)}\frac{n}{|S|} \text{ si } y = x\backslash\eta, \eta \in x \end{cases}$$

L'irréductibilité de q est assurée : pour x et y deux états de E, il existe un chemin de longueur $n(x) + n(y)$ joignant x à y ; il suffit en effet de passer de x à la configuration vide $\emptyset$, et effaçant les $n(x)$ points de x point après point, puis, depuis la configuration vide, de faire apparaître progressivement les $n(y)$ points de y.

2.4 Exercices

Exercice 2.1 *Loi jointe et lois conditionnelles*

(1) *Une loi jointe positive est caractérisée par* ***ses*** *lois conditionnelles.*
Soit $\pi > 0$ une loi sur $E = F_1 \times F_2 \times \cdots \times F_n$, chaque F_i étant fini. Soit ω_i un état de référence pour chaque F_i, $\omega = (\omega_i)$. Vérifier que la loi jointe peut être reconstruite à partir de ses lois conditionnelles sur la base de l'identité

$$\pi(x) = \pi(\omega) \prod_{i=1}^{n} \frac{\pi_i(x_i \mid \omega_1, \cdots, \omega_{i-1}, x_{i+1}, x_n)}{\pi_i(\omega_i \mid \omega_1, \cdots, \omega_{i-1}, x_{i+1}, x_n)}$$

(2) *En général et sans contraintes, une famille de n lois conditionnelles ne se recolle pas en une loi jointe.*

Soit $F_1 = \{1, 2, \cdots, m_1\}$ et $F_2 = \{1, 2, \cdots, m_2\}$, m_1 et $m_2 > 2$. On se donne des familles de lois $(X \mid Y = y)$ et $(Y \mid X = x)$ respectivement sur F_1 et sur F_2, pour $y \in F_2$ et $x \in F_1$. Evaluer la dimension paramétrique de ces deux familles s'il n'y a pas de contraintes. Quelle est la dimension d'un modèle joint (X,Y) général sur $E \times F$? Conclusions.

Exercice 2.2 *Echantillonneur de Gibbs pour un processus bivarié à composantes binaires*

Soit $S = \{1, 2, \cdots, n\}^2$ le tore bidimensionnel, muni de la relation aux 4-p.p.v., relation prolongée par périodicité. On considère sur S le processus bivarié $Z_i = (X_i, Y_i) \in \{0,1\}^2, i \in S$ de loi de Gibbs

$$\begin{aligned} \pi(z) &= Z^{-1}\exp[\sum_{i\in S}\Phi_1(z_i) + \sum_{\langle i,j\rangle}\Phi_2(z_i,z_j)] \text{ avec} \\ \Phi_1(z_i) &= \alpha x_i + \beta y_i + \gamma x_i y_i \text{ et } \Phi_2(z_i,z_j) = \delta x_i x_j + \eta y_i y_j \text{ pour } \langle i,j\rangle \end{aligned}$$

(1) Déterminer les lois conditionnelles suivantes : $\pi_i(z_i \mid z^i)$, $\pi_i^1(x_i \mid x^i, y)$ et $\pi_i^2(y_i \mid x, y^i)$.

(2) Construire un échantillonneur de Gibbs utilisant les deux familles π_i^1 et π_i^2, $i \in S$. Etablir l'ergodicité de cet échantillonneur.

Exercice 2.3 *Simulation d'un processus gaussien bivarié*

Dans le même contexte que l'exercice précédent, on veut simuler la loi gaussienne bivariée sur S de densité

$$\pi(z) = Z^{-1} \exp -\{\sum_{i\in S}(x_i^2 + y_i^2) + \beta \sum_{\langle i,j\rangle}(x_i y_j + x_j y_i)\},\ |\beta| < \frac{1}{2}$$

Déterminer les lois conditionnelles $\pi_i(z_i \mid z^i)$, $\pi_i^1(x_i \mid x^i, y)$ et $\pi_i^2(y_i \mid x, y^i)$. Proposer deux procédures de simulation.

Exercice 2.4 *Engendrer une permutation aléatoire [20]*

On veut engendrer une permutation aléatoire de loi π uniforme sur l'ensemble $E = \Sigma_n$ des permutations de $\{1, 2, \cdots, n\}$. Montrer que la transition P sur E qui permute deux indices i et j choisis au hasard est π-réversible. En déduire une façon de tirer au hasard une permutation.

Exercice 2.5 *Chaîne de Markov de champ de Markov ou dynamique spatio-temporelle*

On considère $S = \{1, 2, \ldots, n\}$, $F = \{0, 1\}$ et la chaîne homogène $X = (X(t), t \geq 0)$ sur $E = F^S$ de transition

$$\begin{aligned} P(x(t-1), x(t)) &= Z(x(t-1))^{-1} \exp \sum_{i\in S} x_i(t)[\alpha + \beta v_i(t) + \gamma w_i(t-1)] \text{ avec} \\ v_i(t) &= x_{i-1}(t) + x_{i+1}(t) \text{ et } w_i(t-1) = x_{i-1}(t-1) + x_i(t-1) + x_{i+1}(t-1) \end{aligned}$$

avec la convention $z_i = 0$ si $i \notin S$.

(1) Comment simuler une telle dynamique par échantillonneur de Gibbs ? Ecrire les lois conditionnelles qui interviennent.

(2) Réaliser cette dynamique pour $\alpha = -\beta = 2$ et $n = 100$. Etudier l'évolution des taches $N_t = \{i \in S : X_i(t) = 1\}$ en fonction du paramètre γ.

(3) Proposer un modèle analogue sur $S = \{1, 2, \ldots, n\}^2$ et le simuler.

Exercice 2.6 *La composition de transitions π-réversibles n'est pas automatiquement π-réversible*

(1) Soient P et Q deux transitions π-réversibles sur E fini. Démontrer que $\forall x, y$

$$\pi(x)PQ(x, y) = \pi(y)QP(y, x)$$

(2) Déterminer la forme explicite de l'échantillonneur de Gibbs $P = P_1 P_2$ dans le cas $F = \{0, 1\}$ et $S = \{1, 2\}$ (deux balayages), pour une loi π générale à trois paramètres. En déduire qu'il existe π telle que $P_1 P_2 \neq P_2\ P_1$, et donc que l'échantillonneur de Gibbs n'est pas π-réversible.

Exercice 2.7 *Echantillonnages asynchrone et synchrone d'un modèle d'Ising*

Réaliser les échantillonneurs de Gibbs asynchrone (ou séquentiel) et synchrone pour le modèle d'Ising $\pi(x) = Z^{-1} \exp \beta \sum_{\langle i,j\rangle} x_i x_j$, $\beta = 0.2, 0.5, 1$, sur le tore bidimenssionnel $S = \{1, 2, \cdots, N\}^2$, $N = 64$, muni du graphe de voisinage aux 4-p.p.v.. Comparer les deux types de réalisations. Calculer la corrélation empirique à distance 1 pour l'une et l'autre des simulations et vérifier que pour la simulation synchrone, celle ci est nulle.

Exercice 2.8 *Simulation d'un modèle d'Ising par la dynamique d'échange de spins*

Dans le même contexte que l'exercice précédent, réaliser la simulation du modèle d'Ising par échange de spins, la configuration initiale étant équilibrée entre les deux spins $+1$ et -1. Calculer la corrélation empirique à distance 1. Comparer cette simulation à celle obtenue par échantillonneur de Gibbs séquentiel.

Exercice 2.9 *Echantillonneur de Gibbs gaussien : une approche directe [112]*

Reprenons les notations du paragraphe relatif à la simulation d'un vecteur gaussien $\pi \sim \mathcal{N}_n(0, \Sigma)$, de matrice de covariance inverse $Q = \Sigma^{-1} = (q_{ij})$. Considérons la situation de balayages périodiques $1 \mapsto 2 \mapsto \cdots \mapsto n$ de S. Si $X(k)$ est l'état au temps k, et $X(k+1)$ celui au temps $k+1$ après relaxation au site $i = i(k)$, on a

$$X_i(k+1) \sim N(-\frac{1}{q_{ii}} \sum_{j \neq i} q_{ij} X_j(k), \frac{1}{q_{ii}})$$

Si on se donne un état initial $X(0) = x(0) \in \mathbb{R}^n$, $X(k)$ est un vecteur gaussien pour tout k. Il suffit donc de montrer que la moyenne $M(k)$ et la variance $\Sigma(k)$ de $X(k)$ tendent respectivement vers 0 et Σ lorsque $k \to \infty$.

Soient $A_i = I - B_i$ où B_i est la matrice $n \times n$ avec toutes ses lignes nulles sauf la ième ligne valant $q_{ii}^{-1}(q_{i1}, q_{i2}, \cdots, q_{in})$. Soit S_i la matrice $n \times n$ à coefficients tous nuls sauf le terme (i, i) égal à q_{ii}^{-1}.

(1) Vérifier que $(X_i(k+1) \mid X(k)) \sim \mathcal{N}(A_i X(k), S_i)$. En déduire que :

$$M(k+1) = A_{i(k)} M(k) \text{ et } \Sigma(k+1) = S_{i(k)} + A_{i(k)} \Sigma(k)^t A_{i(k)}$$

(2) La loi π étant invariante pour un pas de l'échantillonnage, en déduire que

$$\Sigma(k+1) - \Sigma = A_{i(k)}(\Sigma(k) - \Sigma)^t A_{i(k)}$$

Ainsi, l'ergodicité de l'échantillonneur de Gibbs sera assurée par la convergence

$$A(k) = A_{i(k)} A_{i(k-1)} \cdots A_{i(0)} \to 0 \text{ pour } k \to \infty$$

(3) Soit $\langle x, y \rangle_Q$ la norme induite par Q, $\|.\|_Q$ la norme matricielle correspondante. Montrez que pour ce produit scalaire, A_i et B_i sont des projecteurs orthogonaux. Démontrer que $\|A(n)\|_Q \leq \varrho < 1$. En déduire l'ergodicité de l'échantillonneur de Gibbs.

Remarque : ce résultat s'étend à des balayages non nécessairement périodiques, à condition que chaque balayage recouvre S et que le nombre de pas d'un balayage soit borné [112].

Exercice 2.10 *Echantillonnage synchrone, loi virtuelle μ associée à π*

(1) La loi virtuelle μ diffère en général de π. Soit $F = \{0, 1\}$ et $S = \{1, 2\}$ et π définie sur E par : $\pi(0,0) = \pi(1,1) = 0.1$ et $\pi(0,1) = \pi(1,0) = 0.4$. Expliciter le noyau de Gibbs asynchrone P et le noyau de Gibbs synchrone Q. Vérifier que $\pi Q \neq \pi$.

(2) Explicitation de la loi virtuelle pour le modèle d'Ising aux p.p.v..
Dans le contexte suivant, on va pouvoir expliciter la loi virtuelle μ. π est un modèle binaire à états $\{0, 1\}$ sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}$ munie d'un graphe de voisinage $\langle ., . \rangle$, de densité

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp \beta \sum_{\langle i,j \rangle} x_i x_j$$

(2.1) Vérifier que la loi conditionnelle en i est

$$\pi_i(x_i \mid x^i) = \frac{e^{x_i v_i(x)}}{1 + e^{v_i(x)}} \text{ où } v_i(x) = \beta \sum_{j : \langle i,j \rangle} x_j$$

(2.2) Déterminer le noyau d'échantillonnage synchrone Q. Vérifier que la loi μ

$$\mu(x) = \Gamma^{-1} \prod_{i=1}^{n} [1 + e^{v_i(x)}]$$

est invariante pour Q (Q est même μ-réversible).
(2.3) Vérifier que la loi μ est markovienne, avec pour ensemble de cliques

$$\mathcal{C} = \{\partial i = \{j \in S : \langle i, j \rangle\}, i \in S\}$$

Exemple : soit $S = \{1, 2, \cdots, N\}^2$ le tore bidimensionnel, N pair, et $\langle i, j \rangle$ la relation aux 4-p.p.v. prolongée par périodicité. Comparer les graphes de Markov de π et de μ. Vérifier par exemple que si μ^+ (resp. μ^-) est la loi marginale de μ sur $S^+ = \{i = (i_1, i_2) \in S,\ i_1 + i_2 \text{ pair}\}$ (resp. $S^- = S \backslash S^+$), alors $\mu = \mu^+ \otimes \mu^-$.

Exercice 2.11 *Echantillonneur de Gibbs métropolisé*

Montrer que la transition P de l'algorithme de Gibbs Métropolisé est π réversible et irréductible. Vérifier que $P^2(x, x) > 0$ et caractériser les configurations x t.q. $P(x, x) = 0$. En déduire que P est apériodique dès que π n'est pas la loi uniforme.

Exercice 2.12 *Dynamique générale de relaxation site par site [33]*

Soit $F = \{-1, +1\}$, $S = \{1, 2, \cdots, n\}^2$ le tore bidimensionnel, $\langle i, j \rangle$ la relation aux 4-p.p.v., avec conditions de bords périodiques et

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp \beta \sum_{\langle i,j \rangle} x_i x_j$$

On va examiner les dynamiques issues de transitions P_s où seule une relaxation est effectuée en s : $P_s(x, y) = 0$ si $x^s \neq y^s$. Pour $s \in S$ on note $m \triangleq m(s)$ le nombre de spins positifs parmi les quatre voisins de s. On impose :

(i) d'une part, que P_s ne dépend que de m

$$P_s(x, y) = P_s(x_s \to y_s \mid m) \text{ pour } x_s = y_s$$

(ii) d'autre part, la symétrie suivante vis-à-vis de la transformation $x \mapsto -x$

$$P_s(-x_s \to -y_s \mid 4 - m) = P_s(x_s \to y_s \mid m)$$

(1) Quelles sont les valeurs possibles de m. Montrer que P_s est entièrement déterminée par les cinq paramètres suivants :

$$\begin{aligned} a_4 &= P_s(-1 \to +1 \mid m = 4) \text{ et } a_3 = P_s(+1 \to -1 \mid m = 4) \\ a_2 &= P_s(-1 \to +1 \mid m = 3) \text{ et } a_1 = P_s(+1 \to -1 \mid m = 3) \\ a_0 &= P_s(+1 \to -1 \mid m = 2) \end{aligned}$$

(2) Montrer que P_s est π-réversible si et seulement si

$$a_3 = a_4 \exp(-8\beta) \text{ et } a_1 = a_2 \exp(-4\beta)$$

On supposera ces deux conditions vérifiées et on note $a = (a_0, a_2, a_4) \in]0, 1]^3$ les trois paramètres définissant la dynamique.

(3) Indiquer les valeurs de $a = (a_0, a_2, a_4)$ pour les algorithmes suivants : (i) L'échantillonneur de Gibbs ; (ii) l'échantillonneur de Metropolis.

(4) Montrer que la dynamique associée à une telle transition P_s pour un choix aléatoire uniforme de s est ergodique.

Exercice 2.13 *Diverses transitions de proposition de changement pour la simulation d'une* $\mathcal{N}(0, 1)$ *[43]*

Le but de cet exercice est de mettre en évidence l'influence prépondérante du choix de la transition de proposition de changement $q(x \to y)$ dans la dynamique de Metropolis ainsi que de la valeur initiale x_0. On veut simuler une loi $\pi \sim \mathcal{N}(0,1)$. Pour cela, on choisira comme propositions de changement :

$$\begin{array}{l} \text{(i) } q(x,.) \sim \mathcal{N}(x, 0.5) \text{ et } x_0 = -10 \\ \text{(ii) } q(x,.) \sim \mathcal{N}(x, 0.1) \text{ et } x_0 = 0 \\ \text{(iii) } q(x,.) \sim \mathcal{N}(x, 10) \text{ et } x_0 = 0 \end{array}$$

La probabilité d'acceptation de y est celle de la dynamique de Metropolis :

$$a(x,y) = \min\{1, \frac{\pi(y)q(x,y)}{\pi(x)q(y,x)}\}$$

Pour chacun de ces choix, représenter graphiquement la trajectoire $\{x_t,\ 0 \le t \le 500\}$. Evaluer la probabilité de non-changement dans l'algorithme de Métropolis. Tester la gaussianité des réalisations et la rapidité à entrer dans le régime stationnaire $\mathcal{N}(0,1)$.

Exercice 2.14 *Comparaison des variances de moyennes pour deux dynamiques de M.H.*

On a vu que pour deux dynamiques P et Q de M.H. t.q. $P \succ Q$,

$$Var_P(\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T} f(X_t)) \le Var_Q(\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T} f(X_t))$$

pour $T = 1$ et lorsque $T \to \infty$. Comme le montre l'exemple suivant [100], ceci n'est pas vrai en général pour d'autres valeurs de T .

Soient les deux transitions symétriques sur l'espace E à 4 états :

$$P = \begin{pmatrix} 0 & .2 & .8 & 0 \\ .2 & 0 & 0 & .8 \\ .8 & 0 & .2 & 0 \\ 0 & .8 & 0 & .2 \end{pmatrix} \text{ et } Q = \begin{pmatrix} .1 & .1 & .8 & 0 \\ .1 & .1 & 0 & .8 \\ .8 & 0 & .2 & 0 \\ 0 & .8 & 0 & .2 \end{pmatrix}$$

P et Q sont π-réversibles pour $\pi = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ et $P \succ Q$. Pour $f = {}^t(1, -1, -3, 3)$, vérifier que

$$Var_R(f(X_0) + f(X_1) + f(X_2)) = \begin{cases} 15.4 \text{ pour } R = P \\ 14.8 \text{ pour } R = Q \end{cases}$$

Exercice 2.15 *Processus Ponctuel : un cas où Q n'est pas irréductible*

Sur $[0,1]^2$, et pour $n(x) \equiv 2$, déterminer pour un processus à noyau dur la valeur maximale r_0 de r . Montrer que pour $\varepsilon > 0$ petit et $r = r_0 - \varepsilon$, la transition de proposition q proposée pour la simulation d'un P.P. n'est pas irréductible (proposer deux configurations à deux points qui ne peuvent communiquer entre elles).

Exercice 2.16 *Dynamique de Metropolis pour le P.P. de Strauss*

Mettre en oeuvre la simulation par dynamique de Métropolis d'un processus de Strauss à $n(x) = n = 50$ fixé (seul le paramètre b (ou γ) est influent) et pour $r = 0.05$. Examiner les configurations de simulations pour $\gamma = 0.01$, 0.5, 1, 2, 10.

Chapitre 3

Chaîne inhomogène et recuit simulé

Une *chaîne de Markov inhomogène* sur un espace d'état fini E est un processus de Markov dont la probabilité de transition à l'instant k dépend de k

$$P(X_{k+1} = j \mid X_k = i) = P_k(i, j)$$

Une chaîne inhomogène est donc caractérisée par sa loi initiale ν et la suite de ses transitions $(P_k)_{k \geq 0}$. La loi de $(X_0, X_1, \cdots, X_n)$ est

$$P(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \cdots, X_n = x_n) = \nu(x_0) \prod_{k=0}^{n-1} P_k(x_k, x_{k+1})$$

la loi de X_n étant donnée par le produit matriciel $\nu P_0 P_1 \cdots P_{n-1}$.

Utilisant la notion de *coefficient de contraction* d'une transition P (Dobrushin [26] ; [92], [47], [106]), nous commencerons par établir des critères d'ergodicité pour une chaîne de Markov inhomogène.

Ensuite, nous présenterons la méthode et les résultats *du Recuit Simulé*. On montrera qu'à un problème d'optimisation général :

$$\text{Optimiser } U : E \longrightarrow \mathbb{R}$$

peut être associé canoniquement, pour un schéma de température (T_k) convergeant vers 0 et une dynamique donnée, une chaîne de Markov inhomogène se concentrant sur les états réalisant le maximun de U. La recherche du maximun de U est alors liée de l'étude de l'ergodicité de cette chaîne inhomogène.

3.1 Coefficient de contraction de Dobrushin

3.1.1 Préliminaires

Commençons par établir quelques propriétés préliminaires. Soit μ une mesure sur E. La *norme en variation* de μ est définie par

$$\|\mu\| \triangleq \sum_{x \in E} |\mu(x)| = \|\mu\|_1$$

On a la propriété,

Proposition 3.1 *Soient μ et ν deux probabilités sur E. Alors :*
(1) $\|\mu-\nu\| = 2\sum_x(\mu(x)-\nu(x))^+ = 2\sup_{A\subset E}(\mu(A)-\nu(A)) \le 2$.
(2) $\|\mu-\nu\| = 2(1-\sum_x \inf\{\mu(x),\nu(x)\})$
(3) $\|\mu-\nu\| = \sup_{h:|h|\le 1}|\sum_x h(x)(\mu(x)-\nu(x))|$

En particulier, deux probabilités sont étrangères si et seulement si $\|\mu-\nu\|=2$.

Preuve :

(1) Soit $A=\{x:\mu(x)\ge\nu(x)\}$, $B=E\backslash A$. μ et ν étant de même masse,

$$\sum_{x\in A}(\mu(x)-\nu(x)) = -\sum_{x\in B}(\mu(x)-\nu(x)) = \sum_{x\in E}(\mu(x)-\nu(x))^+ = \frac{1}{2}\|\mu-\nu\|$$

(2)

$$\frac{1}{2}\|\mu-\nu\| = \sum_{x\in A}(\mu(x)-\nu(x)) = \sum_{x\in E}\mu(x) - \sum_{x\in B}\mu(x) - \sum_{x\in A}\nu(x) = 1-\sum_{x\in E}\inf\{\mu(x),\nu(x)\}$$

(3)

$$\|\mu-\nu\| = \sum_{x\in E}|\mu(x)-\nu(x)| \ge \max_{|h|\le 1}\left|\sum_{x\in E}h(x)(\mu(x)-\nu(x))\right|$$

Pour l'égalité, choisir $h(x)=$signe$(\mu(x)-\nu(x))$. □

L'oscillation d'une fonction $f:E\to\mathbb{R}$ est définie par :

$$\delta(f) = \sup_{x,y\in E}|f(x)-f(y)| = \sup_E f - \inf_E f$$

Soit $\mu(f)=\sum_x f(x)\mu(x)$.

Proposition 3.2 *Soient μ et ν deux probabilités sur E, $f:E\to\mathbb{R}$. Alors,*

$$|\mu(f)-\nu(f)| \le \frac{1}{2}\delta(f)\,\|\mu-\nu\|$$

Preuve : Soit m un réel fixé. μ et ν étant de même masse totale, on a :

$$|\mu(f)-\nu(f)| = |\mu(f-m)-\nu(f-m)| \le \|\mu-\nu\|\times\max_{x\in E}|f(x)-m|$$

Il suffit alors de constater que dans le terme majorant, $\max_{x\in E}|f(x)-m|$ est obtenu pour $m=\frac{1}{2}(\sup_E f+\inf_E f)=\frac{1}{2}\delta(f)$. □

3.1.2 Coefficient de contraction et ergodicités

Coefficient de contraction.

Soit P une probabilité de transition sur E. Le coefficient de contraction de P est défini par

$$c(P) = \frac{1}{2}\max_{x,y\in E}\|P(x,.)-P(y,.)\| \tag{3.1}$$

On a toujours $0\le c(P)\le 1$. $c(P)=1$ si il existe $x,y\in E$ tels que $P(x,.)$ et $P(y,.)$ sont étrangères (c'est à dire à supports disjoints). Enfin $c(P)=0$ signifie que toute les lignes $P(x,.)$ de P sont identiques entre elles, égales à une distribution π : P est la transition indépendante de loi π. La propriété suivante donne deux autres expressions de $c(P)$. Notons $Ph(x)=P(x,.)h=\sum_{z\in E}P(x,z)h(z)$,

Proposition 3.3 *Deux expressions de* $c(P)$.
(1) $c(P) = 1 - \min_{x,y} \sum_z \inf\{P(x,z), P(y,z)\}$.
(2) $c(P) = \frac{1}{2} \max_{x,y} \max_{h:|h|\leq 1} |Ph(x) - Ph(y)|$

Preuve : Pour (1) (resp. (2)) on utilise la description (2) (resp. (3)) de la proposition 3.1 décrivant la norme en variation. □

En particulier, si $\varepsilon(P) = \inf_{x,z} P(x,z)$ et $r = card(E)$, on a la majoration :

$$c(P) \leq 1 - r\varepsilon(P) \tag{3.2}$$

Cette majoration est simple et importante du point de vue théorique. On a par ailleurs les propriétés de contraction suivantes,

Proposition 3.4 *Soient* μ, ν *deux lois sur* E *et* P, Q *deux transitions sur* E.
(1) $\|\nu P - \mu P\| \leq c(P)\ \|\nu - \mu\|$
(2) $c(PQ) \leq c(P)c(Q)$
En conséquence, si P *est ergodique de loi invariante* π, *alors, pour toute loi initiale* ν, $t \mapsto \left\|\nu P^t - \pi\right\|$ *est une fonction décroissante de* t.

Preuve :
(1) $\|\nu P - \mu P\| = \max_{|h|\leq 1} |(\nu P)h - (\mu P)h|$. Mais :

$$(\mu P)h = \sum_z (\mu P)(z)h(z) = \sum_{z,x} \mu(x)P(x,z)h(z) = \sum_x \mu(x) \sum_z P(x,z)h(z) = \mu(Ph)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \|\nu P - \mu P\| &= \max_{|h|\leq 1} |\nu(Ph) - \mu(Ph)| \\ &\leq \|\nu - \mu\| \times \max_{|h|\leq 1}\{\frac{1}{2}\max_{x,y}|Ph(x) - Ph(y)|\} = c(P)\ \|\nu - \mu\| \end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned} c(PQ) &= \frac{1}{2}\max_{x,y}\|PQ(x,.) - PQ(y,.)\| = \frac{1}{2}\max_{x,y}\|P(x,.)Q - P(y,.)Q\| \\ &\leq \frac{1}{2}\max_{x,y}\|P(x,.) - P(y,.)\|\, c(Q) = c(P)c(Q) \qquad \text{(point (1))} \end{aligned}$$

□

Le résultat suivant contrôle l'oscillation de Pf et compare les valeurs propres de P à $c(P)$,

Proposition 3.5 *Oscillation de* Pf *, valeurs propres de* P *et* $c(P)$.
(1) $\delta(Pf) \leq c(P)\delta(f)$
(2) Soit $\lambda \neq 1$ *une valeur propre de* P. *Alors,* $|\lambda| \leq c(P) \leq 1 - r\varepsilon(P)$

Preuve :
(1) Pour deux lois μ et ν, $|\mu(f) - \nu(f)| \leq \frac{1}{2}\delta(f)\ \|\mu - \nu\|$. Choisissant $\mu = P(x,.)$ et $\nu = P(y,.)$, on obtient :

$$|(Pf)(x) - (Pf)(y)| \leq \frac{1}{2}\delta(f)\ \|P(x,.) - P(y,.)\|$$

Il suffit de prendre le maximun en x, y pour obtenir (1).
(2) Soit λ une valeur propre de P, $f \neq 0$ une valeur propre associée, $Pf = \lambda f$. f n'est pas à coordonnées constantes si $\lambda \neq 1$: en effet, si f était à coordonnées constantes, P étant une

matrice de transition, $Pf = f = \lambda f$, soit $\lambda = 1$. Pour cet f, utilisons la majoration donnée en (1) :

$$\max_{x,y} |Pf(x) - Pf(y)| = |\lambda| \max_{x,y} |f(x) - f(y)| \leq c(P)\delta(f)$$

Puisque $\delta(f) \neq 0$, on obtient le résultat annoncé. □

Soit $\mathbb{P}$ une probabilité sur un espace mesurable $(E, \mathcal{E})$, $\mathcal{F}$ et $\mathcal{G}$ deux sous tribus de $\mathcal{E}$. Le coefficient de α-mélange entre $\mathcal{F}$ et $\mathcal{G}$ est défini par ([28]),

$$\alpha(\mathcal{F}, \mathcal{G}) = \sup\{|\mathbb{P}(A \cap B) - \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)|, A \in \mathcal{F}, B \in \mathcal{G}\}$$

La proposition suivante permet de contrôler le mélange et la covariance de la chaîne de transitions (P_n) :

Proposition 3.6 *Estimations du mélange et de la covariance de la chaîne. Soit X une chaîne de loi initiale μ et de transitions (P_n), $f : E \to \mathbb{R}$.*

(1) Pour tout $0 \leq k < m$, et tout μ, on a : $\alpha(X_k, X_m) \leq 2c(P^{k,m})$.

(2) Pour tout $0 \leq k < m$, et tout μ, on a : $|Cov(f(X_k), f(X_m))| \leq 2\delta^2(f)c(P^{k,m})$.

