# Algorithme d'Hasting Metropolis - ProblÃÍme du voyageur de commerce

PEROTTINO Tony, VAILLANT Corentin, LE BER Tom

10 mai 2025

# Table des matières

1	Inti	roduction	3
	1.1	Informations gÃlnÃlrales et description historique	3
	1.2	Pourquoi HM permet-il de rÃlsoudre le problÃlme du voyageur	
		de commerce?	4
	1.3	Objectif de ce rapport	5
2	Cha	aÃőnes de Markov Ãă Ãľtats finis	6
	2.1	DÃlfinitions fondamentales	6
	2.2	PropriÃltÃls fondamentales	8
		2.2.1 Matrice de Transition	8
		2.2.2 ReprÃľsentation sous forme de Graphe OrientÃľ	9
		2.2.3 Matrice de transition en $k$ -pas	10
	2.3	Classes d'Āl'quivalence	12
		2.3.1 Classification des Ãltats	12
		2.3.2 Classes de communication	13
	2.4	ProbabilitÃľ invariantes et thÃľorÃĺme ergodique	16
		2.4.1 probabilitÃľ invariantes	16
		2.4.2 ThÃlorÃlme ergodique	18
	2.5	Comportement en temps long	19
3	Fonctionnement de l'Algorithme de Hasting-Metropolis		21
	3.1	Qu'est-ce qu'une mÃlthode dite MCMC?	21
	3.2	Definitions	22
	3.3	Description des Ãltapes de l'algorithme	22
	3.4	Preuve de l'algorithme	22
	3.5	Exemples d'applications simples de HM	22
	3.6	Application au cas du voyageur de commerce	24
	3.7	Comparaison avec d'autres m $\tilde{A}$ l'thodes d' $\tilde{A}$ l'chantillonnage	25
4	Cor	nclusion	26
5	Anı	nexe	27
	5.1	Code source	27
		5.1.1 Code utilitaires	27
		5.1.2 ImplÄlmentation de l'algorithme de Hastings-Metropolis .	28
		5.1.3 Applications du code d'Hasting Metropolis	30
	5.0	Courses	25

# PrÃľambule

Ce rapport s'inscrit dans le cadre de la matiÃÍre "Projet de MathÃľmatiques" de l'universitÃľ de Toulouse (Paul Sabatier).

L'objectif de ce rapport est de prÃlsenter et de prouver l'algorithme d'Hastings-Metropolis. ÃĂ la fois d'expliquer en dÃltail son fonctionnement, mais aussi de comprendre l'intÃlrÃłt qu'il prÃlsente dans les sciences et en quoi il prend sa valeur.

Pour illustrer l'algorithme, nous nous intÃlresserons au problÃlme du voyageur de commerce et Ãltudierons sa complexitÃl.

#### 1 Introduction

Afin de comprendre en profondeur ce sujet, il est n\( \tilde{A}\) l'essaire de s'en faire une id\( \tilde{A}\) le globale, m\( \tilde{A}\) me na\( \tilde{A}\) ve, pour pouvoir suivre convenablement la ligne directrice de notre discours.

#### 1.1 Informations gÃľnÃľrales et description historique

L'algorithme d'Hastings-Metropolis (notÃl "HM" dans ce rapport) consiste en une mÃl'thode d'Ãl'chantillonnage stochastique permettant, Ãă partir d'une distribution de probabilitÃl donnÃle, de pouvoir dÃl'crire son comportement et d'obtenir des statistiques dessus. Cet algorithme prend sa valeur quand la distribution est difficile Ãă analyser (systÃlmes multidimensionnels, par exemple) et permet de rÃl'soudre de nouveaux problÃl'mes avec une complexitÃl' temporelle dÃl'cente.

Cette mÃl'thode est marquante, car elle a Ãl'tÃl' conceptualisÃle tÃtt dans l'histoire de l'informatique et a mis des dÃl'cennies avant d'Ãl'tre prouvÃle et expliquÃle entiÃl'rement.