(3) En particulier, si la chaîne est homogène, de transition P, on a :

$$Var[\frac{1}{N}\sum_{t=0}^{N-1} f(X_t)] \leq \frac{\delta^2(f)}{N}\frac{1+c(P)}{1-c(P)}$$

Preuve :

(1) Notons P la transition $P^{k,m}$ et ν la loi de X_k. Soient A et B deux parties de E : $\mathbb{P}(A \cap B) = \sum_{i\in A, j \in B} \nu_i P_{i,j}$, $\mathbb{P}(A) = \sum_{i \in A} \nu_i$ et $\mathbb{P}(B) = \sum_{l \in E, j\in B} \nu_l P_{l,j}$. On obtient donc :

$$\Delta = \mathbb{P}(A \cap B) - \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B) = \sum_{i \in A} \nu_i \{\sum_{j \in B} (P_{i,j} - \sum_{l \in E} \nu_l P_{l,j})\}$$

Ecrivant $P_{i,j} = (\delta_{\{i\}}P)_j$, on obtient facilement la majoration

$$|\Delta| \leq \sum_{i \in A} \nu_i \sum_{j \in B} \left|(\delta_{\{i\}}P - \nu P)_j\right| \leq \sum_{i\in E} \nu_i \sum_{j \in E} \left\|\delta_{\{i\}}P - \nu P\right\| \leq 2c(P)$$

(2) Notons νf et $\nu P f$ les espérances de $f(X_k)$ et de $f(X_m)$. On a :

$$\begin{aligned}
Cov(f(X_k), f(X_m)) &= \sum_{i,j \in E} \nu_i P_{i,j} (f_i - \nu f)(f_j - \nu P f) \\
&= \sum_{i \in E} \nu_i (f_i - \nu f)\{P(i, .)(f - \nu P f \mathbf{1})\} \\
&= \sum_{i \in E} \nu_i (f_i - \nu f)\{P(i, .)(f - \nu P f \mathbf{1}) - P(l, .)(f - \nu P f\mathbf{1})\}, \text{ d'où} \\
|Cov(f(X_k), f(X_m))| &\leq 2 \sum_{i\in E} \nu_i |f_i - \nu f| \, \delta(f) c(P) \leq 2\delta^2(f)c(P)
\end{aligned}$$

(3) Il suffit de développer la variance :

$$\begin{aligned}
Var[\frac{1}{N}\sum_{t=0}^{N-1} f(X_t)] &= \frac{1}{N^2}[\sum_{i=0}^{N-1} Var(f(X_t) + 2 \sum_{0 \leq t < t' \leq N-1} cov(f(X_t, f(X_{t'}))] \\
&\leq \frac{1}{N^2}[N\delta^2(f) + 2\delta^2(f)\sum_{k=1}^{\infty}(N-k)c(P)^k] \leq \frac{\delta^2(f)(1+c(P))}{N(1-c(P))}
\end{aligned}$$

□

Ergodicité faible et ergodicité forte

Notons $P^{m,k} = P_m P_{m+1} \cdots P_{k-1}$ la transition de m à k.
•La chaîne de Markov de transitions $(P_k)_{k \geq 0}$ est dite *faiblement ergodique* si

$$\forall m \geq 0, \forall \nu_1, \nu_2, \lim_{k \to \infty} \left\| \nu_1 P^{m,k} - \nu_2 P^{m,k} \right\| = 0 \tag{3.3}$$

••La chaîne de Markov de transitions $(P_k)_{k \geq 0}$ est dite *fortement ergodique* si

$$\exists \pi_\infty \text{ t.q. : } \forall m \geq 0, \lim_{k \to \infty} (\sup_\nu \left\| \nu P^{m,k} - \pi_\infty \right\|) = 0 \tag{3.4}$$

La propriété d'ergodicité faible traduit que pour tout m il y a *perte de mémoire de la loi de* X_m. La propriété d'ergodicité forte traduit en plus que la loi de la chaîne se stabilise autour d'un loi π_∞ pour k grand.

Ergodicité des chaînes homogènes

On verra au paragraphe suivant que si la chaîne (P_n) admet une suite de lois invariantes (π_n) $(\pi_n P_n = \pi_n)$ vérifiant $\sum_{n>0} \|\pi_n - \pi_{n+1}\| < \infty$, alors l'ergodicité faible entraînera l' ergodicité forte. En particulier, *si la chaîne est homogène* de transition P et si P admet une loi invariante π, les notions de *faible et de forte ergodicité coïncident*. A titre d'illustration, montrons comment l'ergodicité d'une chaîne homogène peut être obtenue à partir du coefficient de contraction. Notons $[x]$ la partie entière d'un réel x, r le cardinal de E, $\varepsilon(P) = \inf_{x,y} P(x,y)$.

Proposition 3.7 *Ergodicité d'une chaîne homogène de transition P.*
(1) $c(P^n)$ est décroissante.
(2) Si P est régulière, c.a.d. s'il existe m t.q. $P^m > 0$, alors

$$c(P^n) \leq \{1 - r\varepsilon(P^m)\}^{[\frac{n}{m}]} \to 0 \text{ si } n \to \infty$$

Ce résultat est une conséquence de la propriété de sous-multiplicativité $c(PQ) \leq c(P)c(Q)$, de l'égalité $P^{n+k} = P^n P^k$ et de la division euclidienne $n = mq + s$, $0 \leq s < m$, de l'entier n par m. Si P est régulière, il existe $\pi = \pi_\infty$ invariante pour P. On a donc,

$$\|\nu P^n - \pi_\infty\| = \|\nu P^n - \pi_\infty P^n\| \leq \|\nu - \pi_\infty\| c(P^n) \leq 2c(P^n) \to 0$$

La chaîne est ergodique.

Ergodicité des chaînes inhomogènes ([26] ;[53] ;[106])

Soit la condition :

$$\forall m, \lim_{k \to \infty} c(P_m P_{m+1} \cdots P_k) = 0 \tag{3.5}$$

Proposition 3.8 ***Critère d'ergodicité faible.*** *Une chaîne non-homogène est faiblement ergodique si et seulement si elle vérifie (3.5).*

Preuve :
•($\Longleftarrow$) Pour tout m et pour toute loi μ, ν, $\left\|\mu P^{m,k} - \nu P^{m,k}\right\| \leq \|\mu - \nu\| c(P^{m,k})$. L'ergodicité faible découle alors de la condition $\lim_{k \to \infty} c(P^{m,k}) = 0$.

••($\Longrightarrow$) Réciproquement, choisissons comme lois initiales $\mu = \delta_{\{i\}}, \nu = \delta_{\{j\}},\ i \neq j$. $\delta_{\{i\}} P^{m,k}$ n'est autre que la i-ième ligne de $P^{m,k}$. Ainsi $\left\|\delta_{\{i\}} P^{m,k} - \delta_{\{j\}} P^{m,k}\right\| = \sum_{l \in E} \left|P^{m,k}(i,l) - P^{m,k}(j,l)\right|$, et

$$c(P^{m,k}) = \frac{1}{2} \sup_{i,j} \left\|\delta_{\{i\}} P^{m,k} - \delta_{\{j\}} P^{m,k}\right\| \to 0 \text{ si } k \to \infty$$

□

Nous allons maintenant donner une condition *suffisante* d'ergodicité forte. Soit (π_n) une suite de lois sur E vérifiant

$$\sum_{n>0} \|\pi_n - \pi_{n+1}\| < \infty \tag{3.6}$$

(π_n) est une suite de Cauchy sur l'espace complet $(\mathbb{R}^E, \|.\|_1)$: il existe donc une loi π_∞ telle que $\pi_n \to \pi_\infty$.

Soit $X = (X_n)_{n \geq 0}$ une chaîne de transitions (P_n). On a le résultat d'ergodicité suivant,

Proposition 3.9 ***Critère d'ergodicité forte.*** *Supposons qu'il existe une suite de lois (π_n) invariantes pour (P_n), telle que (π_n) vérifie (3.6) et que la suite (P_n) vérifie (3.5). Alors, il existe une loi π_∞ telle que*

$$\sup_\nu \|\nu P_0 P_1 \cdots P_n - \pi_\infty\| \to 0$$

Preuve : L'existence de π_∞ a été établie.

(1) Commençons par contrôler $A_{i,k} = \|\pi_\infty P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k} - \pi_\infty\|$. On a :

$$\begin{aligned}
\pi_\infty P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k} - \pi_\infty &= (\pi_\infty - \pi_i) P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k} + \pi_i P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k} - \pi_\infty \\
&= (\pi_\infty - \pi_i) P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k} \\
&\quad + \sum_{j=1}^{k} (\pi_{i-1+j} - \pi_{i+j}) P_{i+j} \cdots P_{i+k} + (\pi_{i+k} - \pi_\infty)
\end{aligned}$$

On en déduit la majoration :

$$A_{i,k} \leq 2c(P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k}) + \sum_{n=i}^{\infty} \|\pi_n - \pi_{n+1}\| + \|\pi_{i+k} - \pi_\infty\|$$

Donc, pour tout $\varepsilon > 0$, on peut choisir i puis k tels que $A_{i,k} \leq \varepsilon$.

(2) De la décomposition, pour tout $i < n$:

$$\nu P_0 P_1 \cdots P_n - \pi_\infty = (\nu P_0 P_1 \cdots P_{i-1} - \pi_\infty) P_i P_{i+1} \cdots P_n + \pi_\infty P_i P_{i+1} \cdots P_n - \pi_\infty$$

on déduit,

$$\|\nu P_0 P_1 \cdots P_n - \pi_\infty\| \leq 2c(P_i P_{i+1} \cdots P_n) + A_{i,k} \text{ pour } k = n - i$$

L'ergodicité résulte alors de (3.5) et de (3.6). □

Remarque 3.1 .

(1) Le contrôle en n de la vitesse d'ergodicité, c'est-à-dire de $\sup_\nu \|\nu P_0 P_1 \cdots P_n - \pi_\infty\|$ en n s'obtient à partir de celui de $c(P_i P_{i+1} \cdots P_n)$ et du reste de la série $\sum_{k \geq n} \|\pi_k - \pi_{k+1}\|$ [106].

(2) Une condition suffisante, très utilisée dans la pratique, assurant que $\sum_n \|\pi_n - \pi_{n+1}\| < \infty$ est :

$$(M) :\ \forall x \in E,\ n \to \pi_n(x) \text{ est monotone à partir d'un certain rang} \tag{3.7}$$

En effet, $\sum_n \|\pi_n - \pi_{n+1}\| = 2\sum_x \sum_n |\pi_n(x) - \pi_{n+1}(x)|^+$. *Les x étant en nombre fini, il suffit de s'assurer de la convergence de chaque série numérique à x fixé. La condition de monotonie (3.7) assure bien cette convergence : en effet, pour n assez grand,* $|\pi_n(x) - \pi_{n+1}(x)|^+ = \pi_n(x) - \pi_{n+1}(x)$ *si* $(\pi_n(x))$ *est décroissante,* $= 0$ *sinon.*

(3) Trois conditions suffisantes assurant l'ergodicité faible (3.5) sont :

(3.5-1) : $\forall m \geq 0$, $\prod_{n\geq m} c(P_n) = 0$

(3.5-2) : $\forall n$, $c(P_n) > 0$ *et* $\prod_{n\geq 0} c(P_n) = 0$

(3.5-3) : $\forall n$, $\exists k \geq n$ *tel que* $c(P_k) = 0$.

(4) Une technique classique pour contrôler $c(P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k})$ *est de décomposer l'intervalle* $[i, i+k+1[$ *en l intervalles successifs et adjacents* $I_s = [\tau_{s-1}, \tau_s[$, $s = 1, l$. *Si on note* $P^{(s)} = P_{\tau_{s-1}} P_{\tau_{s-1}+1} \cdots P_{\tau_s - 1}$, *on obtient :*

$$c(P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k}) \leq \prod_{s=1}^{l} c(P^{(s)})$$

Si de plus on a choisi τ_s de telle sorte que $P^{(s)} > 0$, *on a* $c(P^{(s)}) \leq (1 - r\varepsilon(P^{(s)}))$. *Cette technique est facile à utiliser mais elle est loin d'être optimale.*

(5) La condition (3.5) : $\forall m \geq 0$, $c(P_m P_{m+1} \cdots P_n) \to 0$, *pour tous les m, est nécessaire (cf. exercice).*

Chaînes inhomogènes : loi des grands nombres et T.L.C.

Soit $X = (X_n)$ une chaîne inhomogène, de transitions (P_n). Si la loi initiale est ν, on notera $\mathbb{P}_\nu$ la loi de la chaîne. Notons par ailleurs $c_n = \sup_{1\leq i\leq n} c(P_i)$. On a les deux résultats suivants :

Proposition 3.10 *Loi des Grands Nombres (Gantert [35]; [52])*

On suppose que la chaîne est fortement ergodique convergeant vers π_∞. Soit $f : E \to \mathbb{R}$. *Alors,* $\frac{1}{n}\sum_{i=1,n} f(X_i) \to \pi_\infty(f)$

(i) dans $L^2(\mathbb{P}_\nu)$ *si* $\lim_n n(1 - c_n) = \infty$.

(ii) $\mathbb{P}_\nu$*-p.s. si* $\sum_{n\geq 1} \frac{1}{2^n(1-c_{2^n})^2} < \infty$.

Proposition 3.11 *Théorème de la Limite Centrale (Dobrushin [26]).*

Soient $f_i : E \to \mathbb{R}$, *et* $S_n = \sum_{i=1,n} f_i(X_i)$. *On suppose que :*

(i) Il existe un $c > 0$ *tel que, pour tout i,* $Var(f_i(X_i)) \geq c$

(ii) $\sup_i \|f_i\|_\infty < \infty$ *et*

(iii) $\lim_n n^{\frac{1}{3}}(1 - c_n) = +\infty$. *Alors :*

$$\frac{S_n - E(S_n)}{Var(S_n)^{\frac{1}{2}}} \rightsquigarrow \mathcal{N}(0,1)$$

La constante $\frac{1}{3}$ de (iii) est optimale.

Pour ces deux résultats, le cas difficile est celui où $c_n \to 1_-$. Supposons par exemple que $c_n = 1 - \frac{a_n}{n}$, $0 < a_n < n$ et $a_n \to \infty$. Pour la loi des grands nombres, la convergence a lieu dans $L^2(\mathbb{P}_\nu)$ et $\mathbb{P}_\nu$-*p.s.* si $\sum_n a_n^{-2} < \infty$. Le TCL a lieu si $a_n n^{-\frac{2}{3}} \to +\infty$.

3.2 Optimisation par recuit simulé

Soit $U : E \to \mathbb{R}$ une fonction à minimiser sur E fini, $U_* = \min\{U(x) : x \in E\}$ et $E_* = \{x \in E : U(x) = U_*\}$. Soit $\beta = T^{-1}$ le paramètre inverse d'une température $T > 0$ ($T \to 0$ équivaut à $\beta \to \infty$), et π_β la loi sur E associée à U et à β :

$$\pi_\beta(x) = Z^{-1}(\beta) \exp -\beta U(x)$$

L'heuristique de l'algorithme du *recuit simulé* (noter par la suite RS) est la suivante :

$$\text{Si } U(a) < U(b), \quad \lim_{\beta \to +\infty} \frac{\pi_\beta(b)}{\pi_\beta(a)} = 0$$

A basse température (β grand), la loi π_β se concentre sur E_*, l'ensemble des minima de U. Plus précisément, si on note π_∞ la loi uniforme sur E_*,

$$\pi_\infty(x) = |\mathrm{E}_*|^{-1} \mathbf{1}(x \in E_*), \text{ alors : } \|\pi_\beta - \pi_\infty\| \to 0 \text{ si } \beta \to \infty$$

($|A|$ est le cardinal de A). Ainsi, à première vue, optimiser U revient à simuler π_β pour β grand. Deux problèmes se présentent :

(i) quand considérer que β est grand ?

(ii) la convergence de la simulation de π_β pour β grand est très lente.

L'algorithme de RS est une réponse à ces problèmes (Kirkpatrick, Gelatt et Vecchi [65]) : on va utiliser une dynamique (P_k) inhomogène dans le temps, relative à une suite (β_k) tendant vers l'infini et on cherchera des conditions suffisantes assurant que la chaîne (P_k) est fortement ergodique et converge vers π_∞. On examinera deux cas :

- Le cas où E est un espace produit, la dynamique retenue est celle de l'échantillonneur de Gibbs ([37] ; [39]) ;
- Le cas d'un espace d'état E général et de la dynamique de Metropolis-Hastings (Hajek [50] ;[103] ;[1] ; [42] ;[5]).

3.2.1 Recuit simulé pour la dynamique de Gibbs

$E = F^S$ où $S = \{1, 2, \cdots, n\}$ et F est fini. Soit $U : E \to \mathbb{R}$. Sans que cela soit restrictif, on supposera que le minimun de U est $U_* = 0$ (U est donc à valeur dans $\mathbb{R}^+$, et pour au moins un $x \in E$, $U(x) = 0$). La dynamique de l'échantillonneur de Gibbs est associée à la loi

$$\pi_\beta(x) = Z^{-1}(\beta) \exp -\beta U(x)$$

et à ses lois conditionnelles $\pi_{i,\beta}(x_i \mid x^i)$, $i \in S$. L'algorithme est le suivant :

`Algorithme du RS pour la dynamique de Gibbs`

`(i) On choisit un schéma` $(\beta_k) \uparrow +\infty$.

`(ii) Visites de` S `périodiques,` $\beta = \beta_k$ `au` k`-ième balayage.`

`(iii) La transition au` k`-ième balayage est :`

$$P_k(x, y) = \prod_{i=1}^{n} \pi_{i,\beta_k}(y_i \mid y_1, \cdots, y_{i-1}, x_{i+1}, \cdots, x_n)$$

Soit $\Delta = \max\{U(x) - U(y) : x \equiv y \text{ sauf en un site}\}$, r le cardinal de E.

Proposition 3.12 *Convergence du RS pour la dynamique de Gibbs (Geman D. et Geman S.[37];[39]).*

Si $(\beta_k) \uparrow +\infty$ *en vérifiant*

$$\sum_{k \geq 0} \exp -\{n\Delta\beta_k\} = +\infty$$

alors : $\forall x_0, \lim_{k\to\infty} P(X_k \in E_* \mid X_0 = x_o) = 1$. *En d'autres termes, pour toute loi initiale* ν, $\nu P_0 P_1 \cdots P_k \to \pi_\infty$. *Si* $\beta_k = \gamma \log k$, *cette convergence est assurée dès que* $\gamma \leq (n\Delta)^{-1}$.

Preuve : $\pi_k = \pi_{\beta_k}$ est invariante pour P_k et $\pi_k \to \pi_\infty$. Il suffit de vérifier les deux conditions (3.6)et (3.5). Notons que la convergence $\pi_k \to \pi_\infty$ ne permet pas d'obtenir (3.6).

(i) Vérifions que pour tout x, la suite $(\pi_k(x))$ est monotone pour n grand. Fixons x. On a :

$$\pi_\beta(x) = \{\sum_{y\in E} \exp -\beta[U(y) - U(x)]\}^{-1}$$

Posons $a(y) = U(y) - U(x)$. Si $x \in E_*$, $a(y) \geq 0$, chaque $\exp -\beta_k a(y)$ est décroissante et donc $(\pi_k(x))$ est croissante. Sinon,

$$d(\beta) = \pi_\beta(x)^{-1} = |\{y \in E : U(y) = U(x)\}| + \sum_{a(y)<0} e^{-\beta a(y)} + \sum_{a(y)>0} e^{-\beta a(y)}$$

La dérivée de d est $d'(\beta) = -\sum_{a(y)<0} a(y)e^{-\beta a(y)} - \sum_{a(y)>0} a(y)e^{-\beta a(y)}$. Si U n'est pas constante, il existe y t.q. $a(y) < 0$ et le premier terme tend vers $-\infty$ si $\beta \to \infty$. Quant au second terme, il tend vers 0. Ainsi si $x \notin E_*$, $(\pi_k(x))$ est décroissante à partir d'un certain rang.

(ii) $\pi_{i,\beta}(x_i \mid x^i) = \{\sum_{u\in F} \exp -\beta[U(u,x^i) - U(x_i,x^i)]\}^{-1} \geq (re^{\beta\Delta})^{-1}$ puisque $[U(u,x^i) - U(x_i,x^i)] \geq -\Delta$. On en déduit que :

$$P_\beta(x,y) \geq (ne^{n\beta\Delta})^{-1} \text{ et donc } c(P_\beta) \leq 1 - e^{-n\beta\Delta}$$

La condition suffisante (ii) sera assurée dès que $\forall m, \prod_{k\geq m} c(P_k) = 0$, condition équivalente à

$$\sum_k (1 - c(P_k)) = +\infty$$

Pour le schéma de température proposé, $1 - c(P_k) \geq e^{-n\beta_k\Delta} = (\frac{1}{k})^{\gamma n\Delta}$. La divergence est assurée dès que $\gamma n\Delta \leq 1$. □

Exemple 3.1 *Lissage d'une courbe par minimisation de la flexion*

On souhaite reconstruire une courbe $x : [0,1] \to F \subset \mathbb{R}$, où F est un maillage fini de $\mathbb{R}$. On dispose d'observations $\{y_i, i = 0, n\}$ que l'on relient à x par le modèle :

$$y_i = x_i + \varepsilon_i,\ i = 0, n \text{ où } x_i = x(\frac{i}{n})$$

La flexion d'une courbe x de classe $\mathcal{C}^2$ est définie par $F(x) = \int_0^1 x''(t)^2 dt$. Sa version discrétisée est $F_D(x) = \sum_{i=1}^{n-1}(x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1})^2$: la flexion est faible si x est régulière. Une reconstruction discrète de x pourra se faire sur la base de l'énergie

$$U : E = F^{n+1} \to \mathbb{R}, \quad U(x \mid y) = \gamma F_D(x) + \|y - x\|_2^2$$

γ est un paramètre de régularisation : plus γ est grand, plus régulière sera la reconstruction ; plus γ est petit, plus grande sera la fidélité de x à y. On vérifie que U s'écrit de façon additive et locale :

$$U(x \mid y) = \sum_i \Phi_i(x_i \mid y) + \sum_{i,j} \Phi_{i,j}(x_i, x_j \mid y)$$

$$\text{avec } \left\{ \begin{array}{c} \Phi_i(x_i \mid y) = x_i^2(6\gamma + 1) - 2x_i y_i \\ \Phi_{i,j}(x_i, x_j \mid y) = \Phi_{i,j}(x_i, x_j) = \left\{ \begin{array}{c} -8\gamma x_i x_j \text{ si } |i-j| = 1 \\ 2\gamma x_i x_j \text{ si } |i-j| = 2 \\ 0 \text{ sinon} \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Les lois conditionnelles s'explicitent à partir d'une energie conditionnelle :

$$U_{i,\beta}(x_i \mid x_{\partial i}, y_i) = -\beta x_i(x_i(6\gamma+1) - 2y_i - 8\gamma(x_{i-1}+x_{i+1}) + 2(x_{i-2}+x_{i+2})$$

$$\pi_{i,\beta}(x_i \mid x_{\partial i}, y) = \exp U_{i,\beta}(x_i \mid x_{\partial i}, y_i)\{\sum_{u\in F} \exp U_{i,\beta}(u \mid x_{\partial i}, y_i)\}^{-1}$$

3.2.2 Recuit simulé pour la dynamique de Metropolis

On étudie maintenant le RS pour la dynamique de Metropolis, la transition de proposition Q étant supposée symétrique. Le cas général des dynamiques de Metropolis-Hastings peut se traiter de façon similaire. A température $T = \beta^{-1}$, la transition est, pour $x \neq y$

$$P_\beta(x,y) = Q(x,y)\exp -\beta[U(y)-U(x)]^+$$

L'algorithme est le suivant :

$\boxed{\texttt{R.S. pour la dynamique de Metropolis}}$

(i) choisir un schéma $(\beta_k)\uparrow +\infty$. On est en $X_k = x$.
(ii) choisir une proposition de changement y suivant $Q(x,.)$.
(iii)Si $\Delta U = U(y)-U(x) \leq 0$, prendre $X_{k+1} = y$.
(iv) Sinon tirer une loi V uniforme sur $[0,1]$:
  (iv-1) Si $V \leq \exp -\Delta U$, prendre $X_{k+1} = y$.
  (iv-2) Sinon prendre $X_{k+1} = x$.

On supposera que Q est régulière. Soient $M = \inf\{n \text{ t.q. } Q^n > 0\}$, $q = \inf\{Q(x,y) : x, y \text{ t.q. } Q(x,y) > 0\}$ et $\Delta = \max\{U(y)-U(x) : x,y \in \text{ t.q. } Q(x,y) > 0\}$. On adoptera un schéma de refroidissement par paliers, chacun de longueur M, la température restant constante égale à β_k^{-1} sur le k-ième palier. On a le résultat suivant ([50],[42],[107])

Proposition 3.13 *Convergence du RS pour la dynamique de Metropolis.*
Si $(\beta_k)\uparrow +\infty$ en vérifiant

$$\sum_{k\geq 0} \exp -\{M\Delta\beta_k\} = +\infty$$

alors la chaîne du RS pour la dynamique de Metropolis réalise la recherche du minimun de U, c'est à dire $\lim_{k\to\infty} P(X_k \in E_* \mid X_0 = x_0) = 1$. *Si $\beta_k = \gamma \log k$, la convergence du RS est assurée dès que $\gamma \leq (M\Delta)^{-1}$.*

Preuve : On suit la même démarche que pour établir la convergence du RS relatif à l'échantillonneur de Gibbs. Notons $\pi_\beta = Z^{-1}(\beta)\exp -\beta U$, $\pi_k = \pi_{\beta_k}$ et $R_k = P^M_{\beta_k}$. π_k est invariante pour R_k et $\pi_k \to \pi_\infty$. L'ergodicité forte sera assurée sous les conditions (3.6) et (3.5).

Le point (i) s'établit comme pour l'échantillonneur de Gibbs : le fait que E soit un espace produit n'intervient pas pour établir la monotonie des $(\pi_n(x))$.

Reste à contrôler le coefficient de contraction de R_β. $Q(x,y) \geq q > 0$ pour les changements possibles $x \mapsto y$. Q étant régulière avec $Q^M > 0$, pour $x, y \in E$, il existe un chemin $x = x(0) \mapsto x(1) \mapsto \cdots \mapsto x(M) = y$ de longueur M joignant x à y :

$$R_\beta(x,y) \geq q^M \exp -\beta \sum_{l=1,M} [U(x_l) - U(x_{l-1})]^+ \geq q^M \exp -M\beta\Delta$$

On a donc : $c(R_\beta) \leq 1 - rq^M \exp -M\beta\Delta$. D'où la première partie du résultat. Pour le schéma $\beta_k = \gamma\log k$, $1 - c(P_k) \geq rq^M(\frac{1}{k})^{\gamma M\Delta}$. La série de terme général $1 - c(P_k)$ est bien divergente si $\gamma \leq (M\Delta)^{-1}$. □

Les deux résultats précédents de convergence du RS dans les deux contextes de la dynamique de Gibbs et de la dynamique de Metropolis donnent des *conditions suffisantes non-optimales* de convergence du recuit simulé. Obtenir une condition nécessaire et suffisante d'ergodicité forte sur la suite (β_k) est beaucoup plus difficile.

Décrivons une telle condition obtenue par Hajek [50] dans le contexte de le dynamique de Metropololis. Q est supposée symétrique définissant la relation de Q-voisinage : $x \sim y \Leftrightarrow Q(x,y) > 0$. L'ensemble E_*^{loc} des minimums locaux est l'ensemble des x t.q. $U(x) \leq U(y)$ si $x \sim y$. La *profondeur* $d(x)$ d'un minimun local $x \in E_*^{loc}$ est

$$d(x) = \inf\{d > 0 : \exists y \text{ t.q. } U(y) < U(x) \text{ et } \exists\ x \ \rightsquigarrow\ y \text{ de niveau} \leq U(x) + d\}$$

où $x \rightsquigarrow y$ est un chemin qui va de x à y : pour sortir du puits local de U en x afin d'aller vers y, plus bas que x $(U(y) < U(x))$, on peut trouver un chemin qui ne monte pas à plus que $U(x) + d$. On définit alors la profondeur maximum du paysage de l'énergie U par :

$$D = \max\{d(x), x \in E_*^{loc} \backslash E_*\}$$

La condition nécessaire et suffisante de convergence du RS est :

Proposition 3.14 *Condition nécessaire et suffisante de convergence du RS (Hajek, [50])*

$$\lim_{k\to\infty} P(X_k \in E_* \mid X_0 = x_0) = 1 \Longleftrightarrow \sum_{k \geq 0} \exp -\{D\beta_k\} = +\infty$$

On remarque que $D \leq M\Delta$. Pour la suite $\beta_k = \gamma \log k$, le résultat de Hajek implique bien le résultat précédent puisque $\gamma \leq (M\Delta)^{-1} \leq D^{-1}$.