Historiquement, c'est en 1949 que l'Âlcriture de l'algorithme a ÂltÂl publiÂle dans un article de Nicholas Metropolis et StanisÅĆaw Ulam. La paternitÂl de l'algorithme est soumise Ãă dÂlbat, car l'algorithme s'inscrit sous le nom de son chef de projet (Metropolis), alors que l'Âlquipe composÂle de Nicholas Metropolis, Arianna et Marshall Rosenbluth, Augusta et Edward Teller a contribuÂl Ãă cette mÂlthode. Ils Âltudiaient alors plus particuliÂlrement le cas de la distribution de Boltzmann, une des distributions les plus utilisÂles en physique statistique, dans des travaux datant de 1953.

Cela illustre une dynamique frÃlquente dans les sciences, oÃź le mÃlrite est disproportionnellement attribuÃl Ãă une personne alors qu'il s'agit des efforts de toute une Ãlquipe. En particulier, Arianna Rosenbluth Ãltait considÃlrÃle comme brillante par le monde scientifique.

En 1970, W. K. Hastings (1930-2016) a Ãl'tendu l'algorithme au cas d'une distribution quelconque, et c'est cette version gÃl'nÃl'ralisÃl'e qui est

connue sous le nom d'algorithme de Metropolis-Hastings. Cette extension a eu de nombreuses applications dans divers domaines scientifiques, comme en statistique bayÃlsienne (espaces complexes multidimensionnels), en biologie computationnelle (analyse des sÃlquences gÃlnÃltiques), en Ãlconomie et en finance (modÃlles stochastiques MCMC en gÃlnÃlral), etc.

Quant Ãă lui, le problÃÎme du voyageur de commerce (dit "TSP", comme Travelling Salesman Problem en anglais) est un problAlme classique et bien connu pour Ãltre un problÃlme NP-difficile, ce qui signifie qu'il n'existe actuellement aucune mAlthode connue capable de le rAlsoudre de maniAlre optimale en temps polynomial pour toutes les tailles d'instances, et qu'il est au moins aussi difficile que les problAlmes de NP. L'origine du problAlme est assez incertaine : il a ÃltÃl formulÃl pour la premiÃlre fois vers 1850 dans un manuel d'un commerÃgant voyageant en Suisse et en Allemagne. Ce n'est que dans les annÃles 1930 que le problÃĺme fut ÃľnoncÃľ d'abord comme un casse-tÃłte (par William Rowan et Thomas Kirkman), puis AltudiAl (par, entre autres, Thomas Kirkman, Jillian Beardwood, J. H. Halton et John Hammersley). Le problAlme consiste Aă dAlterminer le chemin le plus court passant par tous les points d'un graphe une seule fois chacun, en terminant par le point de dÅlpart (recherche d'un cycle hamiltonien le plus court). Les distances peuvent Ãltre dites symÃltriques ou asymÃltriques, c'est-Ãă-dire que la distance entre eux varie en fonction de la direction du d'Alplacement. On peut illustrer ce problAlme grAcce Aa un voyageur de commerce devant vendre ses produits dans chacune des villes en un minimum de temps. Ce problAlme peut donc Ältre naturellement reprÄlsentÄl par un graphe.

# 1.2 Pourquoi HM permet-il de rÃl'soudre le problÃlme du voyageur de commerce?

Le principe mathAlmatique derriAlre HM repose sur la construction dynamique d'une chaÃone de Markov, qui n'est pas connue au prAlalable mais se dAlveloppe au fil des itAlrations. AA mesure que l'algorithme progresse, le comportement de cette chaÃone converge vers la distribution cible, permettant d'obtenir un Alchantillon fiable de solutions par rapport aux Altats de la distribution.

Quant au problÃÍme du voyageur de commerce, il peut Ãłtre reprÃſsentÃſ par un graphe orientÃſ ayant un sommet pour chaque ville et une arÃłte pour chaque temps de trajet. Nous verrons par la suite qu'une chaÃone de Markov peut Ãłtre associÃſe Ãă un graphe orientÃſ, c'est-Ãă-dire que le problÃſme du voyageur de commerce est rÃſsoluble par HM.

Par rÃľsoluble, il est important de prÃľciser qu'il s'agit d'une rÃľsolution appoximative parce que le TSP est NP-difficile comme mentionnÃľ prÃľcÃľ-demment. En consÃľquence, l'objectif de HM n'est pas d'apporter la rÃľponse exacte au problÃĺme, mais une approximation fiable de la solution, ce qui peut

sembler contre-intuitif. Cette approximation est la caractÃlristique principale des mÃlthodes MCMC que nous aborderons dans leur partie dÃldiÃle.