Exemple 3.2 *Lissage de courbe (suite)*

Reprenons l'exemple *3.1*. Supposons que l'espace d'état F est l'intervalle $[-5, +5]$ discrétisé à pas 0.1 (F a 101 éléments). Soit ε petit ($\varepsilon = 0.1$). La proposition de changement $x \mapsto z$ est la suivante :

(i) on décide de ne rien changer avec la probabilités ε

(ii) on choisit au hasard $i \in S = \{0, 1, 2, \cdots, n\}$ et on change la valeur $x_i \mapsto z_i$ en ce seul site i de ± 0.1 si $x_i \notin \{-5, +5\}$, ou $z_i \in \{x_i \text{ ou } x_i \pm 0.1 \text{ si } x_i = \mp 5\}$, cela avec la probabilité $Q(x,z) = \frac{1-\varepsilon}{2n}$;

(iii) $Q(x,z) = 0$ sinon.

Q est symétrique, régulière, $M \leq 101 \times (n+1)$. Un calcul direct de $\Delta U = U(z) - U(x)$, conditionnel à y, donne :

$$\Delta U = \gamma(z_i - x_i)[(z_i + x_i)(6 + \gamma^{-1}) - 2y_i - 8(x_{i-1} + x_{i+1}) + 2(x_{i-2} + x_{i+2})]$$

On garde z_i avec une probabilité 1 si $\Delta U \leq 0$, et sinon avec la probabilité $e^{-\beta_k \Delta U}$.

Exemple 3.3 *Un problème de recouvrement*

On dispose de N segments de longueurs $l_i > 0, i = 1, N$ avec lesquels on veut recouvrir sans chevauchement ni dépassement un intervalle de longueur $L < l_1 + l_2 + \cdots + l_N$. Notons $S = \{1, 2, \cdots, N\}$, $E = \{A \subset S : A \neq \emptyset \text{ et } \sum_{i \in A} l_i \leq L\}$ et $U(A) = \sum_{i \in A} l_i$. Recouvrir au mieux l'intervalle $[0, L]$ revient à optimiser U sur E. On va décrire l'algorithme de Metropolis pour la transition de proposition $Q(A, B)$ suivante :

(i) Choisir un s uniformément dans S.

(ii) Les seuls changements $A \mapsto B$ sont : $\begin{cases} \text{Si } s \in A, \text{ passer à } B = A \backslash \{s\} \\ \text{Si } s \notin A, \text{ passer à } B = A \cup \{s\} \end{cases}$

Q est une transition irréductible (on passe de A à B en au plus $|A|+|B|$ pas) et symétrique (si $s \notin A$ et $B = A \cup \{s\}$, $Q(A,B) = \frac{1}{N} = Q(B,A)$). On a

$$\Delta U = U(A) - U(B) = \begin{cases} +l_s \text{ si } B = A\backslash\{s\} \\ -l_s \text{ si } B = A \cup \{s\} \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

Ainsi, à la k-ième itération de l'algorithme, on retient sûrement B si $B = A \cup \{s\}$, et avec la probabilité $\exp -\beta_k l_s$ si $B = A\backslash\{s\}$.

Remarque 3.2 *Quelques commentaires sur le recuit simulé*

(1) L'analogie avec le recuit simulé de la métallurgie est justifiée. Pour le schéma de température $T(k) = \frac{T_0}{\log k}$, la condition suffisante d'ergodicité est $T_0 \geq N\Delta$. La température initiale doit être assez grande, toutes les particules sont libres et désordonnées. Ensuite, le refroissement doit être assez lent (schéma en $(\log k)^{-1}$), et la cristallisation s'opère, réalisant le minimun d'énergie.

(2) Le RS permet toujours de s'échapper d'un minimun local contrairement aux méthodes numériques classiques d'optimisation, par exemple la descente de gradient : c'est bien une condition nécessaire à la convergence vers un minimun global. En contrepartie, on s'échappera aussi du minimun global et il ne peut donc pas y avoir de convergence presque sûre vers E_* : la convergence du RS a lieu en probabilité et n'a pas lieu presque surement.

(3) Le recuit simulé en horizon fini K a été étudié par Catoni [15]. Le problème est le suivant : on dispose d'un budget K fixé (le nombre d'itérations autorisées dans l'algorithme de RS), et on désire retenir le meilleur schéma de refroidissement triangulaire $\mathcal{T}^K = \{T_1^K > T_2^K > \cdots > T_K^K\}$ minimisant :

$$P(\mathcal{T}^K) = \max_{x \in E} P(X_K \notin E_* \mid X_0 = x)$$

Le résultat est le suivant : le schéma optimal $\mathcal{T}^K$ est un schéma à décroissance exponentielle et $P(\mathcal{T}^K) = O(K^{-d})$ où d est une caractéristique du paysage d'énergie. Ce résultat n'est pas asymptotique. Il n'est pas en contradiction avec le résultat de décroissance lente de la température pour la convergence du RS. CEn un certain sens, ce résultat valide le fait que, dans la pratique, les schémas de refroidissement utilisés sont exponentiels, du type $T_k^K = T_0 \rho^k$ avec T_0 assez grand et ρ proche de 1 ($\rho = 0.99$) : on laissera T_k^K constante par paliers de longueurs $l_k, k = 1, K$ (l_k a déterminer) ; un schéma de refroidissement sera alors caractérisé par $(T_0, \rho, (l_k))$.

(4) Un contrôle de $\|\nu P_1 P_2 \cdots P_k - \pi_\infty\|$ peut être obtenu à partir de la majoration permettant d'obtenir l'ergodicité forte d'une chaîne inhomogène

$$\begin{aligned} \|\nu P_1 P_2 \cdots P_{i+k} - \pi_\infty\| &\leq A_{i,k} + 2c(P_i P_{i+1} \cdots P_{i+k}) \text{ avec} \\ A_{i,k} &= \|\pi_\infty P_1 P_2 \cdots P_{i+k} - \pi_\infty\| \leq \|\pi_\infty - \pi_i\| + \sum_{n \geq i} \|\pi_{i+1} - \pi_i\| \end{aligned}$$

Dans le cadre du RS pour la dynamique de Gibbs sur $E = F^S$, $S = \{1, 2, \cdots, N\}$, pour une fonction U de minimun global 0 ($U_* = 0$) et pour le schéma $\beta_k = \frac{\log k}{N\Delta}$, Winkler [106] obtient le contrôle suivant, en fonction de $m = \inf\{U(x) : x \notin E_*\}$,

$$\|\nu P_1 P_2 \cdots P_k - \pi_\infty\| = 0(k^{-\frac{m}{m+N\Delta}})$$

La vitesse est d'autant meilleure que le minimun global de U est profond par rapport au reste du paysage et que U est localement régulière en dehors de E_*.

3.3 Simulation et optimisation sous contraintes

Soit $C : E \to \mathbb{R}$ une application définissant la *contrainte* $E_C = \{x \in E : C(x) = C_*\}$ où $C_* = \inf\{C(x), x \in E\}$. On supposera que C est non-constante.

Soit $U : E \to \mathbb{R}$ une énergie, $\pi(x) = Z^{-1}\exp\{-U(x)\}$ la loi sur E associée à U, $U_{*,C} = \inf\{U(x) : x \in E_C\}$, $E_{*,C} = \{x \in E_C : U(x) = U_{*,C}\}$. La loi d'énergie U restreinte à E_C est

$$\pi_C(x) = Z_C^{-1}\mathbf{1}\{x \in E_C\}\exp -U(x)$$

Soit $\pi_{\infty,C}$ la loi uniforme sur $E_{*,C}$. Nous allons répondre aux deux questions suivantes :

- (S) : Simuler π_C ?
- (O) : Minimiser U sur E_C ?

L'approche intuitive est la suivante. Soient β et λ deux paramètres réels positifs et $\pi_{\beta,\lambda}$ la loi sur E d'énergie $U_{\beta,\lambda} = \beta\{U(x) + \lambda C(x)\}$:

$$\pi_{\beta,\lambda}(x) = Z^{-1}(\beta,\lambda)\exp -\beta\{U(x) + \lambda C(x)\}$$

Il est facile de vérifier les deux résultats suivants :

- (S) : Si $\beta = 1$ et si $\lambda \uparrow \infty$, alors $\pi_{1,\lambda} \to \pi_C$.
- (O) : Si $\beta \uparrow \infty$ et si $\lambda \uparrow \infty$, alors $\pi_{\beta,\lambda} \to \pi_{C,\infty}$.

Notons $\pi_k = \pi_{\beta_k,\lambda_k}$. Ce comportement asymptotique suggère que l'on construise des chaînes de Markov de transitions (P_k) en relation avec π_k. Si (π_k) est la loi invariante de (P_k), l'ergodicité des chaînes sera assurée sous (3.6) et (3.5). Dans le cas où E est un ensemble produit, on choisit la dynamique de l'échantillonneur de Gibbs : les résultats sont dus aux frères Geman [38] (cf. aussi [39]). Dans le cas d'un espace d'état fini général et de la dynamique de Metropolis, les résultats sont dus à Yao [107].

Si on retranche C_* à C et $U_{*,C}$ à U, la loi $\pi_{\beta,\lambda}$ est inchangée : ausi, sans perte de généralité, on supposera que $C_* = U_{*,C} = 0$.

3.3.1 Simulation et optimisation sous contrainte pour la dynamique de l'échantillonneur de Gibbs

$E = F^S$ où F est finie et $S = \{1, 2, \cdots, n\}$. Soient (β_k) et (λ_k) deux suites croissant vers $+\infty$, $\pi_k = \pi(\beta_k, \lambda_k)$ et P_k la transition de l'échantillonneur de Gibbs de π_k pour le balayage $1 \mapsto 2 \mapsto \cdots \mapsto n$ de S. Notons $\Delta = \max\{U(x) - U(y) : x \equiv y \text{ sauf en un site}\}$, $\Gamma = \max\{C(x) - C(y) : x \equiv y \text{ sauf en un site}\}$. Δ et Γ sont > 0. On a le résultat suivant :

Proposition 3.15 ***Simulation et optimisation sous contraintes*** *(dynamique de Gibbs, Geman D. et Geman S.,[38]; [39]).*

(1) Simulation : fixons pour tout k, $\beta_k \equiv 1$. La chaîne inhomogène (P_k) de paramètres $((1, \lambda_k))$ converge vers π_C dès que la suite (λ_k) vérifie :

$$\sum_{k>0} \exp(-n\Gamma\lambda_k) = +\infty$$

Cette condition est satisfaite pour $\lambda_k = \lambda \log k$ dès que $\lambda n\Gamma \leq 1$.

(2) Optimisation : La chaîne inhomogène (P_k) de paramètres $((\beta_k, \lambda_k))$ converge vers $\pi_{C,\infty}$ dès que les suites (β_k) et (λ_k) vérifient :

$$\sum_{k>0} \exp\{-n\beta_k(\Delta + \lambda_k\Gamma)\} = +\infty$$

Cette condition est satisfaite pour $\beta_k\lambda_k = \gamma \log k$ dès que $\gamma n\Gamma < 1$.

Preuve : Pour établir chacun des résultats, il suffit de vérifier (3.6) et (3.5).
(1-(i)) *Simulation et (3.6)* : il suffit de vérifier que $(\pi_k(x))_k$ est monotone. La méthode est standard : on écrit

$$\pi_k(x)^{-1} = \sum_{y \in E} \exp\{(U(x) - U(y)) + \lambda_k(C(x) - C(y))\}$$

On divise la somme en trois parties suivant que $C(y)$ est $<$, $=$ ou $>$ à $C(x)$ et on conclut facilement.
(1-(ii)) *Simulation et (3.5)* : la loi conditionnelle en i vaut

$$\pi_{i,k}(x_i \mid x^i) = \{\sum_{a \in F} \exp[(U(x_i, x^i) - U(a, x^i)) + \lambda_k(C(x_i, x^i) - C(a, x^i))]\}^{-1}$$

Ces probabilités sont minorées par $L^{-1} \exp -\{\Delta + \lambda_k \Gamma\}$, où $L = |F|$, et donc :

$$1 - c(P_k) \geq \exp -n\{\Delta + \lambda_k \Gamma\}$$

D'où le résultat (1) .
(2-(i)) *Optimisation et (3.6)* : on va utiliser le lemme suivant. Soit $(\pi_k = Z_k^{-1} \exp\{-U_k\})$ une suite de lois sur E.

Lemme 3.1 *([39]) Supposons que la suite (U_k) vérifie :*
(a) $\forall x \in E$, $\exists k_0$ tel que $U_k(x) \leq U_{k+1}(x)$ si $k \geq k_0$.
(b) $\exists x_0 \in E$ tel que $\sup_{k \geq 0} U_k(x_0) < +\infty$.
Alors, sous (a) et (b), la suite (π_k) vérifie (3.6)

La démonstration de ce lemme est donnée à la suite de celle du théorème. Vérifions que les conditions (a) et (b) sont satisfaites. Ici, $U_k = \beta_k(U(x) + \lambda_k C(x))$, (β_k) et $(\lambda_k) \uparrow +\infty$.
Condition (a) : si $x \in E_C$, $C(x) = 0$ et $U(x) \geq U_{*,C} = 0$: $(U_k(x))$ est croissante. Si $x \notin E_C$, et si $U(x) \geq 0$, on a le même résultat. Reste à examiner le cas où $x \notin E_C$ et $U(x) < 0$. On a :

$$U_{k+1}(x) - U_k(x) = (\beta_{k+1} - \beta_k)[U(x) + \lambda_{k+1} C(x)] + \beta_k(\lambda_{k+1} - \lambda_k) C(x)$$

Cet accroissement est positif à partir d'un certain rang puisque $C(x) > 0$ et $\lambda_k \uparrow +\infty$.
Condition (b) : il suffit de prendre $x_0 \in E_{*,C}$ puisqu'alors, $U(x_0) = C(x_0) = 0$, et donc, pour tout $k \geq 0$, $U_k(x_0) = \beta_k\{U(x_0) + \lambda_k C(x_0)\} = 0$.
(2-(ii)) *Optimisation et (3.5)* : en introduisant le paramètre β_k, on obtient

$$\pi_{i,k}(x_i \mid x^i) = \{\sum_{a \in F} \exp \beta_k[(U(x_i, x^i) - U(a, x^i)) + \lambda_k(C(x_i, x^i) - C(a, x^i))]\}^{-1}$$

Ces probabilités étantt minorées par $L^{-1} \exp -\beta_k\{\Delta + \lambda_k \Gamma\}$, on obtient la minoration :

$$1 - c(P_k) \geq \exp -n\beta_k\{\Delta + \lambda_k \Gamma\}$$

On en déduit le résultat (2). Pour le schéma logarithmique, l'inégalité $\gamma n \Gamma < 1$ est suffisante : en effet $\exp -n\beta_k \lambda_k\{\Gamma + \lambda_k^{-1}\Delta\} = (\frac{1}{k})^{n\gamma\{\Gamma + \lambda_k^{-1}\Delta\}} \geq \frac{1}{k}$ dès que k est assez grand. □

Preuve du Lemme :
Il suffit de démontrer que pour chaque x, $\sum_{k \geq 0} |\pi_{k+1}(x) - \pi_k(x)| < \infty$. Fixons donc un x et notons $u_k = \exp -U_k(x)$. On a la majoration

$$\begin{aligned} |\pi_{k+1}(x) - \pi_k(x)| &= (Z_k Z_{k+1})^{-1} |u_{k+1} Z_k - u_k Z_{k+1}| \\ &\leq (Z_k Z_{k+1})^{-1}\{u_{k+1} |Z_{k+1} - Z_k| + Z_{k+1} |u_{k+1} - u_k|\} \\ &\leq (\inf_k Z_k)^{-2}\{[\sup_k u_k] |Z_{k+1} - Z_k| + [\sup_k Z_k] |u_{k+1} - u_k|\} \end{aligned}$$

Or, $\sup_k u_k < \infty$ puisque $(U_k(x))$ est croissante à partir d'un certain rang. De même, E étant fini, $\sup_k Z_k < \infty$. Par ailleurs, $\inf_k Z_k \geq \exp\{-\sup_k U_k(x_0)\} > 0$. On conclut en remarquant que les suites (Z_k) et (u_k) sont positives et décroissantes à partir d'un certain rang. $\square$

Dans [39], D. Geman donne une forme plus générale de ce résultat. D'abord, les relaxations stochastiques peuvent se faire sur des parties A_i (ici nous avons toujours considéré des singletons $A_i = \{i\}$). Les parties associées à chaque balayage doivent recouvrir S, mais les balayages ne sont pas nécessairement périodiques. Enfin, si le balayage numéro k est de longueur k et est à (β_k, λ_k) fixés, il faut une condition croisée sur (β_k, λ_k) et sur τ_k pour assurer la convergence de la chaîne. Si les τ_k sont bornés, les schémas logarithmiques $\gamma \log k$ assurent les convergences souhaitées si γ est assez petite.

3.3.2 Simulation et optimisation sous contrainte pour la dynamique de Metropolis

Soit Q un noyau de proposition symétrique, irréductible et même régulier (cette hypothèse peut être relaxée, cf. [107]). Soit M le plus petit entier tel que $Q^M > 0$. La transition de Metropolis associée à $U_k = \beta_k(U(x) + \lambda_k C(x))$ est, pour $x \neq y$:

$$P_k(x) = Q(x,y) \exp -[U_k(y) - U_k(x)]^+$$

Soient (β_k) et (λ_k) deux suites croissant vers $+\infty$. On a alors :

Proposition 3.16 ***Simulation et optimisation sous contrainte*** *(dynamique de Metropolis, Yao [107]).*

(1) Pour $\beta_k \equiv 1$, la chaîne (P_k) réalise la simulation de π_C dès que

$$\sum_{k \geq 0} \exp -\{M\Gamma\lambda_{kM}\} = +\infty$$

(2) La chaîne (P_k) réalise l'optimisation de U sur $E(C)$ dès que

$$\sum_{k \geq 0} \exp -[M\beta_{kM}\{\Delta + \lambda_{kM}\Gamma\}] = +\infty$$

Un schéma naturel consiste à laisser constant, par palier de longueur l, les paramètres β et λ : si $l = M$ et si β_k et λ_k sont les valeurs sur le k-ième palier, les conditions d'ergodicité s'obtiennent en remplaçant dans les critères précédents l'indice kM par k.

3.4 Exercices

Exercice 3.1 *Contraction sur un espace à 2 états*

Soient les transitions $P = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ b & 1-b \end{pmatrix}$ et $Q = \begin{pmatrix} 1-a' & a' \\ b' & 1-b' \end{pmatrix}$.

(1) Montrer que $c(P) = |1-(a+b)|$.

(2) Vérifier que $c(PQ) = c(P)c(Q)$.

(3) Pour deux lois μ et ν, vérifier que $\|\mu P - \nu P\| = \|\mu - \nu\| \, c(P)$

Exercice 3.2 *Quelques calculs de coefficients de contraction*

(1) Soit la transition $P = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$.

Calculer $c(P)$, $c(P^2)$. Comparer $c(P^2)$, $c(P)^2$ et $(1 - 4\inf_{x,y} P^2(x,y))$.

(2) Soit la loi $\pi(x_1, x_2) = Z^{-1} \exp \beta x_1 x_2$ sur $\{-1, +1\}^2$. On considère l'échantillonneur de Gibbs de transition $P((x_1, x_2), (y_1, y_2)) = \pi_1(y_1 \mid x_2)\pi_2(y_2 \mid y_1)$. Calculer $c(P)$ et comparer à la majoration $1 - 4\inf_{x,y} P(x,y)$.

(3) Soit la loi π sur $E = \{1, 2, \cdots, r\}$ définie par une famille (a_i), $\pi_i = Z^{-1} \exp a_i$. Expliciter la dynamique de Metropolis pour la proposition de changement : $\forall i, j \in E$, $q(i,j) = \frac{1}{r}$. Donner une majoration de $c(P)$ à partir de l'oscillation $\delta(a)$ de a.

Exercice 3.3 *Etude de la corrélation d'une chaîne binaire*

Sur $E = \{-1, +1\}$, on considère la chaîne stationnaire $X = (X_0, X_1, \cdots)$ de transition P, $P(x,x) = a, x = \pm 1$, $0 < a < 1$, et de loi initiale $\pi = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Soit $f : E \to \mathbb{R}$, $f(+1) = -f(-1) = \alpha$.

(1) Diagonaliser P et évaluer $c(P^n)$. Calculer $c_n(a) = cov(f(X_0), f(X_{n-1}))$.

(2) Vérifier le résultat :

$$\lim_{n\to\infty}[Var \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1,n} f(X_i)] = v(a) = v(f, \pi, P) = \frac{1+\lambda}{1-\lambda}\langle f, e\rangle_\pi^2$$

où λ est la valeur propre de P différente de 1, et e le vecteur propre associé de norme 1 dans $l^2(\pi)$. Etudier la fonction $a \mapsto v(a)$.

Exercice 3.4 *Sur la majoration $c(PQ) \leq c(P)c(Q)$*

Soit la chaîne de transitions $P_{2n-1} = P$, $P_{2n} = Q$, $n \geq 1$, où $P = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ et $Q = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

(1) Calculer $c(P), c(Q)$ et $c(PQ)$.

(2) Calculer $c(P_1 P_2 \cdots P_{2n})$ et comparer à $c(P_1)c(P_2)\cdots c(P_{2n})$.

Exercice 3.5 *De l'importance de la condition : $\forall m$ dans (3.5)*

Soient les transitions : $P_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$, $P_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$, $P_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{n^2} & 1 - \frac{1}{n^2} \\ 1 - \frac{1}{n^2} & \frac{1}{n^2} \end{pmatrix}$ si $n \geq 3$.

(1) Calculer $P_1 P_2$ et $P_1 P_2 P_3$. Montrer que $Q_n = P_1 P_2 \cdots P_n = \begin{pmatrix} a_n & 1 - a_n \\ a_n & 1 - a_n \end{pmatrix}$.

(2) En déduire que pour $n \geq 2$, X_n est indépendante de X_1. Ce résultat reste-t-il vrai entre X_m et X_{m+n}, $m \geq 2$, $n \geq 1$?

Exercice 3.6 *Chaîne faiblement ergodique et non fortement ergodique*

Montrer que la chaîne suivante est faiblement, mais non fortement ergodique :

$$P_{2n-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, P_{2n} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 - \frac{1}{2n} & \frac{1}{2n} \end{pmatrix}, n \geq 1$$

Exercice 3.7 *Chaîne fortement ergodique*

Soient pour $n \geq 2$, $P_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} + \frac{1}{n} & \frac{2}{3} - \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$. Démontrer que (P_n) est fortement ergodique.

Exercice 3.8 *Marche aléatoire avec barrière réfléchissante*

Soient a, c et $b = (1-(a+c))$ trois réels > 0 et la transition P sur $E = \{1, 2, \cdots, n\}$ caractérisée par : $P_{i,i+1} = c$ pour $1 \leq i \leq n-1$, $P_{i,i-1} = a$ pour $2 \leq i \leq n$, $P_{1,1} = a+b$ et $P_{n,n} = b+c$.

(1) Identifier la plus petite puissance r telle que $P^r > 0$. Si $b \geq c \geq a > 0$, vérifier que, pour cet r, $\inf_{i,j} P^r(i,j) = P^r(n,1)$. En déduire une majoration de $c(P^r)$.

Dans toute la suite, on prend $n = 3$ et $b \geq c \geq a > 0$ ($b_k \geq c_k \geq a_k > 0$ si ces paramètres sont indexés en k) ; on note $P_{a,c}$ la transition de paramètres a et c.

(2) Déterminer la loi invariante de $P_{a,c}$ et calculer $c(P_{a,c})$.

(3) Soit (P_k) la chaîne inhomogène de paramètres $(a_k, c_k)_{k\geq 1}$. Pour $a_k = c_k \to 0$, donner une condition suffisante d'ergodicité forte de (P_k). Pour $a_k = \frac{1}{k}$ et $c_k = \frac{1}{\sqrt{k}}$, $k \geq 3$, (P_k) est-elle fortement ergodique ?

Exercice 3.9 *Le problème du voyageur de commerce*

Un voyageur de commerce doit visiter $(N+1)$ villes $V_0, V_1, \cdots, V_N$: il part de V_0, y revient à la fin de son tour, et passe une fois et une seule par toutes les autres villes. L'ensemble E de ces tours $x = (x_0, x_1, x_2, \cdots, x_N, x_0)$ ($x_0 \equiv V_0$) s'identifie à l'ensemble des permutations de $\{1, 2, \cdots, N\}$: si σ est une permutation, le tour est

$$0 \mapsto \sigma(1) \mapsto \sigma(2) \mapsto \cdots \mapsto \sigma(N) \mapsto 0$$

Notons $d(i,j)$ la distance entre les villes V_i et V_j. Le voyageur de commerce veut organiser au mieux son tour, c'est à dire minimiser la longueur $U(x)$ de son tour x :

$$U(x) = \sum_{i=0}^{N} d(x_i, x_{i+1})$$

On considère les 4 noyaux de propositions Q suivants :

(1) Q_1, *échange de deux villes* : on choisit au hasard deux villes x_i et x_j différentes (hors V_0) et on échange ces deux villes dans le parcours.

(2) Q_2, *échange de deux villes consécutives* : la même chose mais sur x_i, x_{i+1}, $1 \leq i \leq N-1$.

(3) Q_3, *retournement d'un segment* : on choisit au hasard un couple (i,j) avec $1 \leq i < j \leq N$. Un tel couple définit un segment $[x_i \mapsto x_{i+1} \mapsto \cdots \mapsto x_j]$ que l'on retourne en $[x_j \mapsto x_{j-1} \mapsto \cdots \mapsto x_i]$. Ainsi $x_{i-1} \mapsto x_i$ (resp. $x_j \mapsto x_{j+1}$) est changé en $x_{i-1} \mapsto x_j$ (resp. $x_i \mapsto x_{j+1}$) et on va de x_j à x_i par le chemin retourné.

(4) Q_4, *insertion d'une ville* : choisir i au hasard dans $\{1, 2, \cdots, N\}$ et j au hasard dans $\{0, 1, 2, \cdots, N\}$. Déplacer x_i en l'insérant entre j et $j+1$.

Illustrer graphiquement ces quatre propositions de changements. Etudier la symétrie et l'irréductiblité de ces transitions. Expliciter la dynamique de Metropolis. Sur un exemple que vous choisirez, simuler la loi $\pi_T = Z^{-1} \exp -\frac{U}{T}$ pour $T = 1, 0.1$ et 0.01. Représenter les parcours obtenus.

Exercice 3.10 *Le problème du voyageur de commerce avec contrainte*

On est dans le contexte de l'exercice précédent. Les $(N+1)$ villes appartiennent à p ($p \geq 2$) pays $B_0, B_1, \cdots, B_{p-1}$, et $V_0 \in B_0$, le pays d'origine du voyageur. La contrainte est la suivante : lorsque on entre dans un nouveau pays B_j ($j \neq 0$), on est tenu de visiter toutes les villes de ce pays avant d'en ressortir (droit d'entrée important).

(1) Proposer une (des) contrainte(s) $C : E \to \mathbb{R}^+$ évaluant le respect de ces règles.

(2) Programmer l'optimisation sous contrainte sur un exemple simple.

Exercice 3.11 *Matrice à largeur de bande minimun*

$A_0 = (A_0(i,j))_{i,j=1,n}$ est une matrice dont la majorité des coefficients est nulle (matrice creuse). On cherche à regrouper les termes non nuls autour de la diagonale par permutations successives des lignes et des colonnes. Soit E la classe de toutes les matrices que l'on peut ainsi obtenir à partir de A_0. Le problème est donc de minimiser la fonction U sur E :

$$U(A) = \sum_{i,j=1}^{n} d(i,j)\mathbf{1}\{A(i,j) \neq 0\}$$

pour d une pseudo-distance sur $\{1, 2, \cdots, n\}$. Soit Q la transition de proposition de changement suivante : on permute deux lignes, puis deux colonnes, les lignes permutées comme les colonnes permutées étant choisies au hasard.

(1) Montrer que Q est symétrique et irréductible.

(2) Décrire l'algorithme de Métropolis à température constante en précisant le calcul de ΔU.

(3) Prendre $n = 100$, $(A_0(i,j))_{i,j=1,100}$ i.i.d. Bernoulli de paramètre 0.05, $d(i,j) = |i-j|^p$, $p = 1, 2, 4$. Effectuer le RS pour la minimisation de U.

(4) Q est-elle régulière ? Que penser de l'algorithme pour la proposition de changement Q' suivante : avec la probabilité $\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$, on intervertit soit deux lignes, soit deux colonnes, les lignes permutées (resp. les colonnes permutées) étant choisies au hasard.

Exercice 3.12 *Coupe maximale d'un graphe*

$S = \{1, 2, \cdots, n\}$ est l'ensemble des sommets d'un graphe valué non-orienté, l'arête $\langle i,j \rangle$ ayant le poids $b_{ij} > 0$. Soit $E = \mathcal{P}(S)$ est l'ensemble des parties de S et $U : E \to \mathbb{R}$ une fonction définie par :

$$\text{Pour } A \subseteq S : U(A) = \sum_{\langle i,j \rangle : i \in A, j \notin A} b_{ij}$$

On note $a_i = \sum_{j \in \partial i} b_{ij}$ où $\partial i = \{j \in S, \langle i,j \rangle\}$. $\mathcal{P}(S)$, qui n'est pas un ensemble produit, peut être mis en bijection avec $\Omega = \{0,1\}^S$:

$$A \leftrightarrow x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \text{ avec } x_i = \begin{cases} 1 \text{ si } i \in A \\ 0 \text{ si } i \notin A \end{cases}$$

On vérifie que $U(A)$ s'écrit en fonction de x :

$$U(x) = \sum_{i \in S} a_i x_i - 2 \sum_{\langle i,j \rangle} b_{ij} x_i x_j$$

Cette correspondance fait de E un ensemble produit et elle permet d'utiliser la dynamique de Gibbs pour l'optimisation de U par le RS. Pour $\beta > 0$, soit $\pi_\beta(x) = Z^{-1}(\beta)\exp\{\beta U(x)\}$.

(I) *RS pour la dynamique de Gibbs sur* $\Omega = \{0,1\}^n$.

(I-1) Expliciter la loi conditionnelle $\pi_{i,\beta}(x_i \mid x^i)$. Utilisant la positivité des b_{ij}, donner une minoration uniforme en x^i de $\pi_{i,\beta}(0 \mid x^i)$ et de $\pi_{i,\beta}(1 \mid x^i)$. En déduire que, uniformément en x : $\pi_{i,\beta}(x_i \mid x^i) \geq \frac{1}{2}\exp -\{\beta a_i\}$.

(I-2) Soit P_β la transition de l'échantillonneur de Gibbs pour le balayage systématique $1 \to 2 \to 3 \cdots \to n$. Donner une majoration du coefficient de contraction $c(P_\beta)$ de P_β en fonction de β et de $a = \sum_{i \in S} a_i$.

(I-3) Si $(\beta_k)_{k \geq 1}$ est une suite tendant vers $+\infty$, et pour $P_k = P_{\beta_k}$, donner une condition suffisante sur la suite des β assurant que $c(P_1 P_2 \cdots P_k) \to 0$ si $k \to +\infty$.

(II) *RS pour la dynamique de Métropolis sur* $\mathcal{P}(S)$. On choisit la transition de proposition Q suivante faisant passer de $A \to B$:

- avec une probabilité ε, $0 < \varepsilon < 1$, on reste en A ;

•• avec une probabilité $1-\varepsilon$, on choisit au hasard uniforme un site i de S. Deux situations se présentent : (i) si $i \in A$, on passe à $B = A\backslash\{i\}$; (ii) si $i \notin A$, on passe à $B = A \cup \{i\}$. Aucun autre changement n'est autorisé.

(II-1) Expliciter la transition Q. Vérifier que Q est symétrique, irréductible et apériodique.

(II-2) Montrer que pour tout A, B, $Q^{2n}(A,B) > 0$ et donner un minorant de ces probabilités. Cet ordre $r = 2n$ assurant la positivité de Q^r est-il minimal ?

(II-3) Ecrire la transition de Métropolis $P_\beta(A,B)$ associée à l'énergie βU.

(II-4) i étant le site définissant la passage de A à B, vérifier que $U(A) - U(B) \leq a_i$. En déduire une majoration de $c(P_\beta^{2n})$. Donner une condition sur (β_k) assurant la convergence du RS vers le maximun de U.

Exercice 3.13 *Coupe maximale d'un graphe sous contrainte*

On est dans le contexte de l'exercice précédent, le nombre n de sites de S étant pair, $n = 2p$. Proposer une méthode d'optimisation de U sous la contrainte que la coupe doit se faire en deux parties égales :

(1) Soit en réadaptant les transitions de telle sorte que l'on reste dans l'espace contraint $E(C) = \{A \subset S : |A| = p\}$.

(2) Soit en définissant une contrainte $C : E \to \mathbb{R}$ et en utilisant la procédure de simulation sous contrainte.

Exercice 3.14 *Coloriage d'une carte*

Une carte est la donnée de n pays, $S = \{1, 2, \cdots, n\}$, et d'un graphe de voisinage sur S : $\langle i,j\rangle$ si i et j sont deux pays voisins. On veut réaliser un coloriage de la carte avec K couleurs $F = \{c_1, c_2, \cdots, c_K\}$. Un coloriage étant repéré par $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \in E = F^S$, on cherche à réaliser un coloriage minimisant :

$$U(x) = \sum_{\langle i,j\rangle} \mathbf{1}(x_i = x_j)$$

On note ∂i l'ensemble des voisins de i, et $n_i(x) = \sum_{j\in\partial i} \mathbf{1}(x_j = x_i)$ le nombre de voisins de i de couleur x_i. On note $N = \frac{1}{2}\sum_{i\in S} \mid \partial i \mid$ le nombre d'arêtes du graphe de voisinage.

(1) *Optimisation via l'échantillonneur de Gibbs.* On choisit le balayage $1 \to 2 \to \cdots \to n$, et le long d'un balayage, on fixe la température à β^{-1}.

$(1-1)$ Expliciter $\pi_{i,\beta}(x_i \mid x^i)$ et démontrer que $\pi_{i,\beta}(x_i \mid x^i) \geq k^{-1} \exp -\beta\,|\partial i|$.

$(1-2)$ Expliciter la transition P_β associée à un balayage. Donner une majoration de $c(P_\beta)$. Donner une condition suffisante sur (β_k) assurant que pour tout m, $\lim_{k\to\infty} c(P_m P_{m+1} \cdots P_k) = 0$. En déduire que plus N est grand, plus lente doit être la convergence de (β_k) vers $+\infty$.

(2) *Optimisation pour la dynamique de Metropolis.* Soit Q la transition de proposition de changement suivante : un site i est choisi dans S, uniformément ; en ce site, on propose le changement $x_i \to y_i$, $y_i \neq x_i$, y_i uniforme sur $F\backslash\{x_i\}$; il n'y a pas de changement ailleurs.

$(2-1)$ Expliciter Q. Q est-elle irréductible ? Décrire l'algorithme de Métropolis à température constante. Cet algorithme est-il ergodique ?

$(2-2)$ Q est-elle ergodique ? (on distinguera les cas $K \geq 3$ ou $K = 2$).

(3) Expérimenter l'un ou l'autre de ces algorithmes sur un exemple de carte que vous aurez dessiné à la main avec $K = 3$ et pour la fonction à minimiser

$$U^F(x) = \sum_{\langle i,j\rangle} F_{i,j}$$

où $F_{i,j}$ est la longueur de frontière commune entre les pays i et j. Pour $K = 4$ et des cartes plus complexes, constater que le théorème des 4 couleurs se trouve vérifié.

Exercice 3.15 *Reconstruction d'un système de failles*

On se place sur le domaine $D = [0,1]^2$. Une faille est identifiée par une droite d coupant D. D'autre part, une valuation est associée à cette faille d, $V_d : D \to \{-1,+1\}$, V_d étant constante sur les deux demi-plans définis par d, $+1$ sur l'un, -1 sur l'autre. On sait que n failles exactement, $R = \{d_1, d_2, \cdots, d_n\}$ intersectent D (on connaît n, mais pas R). Donc, pour ce système R, il existe une fonction mesurant la valuation totale $V_R : D \to \mathbb{R}$, $V_R(x,y) = \sum_{i=1,n} V_{d_i}(x,y)$.

L'information disponible est la suivante. On dispose de m puits $\mathcal{X}$ localisés en m sites connus de D, $\mathcal{X} = \{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_m,y_m)\}$. En chacun de ces puits, on connaît la valuation exacte V_i, $i = 1,m$ du réseau réel.

Le problème de reconstruction de R peut être vu comme un problème de simulation sous contrainte : simuler n droites R limites de failles et coupant D sous la contrainte

$$C(R) = \sum_{i=1}^{m} (V_R(x_i,y_i) - V_i)^2 \text{ minimun}$$

(1) Réaliser la simulation sous la contrainte C de la loi π suivante : les n droites valuées sont *i.i.d.* (Indications : une droite d est paramétrée par un couple $(r,\theta) \in \mathbb{R}^+ \times [0,2\pi[$, les paramètres polaires de d. L'équation cartésienne d'une telle droite est

$$d(x,y) = x\cos\theta + y\sin\theta - r = 0$$

On considèrera donc n droites indépendantes **et** coupant D (il faut déterminer le sous-ensemble Δ de $\mathbb{R}^+ \times [0,2\pi[$ acceptable). Le tirage au hasard d'une droite d correspond au tirage au hasard uniforme d'un point de Δ. Le choix de la valuation peut être effectué ainsi : soit ε une variable uniforme sur $\{-1,+1\}$ indépendante de d ; la valuation de d en un point (x,y) pour une droite d est : $V_d(x,y) = signe(\varepsilon d(x,y)))$.

(2) Même problème, mais on ne connaît pas a priori le nombre n de failles coupant D.

Exercice 3.16 *Recuit simulé à deux états, $E = \{0,1\}$ ([101])*

On considère la suite de transitions où $h_0 > h_1 > 0$, et $(a_n) \uparrow +\infty$: $P_n = \begin{pmatrix} 1 - e^{-h_0 a_n} & e^{-h_0 a_n} \\ e^{-h_1 a_n} & 1 - e^{-h_1 a_n} \end{pmatrix}$

(1) On prend n grand de telle sorte que sorte que $\alpha_n \triangleq e^{-h_0 a_n} + e^{-h_1 a_n} < 1$. Montrer que $c(P_n) = 1 - \alpha_n$. Quelle est la loi invariante π_n de P_n ?

(2) Calculer $\sum_n \|\pi_n - \pi_{n+1}\|$. Identifier la limite π_∞ de (π_n).

(3) Donner une condition sur (a_n) assurant que la chaîne est fortement ergodique.

Commentaires **:** On fixe la loi uniforme comme loi initiale et on note $e_k = P(X_k = 1)$ la probabilité que l'algorithme ne donne pas le maximun recherché. Fixons un n (le nombre de pas du R.S.) et considérons le problème

$$\begin{cases} \text{Minimiser } e_n = P(X_n = 1) \\ \text{parmi les schémas : } T_1 \geq T_2 \geq \cdots \geq T_n \end{cases}$$

On a le résultat asymptotique suivant ([101], notons que ici le schéma n'est pas triangulaire) : la solution est contrôlée par deux constantes positives R_1 et R_2, avec $R_1 + \frac{\log n}{h_1} \leq \frac{1}{T_n^{opt}} \leq R_2 + \frac{\log n}{h_1}$. Commenter ce résultat en relation à (3). D'autre part, pour ce schéma, $e_n = 0(n^{-\alpha})$ avec $\alpha = \frac{h_0 - h_1}{h_1}$.

Exercice 3.17 *Graphes, arbres, lois invariantes et grandes déviations (Trouvé, [101];[29])*

(1) On considère P une transition irréductible sur E fini. On associe à P son graphe (orienté) $\mathcal{G} : x \mapsto y$ si $P(x,y) > 0$. Un sous-graphe g de $\mathcal{G}$ est un sous-ensemble de flèches. Chaque sous-graphe g est valué par un poids $\pi(g) = \prod_{x \mapsto y \in g} P(x,y)$.

Un arbre g conduisant à un point $x \in E$ est un sous-graphe de $\mathcal{G}$ regroupant tous des points de E et pour lequel : (i) chaque $y \in E\backslash\{x\}$ est l'origine d'une unique flèche dans g ; (ii) x n'est l'origine d'aucune flèche ; (iii) il n'y a pas de cycle dans g. On note $\mathcal{G}(x)$ l'ensemble des arbres conduisant à x. Démontrer la formule suivante (lemme de Bott-Mayberry) : l'unique loi invariante de P est donnée par $\pi(x) = c\sum_{g\in\mathcal{G}(x)} \pi(g)$.
(2) On se donne une transition irréductible q sur E et on considère le noyau de Metropolis généralisé suivant :

$$P_T(x,y) = q(x,y)\exp[-\frac{1}{T}V(x,y)] \quad \text{pour } x \neq y,\, T > 0$$

où V est un coût de communication sur $E\backslash\{(x,x), x \in E\}$ valant $+\infty$ si et seulement si $q(x,y) = 0$. P_T et q ont le même graphe de communication $\mathcal{G}$. On définit l'énergie virtuelle W par $W(x) = \min\{V(g), g \in \mathcal{G}(x)\}$ où $V(g) = \sum_{x\mapsto y\in g} V(x,y)$.

Démontrer que lorsque $T \to 0$, les lois invariantes π_T de P_T satisfont le principe de grandes déviations

$$\lim_{T\to 0} T\log \pi_T(x) = -[W(x) - W_*] \text{ pour } x \in E\backslash E_*$$

où $\mathrm{W}_* = \min_{y\in E} W(y)$, $E_* = \{y \in E : W(y) = W_*\}$.

Chapitre 4

Champ de Markov et problèmes inverses

Nous allons voir comment l'association d'une modélisation markovienne avec un critère de choix bayésien fournit un outil mathématiquent rigoureux et numériquement performant pour la résolution de problèmes inverses.

Nous commencerons par définir la notion de champ de Gibbs et donnerons la correspondance avec les champs de Markov. Nous présenterons en premier lieu les modèles latticiels définis sur un ensemble fini de sites $S = \{1, 2, \cdots, n\}$. Puis nous donnerons la définition des processus markoviens d'objets, modèles qui généralisent les processus ponctuels de Markov et qui sont des outils de base en géométrie stochastique.

Présentant quelques exemples de problèmes inverses en théorie du signal ou en imagerie, nous montrerons comment une modélisation de Markov peut capter convenablement l'information a priori que l'on a sur le problème, information importante pour sa résolution.

Nous verrons alors que les algorithmes stochastiques, de simulation ou d'optimisation, dont la construction est liée à notre critère, fournissent des méthodes numériques structurées et efficaces pour résoudre un problème inverse.

4.1 Modèle de Gibbs et champ de Markov

Soit $S = \{1, 2, \cdots, n\}$ un ensemble fini de sites, $(F, \mathcal{F})$ un espace d'état mesurable muni d'une mesure de référence ν. Si F est discret, on prendra pour $\mathcal{F}$ la tribu discrète. Si F est fini, ν est la mesure de comptage. Si $F = \mathbb{R}^p$, on prendra pour $\mathcal{F}$ la tribu borélienne et ν sera en général une mesure absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue. Notons $E = F^S$, $\mathcal{E} = \mathcal{F}^{\otimes S}$ et $\mu = \nu^{\otimes S}$. Une configuration sur S est notée $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$, y ou z. Quelques références sur les modèles de Gibbs sur un réseau fini sont : Besag ([10]), Kinderman et Snell ([64]), Prum ([85]) et Guyon ([47]). Nous n'aborderons pas ici l'étude, beaucoup plus délicate, des champs de Gibbs sur un réseau infini : une bonne référence sur le sujet est le livre de Georgii [41].

4.1.1 Modèle de Gibbs

Soit U une application mesurable de E dans $\mathbb{R}$. Un *modèle de Gibbs* sur $(E, \mathcal{E})$ d'*énergie* U est une loi π absolument continue par rapport à μ, de densité π

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp U(x)$$

Cette écriture n'a de sens que si l'énergie U est *admissible*, c'est-à-dire si

$$Z = \int_E \exp\{U(y)\} \ \mu(dy) < \infty$$

Une telle densité $\pi(x)$ est partout strictement positive. A l'inverse, toute densité strictement positive s'écrit de cette façon en prenant par exemple pour énergie $U = \log \pi$. Spécifions davantage notre modèle.

Soit $\mathcal{C}$ une famille de parties de S contenant, par convention, l'ensemble vide et tous les singletons de S. Une partie A de $\mathcal{C}$ est appelée une *clique*. On dit que U *dérive d'un potentiel* $\Phi = \{\Phi_A, A \in \mathcal{C}\}$ si

$$U = \sum_{A \in \mathcal{C}} \Phi_A$$

où $\Phi_A : F^A \to \mathbb{R}$, le *potentiel* attaché à la clique $A \subset S$, ne dépend que des coordonnées de x dans A, $\Phi_A(x) = \Phi_A(x_A)$. On notera π_Φ le champ associé à Φ, mais si il n'y a pas d'ambiguité, on pourra oublier l'indice Φ. Si on veut engendrer un modèle non-saturé, on choisira $\mathcal{C}$ différent de $\mathcal{P}(S)$. Pour $A = \{i\}$ (resp. $A = \{i, j\}$, $A = \{i, j, k\}$...), on parle de potentiel de singleton (resp. de potentiel de paire, de triplet ....).

4.1.2 Spécification conditionnelle et propriété de Markov

Lois conditionnelles

Les *lois conditionnelles* $\pi_B(. \mid x^B)$, $B \subset S$, dérivent de l'énergie

$$U_B(x_B \mid x^B) = \sum_{A \in \mathcal{C} : A \cap B \neq \emptyset} \Phi_A(x)$$

$$\pi_B(x_B \mid x^B) = Z_B^{-1}(x^B) \exp U_B(x_B \mid x^B)$$

$Z_B(x^B) = \sum_{a_B} \exp U_B(a_B \mid x^B)$ est la constante de normalisation.

Graphe de Markov du modèle de Gibbs

A la famille de cliques $\mathcal{C}$ on associe le *graphe de voisinage* de Markov $\mathcal{G} = \mathcal{G}(\mathcal{C})$, symétrique suivant, $\langle i, j \rangle$ traduisant l'existence d'une arête entre i et j,

$$\text{Pour } i \neq j \text{ dans } S : \langle i, j \rangle \Longleftrightarrow \exists A \in \mathcal{C} \text{ telle que } \{i, j\} \subset A \tag{4.1}$$

Notons $\partial B = \{j \in S : \exists i \in B \text{ t.q. } \langle i, j \rangle\}$ la *frontière de voisinage* de B. On vérifie facilement que la loi conditionnelle $\pi_B(. \mid x^B)$ ne dépend de x^B que par l'intermédiaire de $x_{\partial B}$. En particulier $\pi_i(. \mid x^i)$ dépend de x_j seulement si j est voisin de i,

$$\pi_i(x_i \mid x^i) = \pi_i(x_i \mid x_{\partial i}) = Z_i^{-1}(x_{\partial i}) \exp U_i(x_i \mid x_{\partial i})$$

4.1.3 Champ de Markov et champ de Gibbs

Supposons F *discret*. Un champ de Markov ϖ sur $E = F^S$ associé à un graphe symétrique $\mathcal{G}$ est une loi telle que, pour toute partie B de S, la loi conditionnelle est locale au sens suivant,

$$\varpi_B(. \mid x^B) = \varpi_B(. \mid x_{\partial B})$$

Définissons alors l'ensemble $\mathcal{C}(\mathcal{G})$ des cliques associées à $\mathcal{G}$: $\emptyset$ et les singletons appartiennent à $\mathcal{C}(\mathcal{G})$, une partie A de S avec au moins deux points étant une clique si

$$A \in \mathcal{C}(\mathcal{G}) \Longleftrightarrow \forall i, j \in A, \langle i, j \rangle \tag{4.2}$$

Proposition 4.1 *(Hammersley-Clifford, [10],[85],[47])*

(i) Tout champ de Gibbs π de famille de cliques $\mathcal{C}$ est un champ de Markov de graphe $\mathcal{G}$ défini par (4.1).

(ii) Réciproquement, tout champ de Markov ϖ de graphe $\mathcal{G}$ vérifiant la condition de positivité : $\forall x \in E$, $\varpi(x) > 0$, est un champ de Gibbs pour la famille de clique $\mathcal{C}$ définie par (4.2).

La correspondance (i) vient d'être explicitée. Précisons (ii). Les potentiels de Gibbs $(\Phi_A, A \in \mathcal{C})$ du champ de Markov s'obtiennent à partir de la formule d'inversion de Mœbius : notons $\mathbf{0}$ un état de référence de F ; alors, si $A \in \mathcal{C}(\mathcal{G})$, et si $\mathbf{0}_B$ est la configuration de $\mathbf{0}$ sur B,

$$\Phi_A(x) = \sum_{B \subset A} (-1)^{|A \backslash B|} H^B(x) \quad \text{où} \quad H^B(x) = \log\{\frac{\varpi_B(x_B \mid x_{\partial B})}{\varpi_B(\mathbf{0}_B \mid x_{\partial B})}\}$$

Identifiabilité des potentiels. On dira que la représentation en potentiel Φ est identifiable si $\Phi \to \pi_\Phi$ est injective. Si l'énergie U (resp. le potentiel Φ_A) est modifiée en $U+c$ (resp. en Φ_A+c) où c est une constante, la loi π associée est inchangée. Il faut donc imposer des contraintes pour rendre Φ identifiable. Il est facile de vérifier que les contraintes suivantes rendent Φ identifiable,

$$\forall A \neq \emptyset, \Phi_A(x) = 0 \text{ pour tout } x \in E \text{ dès que } \exists i \in A \text{ avec } x_i = 0 \tag{4.3}$$

Il existe d'autres jeux de contraintes rendant Φ identifiable, par exemple celles de l'analyse de la variance. Ces conditions d'identifiabilité prennent toute leur importance dans l'analyse statistique des modèles log-linéaires. Ici, elles sont secondaires.

4.1.4 Exemples

Modèles d'Ising sur le cube d-dimensionnel

Soit $S = \{1, 2, \cdots, N\}^d$, $F = \{-1, +1\}$ et la relation de voisinage aux $2d$-ppv : $\langle i, j \rangle \Longleftrightarrow \|i - j\|_1 = 1$. Le modèle d'Ising de champ extérieur h et d'interaction de paire β est le modèle d'énergie

$$U(x) = h \sum_S x_i + \beta \sum_{\langle i,j \rangle} x_i x_j$$

Les auto-modèles de Besag ([10] ; [47], §2.2.3)

Definition 1 *Un champ π à valeurs réelles ($F \subset \mathbb{R}$) est un auto-modèle si sa loi π est d'énergie U*

$$U(x) = \sum_S \Phi_i(x_i) + \sum_{\{i,j\}, i \neq j} \beta_{i,j} x_i x_j \tag{4.4}$$

Seuls sont autorisés les potentiels de sigletons et les potentiels de paires, les potentiels de paires ayant la forme particulière $\Phi_{\{i,j\}}(x_i, x_j) = \beta_{i,j} x_i x_j$ (automatiquement, $\beta_{i,j} = \beta_{j,i}$). Quitte à changer la mesure de référence en x_i, écrivons $\Phi_i(x_i) = \alpha_i x_i + C_i(x_i)$. Les énergies conditionnelles sont

$$U_i(x_i \mid x^i) = x_i(\alpha_i + \sum_{j:j \neq i} \beta_{i,j} x_j) + C_i(x_i) \tag{4.5}$$

Pour chaque i, $\mathcal{L}(X_i \mid x^i)$ appartient à la famille exponentielle de densité

$$f_i(x_i; x^i) = Z^{-1}(x^i) g(x_i) \exp\{x_i \times \theta_i(x^i)\}, \text{ avec } \theta_i(x^i) = \alpha_i + \sum_{j:j \neq i} \beta_{i,j} x_j \tag{4.6}$$

La propriété remarquable d'une telle famille est que si des lois conditionnelles sont de la forme (4.6), elles définissent un modèle joint, l'auto-modèle (4.4) ([10] ; [47], propriété 2.3.). Donnons quelques exemples.

Modèle auto-binomial. Les lois binomiales conditionnelles, $\mathcal{L}(X_i \mid x^i) \sim \mathcal{B}in(m; p_i(x^i))$, $i \in S$, de paramètres

$$p_i(x^i) = [1 + \exp -\{\alpha_i + \sum_{j:j\neq i} \beta_{i,j} x_j\}]^{-1}$$

sont les lois conditionnelles d'un auto-modèle de potentiels

$$\Phi_i(x_i) = \alpha_i x_i + \log\tbinom{m}{x_i} \text{ et } \Phi_{\{i,j\}}(x_i, x_j) = \beta_{ij} x_i x_j$$

Il suffit de remarquer qu'une loi binomiale $B(m,p)$ admet la représentation exponentielle $P(X = x) = \exp\{x \log \frac{p}{1-p} + \log\binom{m}{x} + m \log(1-p)\}$.

Modèle auto-logistique. C'est le modèle précédent avec $m = 1$. Ce modèle est d'énergie

$$U(x) = \sum_i \alpha_i x_i + \sum_{i \neq j} \beta_{ij} x_i x_j$$

Les modèles auto-binomiaux permettent la simulation d'une grande variété de textures. La diversité des modèles (nombre de niveau de gris et loi marginale, portée de la corrélation, isotropie ou non, inhibition, formes organisées ...) est obtenue en jouant sur les paramètres m (nombre de niveaux de gris), ∂i, la forme et la taille de voisinage, α et β les valeurs des paramètres d'interactions. La dynamique utilisée pour la simulation est soit la dynamique de Gibbs, soit la dynamique de Metropolis d'échange de spins (cf. Cross et Jain [18] ; [47], §2.2.4.).

Le modèle *auto-poissonnien* correspond à $F = \mathbb{N}$, avec pour lois conditionnelles aux sites i des lois de Poisson de paramètres

$$\lambda_i(x^i) = \exp\{\alpha_i + \sum_{j:j\neq i} \beta_{i,j} x_j\}$$

Ce modèle est admissible si et seulement si pour tout i, j, $\beta_{ij} \leq 0$. La loi jointe admet pour potentiels $\Phi_i(x_i) = \alpha_i x_i + \log(x_i!)$, $\Phi_{\{i,j\}}(x_i, x_j) = \beta_{ij} x_i x_j$.

Les *modèles gaussiens* sont des *modèles auto-normaux* : en effet, la loi $\mathcal{N}_S(\mu, \Sigma)$ d'énergie quadratique $U(x) = -\frac{1}{2}{}^t(x-\mu)Q(x-\mu)$, de potentiels

$$\Phi_i(x_i) = -\frac{1}{2} q_{ii} x_i^2 + \alpha_i x_i \text{ et pour } i \neq j,\ \Phi_{\{i,j\}}(x) = \beta_{ij} x_i x_j$$

où $Q = (q_{ij}) = \Sigma^{-1}$, $\alpha_i = \sum_{j \in S} q_{ij} \mu_j$, $\beta_{ij} = -\frac{1}{2} q_{ij}$.

Réciproquement, la famille de lois gaussiennes unidimensionnelles $\mathcal{N}(a_i + \sum_{j:j\neq i} c_{ij} x_j, v_i)$, $i \in S$, se recolle en une gaussienne multidimensionnelle si la matrice Q définie par $q_{ii} = v_i^{-1}$ et $q_{ij} = -\frac{c_{ij}}{\nu_i}$, est symétrique et définie positive. Q n'est autre l'inverse de la matrice de covariance de la loi jointe, loi de moyenne $\mu = (I - C)^{-1} a$ (C est la matrice des c_{ij} complétée par des 0 sur la diagonale).

Modèle de plages colorées (Strauss, [96])

Ce modèle est particulièrement simple et fort utile en analyse d'image. Considérons un modèle X à états qualitatifs $F = \{c_1, c_2, \cdots, c_K\}$ (K couleurs, K modalités...) et définit sur S fini et muni de la relation de voisinage $\langle i, j \rangle$. Une configuration de X est repérée par les K plages colorées $S_k = \{i \in S : x_i = c_k\}$, $k = 1, K$. Ces plages forment une partition de S. Définissons les potentiels

$$\begin{cases} \Phi_i(x_i) = \sum_k \alpha_k \mathbf{1}(x_i = c_k) \\ \Phi_{\{i,j\}}(x_i, x_j) = \sum_{k \neq l} \beta_{k,l} \mathbf{1}[(x_i, x_j) = (c_k, c_l)] \end{cases}$$

L'énergie retenue pour une configuration x est

$$U(x) = \sum_k \alpha_k n_k + \sum_{k<l} \beta_{k,l} n_{kl} \tag{4.7}$$

où n_k est le nombre de sites de couleur c_k et n_{kl} le nombre de sites voisins de couleurs $\{c_k, c_l\}$. Le paramètre α_k règle l'importance marginale de la couleur c_k ; plus c_k est grand, plus importante sera la plage S_k. $\beta_{k,l}$ contrôle la vraisemblance de configurations voisines (c_k, c_l) ; si on veut interdire le voisinage de deux couleurs c_k et c_l, on choisira β_{kl} grand et négatif ; au contraire, des configurations voisines (c_k, c_l) seront assez probables si $\beta_{kl} > 0$ est grand. Notons que, puisque $\sum_k n_k = n$, le modèle est mal paramétré : on peut fixer par exemple $\alpha_K = 0$. Si les K couleurs sont échangeables (les α_k sont identiques, les $\beta_{k,l}$ sont tous égaux à un même coefficient β), l'énergie est décrite par le seul paramètre β, valant si $n(x) = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{1}(x_i = x_j)$

$$U(x) = -\beta n(x) \tag{4.8a}$$

Plus β est grand négatif, plus il sera probable d'observer des plages régulières.