Il convient de souligner que, dans le cas du TSP, c'est Ãă la version d'optimisation que l'on s'intÂlresse, par opposition au problÂlme dÂlcisionnel, qui, lui, est NP-complet. La diffAlrence entre ces deux formulations repose sur leur objectif: dans le TSP d\( \tilde{A} \) l'cisionnel, on pose une question du type "Existe-t-il un chemin de coÃżt infÃľrieur ou Ãľgal Ãă une valeur donnÃľe?", Ãă laquelle il s'agit de rAlpondre par oui ou non. Alors que le TSP d'optimisation cherche Aă partir de la situation initiale la meilleure solution : donc optimiser le chemin au fil des itAlrations. C'est cette version du problAlme pour laquelle l'approche par Älchantillonnage stochastique est envisageable. PrÄlcisons toutefois que HM n'est habituellement pas la mÃlthode que l'on utilise pour le TSP en pratique. Usuellement, le nombre de ville Altant grand (suffisemment pour que la solution par brute force ne soit pas trouvable) mais pas absurde (une centaine par exemple), on prAlfAlre utiliser des versions dAlterministes optimisAles comme l'algorithme de Held-Karp de complexitAl  $O(2^n \times n^2)$ , ou dans le cas de situation avec encore plus de villes, des mÃlthodes similaires Ãă HM plus adaptÃles comme l'Alchantillonage de Gibbs.

En somme, il est important de comprendre que HM est un outil adaptÃľ Ãă la rÃľsolution de problÃľmes dont l'espace des solutions est trop vaste pour Ãltre explorÃľ exhaustivement dans un temps raisonnable. C'est donc par l'approximation de la solution optimale, Ãă travers des Ãľchantillons, que cette mÃľthode permet de trouver une solution satisfaisante. Cette nuance est essentielle, car elle met en lumiÃſre la sophistication de HM en tant qu'outil d'approximation pour des problÃſmes complexes.

#### 1.3 Objectif de ce rapport

L'objectif de ce rapport Ãl'tant d'apporter une solution fiable au TSP grÃćce Ãă HM, nous prouverons alors le fonctionnement dde ce dernier grÃćce Ãă la thÃl'orie mathÃl'matique des chaÃónes de Markov. Nous en expliciterons les dÃl'finitions et propriÃl'tÃl's fondamentales dans un premier temps, qui permettront de prouver l'algorithme d'HM dans un second temps. Nous prÃl'senterons alors Ãă la fin du rapport une implÃl'mentation personnelle de l'algorithme.

# 2 ChaÃőnes de Markov Ãă Ãltats finis

#### 2.1 DÃlfinitions fondamentales

#### Temps Discret et Temps Continu

Soit T un ensemble d'indices num $\tilde{A}$ lrot $\tilde{A}$ les repr $\tilde{A}$ lsentant le temps.

Il existe deux types de modÃllisation temporelle :

- (1) Un processus  $\tilde{\mathbf{A}}$ ă temps discret signifie que l'on consid $\tilde{\mathbf{A}}$ Îre les valeurs de la mod $\tilde{\mathbf{A}}$ Îlisation comme espac $\tilde{\mathbf{A}}$ Îes r $\tilde{\mathbf{A}}$ Îguli $\tilde{\mathbf{A}}$ Îrement dans le temps. On peut prendre des ensembles d $\tilde{\mathbf{A}}$ Îr nombrables comme  $T=\mathbb{N}$  ou  $T=\mathbb{Z}$  o $\tilde{\mathbf{A}}$ ź chaque instant est distinct.
- (2) Un processus  $\tilde{\mathbf{A}}$  **it temps continu** signifie que T n'est pas d $\tilde{\mathbf{A}}$ lnombrable. Il existe toujours un temps interm $\tilde{\mathbf{A}}$ ldiaire entre deux indices de T. Cela signifie que le processus  $\tilde{\mathbf{A}}$ l-volue en tout instant dans un continuum temporel, on peut prendre des ensembles non d $\tilde{\mathbf{A}}$ lnombrables comme  $T = \mathbb{R}_+$  o $\tilde{\mathbf{A}}$ ź chaque instant est continu.