Modèle à espace d'état mixte $F = \Lambda \times \mathbb{R}^d$

L'espace d'état F peut être multidimensionnel. Supposons par exemple que $Z = (X, Y)$ est à valeur dans $\Lambda \times \mathbb{R}^d$, où, à l'image de l'exemple précédent, $\Lambda = \{c_1, c_2, \cdots, c_K\}$. Une façon classique de modéliser Z est de définir hiérarchiquement la loi : en proposant d'abord un modèle pour X ; puis, pour chaque $x \in \Lambda^S$, en proposant une famille de modèles conditionnels pour $(Y \mid x)$. Par exemple X est un modèle à K couleurs d'energie (4.7). Une réalisation x définit alors une partition de S en K ensembles et on choisit pour $(Y \mid x)$ un modèle où les réalisations de Y sur les plages différentes sont indépendantes entre elles , $\{Y_i, i \in S_k\}$ étant une texture de niveau de gris $\mathcal{T}_k$, $k = 1, K$. On peut choisir pour $\mathcal{T}_k$ un modèle gaussien d-dimensionnel, corrélé ou non à l'intérieur de chaque plage, ou encore un Φ-modèle pénalisant moins les forts gradients de Y. C'est ce type de modèle qui est utilisé pour la segmentation de texture par C. Graffigne ([45]).

Dynamique d'un champ de Markov

Les modèles de dynamiques spatiales (ou modèles spatio-temporels) décrivent de nombreux phénomènes en écologie, épidémiologie, météorologie, économie ou géographie spatiale. Ce sont aussi des modèles utiles pour l'analyse de séquences d'images, la détection du mouvement et plus généralement la robotique. Parmi ces modèles, présentons les Chaînes de Markov-Champ de Markov (MCMF, [9]).

Un processus MCMF $X = (X(t), t \in \mathbb{N})$ est d'abord une chaîne de Markov dans le temps, $X(t) = (X_i(t), i \in S)$ étant l'état au temps t. Ensuite, pour un graphe $\mathcal{G}$ de voisinage instantané $\langle i,j \rangle_{\mathcal{G}}$ sur S (encore noté $\langle i,j \rangle$), $(X(t) \mid X(t-1) = x)$ est un *champ de Gibbs, conditionnel* à x, de potentiels $\Phi^x = (\Phi^x_A)$.

Une classe de modèles simples et maniables est la suivante : notons x (resp. y) l'état au temps $t-1$ (resp.t) : la transition $P(x, y)$ dérive de deux familles de potentiels

$$P(x, y) = Z^{-1}(x) \exp\{\sum_A \Phi_A(y) + \sum_{A,B} \Phi_{B,A}(x, y)\}$$

(Φ_A) sont les potentiels instantanés associés au graphe $\mathcal{G}$. $(\Phi_{B,A})$ sont des potentiels définissant l'interaction temporelle entre les sites. Ils sont associés à $\mathcal{G}^-$, un graphe orienté $(t-1) \to t$ définissant l'influence de $(i, t-1)$, le site i à l'instant $t-1$, sur (j, t), le site j à l'instant t. Par exemple, une dynamique à états $\{0, 1\}$ est :

$$P(x, y) = Z^{-1}(x) \exp\{\alpha \sum_{\langle i,j \rangle^-} x_i y_j + \beta \sum_{\langle i,j \rangle} y_i y_j\}$$

Ces modèles se prêtent bien à la simulation : une fois $X(t-1) = x$ simulé, on simule le champ de Markov $(X(t) \mid x)$, par exemple par l'échantillonneur de Gibbs, sur la base des lois

$$\pi_i(y_i \mid x, y^i) = Z^{-1}(x, y^i) \exp\{\sum_{A:i\in A} [\Phi_A(y) + \sum_B \Phi_{B,A}(x, y)]\}$$

Ces lois s'explicitent facilement. Elles permettent également une étude statistique simple de ces modèles par l'intermédiaire de la pseudovraisemblance (PV)

$$\mathcal{PL}(x(1), x(2), \cdots, x(T) \mid x(0)) = \prod_{t=1,T} \prod_{i\in S} \pi_i(x_i(t) \mid x(t-1), x^i(t))$$

Lorsque la transition P_θ appartient à une famille exponentielle de paramètre θ, cette pseudovraisemblance est concave en θ et les algorithmes déterministes habituels convergent vers l'unique estimateur du maximun de PV.

4.2 Processus ponctuels de Gibbs

Nous avons présenté au chapitre 2 quelques modèles de processus ponctuels. Ces modèles sont définis par leur densité en référence au processus de Poisson. De façon plus générale, des modèles de Gibbs peuvent être définis pour des *objets* u appartenant à un ensemble F de sous-ensembles fermés de $\mathbb{R}^d$ (cf. Matheron [73], [94]). En général, on suppose que F est un espace métrique séparable et localement compact. Par exemple $u = (x, r) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+$ est un disque centré en x et de rayon $r > 0$. On parle aussi de *processus ponctuel marqué* chaque fois que $u = (x, m)$, $x \in \mathbb{R}^p$ repérant le placement de l'objet, et m, la *marque,* contenant les autres informations sur l'objet : taille, orientation, forme... De tels modèles de la *géométrie stochastique* sont utiles en analyse d'image chaque fois que l'observation (dégradée ou non) est issue d'un espace continu. La présentation que nous en donnons ici suit l'article de van Lieshout ([105]).

Une configuration d'objets est un ensemble non-ordonné $x = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ d'objets de F. L'espace de toutes les configurations est l'espace exponentiel $E = \oplus_{n\geq 0} F^n$. Soit μ une mesure finie et non atomique sur F. Pour le modèle de référence sur F, le processus poissonnien d'objet (PPO), le nombre d'objets dans la fenêtre d'observation suit une loi de Poisson de moyenne $\mu(F)$. De plus, si n objets sont présents, ils sont répartis uniformément et indépendamment les uns des autres sur F : $P(x_i \in B) = \frac{\mu(B)}{\mu(F)}$. En particulier, il n'y a pas d'interaction entre les objets.

Pour construire un processus spatial avec interaction, on va spécifier la densité $p : E \to \mathbb{R}^+$ du nouveau processus par rapport à celle du PPO. La distribution du nombre d'objets est

$$q_n = P(N = n) = \frac{e^{-\mu(F)}}{n!} \int_{F^n} p(\{x_1, \cdots, x_n\}) d\mu(x_1) \cdots d\mu(x_n)$$

et conditionnellement à $(N = n)$, la distribution spatiale est

$$p_n(x_1, \cdots, x_n) = \frac{\mu(F)^n e^{-\mu(F)}}{n!\, q_n} p(\{x_1, \cdots, x_n\})$$

Soit $\sim$ une relation symétrique et réflexive sur F : par exemple deux objets sont voisins si leur intersection est non-vide. Une classe particulière de densité est celle des modèles de Gibbs à interactions de paires

$$p(x) = \alpha\beta^{n(x)} \prod_{x_i \sim x_j} g(x_i, x_j) = \alpha\beta^{n(x)} \exp \sum_{x_i \sim x_j} \Phi(x_i, x_j) \tag{4.9}$$

α, β sont deux constantes > 0, $n(x)$ est le nombre d'objets, et $g : F \times F \to \mathbb{R}^+$ est la fonction d'interaction (Φ est le potentiel d'interaction), le produit étant étendu aux objets x_i et x_j tels que $i < j$. La fonction p doit être intégrable, c'est-à-dire Φ doit être admissible.

Le cas $g \equiv 1$ correspond au processus de Poisson d'intensité $\beta\mu(.)$; $g(x, y) \equiv 0$ si $\|x - y\| < r$ au processus à noyau dur de rayon r. Le processus de Strauss (cf. chapitre 2 ; et [95]) correspond lui à $g \equiv \gamma$, γ une constante. $\gamma < 1$ donne des configurations régulières (modèle avec *inhibition*), $\gamma > 1$ et $n(x) \leq n_0$ des confugurations avec agrégations (modèle avec *attraction*). Ce dernier modèle n'est pas retenu dans la littérature parce que : (i) non-admissible (sans la contrainte $n(x) \leq n_0$) et (ii) conduisant à des configurations très instables oscillant entre un P.P.P. et un processus fortement agrégé (cf. [77]).

4.2.1 Propriétés de Markov

Si $u \in F$ et $u \notin x = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ avec $p(x) > 0$, et pour le modèle (4.9), le rapport

$$\frac{p(x \cup \{u\})}{p(x)} = \beta \prod_{x_i : x_i \sim u} g(x_i, u)$$

dépend de u et des seuls objets x_i de x voisins de u. Cette propriété est comparable à celle des champs de Markov. Le rapport $\frac{p(x \cup \{u\})}{p(x)}$ mesure la densité conditionnelle pour qu'un objet soit placé en u étant donnée la configuration x autour. La définition précise d'un objet markovien est due à Ripley et Kelly [87]

Definition 2 *Un objet aléatoire de densité p est markovien pour la relation $\sim$ si pour tout x de E*

(a) $p(x) > 0$ entraine $p(y) > 0$ si $y \subset x$ (propriété d'hérédité)

(b) Si $p(x) > 0$, $\frac{p(x \cup \{u\})}{p(x)}$ dépend uniquement de u et de $\mathcal{N}(u, x) = \{x_i \in x : u \sim x_i\}$, les voisins de u dans x.

Ripley et Kelly ont alors établi l'équivalent du théorème de Hammersley-Clifford : un processus d'objets de densité $p : E \to \mathbb{R}^+$ est markovien si et seulement si

$$p(x) = \prod_{y \subset x,\ y \text{ clique}} q(y) \tag{4.10}$$

Le produit est étendu aux cliques $y \subset x$, les cliques étant définies relativement à la relation $\sim$ sur $F \times F$. Là aussi, comme pour les processus sur un réseau discret, on impose par convention que l'ensemble vide et tous les singletons soient des cliques. $q : E \to \mathbb{R}^+$ est une fonction d'interaction générale.

Ces modèles vérifient la propriété de Markov globale suivante : soit A un sous-ensemble mesurable de F ; alors la distribution de $X \cap A$ conditionnellement à $X \cap A^c$ dépend de X dans le voisinage de $\mathcal{N}(A) \cap A^c = \{u \in A^c : u \sim a \text{ pour un } a \in A\}$

$$\mathcal{L}(X \cap A \mid X \cap A^c) = \mathcal{L}(X \cap A \mid X \cap \mathcal{N}(A) \cap A^c)$$

Les processus markoviens d'objets ont été généralisés par Baddeley et Møller ([7]) au processus d'objets aux plus proche voisins : pour ces modèles, l'interaction (c'est à dire la relation de voisinage) est autorisée à dépendre de la configuration. Par exemple, deux objets de x sont voisins, $x_i \sim_x x_j$ s'ils sont dans une même composante connexe de $\cup_{x_i \in x} x_i$. Une version spécifique du théorème de Hammersley-Clifford existe pour ces modèles ([7]), la généralisation de la propriété de Markov spatiale étant donnée dans ([77], [60]).

4.2.2 Un exemple : le processus d'interaction d'aires

Soit (F, d) l'espace métrique des objets. Un processus d'interaction d'aire ([6]) est défini par la densité

$$p(x) = \alpha \beta^{n(x)} \gamma^{-\nu(S(x))}$$

$\beta, \gamma > 0$ sont deux constantes, $S(x) = \cup_{i=1,n} B(x_i, r)$ est la réunion des d-boules de rayon r centrées aux points de la réalisation x, ν est une mesure totalement finie et régulière sur F. A l'inverse du processus de Strauss, cette densité est admissible sans limitation sur γ. De plus, comme $\nu(S(x)) \leq \nu(F) < \infty$ uniformément en x, la densité par rapport au PPO de densité $\beta\mu(.)$ est uniformément bornée. $\gamma < 1$ correspond à une répartition régulière des objets, d'autant plus régulière que γ est petit (processus d'inhibition) ; $\gamma > 1$ fait apparaître des agrégats.

Pour la relation $u \sim v \Longleftrightarrow B(u, r) \cap B(v, r) \neq \emptyset$ (soit encore $d(u, v) < 2r$), ce processus est markovien au sens de (4.10) et pour la fonction d'interaction q

$$\begin{cases} q(\emptyset) = \alpha \ ; \qquad q(a) = \beta \gamma^{-\nu(B(a,r))} \\ \forall k \geq 2, q(\{y_1, \cdots, y_k\}) = \gamma^{(-1)^k B_k} \text{ avec } B_k = \nu(\cap_{i=1,k} B(y_i, r)) \end{cases}$$

Ce processus a des potentiels de tous ordres. Comme on va le voir, ces modèles d'inhibition ($\gamma < 1$) sont bien adaptés pour la reconstruction d'objets : au même type qu'un critère AIC pour le choix d'un modèle pénalise une dimension trop importante, un modèle d'inhibition pénalisera la reconstruction de plusieurs objets là où dans l'image originale un seul objet est présent.

4.3 Modélisation de Gibbs et problèmes inverses

L'utilisation des modèles de Gibbs pour la résolution bayésienne de problèmes inverses a connu un développement important à partir de l'article fondateur des frères Geman ([37], IEEE-PAMI, 1984). Les domaines couverts sont très larges : l'analyse d'image, le traitement du signal, la reconstruction tridimensionnelle, la detection du mouvement, la robotique et plus généralement la reconnaissance de formes.

Les articles sur ces sujets sont nombreux. Il est indispensable que le lecteur motivé par ces problèmes consulte ces travaux : il y trouvera des éléments importants sur les phénomènes eux-mêmes, le processus de formation de l'observation, et d'autres aspects ad hoc spécifiques à la situation étudiée, exprimés souvent de façon non-mathématique, mais cruciaux pour une bonne prise en compte du problème et pour sa résolution. Nous n'arborderons pas ici ces aspets, nous limitant à citer quelques ouvrages de référence sur le sujet : D.Geman [39], Li [67], Chalmond [16], et, dans le contexte de théorie du signal, O'Ruanaidh et Fitzerald [81]. On trouvera dans ces ouvrages : (i) une bibliographie détaillée ; (ii) des indications sur le problème délicat du choix des paramètres intervenant dans les modèles, en particulier pour le choix du paramètre de régularisation ; (iii) des traitements effectifs de problèmes. On pourra aussi consulter [47] (§2 et §6).

Présentons quelques problèmes inverses, leur modélisation et leur résolution bayésienne par mise en oeuvre d'algorithmes stochastiques.

4.3.1 Formation de l'image et reconstruction bayésienne

Formation de l'image

Soit $x = \{x_s, s \in S\}$ une image (un signal, une forme....) à reconstruire, $x_s \in F$, où S un ensemble fini de site. L'image observée y est définie par le modèle de dégradation

$$y = f(H(x), b),\ y = \{y_t, t \in T\},\ y_t \in F,\ T \text{ fini}$$

H est un filtre, généralement local (mais pas toujours, par exemple pour la tomographie). b est le bruit. f et H résument la déformation déterministe. On supposera que la déformation (f,H) est connue, et que $(x, b) \to (x, y)$ est inversible, c'est-à-dire que b s'explicite univoquement en $(H(x), y)$

$$b = g(H(x), y) \tag{4.11}$$

T n'est pas nécessairement identique à S : par exemple, dans le cas de la tomographie par rayons X, S est l'ensemble des pixels de l'image x à reconstruire, T est l'ensemble des rayons disponibles (orientations$\times$largeur de barrette) et $|T| \ll |S|$ [25]. La situation où H est inconnue recouvre la déconvolution aveugle. Le fait que x_s et y_t prennent leurs valeurs dans le même espace d'état F n'est pas essentiel.

La méthode de reconstruction bayésienne

Restaurer x, ou filtrer x, c'est proposer une estimation $\widehat{x}(y)$ de x sur la base de l'observation y. Si le cardinal de T est très inférieur à celui de S, le problème est fortement sous-déterminé. On dit aussi qu'il est mal posé. Afin de faire face à ces difficultés liées au passage $x \to y$ (bruitage, déformation, sous-détermination), les méthodes bayésiennes proposent d'intégrer une information a priori sur l'objet x à reconstruire, information dont l'objectif est de combler les indéterminations rencontrées. Cette information a priori doit être choisie conjointement par l'expert (qui connaît finement le problème et a un a priori sur x) et par l'ingénieur (qui sait ce qu'est un modèle, et ce que doivent être les qualités numériques d'un algorithme). La démarche est la suivante :

(1) Choisir une "bonne" information a priori sur x, exprimée en terme d'énergie $U(x)$. Plus $U(\widehat{x})$ est importante, plus $\widehat{x}$ est raisonnable pour l'expert, et plus $\widehat{x}$ est probable pour la *distribution a priori* $P(x) = Z_1^{-1} \exp\{U(x)\}$.

(2) Supposant le modèle de bruit b indépendant de x, et d'énergie $V(b)$, la densité jointe (x, y) est, d'après (4.11)

$$P(x, y) = Z_2^{-1} \exp\{U(x) + V(g(H(x), y)\}$$

(3) $\widehat{x}(y)$ est choisi suivant la loi a posteriori $(X \mid y)$

$$P(x \mid y) = Z^{-1}(y) \exp\{U(x) + V(g(H(x), y)\}$$

Notons que $P(x, y)$ et $P(x \mid y)$ ont, à une constante près en y, la même énergie.

(4) Mise en oeuvre par algorithme stochastique du critère de choix pour $\widehat{x}(y)$.

Le terme en V mesure l'attache aux données, le terme en U la régularité a priori de l'objet x. La méthode consiste donc à faire un choix $\widehat{x}$, d'une part cohérent avec l'information a priori (U important), d'autre part s'ajustant bien aux observations y (V grand), ces deux termes variant en sens inverse l'un de l'autre. $U(x)$ est un facteur de pénalisation sur x.

MAP, MPM, MPE et ICM

Dans les phases (3) et (4), le choix doit être précisé.

Le Maximun a posteriori ([37]) : Le MAP minimise le coût moyen associé à la fonction de coût global $C(x, \widehat{x}) = \mathbf{1}(x \neq \widehat{x})$,

$$\widehat{x}(y) = Arg \max_{x} P(x \mid y) \equiv Arg \max_{x \in E} \{U(x) + V(g(H(x), y)\}$$

L'algorithme de recherche de $\widehat{x}$ est un algorithme d'optimisation. Le recuit simulé est l'un des algorithmes (ici stochastique) adaptés à la recherche du MAP.

Le Mode postérieur maximum (MPM, [71]) : ce choix minimise le coût moyen pour la fonction additive et locale $C(x, \widehat{x}) = \sum_{s \in S} \mathbf{1}(x_s \neq \widehat{x}_s)$,

$$\widehat{x}(y) = \{\widehat{x}_s = Arg \max_{x_s \in F} P(x_s \mid y), s \in S\}$$

$P(x_s \mid y)$ est la marginale de X au site s, cela conditionnellement à la connaissance globale de y. En général, on ne connaît pas l'expression analytique de la loi marginale. L'algorithme repose alors sur la simulation de la loi conditionnelle $(X \mid y)$. Si les modèles sur x et sur b sont markoviens, si H est un filtre de portée bornée, la loi à posteriori est markovienne locale. L'échantillonneur de Gibbs est alors un bon algorithme pour réaliser ces simulations. Les probabilités sont alors obtenues par la méthode de Monte Carlo.

L'Espérance postérieure maximum (EPM) : lorsque $x_s \in F \subset \mathbb{R}$, un critère, analogue au MPM mais portant sur l'espérance, est le choix EPM,

$$\widehat{x}(y) = \{\widehat{x}_s = E(X_s \mid y), s \in S\}$$

Là aussi, le calcul de l'espérance reposera sur la simulation de la loi $(X \mid y)$.

Le "Mode conditionnel itératif" (ICM, Besag, [11]) est une variante déterministe et très rapide du recuit simulé pour la reconstruction MAP. Il repose sur la lecture de l'identité suivante,

$$P(x \mid y) = P_s(x_s \mid x^s, y) P(x^s \mid y)$$

Ainsi, relaxer la valeur x_s en s en proposant le mode conditionnel de $(X_s \mid x^s, y)$ ne peut qu'augmenter la probabilité $P(x \mid y)$. On en déduit l'algorithme :

(i) On choisit une suite de balayage des sites, par exemple périodique.

(ii) Si $s = s_k$ est le site visité au temps k, seule la valeur en ce site est changée en

$$x_s(k+1) = Arg \max_{x_s} P_s(x_s \mid x^s(k), y)$$

$P_s(x_s \mid x^s(k), y)$ s'explicitant analytiquement, l'algorithme est très rapide. Par contre, comme pour tout algorithme d'optimisation déterministe, il est crucial de partir d'une bonne initialisation. L'expérience montre qu'il faut arrêter l'algorithme après un petit nombre d'itérations (environ 5 balayages, cf. [11]). En effet, si $k \to P(x_s(k+1) \mid x^s(k), y)$ ne cesse de croître, on observe sur des problèmes réels qu'il n'y a pas de convergence pour la suite d'images $(x(k))_{k \geq 0}$.

4.4 Quelques exemples

4.4.1 Caractère markovien de la loi a posteriori $P(x \mid y)$

Supposons que les énergies $U(x)$ et $V(b)$ dérivent respectivement des potentiels $\Phi = \{\Phi_C(x), C \in \mathcal{C}\}$ et $\Psi = \{\Psi_D(b), D \in \mathcal{D}\}$. L'énergie conditionnelle est alors

$$U(x \mid y) = \sum_{\mathcal{C}} \Phi_C(x) + \sum_{\mathcal{D}} \Psi_D(g(H(x), y)$$

Supposons de plus que la fonction de convolution H soit locale([1])

$$H(x) = \{H_s(x(V_s)), s \in S\}$$

où V_s est une fenêtre locale centrée en s. Alors l'énergie conditionnelle est locale, valant

$$\begin{aligned} U(x \mid y) &= \sum_{\mathcal{C}} \Phi_C(x) + \sum_{\mathcal{D}} \Psi^*_{D^*}(x,y) \\ \text{où } \Psi^*_{D^*}(x,y) &= \Psi_D[(g_s(H_s(x(V_s)), y_s), s \in D)] \text{ et } D^* = \cup_{s\in D} V_s \end{aligned}$$

La nouvelle famille de cliques pour $P(x \mid y)$, qui permettra de construire les spécifications en x et les algorithmes de simulation ou d'optimisation, est : $\mathcal{C}^* = \mathcal{C} \cup \mathcal{D}^*$ où $\mathcal{D}^* = \{D^*, D \in \mathcal{D}\}$.

Examinons le cas particulier d'un modèle de bruit b indépendant. Notant $\mathcal{N}_s$ le voisinage de s pour la loi a priori, le voisinage de dépendance de la loi conditionnelle $P_s(. \mid x^s, y)$ est

$$\mathcal{N}^*_s = \mathcal{N}_s \cup V^2_s \text{ où } V^2_s = \{t \in S : \exists u \in S \text{ t.q. } s \text{ et } t \in V_u\}$$

4.4.2 Segmentation d'image

Un joli exemple de segmentation est étudié par les frères Geman [37]. La segmentation peut être améliorée en introduisant, en plus du processus x des niveaux de gris, un processus de bords δ. Ce modèle de bord va renforcer la segmentation même si, à l'origine, δ n'est pas observé. Un choix judicieux de modèle a priori sur (x, δ) conduit à des reconstructions efficaces. Cet exemple est devenu un classique de la littérature ([37] ; [39] ; [47], §2.4, exemple 3).

Décrivons un exemple important plus élémentaire. Supposons que x soit une image sur S, l'espace d'état étant à K modalités qualitatives (K couleurs, K labels dans un problème de télédétection,....). L'observation y_s au site s est de loi

$$\mathcal{L}(y_s \mid x_s = k) \sim F_k(y_s),\ y_s \in G,\ \ k = 1, K$$

ces lois étant indépendantes site par site. Le modèle a priori retenu pour x est le modèle des plages colorées de Strauss (4.7), modèle d'énergie

$$U(x) = \sum_k \alpha_k n_k + \sum_{k<l} \beta_{k,l} n_{kl}$$

On a déjà discuté de l'effet des paramètres α et β sur la configuration de l'image x, en particulier du rôle de régularisation des paramètres β. Si on écrit $F_k(y_s) = \exp\{u_k(y_s)\}$, alors l'énergie a posteriori devient

$$U(x \mid y) = U(x) + \sum_{s\in S} u_{x_s}(y_s) \tag{4.12}$$

Pour un modèle où les K états sont échangeables, un seul paramètre β caractérise $U(x)$. L'énergie conditionnelle en s est alors,

$$U_s(x_s \mid x^s, y) = \beta n_s(x) + u_{x_s}(y_s) \tag{4.13}$$

Deux exemples classiques de bruits sont les suivants :

[1] Ceci n'est pas le cas en tomographie : la dépendance en x au pixel s va faire intervenir tous les x_t tels que t et s soient sur un même rayon. Les méthodes markoviennes ne peuvent pas être mises en œuvre aussi directement (cf.[25]).

1. *Bruit de transmission de canal* : $F = G$, et $P(y_s \neq x_s) = \varepsilon$, cela uniformément sur les $(K-1)$ valeurs différentes de x_s.
2. *Réponse y_s multidimensionnelle* : c'est la situation courante en télédétection où le satelitte renvoie, pour chaque pixel, les réponses multispectrales de p-capteurs, $F = \mathbb{R}^p$. Dans le cas d'une réponse gaussienne, $F_k \sim N_p(\mu_k, \Sigma_k)$.

Les énergies (4.12) et (4.13) s'explicitent alors facilement.

4.4.3 Détection de ruptures dans un signal

La version signal d'un problème de segmentation est le problème de la détection des ruptures d'un signal, le nombre de classes n'étant pas nécessairement connu ([81],[66]). Décrivons le cadre de ce problème.

Un régime caché $x_t \in F$, temporel ($t \in S = \{1, 2, \cdots, n\}$), gouverne un signal observable $y = \{y_s, s \in S\}$, $y_s \in \mathbb{R}^p$. Le problème est de détecter les instants de changement de régime ou instants de rupture.

Si $r = \{r_t, t \in S\}$, est le processus à valeurs $\{0, 1\}$ des instants de rupture ($r_t = 1$ s'il y a rupture en t), retenons pour modèle a priori sur r le modèle de Bernoulli, les r_i étant i.i.d. $\mathcal{B}er(p)$

$$P(x) = C \exp\{-\alpha n_r\} \text{ avec } \alpha = \log \frac{1-p}{p}$$

n_r est le nombre de ruptures. $\alpha \in \mathbb{R}$ règle la densité de rupture, une valeur positive importante pénalisant un nombre important de ruptures.

Notons $S = I_1 \cup I_2 \cup \cdots \cup I_{n_r+1}$ la partition associée à chaque zone de régime homogène. Si la vraisemblance du modèle sur le l-ième intervalle est estimée par $q(y(I_l), \widehat{\theta}_l)$, d'énergie u, la loi a posteriori est

$$P(r \mid y) = C \exp\{-\alpha n_r + \sum_{l=1}^{n_r+1} u(y(I_l), \widehat{\theta}_l)\} \tag{4.14}$$

Examinons, par exemple, le cas où le changement porte uniquement sur la moyenne,

$$y_t = \mu_l + \varepsilon_t \text{ si } t \in I_l,\ \varepsilon \sim BB(0, \sigma^2)$$

Sur l'intervalle I_l, cette moyenne est estimée par $\overline{y}_l$, et la variance résiduelle par $\widehat{\sigma^2}(r) = \frac{1}{n} \sum_{l=1,n_r+1} \sum_{t \in I_l} (y_t - \overline{y}_l)^2$. L'énergie a posteriori est alors

$$U(r \mid y) = \frac{n}{2} \log \widehat{\sigma^2}(r) - \alpha n_r$$

4.4.4 Reconnaissance d'objet

Traitons un exemple de reconnaissance d'objet qui relève d'une modélisation sur l'espace continu $\mathbb{R}^2$. Nous suivons à nouveau [105]. L'image initiale est une photo de "granulés" ("pellets") extraite de l'album de textures de Brodatz [13]. Cette photo est scannée en $S = 128 \times 128$ pixels (on est passé à un espace de sites discret). Les granulés seront traités comme des disques de rayons fixe 4 pixels. On suppose que la dégradation est gaussienne additive

$$y_s = H_s(x) + \varepsilon_s,\ s \in S$$

la fonction de brouillage H_s étant portée par la fenêtre 3×3 centrée en s, de poids relatifs 4 au centre, 2 aux 4 p.p.v., et 1 au 4 p.p.v. diagonaux. Le variance du bruit est estimée par seuillage de la distribution des niveaux de gris de y.