Dans ce rapport nous nous interesserons uniquement au temps discret, pour pouvoir modĂliser le problĂlme du voyageur de commerce. De plus, cette distinction joue un rĂtle fondamental dans la classification et l'analyse des **processus stochastiques** et n'implique pas les mĂlmes thĀlorĀlmes.

#### Processus Stochastique

Soit  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$  un espace de probabilit $\tilde{A}$ l'.

Soit T un ensemble d'indices discret ou continu (souvent  $T = \mathbb{N}$  ou  $\mathbb{R}_+$ ).

Un **processus stochastique** est une famille de variables al $\tilde{A}$ latoires  $\{X_t\}_{t\in T}$  d $\tilde{A}$ lfinies sur  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$  et  $\tilde{A}$ ä valeurs dans un espace d' $\tilde{A}$ ltats E (appel $\tilde{A}$ l espace d' $\tilde{A}$ ltats du processus).

Un processus stochastique permet de mod Ã<br/>lliser un syst Ãĺme Ãľvoluant de mani Ãĺre al<br/>Ãľatoire en fonction du temps.

DiffÂlrents types de processus peuvent Âltre ÂltudiÂls en fonction des propriÂltÂls de dÂlpendance temporelle et de la nature de l'espace d'Âltats E. Au cours de ce rapport, nous nous concentrerons l'un des principaux processus stochastiques Ãă temps discret et Ãă espace d'Âltats fini; les **chaÃones de Markov**.

#### ChaÃone de Markov

Soit E un ensemble fini ou d $\tilde{A}$ l'nombrable.

Soit  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  une suite de variables al Ãlatoires Ãă valeurs dans l'espace d'Âltats E.

 $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  est appellÃle **chaÃone de Markov** si et seulement si :

- (1) Sa loi de probabilit $\tilde{A}$ l' initiale  $X_0$  est bien d $\tilde{A}$ l'finie.
- (2) Elle respecte la **propriÃl'tÃl' de Markov**, telle que :

$$\forall n \geq 0, \quad \exists x_1, x_2, \dots, x_{n+1} \in E,$$

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n).$$

Une chaÃ<br/>őne de Markov est un processus de Markov Ã<br/>ă temps discret ou Ã<br/>ă temps continu et Ã<br/>ă espace d'Ãl'tats discret. Un processus de Markov est un processus stochastique possÃl'dant la propriÃl'tÃl' de Markov : l'information utile pour la prÃl'diction du futur est entiÃl'rement contenue dans l'Ãl'tat prÃl'sent du processus et n'est pas dÃl'pendante des ses Ãl'tats antÃl'rieurs.

Autrement dit, la loi de probabilitĂl  $\mathbb{P}$  rĂlgissant la transition de l'Ăltat prĂlsent  $X_n$  vers l'Ăltat futur  $X_{n+1}$  dĂlpend uniquement du dernier terme  $X_n$ , et reste totalement indĂlpendante des tous ses Ăltats antĀlrieurs  $\{X_0, X_1, \ldots, X_{n-1}\}$ .

Cette propriÃľtÃľ, que l'on peut qualifier de Âń sans mÃľmoire Âż ou de propriÃľtÃľ de Markov, constitue la caractÃľristique fondamentale de ces processus stochastiques.

#### Chaine de Markov HomogÃÍne

Un chaine de Markov est dite homog $\tilde{A}$ lne quand  $\forall n \in \mathbb{N}$ :

$$\mathbb{P}[X_{n+1} = j \mid X_n = i] = \mathbb{P}[X_1 = j \mid X_0 = i].$$

En somme, une cha Ã<br/>őne de Markov homog ÃÍne ne d Ãľpend pas des Ãľtats pr<br/>Ãľc Ãľdents (propri Ãľt Ãľ de Markov) et garantit que son comportement reste inchang Ãľ au fil du temps, c'est-Ã<br/>ă-dire que les probabilit Ãľs de transition restent constantes quel<br/>que doit  $t\in T$  (homog Ãľn Ãľit Ãľ de la chaine de Markov). Dans ce rapport, toutes les cha Ã<br/>őnes de Markov seront consid Ãľr Ãľes comme homog Ãĺnes.