Une reconstruction de x par maximun de vraisemblance conduit à l'observation suivante : les granulés sont correctement identifiés mais il y a des réponses multiples, le M.V. faisant parfois apparaître des agrégats autour de vrais objets. Ceci s'explique bien : sans pénalisation, la vraisemblance augmente toujours avec la dimension du modèle et ajouter certains granulés dans certaines zones améliore la vraisemblance sans dégradation (les granulés se recouvrent). Une façon de faire disparaître cet effet et d'imposer une distribution a priori sur x du type modèle d'inhibition, par exemple le modèle d'inhibition de Strauss, ou encore le modèle d'interaction d'aires de Baddeley-van Lieshout. Ces modèles vont pénaliser l'apparition d'agrégats injustifiés. On constate alors que la reconstruction MAP ne présente plus ces défauts de réponses multiples.

Dans [105], l'auteur utilise, pour la simulation comme pour l'optimisation, une dynamique de processus de naissance et de mort (PNM, [76]). Cette dynamique est définie sur l'image discrétisée. Pour l'optimisation par recuit simulé, van Lieshout donne une condition suffisante sur le schéma de température assurant la convergence du recuit simulé [104]. Les dynamiques de Métropolis sont préférées aux dynamiques de PNM [78].

Si on veut travailler directement sur l'objet continu $x \subset \mathbb{R}^2$, les résultats de [98] permettent de contrôler la convergence des simulations. Quant au problème du recuit simulé sur un tel espace, il reste ouvert. Cependant, l'expérience montre qu'une bonne application du R.S. en situation d'espace d'état $E \subset \mathbb{R}^p$ continue à “bien fonctionner”.

4.5 Exercices

Exercice 4.1 *Contraintes d'identifiabilité (4.3) pour un potentiel*

Si F est à K état, et S à n sites, un champ sur $E = F^S$ dépend de $(K^n - 1)$ paramètres. Montrer que l'on retrouve cette dimension en écrivant la représentation en potentiel sous la contrainte (4.3).

Exercice 4.2 *Des lois conditionnelles arbitraires ne se recollent pas*

(1) $A \times B$ est à $m \times n$ éléments. Quelle est la dimension paramétrique jointe de deux familles de lois conditionnelles sans contraintes, $\{f(x \mid b), b \in B\}$ sur A et $\{g(y \mid a), a \in A\}$ sur B ? Quelle est la dimension d'une loi jointe générale sur $A \times B$? Conclusion.

(2) Sur $\mathbb{Z}$, et pour un espace à K états, on considère un noyau homogène $\pi(y \mid x, z) = P(X_0 = y \mid X_{-1} = x, X_1 = z)$. Quelle est la dimension de ce noyau ? Evaluer le nombre de contraintes à imposer afin que ces lois soient celles d'un processus markovien aux deux p.p.v. ?

(3) On considère la famille de lois binomiales, homogènes, $\pi(X_0 = x \mid X_{-1} = x_{-1}, X_1 = x_1) = B(m, \theta(.))$ où $\theta(.) = \frac{\exp A(.)}{1+\exp A(.)}$ avec $A(.) = \alpha + \beta(x_{-1} + x_{+1})^2$. Ces lois conditionnelles se recollent-elles ?

Exercice 4.3 *Processus markovien sur un réseau triangulaire*

Sur le réseau triangulaire plan, on considère le champ de Markov binaire invariant par translation et aux 6 p.p.v.. Décrire les cliques, les potentiels, les lois conditionnelles. Identifier les sous modèles : isotropique ; réversible ($\forall A$, $\Phi_A(x_A)$ est invariant par permutation des indices de x dans A) ; le modèle sans potentiels d'ordre > 2.

Exercice 4.4 *Modèle de Markov bruité*

Soit X le champ de Markov binaire aux 2-p.p.v. sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}$. La transmission $X \to Y$ se fait avec un bruit de canal, indépendant site à site, suivant la loi : $P(X_i = Y_i) = 1 - \varepsilon = 1 - P(Y_i \neq X_i), 0 < \varepsilon < 1$. Expliciter la loi de (X, Y). Y est-il un champ de Markov ? $(X \mid Y)$ est-il un champ de Markov ? Précisez ses lois conditionnelles.

Exercice 4.5 *Modèle bivarié sur* $\{0, 1\}^2$

On considère le modèle bivarié sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}$ d'énergie

$$U(x, y) = \alpha \sum_i x_i + \beta \sum_{\|i-j\|=1} x_i x_j + \gamma \sum_i y_i + \delta \sum_i x_i y_i$$

(1) Expliciter un algorithme de simulation de (X, Y).

(2) Seule y est observée. Expliciter les algorithmes MAP et MPM de reconstruction de x.

(3) On observe n gaussiennes Z, indépendantes entre elles, t.q. $\mathcal{L}(z_i \mid x, y) = \mathcal{L}(z_i \mid y_i) = \mathcal{N}(\mu(y_i), \sigma^2)$. Déterminer la loi jointe de (X, Y, Z) et vérifier que $\pi(y, z \mid x) = \prod_i \pi(y_i, z_i \mid x)$. Calculer $\pi(y_i = 0, z_i \mid x)$ et $\pi(y_i = 1, z_i \mid x)$. En déduire $\pi(z_i \mid x)$, $\pi(z \mid x)$ et $\pi(x, z)$. On observe z. Donner l'algorithme MPM de reconstruction de x.

Exercice 4.6 *Chaîne bruitée observée un site sur deux*

On considère le champ binaire sur $S = \{0, 1, 2, 3, \cdots, 2n\}$ d'énergie

$$U(x) = \alpha \sum_i x_i + \beta \sum_{\|i-j\|=1} x_i x_j + \gamma \sum_{\|i-j\|=2} x_i x_j$$

(1) S est partitionnée en $P \cup I$, l'ensemble de ses indices pairs et l'ensemble de ses indices impairs. Déterminer la loi $\pi_I(x_I \mid x_P)$. Vérifier que $(X_I \mid x_P)$ est une chaîne de Markov, indépendante si $\gamma = 0$.

(2) On suppose $\gamma = 0$. On observe, aux seuls indices $i \in P$, Y_i de loi : $P(Y_i = x_i) = 1 - P(Y_i \neq x_i) = \varepsilon$, ces variables étant indépendantes site par site. On observe y_P. Déterminer les lois $\pi_i(x_i \mid x^i, y_P)$ pour $i \in S$ (examiner séparément les cas $i \in I$ et $i \in P$). Proposer une reconstruction de $(x \mid y_P)$.

Exercice 4.7 *Dégradation exponentielle*

On veut reconstruire un objet $x \in \{0, 1\}^S$, $S = \{1, 2, \cdots, n\}$. On modélise x par :

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp\{\beta \sum_{\langle i,j \rangle} x_i x_j\},\ \beta > 0$$

L'observation disponible $y = (y_i)_{i \in S}$ ($y \in (\mathbb{R}^+)^S$), dégradation de x, suit le modèle suivant : (i) Pour tout i, $\mathcal{L}oi(y_i \mid x) = \mathcal{L}oi(y_i \mid x_i) = \mathcal{E}xp(\lambda(x_i))$ (lois exponentielles, $\lambda(0)$ et $\lambda(1)$ connus) ; (ii) Ces lois sont indépendantes entre elles. Déterminer la loi jointe de (x, y), son énergie ainsi que la loi a posteriori $(x \mid y)$. Identifier les lois conditionnelles $(x_i \mid x^i, y)$. Décrire l'algorithme de reconstruction MPM de x.

Exercice 4.8 *Loi conditionnelle et loi marginale d'un champ de Gibbs*

Soit $X = (X_i, i \in S)$ un champ de Markov binaire sur $\Omega = \{0, 1\}^S$, $S = \{1, 2, \cdots, n\}$, de loi π :

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp U(x),\ \text{où } U(x) = \alpha \sum_S x_i + \beta \sum_{\langle i,j \rangle} x_i x_j$$

(1) Soit k un site de S. Déterminer l'énergie et les potentiels de la loi de $(X^k \mid x_k)$.

(2) Ecrivant $\pi^k(x^k) = \pi(0_k, x^k) + \pi(1_k, x^k)$, identifier l'énergie de la loi marginale π^k de X sur $A = S \backslash \{k\}$,. Constater l'apparition d'un nouveau potentiel $\Phi_{\partial k}$. Préciser le nouveau graphe de voisinage de π^k (on discutera suivant que $\mid \partial k \mid \leq 1$ ou $\mid \partial k \mid > 1$).

Exercice 4.9 *Segmentation et modèle (4.12)*

On considère l'énergie de segmentation définie en (4.12) ainsi que les deux modèles de bruitage décrits à sa suite (bruit de canal, bruit gaussien).

1. Déterminer la loi a posteriori $\pi(x \mid y)$ et les lois conditionnelles $\pi_i(x_i \mid x^i, y)$. Dans le cas du bruitage gaussien, examiner les deux situations : (i) les populations se distinguent uniquement par leurs moyennes (μ_k); (ii) les populations se distinguent uniquement par leurs variances. Décrire les procédures de reconstruction MAP et MPM.

2. Application : prendre $S = \{1, 2, \cdots, 64\}^2$. Choisir une partition en trois couleurs ; la bruiter ; reconstruire la partition initiale.

Exercice 4.10 *Déconvolution*

Sur le tore à une dimension, $S = \{1, 2, \cdots, 64\}$, on considère le signal gaussien autorégressif d'énergie $U(x) = -\frac{1}{2\sigma^2}(\sum_i x_i^2 + 2c\sum_i x_i x_{i+1})$, $|c| < \frac{1}{2}$. Le signal observé est une convolution bruitée par un bruit blanc gaussien $N(0, \sigma_b^2)$,

$$Y_i = \sum_{k=-p}^{p} \theta_k X_{i-k} + \varepsilon_i$$

Le filtre et la variance du bruit sont connus. Expliciter la loi a posteriori $(X \mid y)$, en précisant ses potentiels, ainsi que les lois conditionnelles $\pi_i(x_i \mid x^i, y)$.

Exercice 4.11 *Détection de ruptures*

On reprend le modèle (4.14) décrivant la loi a posteriori dans un problème de détection de rupture, la rupture portant uniquement sur la moyenne. Pour la reconstruction par le MAP, on utilise une dynamique de Metropolis avec le noyau de proposition $q(r, r')$ sur $\{0, 1\}^n$: (i) on choisit un point i de $\{1, 2, \cdots, n\}$ au hasard ; (ii) $r_i' = 1 - r_i$, et $r_j' = r_j$ ailleurs. q est-t-il irréductible ? symétrique ? Calculer la variation d'énergie pour le changement $r \to r'$. Décrire l'algorithme d'optimisation associé.

On souhaite améliorer le noyau q en q' : (i) pour un r t.q. $n_r = 0$ ou n, $q'(r, r') = q(r, r')$; (ii) sinon, on tire une Bernoulli de paramètre p. Si elle vaut 1, on prend encore $q'(r, r') = q(r, r')$; sinon, on choisit au hasard l'une des n_r ruptures de r, on la translate à gauche ou à droite avec la même probabilité et si les deux places places voisines sont libres, ne faisant rien sinon. Expliciter ce noyau. Montrer qu'il est irréductible et symétrique. Ecrire l'algorithme d'optimisation.

Exercice 4.12 *Tomographie Gamma en imagerie médicale ([12])*

Afin de proposer un diagnostic sur l'état d'un organe x, on fait ingérer un produit radioactif par le patient. Ce produit se concentre dans l'organe et émet des photons qui sont captés et amplifiés. On obtient ainsi une image Gamma y de x. Les concentrations dans l'organe sont $x = (x_s, s \in S), x_s \in F = \{c_1, c_2, \cdots, c_K\}$, K valeurs ordonnées et > 0. Les émissions de photons $y = \{y_t, t \in T\}$ sont observées sur une grille T; elles suivent le modèle indépendant en chaque site t, de lois

$$\mathcal{L}(y_t \mid x) = P(\lambda_t(x)) \text{ avec } \lambda_t(x) = \sum_{s \in S} h_{t,s} x_s$$

Le noyau $(h_{t,s})_{t \in T, s \in S}$ est une caractéristique connue de l'appareil. On se propose d'utiliser le modèle a priori sur x

$$\pi(x) = \frac{C}{\prod_s x_s} \exp\{\gamma \sum_{\langle r,s \rangle} |\log x_r - \log x_s|\}$$

(1) Déterminer les lois conditionnelles a posteriori $\pi_s(x_s \mid x^s, y)$.

(2) On cherche à estimer le MAP par un recuit simulé en utilisant la dynamique de Metropolis pour le noyau de proposition suivant : (i) on choisit un site i de S au hasard ; (ii) au site i, notant $c_k = x_s$, x_s est remplacé par x'_s choisit au hasard sur $\{c_{k-1}, c_k, c_{k+1}\}$ (avec un aménagement naturel aux extrémités de F), les autres valeurs étant inchangées. Vérifier que q est symétrique et irréductible. Calculer la variation d'énergie pour un tel changement. Ecrire l'algorithme d'optimisation.

Exercice 4.13 *Décompression d'image*

X est une image à valeurs réelles sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}^2$, $n = 3m$. On transmet l'information $Y = \{y_c, c \in C\}$ où $y_c = \sum_{V_c} x_i$, V_c étant la fenêtre 3×3 autour du point $c = (2+3i, 2+3j)$, $i, j = 0, m-1$ de S. Proposer une modélisation a priori de x permettant sa reconstruction à partir de y si : (1) x est à niveau de gris à variation régulière ; (2) x est à 3 niveaux de gris, avec changement brusque à la frontière.

Chapitre 5

Diagnostic de convergence d'une chaîne

Dans la simulation d'une loi π utilisant la dynamique d'une chaîne de Markov de transition P et de loi initiale ν, les deux questions centrales sont :

(i) Quand arrêter les itérations (*burn-in time*) pour assurer que νP^n et π sont proches ?
(ii) Quel est le biais de la simulation $\|\nu P^n - \pi\|$?

Il existe plusieurs approches pour répondre à ces questions.

(A) La première consiste à *borner la vitesse* $\|\nu P^n - \pi\|$. Dans le cas d'un espace d'état fini, il s'agit d'évaluer le *trou spectral* (*spectral gap*) $s = 1 - |\lambda|$ où λ est la valeur propre de P de plus grand module et $\neq 1$, puisque $\|\nu P^n - \pi\| \leq C(\nu)\,|\lambda|^n$. Les limitations à ce contrôle sont nombreuses :
• L'obtention explicite de bornes appropriées n'est pas connue, même pour des modèles relativement simples et a fortiori pour des modèles plus complexes utiles en pratique. Ceci tient à la grande dimension de l'espace d'état E, c'est-à-dire de la matrice de transition P.
•• Les résultats théoriques existants sont souvent inapplicables. Par exemple, si pour le modèle d'Ising sur $E = \{-1, 1\}^r$, n peut être choisi polynomial en r (cf.[23], [84] et [93] ;([1])), les bornes obtenues sur les coefficients polynomiaux sont telles que le résultat est inapplicable.
••• Ces majorations peuvent être très pessimistes, conduisant à des valeurs de n excessivement grandes. Cette critique s'applique a fortiori aux majorations plus simples et plus grossières, telles celles qui sont basées sur le coefficient de contraction.

(B) Une deuxième approche consiste à proposer des *diagnostics heuristiques* fondés sur un contrôle empirique de la convergence. Le lecteur pourra consulter à ce sujet les deux recueils d'articles, Gilks W.R., Richardson S. et Spiegelhalter D.J. [43] (cf. [86]), et C. Robert [90] ([2]) (cf. [89] et [17]). Si ces méthodes sont raisonnables, elles ne mettent pas à l'abri de problèmes, tel la métastabilité de certains régimes dans lesquelles la chaîne peut séjourner longtemps, laissant croire par là qu'elle est entrée dans son régime stationnaire.

(C) Une troisième approche, récente, est celle de la *simulation exacte* par couplage depuis le passé (*Coupling From The Past, CFTP*). Dans leur article très novateur, J.G. Propp et D.B. Wilson (cf. [84], 1996) proposent un algorithme qui résout simultanément les problèmes (i) et (ii), c'est-à-dire qu'ils proposent un algorithme :

[1] *Un site sur les chaînes de Markov en général est :* http ://www.stat.berkeley.edu/~aldous/book.html
[2] Le site sur le *diagnostic des méthodes MCMC* est :
http ://www.ensae.fr/crest/statistique/robert/McDiag/

(i') détectant automatiquement quand il doit s'arrêter, et
(ii') produisant un échantillon sans biais de π.

L'idée de base est la suivante : on simule, en remontant dans le passé, autant de réalisation de la transitions qu'il y a d'états (soit $r = |E|$ transitions à chaque instant, autant de fois que cela sera nécessaire) ; s'il existe un temps $-T < 0$ tel que les r chaînes démarrées en $-T$ se couplent toutes à l'instant 0 (0 est un instant de *coalescence* des chaînes), alors l'état commun $x(0)$ à l'instant 0 suit *exactement* la loi π. La durée de l'algorithme est aléatoire, mais presque sûrement finie : l'algorithme délivre le label que $X(0) \sim \pi$.

Telle quelle, la méthode est inapplicable parce que : (1) elle fait appel à un trop grand nombre d'opérations (si r, le cardinal de l'espace d'état E, est très grand ; il faut en effet $r \times T$ opérations si le couplage est en $-T$) ; (2) elle demande trop de place mémoire (r places mémoires pour remonter d'une unité dans le temps). Cependant, dans des cas favorables, la mise en œuvre bénéficie de simplifications remarquables qui rendent l'algorithme réalisable. Tel est le cas étudié par Propp et Wilson, où E est muni d'une relation d'ordre partiel qui est préservé par la chaîne de Markov (chaîne de Markov monotone). Se plaçant à la température critique (une bonne frontière entre la faible et la forte dépendance spatiale), Propp et Wilson obtiennent ainsi la simulation exacte d'un modèle d'Ising attractif sur un réseau 512×512, avec un temps de couplage de l'ordre de $T = 30$ balayages, et un temps de réalisation de 10mn sur une station Sparc.

Par son originalité et son efficacité, l'article de Propp et Wilson a redynamisé la recherche sur la simulation par chaîne de Markov([3]). L'un des objectifs est l'extension du CFTP à d'autres contextes que celui étudié par Propp et Wilson (E infini, E sans élément maximal ou sans ordre, dynamique non-monotone, modèle non-attractif), tels les processus ponctuels (W. Kendall [61], O. Häggström, M.N.M. Van Lieshout et J. Møller [48], W. Kendall et J. Møller [62]), les variables multidimensionnelles sur $\mathbb{R}^d$ (D.J. Murdoch et P.J. Green, [80], J. Møller [79]), les champs de Markov non-attractifs (O. Häggstrom et K. Nelander, [49]). D'autre part, le choix d'un "bon couplage" réduisant autant que faire se peut $E(T_*)$ est crucial [56]. Pour faire face à ce problème, J.A. Fill [31] propose une autre stratégie, son nouvel algorithme pouvant s'interrompre plus tôt tout en contrôlant le biais de simulation.

Nous nous limiterons ici à la présentation des principaux résultats de Propp et Wilson.

Signalons que l'approche de V.E. Johnson [55] qui utilise le couplage vers le futur de plusieurs chaînes se trouve à l'interface des approches (B) et (C) (cf. également [32]).

(D) Une dernière approche, due à B. Ycart [111], est liée à l'étude du phénomène de *convergence abrupte* (ou *cutoff*) pour une chaîne. Lorsqu'un tel phénomène est présent, l'étude d'un *temps de fusion* (*merging time*) lié au temps de cutoff permet de proposer un test d'arrêt assurant que la chaîne est entrée dans son régime stationnaire ([109],[72],[110] et ([4])). La méthode est particulièrement bien adaptée au cas d'un espace d'état partiellement ordonné. Cette approche permet en outre l'étude de ce mode de convergence abrupte de νP^t vers π.

Nous commencerons par décrire ce phénomène.

5.1 Phénomène de Cutoff et test d'arrêt d'une chaîne

5.1.1 Convergence abrupte pour une chaîne

Le phénomène de *convergence abrupte* d'une chaîne de Markov, ou *cutoff,* a été observé par Diaconis et Aldous. Le comportement de la convergence est le suivant :

[3] Le site sur la *simulation exacte* est : http ://dimacs.rutgers.edu/~dbwilson/exact.html/#surveys
[4] Disponibles sur le site http ://www.math-info.paris5.fr/~ycart/

Phénomène de Cutoff : il existe t_0 (le *temps de cutoff)* tel que $\forall\varepsilon > 0$;

$$\begin{cases} \bullet \text{ Si } t < (1-\varepsilon)t_0, \left\|\nu P^t - \pi\right\| \simeq 1, \\ \bullet \text{ Si } t > (1+\varepsilon)t_0, \left\|\nu P^t - \pi\right\| \simeq o(1). \end{cases}$$

La convergence est abrupte autour de t_0, la pire qui soit avant t_0, la meilleure après, sans nécessité de la poursuivre au-delà de $(1+\varepsilon)t_0$.

En fait, comme cela va être précisé dans les deux exemples que nous présentons, ce *phénomène est asymptotique* dans un paramètre du modèle lié au nombre d'états de E. Des références générales sur ce phénomène sont Diaconis et altri ([24], [23] et [22]) et Saloff-Coste [91], §2.4.2.

Exemple 1 : La marche aléatoire sur $\{0,1\}^n$

Considérons la marche aléatoire sur $S = \{1, 2, \cdots, n\}$, à état $E = \{0,1\}^n$. Ici, l'asymptotique est en n, la dimension de l'hypercube. A chaque pas, on choisit un site i de S au hasard et on change x_i en $1 - x_i$ en ce site. La transition est $P(x,y) = n^{-1}$ si $\|x-y\|_1 = 1$, 0 sinon. Cette chaîne est symétrique, irréductible (mais périodique), admettant la loi uniforme π comme loi invariante. On a, pour tout état initial x et pour tout $\varepsilon > 0$ ([21],[22]) :

$$\begin{aligned} \lim_{n\to\infty} \left\|P_x^t - \pi\right\| &= 1 \text{ si } t \leq \frac{1}{4}(1-\varepsilon)n\log n \\ \lim_{n\to\infty} \left\|P_x^t - \pi\right\| &= 0 \text{ si } t \geq \frac{1}{4}(1+\varepsilon)n\log n \end{aligned}$$

Puisque $t \to \left\|P_x^t - \pi\right\|$ est décroissante, cela donne une description du mode de convergence lorsque n est grand : la chaîne reste éloignée (au maximun) de sa loi stationnaire π avant $(1-\varepsilon)t_0(n)$ ($t_0(n) = \frac{1}{4}n\log n$) ; puis elle converge abruptement vers π dès que $t = (1+\varepsilon)t_0(n)$, sans nécessité de continuer plus longtemps les simulations. Une description plus précise de ce mode de convergence autour de $t_0(n)$ est donnée dans [22].

Exemple 2 : n-échantillon de chaîne de Markov ([72], [111])

Ce deuxième exemple examine une chaîne pour la simulation d'un n-échantillon d'une loi π sur $E = \{1, 2, \cdots, r\}$: ici r est fixé et l'asymptotique est en n, la taille de l'échantillon. Soit P une transition sur E, réversible, ergodique, de loi invariante π. On veut simuler $\widetilde{\pi} = \pi^{\otimes n}$ sur $\widetilde{E} = E^n$. Pour cela, on considère la chaîne constituée de n-chaînes parallèles et indépendantes de transition P, la transition sur $\widetilde{E}$ étant,

$$\widetilde{P}((i_1, i_2, \cdots, i_n), (j_1, j_2, \cdots, j_n)) = \prod_{k=1,n} P(i_k, j_k)$$

Décomposition spectrale de P. P étant réversible, ses valeurs propres sont réelles,

$$1 = \alpha_1 > \alpha_2 \geq \cdots \geq \alpha_r > -1$$

L'apériodicité entraîne $\alpha_r > -1$. Soit $\alpha = \max\{|\alpha_2|, |\alpha_r|\}$: α contrôle la convergence de P^t vers π. Soit $D = Diag(\sqrt{\pi_i})$. DPD^{-1} est symétrique, de valeurs propres $\{\alpha_l, l = 1, r\}$, de base propre orthonormale associée $\{V_l, l = 1, r\}$. On choisira pour premier vecteur propre (associé à la valeur propre 1) $V_1(i) = \sqrt{\pi(i)}$, $i = 1, r$. Notons enfin $w(i) = \sum_{l:|\alpha_l|=\alpha} V_l^2(i)$, $\widetilde{i} = (i, i, \cdots, i) \in \widetilde{E}$, $\widetilde{P}_i^t$ la loi en t de la chaîne initialisée en $\widetilde{i}$.

On a (Propositions 2.1 et 2.2 de [111]),

Proposition 5.1 *Le temps de cutoff pour* $\widetilde{P}$ *est* $t_0(n) = \frac{\log n}{2\log(1/\alpha)}$ *et pour* $c > 0$ *:*

(i) Si $t > \frac{c+\log n}{2\log(1/\alpha)}$ *:*

$$\left\|\widetilde{P}_i^t - \widetilde{\pi}\right\| < \frac{1}{2}(\exp(\frac{e^{-c}}{\pi(i)}) - 1)^{\frac{1}{2}}$$

(ii) Soit i tel que $w(i) > 0$*. Alors, il existe* $n_0(c)$ *t.q. si* $n > n_0(c)$ *et si* $t < \frac{\log n - c}{2\log(1/\alpha)}$*, on a :*

$$\left\|\widetilde{P}_i^t - \widetilde{\pi}\right\| > 1 - 4\exp\{\frac{-e^c w^2(i)}{8\pi_i(1-\pi_i)}\}$$

Preuve :
(i) Utilisant l'inégalité du produit scalaire, on vérifie facilement que la distance en variation est majorée par la distance du khi-deux

$$\left\|P_i^t - \pi\right\| \le \frac{1}{2}\{\chi(P_i^t, \pi)\}^{\frac{1}{2}}, \text{ où } \chi(P_i^t, \pi) = \sum_{l\in E} \frac{\{P_i^t(l)) - \pi(l)\}^2}{\pi(l)}$$

Il suffira de montrer l'inégalité pour la distance du khi-deux, qui vaut :

$$\chi(P_i^t, \pi) = -1 + \frac{1}{\pi(i)} \sum_{l=1,r} V_l^2(i)\alpha_l^{2t} \text{ pour } t \ge 0$$

Reste à adapter cette formule à $\widetilde{P}$ et $\widetilde{\pi}$. Si $\widetilde{D}$ est la matrice diagonale de $\mathbf{i} = (i_1, i_2, \cdots, i_n)$-ième terme $\sqrt{\pi(i_1)\pi(i_2)\cdots\pi(i_n)}$, $\widetilde{D}\widetilde{P}\widetilde{D}^{-1}$ est le produit de Kronecker de n copies de DPD^{-1}. Le spectre de $\widetilde{D}\widetilde{P}\widetilde{D}^{-1}$ s'obtient ainsi : à toute application $g : \{1, 2, \cdots, n\} \to \{1, 2, \cdots, r\}$, on associe

$$\mathbf{V}_g(\mathbf{i}) = \prod_{l=1,n} V_{g(l)}(i_l)$$

qui est vecteur propre associé à la valeur propre (en notant $n_l = Card(g^{-1}(\{l\}))$

$$\boldsymbol{\alpha}_g = \alpha_1^{n_1} \cdots \alpha_r^{n_r}$$

On obtient ainsi les r^n valeurs/vecteurs propres de $\widetilde{D}\widetilde{P}\widetilde{D}^{-1}$. Isolant celle égale à 1, on obtient :

$$\chi(\widetilde{P}_i^t, \widetilde{\pi}) = -1 + (\frac{1}{\pi(i)} \sum_{l=1,r} V_l^2(i)\alpha_l^{2t})^n$$

D'après le choix de V_1, $\frac{1}{\pi(i)}V_1^2(i)\alpha_1^{2t} = 1$. Puisque $(1+x) \le e^x$, on obtient :

$$\chi(\widetilde{P}_i^t, \widetilde{\pi}) \le -1 + \exp\{n \sum_{l=2,r} \frac{V_l^2(i)}{\pi(i)}\alpha_l^{2t}\} \le -1 + \exp\{\frac{n}{\pi(i)}\alpha^{2t}\}$$

Ainsi, $\chi(\widetilde{P}_{\mathbf{i}}^t, \widetilde{\pi}) \le \eta$ dès que $\frac{n}{\pi(i)}\alpha^{2t} < \log(1+\eta)$, c'est-à-dire dès que

$$t > \frac{\log n}{2\log(1/\alpha)} - \frac{\log \pi(i)}{2\log(1/\alpha)} - \frac{\log(\log(1+\eta))}{2\log(1/\alpha)}$$

C'est le résultat annoncé pour $c = -\log \pi(i) - \log(\log(1+\eta))$.

(ii) On supposera c assez grand de sorte que le terme minorant de l'inégalité annoncée soit ≥ 0. Pour établir l'inégalité, il suffit d'exhiber un sous-ensemble $\mathbf{F}_t \subset E^n$, tel que pour $t < (\log n - c)/(2\log(1/\alpha))$ et $\varepsilon(c,i) = \frac{-e^c w^2(i)}{8\pi_i(1-\pi_i)}$, on a :

$$\widetilde{\pi}(\mathbf{F}_t) > 1 - 2\exp\{\varepsilon(c,i)\} \text{ et } \widetilde{P}_i^t(\mathbf{F}_t) < 2\exp\{\varepsilon(c,i)\}$$

Soit $\mathbf{i} = (i_1, i_2, \cdots, i_n) \in \widetilde{E}$ la valeur échantillonnée par $\widetilde{P}_i^t$ à l'instant t, et, pour $i \in E$, $N_i(\mathbf{i})$ le nombre de coordonnées de $\mathbf{i}$ égales à i. Alors N_i est une loi binomiale $\mathcal{B}in(n, P_i^t)$ sous $\widetilde{P}_i^t$, et une loi binomiale $\mathcal{B}in(n, \pi(i))$ sous $\widetilde{\pi}$. Rappelons que $t \to \left\|P_i^{2t} - \pi\right\|$ est décroissante.

L'idée est de montrer que, sous$\widetilde{P}_i^t$, le nombre $N_i(\mathbf{i})$ est significativement supérieur à $n\pi(i)$, la moyenne de $N_i(\mathbf{i})$ sous $\widetilde{\pi}$. Pour cela, définissons :

$$\mathbf{F}_t = \{i : N_i(i) < n(\pi(i) + \frac{1}{2}[P_i^t(i) - \pi(i)])\}$$

Rappelons que $P_i^t(i) = \sum_{l=1,r} V_l^2(i)\alpha_l^t$. Retenons $t = t(n)$ pair et $c = c(n)$ de sorte que $t = (\log n - c)/(2\log(1/\alpha))$. Alors,

$$P_i^t(i) = \pi(i) + n^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}c} w_i + o(n^{-\frac{1}{2}})$$

Pour cette valeur t, $E(N_i)$ excède $n\pi(i)$ d'un ordre $\sqrt{n}$. Reste à utiliser une inégalité de Chernov relative aux distributions binomiales :

Lemme 5.1 *Soit $B \sim \mathcal{B}in(n,p)$, $b \in]0,1[$, $h(p,b) = (\frac{1-p}{1-b})^{1-b}(\frac{p}{b})^b$. Alors : $P(B > nb) < h^n(p,b)$ si $b > p$ et $P(B < nb) < h^n(p,b)$ si $b < p$.*

Appliquant le lemme à $p = \pi(i)$ (resp. à $p = P_i^t(i)$) et $b = \pi(i) + \frac{1}{2}[P_i^t(i) - \pi(i)]$, on obtient $\widetilde{\pi}(\widetilde{E}\backslash\mathbf{F}_t)$ (resp. $\widetilde{P}_i^t(\mathbf{F}_t) < \exp\{\varepsilon(c,i) + o(1)\}$). D'où le résultat. □

On peut se demander s'il existe un contrôle uniforme dans l'état initial $\mathbf{i} = (i_1, i_2, \cdots, i_n)$ de la chaîne. La réponse est oui (Proposition 2.4, [111]) : pour toute fonction $c(n) \to +\infty$, posant $t^-(n) = \max\{0, \frac{\log n}{2\log(1/\alpha)} - c(n)\}$, $t^+(n) = \frac{\log n}{2\log(1/\alpha)} + c(n)$, on a :

$$\lim_{n\to\infty} \left\|\widetilde{P}_{\mathbf{i}}^{t^-(n)} - \widetilde{\pi}\right\| = 1 \text{ et } \lim_{n\to\infty} \left\|\widetilde{P}_{\mathbf{i}}^{t^+(n)} - \widetilde{\pi}\right\| = 0$$

dès que pour $\mathbf{i} = (i_1, i_2, \cdots, i_n)$, chaque modalité $i \in E$ est de fréquence asymptotique > 0 dans $\mathbf{i}$.

5.1.2 Exemple 2 (suite) : temps de fusion et règle d'arrêt [110]

Soit $f : E \to \mathbb{R}$ et $\{X(t)\}_{t\geq 0} = \{X_1(t), X_2(t), \cdots, X_n(t)\}_{t\geq 0}$ la chaîne démarrant en $\widetilde{i} = (i, i, \cdots, i)$. La moyenne empirique de f au temps t est :

$$S_i^{(t)}(f) = \frac{1}{n}\sum_{m=1}^{n} f(X_m(t))$$

Définition 5.1 *Soient i_1 et i_2 deux états tels que $f(i_1) < E_\pi(f) < f(i_2)$. Le temps de fusion (merging time) de la chaîne associé à (i_1, i_2, f) est la variable aléatoire :*

$$T_{i_1,i_2}(f) = \inf\{t > 0 : S_{i_1}^{(t)}(f) \geq S_{i_2}^{(t)}(f)\}$$

Soit $w_i(f) = \sum_{l:|\alpha_l|=\alpha}\sum_{j\in E} f(j)\sqrt{\frac{\pi_j}{\pi_i}} V_l(i)V_l(j)$ et $\langle f, P_i^t\rangle$ l'espérance de f sous P_i^t.

Proposition 5.2 *([110] et [111]) Si les deux conditions suivantes sont vérifiées :*
(a) l'une ou l'autre des valeurs $w_{i_1}(f)$ et $w_{i_2}(f)$ est non nulle,
(b) $\langle f, P^t_{i_1}\rangle$ est croissante en t et $\langle f, P^t_{i_2}\rangle$ est décroissante en t ;
Alors :

$$\lim_{n\to\infty} T_{i_1,i_2}(f)\{\frac{\log 2n}{2\log(1/\alpha)}\}^{-1} = 1 \text{ en Probabilité}$$

Ce résultat permet de donner une règle d'arrêt assurant la convergence de la chaîne $\widetilde{P}$: si $\varepsilon > 0$ et si n est grand, arrêter la chaîne en $T = (1+\varepsilon)T_{i_1,i_2}(f)$ assure la proximité de $\widetilde{P}^T$ et de π. Remarquons que (b) est vérifiée dès que P est remplacée par P^2 (les valeurs propres de P^2 sont positives, on itère la chaîne par pas de 2 et si on arrête la chaîne à un instant pair). La condition préalable $f(i_1) < E_\pi(f) < f(i_2)$ sur (f, i_1, i_2) ainsi que (b) s'obtiennent par exemple si E est muni d'un *ordre partiel* $\prec$, si f est monotone, si i_1 est minimal et si i_2 est maximal dans E. Par exemple, sur $E = \{-1,+1\}^n$ pour l'ordre :

$$x \prec y \Leftrightarrow \forall i = 1, n : x_i \leq y_i$$

$-\mathbf{1} = (x_i \equiv -1)$ est minimal, $+\mathbf{1} = (x_i \equiv +1)$ est maximal et on peut choisir $f(x) = \sum_i x_i$ qui est croissante.

Différents cadres d'application([5]) sont développés dans [111].

5.2 Simulation exacte par couplage depuis le passé

5.2.1 Couplage depuis le passé

Nous exposons ici les principaux résultats([6]) de J.G. Propp et D.B. Wilson ([84], 1996). Soit P une transition ergodique sur $E = \{1, 2, \cdots, r\}$, de loi invariante π. On veut simuler π suivant la dynamique P. Notons $P(i, .)$ la loi de la chaîne issue de i après un pas.

Les simulations ($\mathcal{S}$). Le couplage depuis le passé est défini à partir d'une suite $\mathcal{S}$ de simulateurs

$$\mathcal{S} = \{f_{-t}(i), t \geq 1, i \in E\}$$

où $f_{-t}(i)$ a pour loi $P(i, .)$. On supposera les générateurs $\mathcal{S}_t = \{f_{-t}(i), i \in I\}$ i.i.d. dans le temps $t \geq 1$ (cette condition est relaxée par W. Kendall et J. Møller, [62]). Quant aux variables $f_{-t}(i), i \in E$ (t est fixé), elles ne sont pas nécessairement indépendantes. On verra même qu'il est possible et même intéressant qu'elles soient toutes issues d'un unique générateur U_t uniforme sur $[0, 1]$. L'algorithme remonte dans le passé :

- *Itération entre* $-t$ et $-t+1$ ($t \geq 2$) :

$$\begin{cases} \bullet \text{ Pour chaque } i \in E, \text{ simuler } i \mapsto f_{-t}(i) \in E \\ \bullet\bullet \text{ On obtient ainsi } r\text{-transitions } \{i \mapsto f_{-t}(i), i \in E\} \text{ de } -t \text{ à } -t+1. \end{cases}$$

Le flot de t_1 à t_2, $t_1 < t_2$: $F^{t_2}_{t_1} : E \to E$.
C'est la transformation aléatoire :

$$F^{t_2}_{t_1} = f_{t_2-1} \circ f_{t_2-2} \cdots \circ f_{-t_1+1} \circ f_{t_1}$$

[5] Cutoff pour une chaîne à espace dénombrable, chaîne de naissances et de morts sur un arbre, sur $\mathbb{R}$, réseaux de Jackson

[6] Propp et Wilson étudient des applications en combinatoire, en mécanique statistique et en pavage (Ising, random-cluster, ice, et dimer models).

$F_{t_1}^{t_2}(i)$ est l'état au temps t_2 de la chaîne est démarrée en i au temps t_1. Ainsi, F_t^0 $(t < 0)$, le flot entre l'instant t et 0, vérifie :

$$F_t^0 = F_{t+1}^0 \circ f_t, \text{ avec } F_0^0 = Id \tag{5.1}$$

Cette dernière relation montre que F_t^0 s'obtient récursivement en utilisant r places mémoire.

Temps et état de coalescence pour $(\mathcal{S})$.
$T < 0$ est un temps de coalescence de l'algorithme si F_T^0 est constante,

$$\exists i_* \in E \text{ t.q. : } \forall i \in E, F_T^0(i) = i_*$$

Les r-chaînes, démarrées des r-états à l'instant T, se couplent toutes à l'instant 0 : on dit encore que T est un *temps de couplage depuis le passé* (coupling from the past, CFTP), i_* l'état de coalescence. La relation (5.1) nous dit que si $T' < T$, alors T' est encore un temps de coalescence, l'état de coalescence à l'instant 0 étant inchangé. Notons $F_{-\infty}^0 = F_{-T_*}^0 = F_{-M}^0$ pour tout $M \geq T_*$ la valeur constante et commune obtenue pour le premier instant de couplage, noté T_*,

$$T_* = \inf\{t > 0 : F_{-t}^0(.) \text{ est constante}\}$$

Proposition 5.3 *Simulation exacte par CFTP($\mathcal{S}$)*
Presque sûrement, le couplage a lieu en un temps fini : $P(T_* < \infty) = 1$. De plus, $i_* = F_{-\infty}^0$ est distribué suivant π.

Preuve : La chaîne étant ergodique, il existe $L < \infty$ tel que, pour tout i, j, $P^L(i,j) > 0$. Ainsi, F_{t-L}^t a une probabilité $\varepsilon > 0$ d'être constante. Chacune des applications F_{-L}^0, F_{-2L}^{-L}, $\cdots$ ayant la probabilité ε d'être constante, et ces événements étant indépendants, l'un au moins est réalisé avec une probabilité 1. Donc p.s. F_{-M}^0 est constante si M est assez grand. On a donc $P(T_* < \infty) = 1$.
La suite $\mathcal{S}_t = \{f_{-t}(i), i \in I\}, t = -1, -2, \cdots$ étant *i.i.d.*, $F_{-\infty}^{-1}$ à $F_{-\infty}^0$ ont même loi ν. D'autre part, on passe de l'une à l'autre par P. On a donc $\nu P = \nu$, soit $\nu = \pi$. □

Ce résultat est étendu à un contexte beaucoup plus général par W. Kendall et J. Møller (Théorème 3.1,[62]).

Commentaires.
(1) La loi de la variable $\mathcal{S}_1 = \{f_{-1}(i), i \in I\}$ est le germe de la simulation. Le test d'arrêt est implicite à la procédure.
(2) *Complexité algorithmique.* Pour obtenir F_t^0, il faut effectuer $(-t) \times r$ opérations, ce qui est irréaliste si r est grand. De même, r places mémoires seraient nécessaires. Deux aménagements sont possibles : (i) les transitions $\mathcal{S}_t = \{f_{-t}(i), i \in I\}$ peuvent être construites à partir d'un unique germe aléatoire U_{-t}, limitant ainsi le nombre d'appels à un générateur aléatoire ; (ii) dans le cas d'un espace E muni d'un ordre partiel $\prec$ et d'une chaîne monotone (notion que nous allons définir), il suffira de tester l'égalité $F_T^0(\underline{i}) = F_T^0(\bar{i})$ pour *deux états seulement.*
(3) La procédure MCMC est bien différente : en effet, on choisit un état initial i_0 et on calcule $F_0^n(i_0)$ pour n grand : *une seule trajectoire est simulée.* La difficulté est le choix de n.
(4) On peut penser qu'une bonne procédure est de simuler, depuis l'instant 0 (c'est-à-dire vers le futur), r chaînes démarrant des r états, jusqu'au premier instant T^* où elles se couplent, c'est-à-dire tel que $F_0^{T^*}$ est constante. C'est l'idée étudiée par Jonhson [54] (cf. aussi [32]). L'avantage est de faire disparaître le biais du choix d'un point initial particulier i_0, la complexité algorithmique se situant entre T^* (celle MCMC) et $r \times T^*$(celle CFTP)) (en effet, au fur et à mesure, des trajectoires se couplent, diminuant d'autant le nombre d'opérations à effectuer). Cette idée est d'autant plus naturelle que T_* et T^* ont, comme on le verra, même loi. Cependant,

$F_0^{T^*}$ et $F_{-T_*}^0$ n'ont pas la même loi, et en général, $F_0^{T^*}$ ne suit pas la loi π. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer une transition P telle qu'il existe un état j_0 ayant un seul prédécesseur : $F_0^{T^*}$ ne chargeant pas j_0 ne peut pas suivre la loi π, puisque $\pi(j_0) > 0$ (cf. exercice).

(5) Ce qui distingue couplage vers le passé et couplage vers le futur est que, pour le couplage vers le passé, on peut écrire pour l'état de coalescence, $x(0) = F_{-\infty}^0(.)$: c'est comme si $x(0)$ était l'état au temps 0 de la chaîne démarrée en $-\infty$. Cet état est bien de distribution π. Une telle écriture et interprétation n'est pas possible pour l'état de couplage vers le futur, la chaîne démarrant au temps fixe 0.

5.2.2 Un unique germe pour définir $\mathcal{S}_{-t} = \{f_{-t}(i), i \in I\}$

Soient $\cdots, U_{-3}, U_{-2}, U_{-1}$ une suite i.i.d. de variables uniformes sur $[0,1]$, et $\Phi : E \times [0,1] \to [0,1]$ une application mesurable telle que

$$\forall i, j : P\{\Phi(i, U_{-1}) = j\} = P(i,j)$$

On peut alors choisir, pour tout $i \in E : f_{-t}(i) = \Phi(i, U_t)$. A chaque instant, une seule simulation est nécessaire. *Il faut malgré tout évaluer toutes les valeurs* $\Phi(i, U_t)$ pour $i \in E$.

Le cas "favorable" d'une *chaîne monotone* permet de lever cette difficulté : dans ce cas, on verra qu'il est suffisant de suivre seulement deux trajectoires pour identifier le couplage. Ceci réduit considérablement le nombre d'opérations à effectuer ainsi que la taille mémoire utile.

5.2.3 Algorithme de Monte-Carlo monotone

Présentation générale

Supposons que E soit muni d'une relation d'ordre partiel, notée $x \prec y$, pour laquelle il existe un élément minimal $\mathbf{0}$ et un élément maximal $\mathbf{1}$: $\forall\ x \in E$, $\mathbf{0} \prec x \prec \mathbf{1}$. Supposons de plus que la règle de mise à jour préserve cet ordre, c'est à dire :

$$\forall x, y \in E \text{ t.q. } x \prec y \text{ alors : } \forall u \in [0,1] : \Phi(x,u) \prec \Phi(y,u)$$

On dira d'un tel *algorithme de Monte-Carlo* qu'il est *monotone*. Définissons alors :

$$\Phi_{t_1}^{t_2}(x, \mathbf{u}) = \Phi_{t_2-1}(\Phi_{t_2-2}(\cdots \Phi_{t_1}(x, u_{t_1}), \cdots, u_{t_2-2}), u_{t_2-1})$$

où $\mathbf{u} = (\cdots, u_{-1}, u_0)$. La monotonie de l'algorithme assure que :

$$\forall x \prec y \text{ et } t_1 < t_2, \Phi_{t_1}^{t_2}(x, \mathbf{u}) \prec \Phi_{t_1}^{t_2}(y, \mathbf{u})$$

En particulier, si $u_{-T}, u_{-T+1}, \cdots, u_{-1}$ sont telles que $\Phi_{-T}^0(\mathbf{0}, \mathbf{u}) = \Phi_{-T}^0(\mathbf{1}, \mathbf{u})$, alors $-T$ est un temps de couplage depuis le passé. Ces deux configurations $\mathbf{0}$ et $\mathbf{1}$ caractérisent le temps de couplage. En effet, pour tout x, les trajectoires $\{F_{-T}^t(x), -T \le t \le 0\}$ sont "sandwichées" ([61]) entre $\{F_{-T}^t(\mathbf{0}), -T \le t \le 0\}$ et $\{F_{-T}^t(\mathbf{1}), -T \le t \le 0\}$.

Complexité de l'algorithme.

Propp et Wilson proposent l'algorithme suivant. On essaye successivement $T = 1, 2, 4, 8, \cdots$ jusqu'à trouver une valeur 2^k telle que $\Phi_{-2^k}^0(\mathbf{0}, \mathbf{u}) = \Phi_{-2^k}^0(\mathbf{1}, \mathbf{u})$. Les valeurs de u_t utilisées doivent être les mêmes pour deux essais faisant intervenir un même instant t. Ces valeurs de u_t sont donc progressivement mises en mémoire.

Pour cet algotithme, le nombre d'opérations nécessaires pour tester la coalescence est $2 \times (1+2+4+\cdots+2^k) \approx 2^{k+2}$ (il faut suivre deux trajectoires, autant de fois que d'essais). Comme $T_* > 2^{k-1}$, ce nombre d'opérations est au plus 4 fois le nombre optimal $2T_*$: la démarche est donc raisonnable.

L'exemple d'un modèle d'Ising

Les systèmes de spins attractifs sont des exemples-types de modèles permettant de construire une dynamique de Monte-Carlo monotone. L'ensemble des sites est $S = \{1, 2, \cdots, n\}$ et celui des états, $E = \{-1, +1\}^S$ ($|E| = r = 2^n$). E est muni de l'ordre :

$$x \prec y \Leftrightarrow \{\forall i \in S, x_i \leq y_i\}$$

Pour cet ordre, $\mathbf{0} = (x_i = -1, \forall i)$ est minimal, $\mathbf{1} = (x_i = +1, \forall i)$ est maximal.

Une loi π sur E est dite *attractive* si, pour tout i :

$$x \prec y \Rightarrow \pi_i(+1 \mid x) \leq \pi_i(+1 \mid y) \tag{5.2}$$

où $\pi_i(. \mid z)$ est la loi conditionnelle à z (en fait à z^i) en i. Ne figurant pas le site i où le retournement du spin est effectué, et notant $x \uparrow$ (resp. $x \downarrow$) la configuration $(+1, x^i)$ (resp. $(-1, x^i)$), la relation (5.2) est équivalente à

$$x \prec y \Rightarrow \frac{\pi(x \downarrow)}{\pi(x \downarrow) + \pi(x \uparrow)} \geq \frac{\pi(y \downarrow)}{\pi(y \downarrow) + \pi(y \uparrow)}$$

Considérons alors l'algorithme de Gibbs (séquentiel déterministe ou à balayage aléatoire), et définissons :

$$f_t(x, u_t) = \begin{cases} x \downarrow \text{ si } u_t < \frac{\pi(x\downarrow)}{\pi(x\downarrow)+\pi(x\uparrow)} \\ x \uparrow \text{ si } u_t \geq \frac{\pi(x\downarrow)}{\pi(x\downarrow)+\pi(x\uparrow)} \end{cases}$$

Si π est attractive, ces f_t définissent un algorithme de Monte-Carlo monotone puisque $f_t(x, u_t)(i) = +1$ et $f_t(y, u_t)(i) = -1$ sont incompatibles pour $x \prec y$.

Si on spécifie π comme la loi d'un modèle d'Ising d'énergie $U(x)$

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp\{U(x)\} \text{ avec } U(x) = \sum_i \alpha_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{i,j} x_i x_j$$

l'attractivité équivaut à la condition : $\forall i, j, \beta_{i,j} \geq 0$. En se plaçant à la température critique ($\beta \simeq 0.441$) pour un modèle d'Ising isotropique et aux 4-p.p.v. sur une grille 512×512, Propp et Wilson observent qu'environ $T = 30$ balayages vers le passé suffisent à la simulation CFTP du modèle (soit 10mn sur une station Sparc).

Un autre intérêt d'un algorithme de Monte-Carlo monotone est qu'il permet de simuler *simultanément* des échantillons d'une loi π_T dépendant d'un paramètre T, pour diverses valeurs de T (omnithermal algorithm,[84]).

Evaluation du temps de couplage

Temps de couplage vers le passé ou vers le futur. Le temps de couplage T_* vers la passé est le premier instant tel que $F_{-t}^0(\mathbf{0}) = F_{-t}^0(\mathbf{1})$. Le temps de couplage T^* vers le futur est le premier $t > 0$ tel que $F_0^t(\mathbf{0}) = F_0^t(\mathbf{1})$. *Ces deux temps ont même loi* : en effet, pour chaque $t > 0$, $P(T_* > t)$, la probabilité que F_{-t}^0 ne soit pas constante, est égale à la probabilité que F_0^t ne soit pas constante puisqu'on passe de F_{-t}^0 à F_0^t par la translation de $+t$ dans le temps et que $\mathcal{S} = \{\mathcal{S}_t\}$ est stationnaire (attention, $F_{-T_*}^0$ et $F_0^{T^*}$ n'ont pas, eux, même lois, cf. exercice).

Efficacité d'un algorithme de couplage vers le passé La durée de l'algorithme étant linéaire en T_*, l'algorithme sera d'autant plus efficace que T_* est petit. Une autre façon de comprendre ce résultat est la suivante : le temps de couplage T^* contrôle la convergence MCMC classique, puisque l'inégalité de couplage donne

$$\left\|\mu P^k - \pi\right\| \leq P(T^* > k)$$

Il faudra donc, dans la multiplicité des choix $\mathcal{S} = \{\mathcal{S}_t\}$ possibles, retenir ceux qui génèrent des trajectoires avec une forte probabilité de coalescence. On parle de couplages optimaux (cf. [46], [83], [56]).

Quelques évaluations sur le temps de couplage T_*. Nous restons dans le cadre d'un algorithme de Monte-Carlo monotone. On travaillera avec le temps de couplage vers le futur T^*, conceptuellement plus simple.

Quelques notations :

- Pour $k > 0$, $\overline{d}(k) = \sup\{\left\|\mu P^k - \nu P^k\right\|, \mu, \nu$ lois initiales$\}$
- le temps de mélange T_{mix} de P est le premier indice k tel que $\overline{d}(k) < e^{-1}$
- l est la longueur maximun d'une chaîne respectant l'ordre partiel : $l = \max\{k :$ il existe un chemin $x_1 \to x_2 \cdots \to x_k$ t.q. $x_l \prec x_{l+1}$ pour $l = 1, k-1\}$

Proposition 5.4 *Evaluations de la loi de T^* (ou de la loi de T_*).*

(1) T_* et T^* ont même loi.

(2) $l^{-1} P(T^* > k) \leq \overline{d}(k) \leq P(T^* > k)$

(3) $P(T^* > k)$ est sous multiplicative :

$$P(T^* > k_1 + k_2) \leq P(T^* > k_1) P(T^* > k_2)$$

(4) $\forall k : k \times P(T^* > k) \leq E(T^*) \leq k / P(T^* > k)$

Preuve :

(1) Ceci est une conséquence de la stationnarité de $\mathcal{S} = (\mathcal{S}_t)$.

(2) Soit $x \in E$, et $h(x)$ la longueur de la plus longue chaîne de sommet x. Soient $X_{\mathbf{0}}(k)$ (resp. $X_{\mathbf{1}}(k)$) l'état de la chaîne initialisée en $\mathbf{0}$ (resp. $\mathbf{1}$) après k pas. Si $X_{\mathbf{0}}(k) \neq X_{\mathbf{1}}(k)$, alors $h(X_{\mathbf{0}}(k)) + 1 \leq h(X_{\mathbf{1}}(k))$. Ce qui conduit à :

$$\begin{aligned}
P(T^* &> k) = P(X_{\mathbf{0}}(k) \neq X_{\mathbf{1}}(k)) \\
&\leq E[h(X_{\mathbf{0}}(k)) - h(X_{\mathbf{1}}(k))] \\
&= E_{P_{\mathbf{0}}^k}[h(X)] - E_{P_{\mathbf{1}}^k}[h(X)] \\
&\leq \left\|P_{\mathbf{0}}^k - P_{\mathbf{1}}^k\right\| \{\max h(x) - \min h(x)\} \\
&\leq \overline{d}(k) \times l
\end{aligned}$$

Pour établir l'autre inégalité, considérons le couplage de deux copies de la chaîne, l'une de loi initiale μ, l'autre ν, les deux chaînes étant couplées à leur premier instant de rencontre. La monotonie implique que les deux copies se rencontrent avant k avec une probabilité au moins égale à $P(T^* \leq k)$. On en déduit que μP^k et νP^k sont inégales sur un événement de probabilité $\leq P(T^* > k)$, soit :

$$\left\|\mu P^k - \nu P^k\right\| \leq P(T^* > k)$$

(3) L'événement $\{F_0^{k_1}$ est constante$\}$ et l'événement $\{F_{k_1}^{k_1+k_2}$ est constante$\}$ sont indépendants. Et si l'un est réalisé, $F_0^{k_1+k_2}$ est constante. D'où la sous multiplicativité.

(4) La minoration provient de la positivité de T^*. Posons $\varepsilon = P(T^* > k)$. Alors, du fait de la sous-multiplicativité, $P(T^* > ik) \leq \varepsilon^i$, et

$$E(T^*) \leq k + k\varepsilon + k\varepsilon^2 + \cdots = k/P(T^* \leq k)$$

□

Ces résultats permettent de conclure : "*si la chaîne est rapidement mélangeante, les trajectoires se couplent rapidement*". En effet, $\overline{d}(k)$ est, elle aussi, sous-multiplicative (cf. chapitre 3), et donc après $k = T_{mix}(1 + \log l)$ pas, $\overline{d}(k) \leq 1/el$, c'est-à-dire $P(T^* > k) \leq 1/e$, soit encore :

$$E(T^*) \leq 2T_{mix}(1 + \log l).$$

Approche empirique pour l'évaluation de T^*.

V.E. Johnson [55] étudie empiriquement la courbe $b \mapsto T^*(b)$ pour un modèle d'Ising isotropique aux 4-p.p.v. de paramètre $b > 0$ (attractif) sur une grille 64×64 :

$$\pi_b(x) = Z^{-1}(b) \exp\{b \sum_{\|i-j\|_1 = 1} x_i x_j\},\ x \in \{-1, +1\}^{64 \times 64}$$

Il estime T^* à partir de 20 simulations indépendantes, obtenant l'estimation empirique de la courbe $b \mapsto E(T^* \mid b)$ ainsi que les histogrammes de l'échantillon $\{T^*(b, k), k = 1, 20\}$ pour diverses valeurs du paramètre de corrélation spatiale b (son paramétrage étant à états $\{0, 1\}$, son paramètre est $\beta = 2b$; le seuil critique est $b \simeq 0.441$ (valeur choisie par Propp et Wilson dans leur simulation)). Il obtient les résultats suivants :

b	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
$\overline{T^*}(b)$	7	15	50	500	200.000

Pour des valeurs modérées de b, comme 0.3, T^* est assez faible : il n'est pas utile d'itérer un grand nombre de balayages de l'échantillonneur de Gibbs pour atteindre l'état stationnaire. Par contre, T^* présente vite une croissance super-exponentielle au delà du seuil critique 0.441.