#### 2.2 PropriÃľtÃľs fondamentales

#### 2.2.1 Matrice de Transition

#### Matrice de Transition

Soit  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  une chaÃone de Markov homogÃlne Ãă valeurs dans un ensemble fini ou dÃlnombrable E.

Soit la famille de nombres rÃlels  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  permettant de passer d'un Ãltat Ãă un autre, dÃlfinie comme :

$$\forall n \geq 0, \ \forall i, j \in E, \quad P_{ij} = \mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i).$$

La **matrice de transition** P regroupe ces probabilitÃls tel que chaque ÃllÃlment  $P_{ij}$  reprÃlsente la probabilitÃl de passer de l'Ãltat i Ãă l'Ãltat j en une seule Ãltape. Lorsque l'ensemble des Ãltats E est discret, par exemple  $E = \{1, 2, ..., N\}$ , la matrice s'exprime sous la forme suivante :

$$P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1N} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{N1} & P_{N2} & \cdots & P_{NN} \end{bmatrix}$$

#### Matrice stochastique par lignes/colonnes

Une matrice stochastique par lignes (appel $\tilde{\mathbf{A}}$ le aussi stochastique  $\tilde{\mathbf{A}}$  a droite) est une matrice dont la somme des probabilit $\tilde{\mathbf{A}}$ ls de ses lignes vaut 1 chacune et toutes ses probabilit $\tilde{\mathbf{A}}$ ls sont positives :

$$\forall i, \quad \sum_{j=1}^{N} P_{ij} = 1 \quad \text{et} \quad 0 \le P_{ij} \le 1.$$

Respectivement, une matrice est **stochastique par colonnes** (dite aussi **stochastique \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{a}} gauche**) lorsque :

$$\forall j, \quad \sum_{i=1}^{N} P_{ij} = 1 \quad \text{et} \quad 0 \le P_{ij} \le 1.$$

Une matrice est dite **bistochastique** lorsqu'elle est Ãă la fois stochastique par lignes et par colonnes.

Dans le cadre des chaines de Markov homog $\tilde{A}$ Ínes, toutes les matrices de transition P sont stochastiques par lignes car les probabilit $\tilde{A}$ Is de transition depuis chaque  $\tilde{A}$ Itat sont normalis $\tilde{A}$ Ies (chaque ligne repr $\tilde{A}$ Isentant le vecteur

des probabilit Ãls de transition depuis un Ãltat donn Ãl vers l'ensemble des autres Ãltats). C'est-Ãă-dire que la somme des probabilit Ãls pour passer d'un Ãltat Ãă un autre vaut 1.

De mani ÃÍre analogue, si l'espace des Ãľ<br/>tats est infini dÃľnombrable (par exemple  $E=\{1,2,3,\dots\}$ ), on indexe les Ãľ<br/>tats de la mÃłme faÃğon et la condition

$$\forall i \in E, \quad \sum_{j \in E} P_{ij} = 1,$$

reste valable.

#### 2.2.2 ReprÃl'sentation sous forme de Graphe OrientÃl'

#### Graphe OrientÃľ d'une ChaÃőne de Markov

Une chaÃone de Markov homogà ne peut toujours à tre reprà sentà le sous forme d'un graphe orientà lG = (V, A), oà  $\dot{z}$ :

- (1) V est l'ensemble des sommets, correspondant aux Ãl'tats de l'espace d'Âl'tats E.
- (2) A est l'ensemble des arcs, o $\tilde{A}$ ź chaque arc poss $\tilde{A}$ Íde une pond $\tilde{A}$ l'ration correspondant  $\tilde{A}$ ĕ la probabilit $\tilde{A}$ l' de transition  $P_{i,j}$ . Un arc de i vers j est repr $\tilde{A}$ l'sent $\tilde{A}$ l' que si  $P_{i,j} > 0$ .

ReprÃlsenter graphiquement une chaÃone de Markov homogÃlne permet de clarifier visuellement les diffÃlrentes dynamiques de transitions entre chaque Ãltat du systÃlme et de comprendre la structure du processus stochastique.