5.3 Exercices

Exercice 5.1 *Couplage vers le passé ou vers le futur : $F_0^{T^*}$ et $F_{-T_*}^0$ n'ont pas la même loi.*

On considère la chaîne sur $E = \{0, 1\}$ de transition $P(0, 0) = P(0, 1) = \frac{1}{2}$, et $P(1, 0) = 1$.

(1) Proposer différentes trajectoires : (i) qui se couplent vers le passé ; (ii) qui se couplent vers le futur.

(2) Déterminer la loi de T^*, le temps de couplage vers le futur (c'est aussi la loi de T_*, le temps de couplage vers le passé).

(3) Vérifier, en donnant des exemples de trajectoires simulées, que $F_{-T_*}^0$ charge les deux états, mais pas $F_0^{T^*}$. Montrez que $F_0^{T^*} \sim \delta_{\{0\}}$, alors que $F_{T_*}^0 \sim \pi = (2/3, 1/3)$.

Même étude pour la chaîne à 3 états de transition $P = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$.

Exercice 5.2 *Un cas où $F_0^{T^*}$ est de loi π*

Soit la chaîne sur $E = \{0, 1\}$ $(0 \prec 1)$ de transition, pour $p, q \in]0, 1[$, et $1 - q < p$:

$$P = \begin{pmatrix} p & 1-p \\ 1-q & q \end{pmatrix}$$

Les deux tirages associés aux deux lignes de $P(0,.)$ et $P(1,.)$ sont obtenus à partir d'une même loi uniforme U sur $[0,1]$:

$$\begin{cases} \bullet\ 0 \mapsto 1 \text{ si } U > p \text{ et } 0 \mapsto 0 \text{ sinon} \\ \bullet\ 1 \mapsto 1 \text{ si } U > 1-q \text{ et } 1 \mapsto 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

(1) Vérifier que l'algorithme est monotone.
(2) Déterminer la loi de T^*, le temps de couplage vers le futur.
(3) Vérifier que $F_0^{T^*} \sim \pi = (2-(p+q))^{-1}(1-q, 1-p)$, la loi invariante de P.

Exercice 5.3 *Programmation d'algorithmes de couplage*

(1) Faire le choix d'une matrice de transition ergodique P sur $E = \{1, 2, \cdots, r\}$ ($r = 3, 5, 10, 20$). Déterminer sa loi invariante π et son spectre. Faire des choix pour lesquelles un algorithme de Monte-Carlo monotone est possible (pour l'ordre naturel sur E).

(2) Procéder à la simulation par couplage vers le passé. Identifier T_*, le temps de couplage vers le passé, et la valeur retournée $x(0)$. Répéter l'expérience N fois ($N = 100, 1000, ...$) de façon indépendante et évaluer : la loi empirique de T_* (espérance, variance empirique, ainsi que son min et son max), l'estimation $\widehat{\pi}$ de π, ainsi que la distance du Chi2 $\chi(\pi, \widehat{\pi})$.

(3) Reprendre la procédure si un algorithme monotone existe et comparer vos résultats.

(4) Pour une précision $\chi(\pi, \widehat{\pi})$ analogue, combien de simulations $MCMC$ seraient nécéssaires. Procéder à cette simulation, et la répéter 1000 fois. Comparer les résultats.

(4) Programmer l'algorithme de couplage vers le futur. Vérifier empiriquement que T^*, le temps de couplage vers le futur, est de même loi que T^*. Donner la distribution empirique de l'état de couplage vers le futur.

Les exercices suivants portent sur le couplage de variables aléatoires (ou de processus) et sont issus de l'article de T.H.T. Thorisson [97]. Une référence générale sur le couplage est le livre de T. Lindvall [68]. Donnons la définition générale du couplage de deux lois.

Définition : couplage de deux lois. Soient μ et ν deux lois sur le même espace mesurable $(E, \mathcal{E})$. Une variable (X, Y) sur $(E \times E, \mathcal{E} \times \mathcal{E})$ *réalise un couplage* de μ et de ν si $X \sim \mu$ et $Y \sim \nu$.

Il existe toujours des couplages : par exemple le couplage indépendant $\mu \otimes \nu$, le couplage dépendant issu d'une même variable uniforme U ($X = F_\mu^{-1}(U)$ et $Y = F_\nu^{-1}(U)$), en passant par beaucoup d'autres possibilités. Ce "*degré de liberté*" dans le *choix du couplage* permet d'obtenir des résultats plus ou moins intéressants. La difficulté d'une méthode par couplage est : "comment choisir un couplage bien adapté au problème considéré". Rappelons que la distance en variation entre μ et ν est définie par :

$$\|\mu - \nu\| = \sup\{|\mu(A) - \nu(A)| : A \in \mathcal{E}\}$$

Exercice 5.4 *Inégalité de couplage*

Soit (X, Y) un couplage de μ et de ν. Démontrer l'inégalité de couplage :

$$\|\mu - \nu\| \leq P(X \neq Y).$$

Si (X, Y) réalise l'égalité, on dit que le *couplage est maximal.* Il existe toujours un couplage maximal.

Exercice 5.5 *Couplage d'une loi binomiale et d'une loi de Poisson de même moyenne : inégalité de Chen-Stein*

(1) *Couplage d'une loi de Bernoulli et d'une loi de Poisson.*
Soit $p \in]0,1[$, $X \sim \mathcal{B}er(p)$ et $Y \sim \mathcal{P}(p)$. Soit $I \in \{0,1\}$, indépendante de X et de Y, définie par : $P(I=0) = e^p(1-p)$. On pose :

$$\begin{cases} X' = 0 \Leftrightarrow Y = 0 \text{ et } I = 0 \\ X' = 1 \Longleftrightarrow Y > 0 \text{ ou } I = 1 \end{cases}$$

Vérifier que (X', Y) est un couplage de X et de Y (c'est même un couplage maximal). Vérifier que : $P(X' \neq Y) = p(1 - e^{-p}) \leq p^2$.

(2) Soient $X_i \sim \mathcal{B}er(p_i)$, $i = 1, n$, n lois de Bernoulli indépendantes, $Y_i \sim \mathcal{P}(p_i)$, $i = 1, n$, n lois de Poisson indépendantes, $X = \sum_i X_i$ et $Y = \sum_i Y_i$ (Y est une loi de Poisson de moyenne $\sum_i p_i$). Proposer un couplage de X et de Y à partir des n-couplages (X_i', Y_i) de X_i et de Y_i, $i = 1, n$. Utilisant l'inclusion :

$$(X' \neq Y) \subseteq \bigcup_{i=1}^{n} (X_i' \neq Y_i),$$

en déduire l'inégalité de Chen-Stein :

$$\|\mathcal{L}oi(X) - \mathcal{L}oi(Y)\| \leq 2 \sum_{i=1}^{n} p_i^2.$$

(3) *Application* :

$$\|\mathcal{B}in(n,p) - \mathcal{P}(np)\| \leq 2np^2 = 2\frac{\lambda^2}{n} \text{ si } \lambda = np.$$

Exercice 5.6 *Domination stochastique*

Pour deux variables aléatoires réelles, on note $X \preceq Y$ la relation de domination stochastique : pour tout $x \in \mathbb{R}$, $F_X(x) \leq F_Y(x)$.

Soient X et Y deux lois telles que $X \preceq Y$, $(X_i, i = 1, n)$ (resp. $(Y_i, i = 1, n)$) un n-échantillon de X (resp. un n-échantillon de Y), $S_X = \sum X_i$ et $S_Y = \sum_i Y_i$. Démontrer que $S_X \preceq S_Y$.
Indication : on utilisera les couplages élémentaires dépendants $(F_X^{-1}(U_i), F_Y^{-1}(U_i))$ de X_i et de Y_i, $i = 1, n$, où $(U_i, i = 1, n)$ est un échantillon $\mathcal{U}[0,1]$.

Exercice 5.7 *Couplage maximal de deux chaînes ([46], [83])*

Pour deux chaînes discrètes de transition P sur $(E, \mathcal{E})$, vérifier que la transition $\mathbf{P}$ suivante est un couplage de P et de P sur $(E, \mathcal{E}) \otimes (E, \mathcal{E})$:

$$\begin{cases} \mathbf{P}[(i,i),(k,k)] = p_{ik} \\ \mathbf{P}[(i,j),(k,k)] = \inf\{p_{ik}, p_{jk}\} \\ \mathbf{P}[(i,j),(k,l)] = \delta_{ij}^{-1}\{(p_{ik} - p_{jk})^+ (p_{il} - p_{jl})^-\} \end{cases}$$

où $\delta_{ij} = \frac{1}{2}\sum_k |p_{ik} - p_{jk}|$. Ce couplage est maximal.

Exercice 5.8 *Le couplage multigamma ([68],[56],[80])*

L'espace d'état est $E \subset \mathbb{R}^d$. Soit $f(. \mid x)$ une densité de transition diffuse et ergodique de loi invariante π. Supposons que :

$$\forall x, y \in E : f(y \mid x) \geq r(y) \geq 0 \text{ avec } 0 < \rho = \int r(y)dy < 1.$$

Soient $R(y) = \rho^{-1} \int r(u)du$, $Q(y \mid x) = (1-\rho)^{-1} \int_{-\infty}^{y} [f(u \mid x) - r(u)]du$, U_1 et U_2 deux lois uniformes indépendantes sur $[0,1]$. On définit la fonction de mise à jour Φ :

$$\Phi(x, U_1, U_2) = \begin{cases} R^{-1}(U_2) \text{ si } U_1 < \rho \\ Q^{-1}(U_2 \mid x) \text{ sinon} \end{cases}$$

(1) Vérifier que : $P(Y_{n+1} \leq y \mid Y_n = x) = \rho R(y) + (1-\rho) Q(y \mid x)$. En déduire que $\Phi(x, U_1, U_2)$ est de loi $f(. \mid x)$. Si le couplage il y a, "il se fait en un seul pas", pour toutes les trajectoires !

(2) Montrer que le temps de couplage (vers le passé) utilisant cette mise à jour est p.s. fini.

(3) Puisque que R^{-1} est appelée avec une probabilité fixe, égale à ρ, on peut proposer l'algorithme suivant de simulation exacte de π : (i) tirer T_* le temps de couplage suivant la loi géométrique de paramètre ρ ; (ii) tirer Y_{-T_*} suivant la loi $r(.)/\rho$; (iii) simuler vers le futur la loi de la chaîne suivant la transition $Q^{-1}(U_2 \mid Y_{t-1}) \to Y_t$. Vérifier que $Y_0 \sim \pi$.

Commentaires : ce couplage permet d'étendre les résultats de Propp et Wilson à un espace d'état continu. Il faut cependant noter que, tel quel, le champ d'application est limité : (1) la fonction de minoration $r(.)$ risque d'être trop petite pour la pratique (l'espérance du temps de couplage est ρ^{-1}), et souvenr $r(.) \equiv 0$; (2) il faut connaître explicitement les constantes de normalisations intervenant dans les densités. Murdoch et Green [80] répondent en partie à ces questions.

Exercice 5.9 *Contrôle de la vitesse de convergence $\|\nu P^n - \pi\|$ par couplage*

Soit P une transition sur un espace général $(E, \mathcal{E})$, vérifiant, pour ν une probabilité sur $(E, \mathcal{E})$:

$$\exists \varepsilon > 0 \text{ t.q.}, \forall x \in E, \forall A \in \mathcal{E} : P(x, A) \geq \varepsilon \nu(A)$$

Soit $x \in E$ un état fixé, X^* la loi de la chaîne démarrant de x, Y^* la loi de la chaîne démarrant de sa loi invariante π. On va construire un couplage multigamma $(X, Y) = (X_n, Y_n)_{n \geq 0}$ de X^* et de Y^* (cf. exercice précédent). En $n = 0$, on prend $X_0 = x$ et $Y_0 \sim \pi$. La simulation au pas $n \mapsto n+1$ est la suivante :

$$\begin{cases} (a) \text{ avec une probabilité } \varepsilon : \text{prendre } X_{n+1} = Y_{n+1} = y \text{ où } y \sim \nu \\ (b) \text{ sinon prendre } X_{n+1} \sim \frac{P(X_n,.) - \varepsilon \nu(.)}{1-\varepsilon},\ Y_{n+1} \sim \frac{P(Y_n,.) - \varepsilon \nu(.)}{1-\varepsilon} \end{cases}$$

les deux simulations de (b) provenant de la même loi uniforme. Les chaînes vont finir par se coupler au sens suivant : dès qu'elle se rencontrent, disons au temps de couplage T (que la cause soit (a) ou (b)), elles continueront leur trajectoire ensemble : $\forall t \geq T$, $X_t \equiv Y_t$.

(1) Vérifier que (X, Y) est un couplage de X^* et de Y^*.

(2) Utilisant l'inégalité de couplage, montré que :

$$\|P_x^n - \pi\| \leq P(T > n) \leq (1-\varepsilon)^n$$

(3) Si $E = \{1, 2, \cdots, r\}$ est fini si P est régulière ($\exists m$ t.q. $\delta = \inf\{P^m(i,j), i, j \in E\} > 0$), déduire de (2) que

$$\|P_x^n - \pi\| \leq (1 - r\delta)^{[\frac{n}{m}]}.$$

Bibliographie

[1] Aarts E. et Korst J., 1989, *Simulated annealing and Boltzman machines : Stochastic approach to combinatorial optimization and neural computing,* Wiley

[2] Aldous D. et Diaconis P, 1986, Shuffling cards and stopping times, Amer. Math. Monthly, 93, 333-348

[3] Aldous D. et Fill J. 1993-1996, *Reversible Markov chains and random walks on graphs*, Monograph in preparation, www.stat.berkeley.edu/~aldous/book.html

[4] Amit Y. et Grenander U., 1991, Comparing sweep strategies for stochastic relaxation, J. Mult. Anal. 37, 197-222

[5] Azencott R., Ed., 1992, *Simulated annealing : Parallelization techniques,* Wiley

[6] Baddeley A. et van Lieshout M.N.M., 1995, Area-interaction point processes, Ann. Inst. Stats. Math. 47, 601-619

[7] Baddeley A.J. et Moller J., 1989, Nearest-neighbour Markov point processes, Ann. Inst. Stat. Math., 57, 89-121

[8] Barker A.A., 1965, Monte Carlo calculations of the radial distribution functions for a proton-electron plasma, Austr. J. Phys. 18, 119-133

[9] Bayomog S., Guyon X. et Hardouin C., 1998, Markov Chain Markov Field Dynamic, Préprint SAMOS, n°100, 25p.

[10] Besag J., 1974, Spatial interaction and the statistical analysis of lattice systems, JRSS B-36, 192-236

[11] Besag J., 1986, On the statistical analysis of dirty pictures, JRSS B, 43, $n°3, 302-318$

[12] Besag J. et Green P.J., 1993, Spatial statistics and Bayesian computation, JRSS B 55, 25-37

[13] Brodatz P., 1966, *Texture : a photographic album for artists ans designers*, Dover, New York

[14] Carter D.S. et Prenter P.M., 1972, Exponential states and counting processes, Z. Wahrsch. Verw. Geibete 21, 1-19

[15] Catoni O., 1992, Rough large deviation estimates for simulated annealing : application to exponential schedules, Ann. Proba., Vol 20, n°3, 1109-1146

[16] Chalmond B., *Eléments de modélisation pour l'analyse d'image,* Springer, 2000, "Mathématiques et Applications", n°33

[17] Chauveau D., Diébolt J. et Robert C.P., 1998, Control by the Central Limit Theorem, 99-126, in *Discrétisation and MCMC convergence assessement*, Ed. Robert C., L.N.S. n°135, Springer

[18] Cross G.R. et Jain A.K., 1983, Markov random field texture models, IEEE Trans. PAMI, $5, n°1, 25-39$

[19] Devroye L., 1986, *Non-Uniform random variable generation*, Springer

[20] Diaconis P. et Sahshahani M, 1981, Generating a random permutation with random transpositions, Z. Wahrsch. Verw. Geb., 57, 159-179

[21] Diaconis P. et Shahshahani M., 1987, Time to reach stationarity in the Bernoulli-Laplace diffusion model, SIAM J. Math. Anal., 18, 208-218

[22] Diaconis P., Graham R. et Morrison J., 1990, Asymptotic analysis of a random walk on an hypercube with many dimensions, Rand. Struct. Algorithms, 1, 51-72

[23] Diaconis P. et Saloff-Coste L., 1995, What do we know about the Metropolis algorithm ?, in Proc. of the Twenty-Seventh Annual ACM Symp. on the Theo. Comp., 112-129

[24] Diaconis P., 1996, The cutoff phenomenon in finite Markov chains, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 93 : 1659-1664

[25] Dinten J.M., 1990, *Tomographie à partir d'un nombre limité de projections : régularisation par champs markoviens*, Thèse Univ. Paris Sud

[26] Dobrushin L.R., 1956, Central Limit Theorem for non-stationnary Markov chain, I et II, Theo. Proba. Appl. 1, 65-80 et 329-383

[27] Doeblin W., 1938, Exposé de la théorie des chaînes simples constantes de Markov à nombre fini d'états, Rev. Math. Union Interbalkan. 2, 77-105.

[28] Doukhan P., 1995, *Mixing : Properties and Examples,* L.N.S. n°85, Springer

[29] Duflo M., 1997, *Algorithmes stochastiques*, Springer

[30] Feller W., 1968, *An introduction to probability theory and its applications*, Vol.1, 3-ème Ed., Wiley

[31] Fill J.A., 1998, An interruptible algorithm for perfect simulation via Markov chains, Ann. Appl. Proba., 8, 131-162

[32] Foss S.G. et Tweedie R.L., 1998, Perfect simulation and backward coupling, Stochastic models, 14, 187-203

[33] Frigessi A., Hwang C.R., Di Stephano P. et Sheu S.J., 1993, Convergence rates of Gibbs sampler, the Metropolis algorithm and other single-site updating dynamics, J.R.S.S. B 55, 205-219.

[34] Gaetan C., 1994, A stochastic algorithm for maximun likelihood estimation of Gibbs point processes, Preprint SAMOS 36, Univ. Paris 1

[35] Gantert N, 1989, Laws of large numbers for the Annealing Algorithms, Stoch. Proc. Appl. 35, 309-313

[36] Gantmacher F.R., 1959, *Applications of the theory of Matrices,* Wiley

[37] Geman D. et Geman S., 1984, Stochastic relaxation, Gibbs distributions and the Bayesian restoration of images, IEEE-PAMI-6, 721-741

[38] Geman D. et Geman S., 1987, Relaxation and annealing with constraints, Tech. report N°35, Div. Appl. Maths., Brown University

[39] Geman D., 1990, *Random fields and inverse problem in imaging,* L.N.M. n°1427, Springer

[40] Geman S. et Graffigne C., 1987, Markov random field models and their application in computer vision, in Gleason M. (Ed.), Proc. Int. Congress of Maths. (1986), A. M. S., Providence, 1496-1517

[41] Georgii H.O., 1988, *Gibbs measure and phase transitions*, De Gruyter

[42] Gidas B., 1991, *Metropolis-type Monte Carlo simulation algorithms and simulated annealing*; Trends in Contemporary Probability, 88 p., A.M.S., Providence

[43] Gilks W.R., Richardson S. et Spiegelhalter D.J., 1996, *Markov Chain Monte-Carlo in Practice*, Chapman et Hall

[44] Godement R., 1962, *Cours d'algèbre*, Hermann

[45] Graffigne C., 1987, *Experiments in texture analysis and segmentation, PhD thesis*, Brown Univ.

[46] Griffeath D., 1975, A maximal coupling for Markov chains, Z. fur W., 31, 95-106

[47] Guyon X., 1995, *Random Fields on a Network : Modeling, Statistics and Applications*, Springer

[48] Häggström O., van Lieshout M.N.M. et Møller J., 1999, Characterisation results and Markov chain Monte Carlo algorithms including exact simulation for some point processes, à paraître in Bernoulli

[49] Häggström O. et Nelander K., 1998, On exact simulation of Markov random fields using coupling from the past, preprint Göteborg Univ.

[50] Hajek B., 1988, Cooling schedules for optimal annealing, Math. of Operations Research 13, n°2, 311-329

[51] Hastings W.K., 1970, Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications, Biometrika 57, 97-109

[52] Iosifescu M. et Theodorescu R., 1969, *Random processes and learning,* Springer

[53] Isaacson D.L. et Madsen R.W., 1985, *Markov chains ; Theory and applications*, 2-ème Ed., Krieger.

[54] Jonhson et Kotz (1969-1972), *Distribution in statistics*, (4 volumes), Wiley

[55] Johnson V.E., 1996, Studying convergence of Markov chain Monte Carlo algorithms using coupled sample paths, JASA, 91, 154-166

[56] Johnson V. et Reutter A., 1995, General strategies for assesing convergence of MCMC algorithms using coupled sample paths, preprint

[57] Karlin S., 1968, *A first course in stochastic processes*, Acad. Press.

[58] Keilson J., 1979, *Markov chain models-Rarity and Exponentiality* ; Springer

[59] Kemeny G. et Snell J.L., 1960, *Finite Markov Chains,* D. Van Nostrand.

[60] Kendall W.S., 1990, A spatial Markov property for nearest-neighbour Markov point processes, J. Appl. Proba., 28, 767-778

[61] Kendall W.S, 1997, Perfect simulation for the area-interaction point process, in Probability towards 2000, Eds Arcadi L. et Heyde C., 218-234, New-York : Springer

[62] Kendall W. et Møller J., 1999, Perfect Metropolis-Hastings simulation of locally stable point processes, preprint

[63] Kelly F.P. et Ripley B.D., 1976, A note on Strauss's model for clustering, Biometrika 63, 357-360

[64] Kinderman et Snell J.L., 1980, *Markov random fields and their applications,* Contemporary Maths., Vol 1, A.M.S., Providence.

[65] Kirkpatrick S., Gelatt C.D. et Vecchi M.P., 1983, Optimisation by simulated annealing, Science, 220, 671-680

[66] Lavielle M., 1998, Optimal segmentation of a random process, IEEE Trans. Signal Proc.,Vol 46, n°5, $1365-1373$

[67] Li S., 1995, *Markov Random Field modeling in computer vision*, Springer

[68] Lindvall T., 1992, *Lectures on coupling method,* Wiley

[69] Luenberger D., 1979, *Introduction to dynamical systems : Theory and Applications,* Wiley.

[70] Liu J.S., 1995, Metropolized Gibbs sampler : an improvement ; Preprint, Univ. of Stanford

[71] Marroquin J., Mitter S. et Poggio T, 1987, Probabilistic solution of ill-posed problems in computational vision, JASA, 82, 76-89

[72] Martinez S. et Ycart B., 1998, Decaying rates and cutoff for convergence and hitting times of Markov chains, soumis

[73] Matheron G., 1975, *Random sets and integral geometry*, Wiley

[74] Metropolis N., Rosenbluth A., Teller A. et Teller E., 1953, Equations of state calculations by fast computing machines, J. Chem. Phys. 21, 1087-1092

[75] Meyn S.P. et Tweedie R.L., 1993, *Markov chains and stochastic stability,* Springer.

[76] Møller J.,1989, On the rate of convergence of spatial birth and death processes, Ann. Inst. Stat. Math., 41, 565-581

[77] Møller J., 1994, Markov chain Monte Carlo and spatial point processes, Tech. Report 293, Dept. Th. Stat., Univ. of Aarhus

[78] Møller J., 1998, Markov chain Monte Carlo and spatial point processes, in Proc. Sém. Eur. de Stat., *Current trend in stochastic geometry with applications*, Eds. Barndorff-Nielsen et Kendall W.S., Chapman et Hall.

[79] Møller J., 1999, Perfect simulation of conditionally specified models, J.R.S.S. B, 61, Part 1, 251-264

[80] Murdoch D.J. et Green P.J., 1998, Exact sampling from continuous state space, Scan. J. Stat., 25, 483-502

[81] O'Ruanaidh J. et Fitzerald W., 1996, *Numerical Bayesian methods applied to Signal Processing*, Springer

[82] Peskun P., 1973, Optimun Monte-Carlo sampling using Markov chains ; Biometrika 60, 607-612

[83] Pitman J.W., 1976, On coupling of Markov chains, Z. fur W., 35, 315-322

[84] Propp J.G. et Wilson D.B., 1996, Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics, Random Structures and Algorithms, 9(1), 223-251

[85] Prum B., 1986, *Processus sur un réseau et mesure de Gibbs*, Masson (existe en version anglaise)

[86] Raftery A.E. et Lewis S.M., 1996, Implementing MCMC, in *Markov Chain Monte-Carlo in Practice*, Gilks, Richardson et Spiegelhalter Eds., Chapman et Hall

[87] Ripley B.D. et Kelly F.P., 1977, Markov point processes, J. London Math. Soc. 15, 188-192

[88] Robert Ch., 1996, *Méthodes de simulation en statistique*, Economica (version anglaise chez Springer)

[89] Robert C.P. et Cellier D., 1998, Convergence control of MCMC algorithms, 27-46, in *Discretization and MCMC convergence assessement*, Ed. Robert C., L.N.S. n°135, Springer

[90] Robert C.P. (Editeur), 1998, *Discretization and MCMC convergence assessement*, L.N.S. n°135, Springer

[91] Saloff-Coste L., 1997, *Lectures on finite Markov chains,* Ecole d'été de Probabilité de St. Flour XXVI, L.N.M. n° 1665, Springer.

[92] Seneta E., 1975, *Non-negative matrices,* Halsted Press.

[93] Sinclair A., 1993, *Algorithms for random generation and counting : a Markov chain approach*, Birkhäuser

[94] Stoyan D., Kendall W.S. et Mecke J, 1995, *Stochastic Geometry and its Applications*, 2nd Ed., Wiley

[95] Strauss D.J., 1975, A model for clustering, Biometrika 62, 467-475

[96] Strauss D.J., 1977, Clustering on coloured lattice, J. Appl. Proba., 14, 135-143

[97] Thorisson T.H.T, 1995, Coupling methods in probability theory, Scand. Jour. of Stat., Vol 22, 159-182.

[98] Tierney L., 1994, Markov chains for exploring posterior distributions, Ann. of Stat. 22, 1701-1762

[99] Tierney L., 1996, Introduction to general state-space Markov chain theory, p.59-74, in *Markov Chain Monte Carlo in practice,* Eds. Gilks, Richardson et Spiegelhalter, Chapman & Hall.

[100] Tierney L., 1995, A note on Metropolis-Hastings kernels for general state space, Preprint 606, School of Statistics, Univ. of Minnesota.

[101] Trouvé A., 1993, Parallélisation massive du recuit simulé, Thèse de Doctorat, Univ. d'Orsay.

[102] Tweedie R.L., *Markov Chains : Structure and Applications*, à paraître, Handbook of Statistics

[103] van Laarhoven P.J. et Aarts E., 1987 ; *Simulated annealing : Theory and Applications*, Reidel

[104] van Lieshout M.N.M., 1994, Stochastic annealing for nearest-neighbour point processes with application to object recognition, Adv. Appl. Prob., 26, 281-300

[105] van Lieshout M.N.M., 1995, Markov point processes and their application in hight-level imaging, Bull. ISI, 559-576

[106] Winkler G., 1995 ; *Image analysis, Randoms Fields and Dynamic Monte Carlo Methods : a mathematical introduction,* Springer

[107] Yao J.F., 1999, On constrained simulation and optimisation by Metropolis chains, à paraître in Statistics and Probability letters (disponible à http ://www.univ-paris1.fr/SAMOS)

[108] Ycart B., 1997, *Algorithmes markoviens*, Cours au Departamento de Ingeneria Matematica, Univ. de Chile, Dec. 1997

[109] Ycart B., 1998, Cutoff for samples of Markov chains, ESAIM Probability and Statistics, à paraître

[110] Ycart B., 1999, Stopping tests for Monte-Carlo Markov chains methods, soumis

[111] Ycart B., 1998, *Cutoff for Markov chains : some example and applications*, Summer school on complex systems, Santiago du Chili, Dec. 1998

[112] Younes L., 1988, *Problèmes d'estimation paramétrique pour les champs de Gibbs Markoviens. Applications au traitement d'Images,* Thèse de Doctorat, Univ. d'Orsay.