#### Exemple

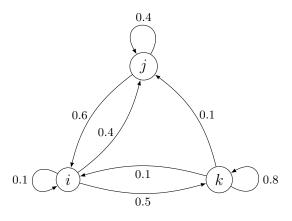
ConsidÃ l'rons par exemple une chaÃ őne de Markov ayant trois Ã l'tats i,j,k, ordonnÃ l's respectivement, et dont la matrice de transition est donnÃ l'e par :

$$P = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.4 & 0.5 \\ 0.6 & 0.4 & 0 \\ 0.1 & 0.1 & 0.8 \end{bmatrix}$$

Dans cette configuration, la probabilit Ãľ de transition de l'Ãľ<br/>tat i vers l'Ãľtat j est donn Ãľ<br/>e par :

$$P_{i,j} = P_{1,2} = \mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i) = 0.4$$

Nous obtenons ainsi le graphe suivant :



#### 2.2.3 Matrice de transition en k-pas

#### Matrice de transition pour k-transitions

Soit  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  une chaine de Markov homogÃÍne d'espace d'Ãltats E fini ou dÃlnombrable tel que  $\{1,2,\ldots,N\}$ . On note P sa matrice de transition.

Pour tout Ãl'tat  $E_i$  et  $E_j$  et pour tout entier naturel  $k \ge 1$ , le coefficient de la ligne i et de la colonne j de la matrice  $P^k$  est la probabilitÃl' de passer de l'Ãl'tat  $E_i$  Ãă celui  $E_j$  en k transitions.

Les cha Ã<br/>őnes de Markov homog ÃÍnes permettent de d ÃIterminer l'ÂItat d'un syst ÃÍme apr ÃÍs<br/> k transitions, c'est-Ãă-dire au bout du k-i ÃÍme mouvement dans la chaine, en ÃI<br/>levant la matrice de transition Ãă la puissance k. Plus formellement, on a :

$$P_{i,j}^{(k)} = \mathbb{P}(X_k = j \mid X_0 = i).$$

Ce rÃľsultat vient de la propriÃľtÃľ de Markov, qui indique que la probabilitÃľ de transition d'un Ãľtat i Ãă un Ãľtat j dÃľpend uniquement du dernier pas rÃľalisÃľ, et non de tous les prÃľaľdents.

#### DÃľmonstration

La dÃlmonstration de cette propriÃltÃl passe par celle de l'**Ãlquation** de Chapman-Kolmogorov, telle que  $\forall i, j \in E$  et  $\forall n, m \in \mathbb{N}$ :

$$\mathbb{P}(X_{n+m} = j \mid X_0 = i) = \sum_{k \in E} \mathbb{P}(X_m = j \mid X_0 = k) \cdot \mathbb{P}(X_n = k \mid X_0 = i).$$

Ce qui Alquivaut en termes matriciels :

$$P_{i,j}^{(n+m)} = \sum_{k \in E} P_{i,k}^{(n)} \cdot P_{k,j}^{(m)}.$$

Cette relation peut s'interpr Ãl'ter en disant que pour passer de i Ã<br/>ă j en n+m Ãl'tapes il a fallu en n Ãl'tapes aller de i Ã<br/>ă un certain k puis en m Ãl'tapes aller de k Ã<br/>ă j.

On reconnait alors l'expression de l'associativit Ã<br/>l du produit matriciel tel que :

$$P^{n+m} = \underbrace{P \cdot \ldots \cdot P}_{n \text{ fois}} \cdot \underbrace{P \cdot \ldots \cdot P}_{m \text{ fois}} = P^n P^m.$$

#### Exemple

Reprenons par exemple la matrice P donn $\tilde{\text{Ale}}$  dans la sous-section 2.2.2 ci-dessus, la matrice de transition en 5  $\tilde{\text{Altapes}}$ , nomm $\tilde{\text{Ale}}$   $P^5$ , repr $\tilde{\text{Altapes}}$  sente l'ensemble des probabilit $\tilde{\text{Alsaper}}$  permettant de passer de chaque  $\tilde{\text{Altat}}$  i  $\tilde{\text{Aŭ}}$  un  $\tilde{\text{Altat}}$  j au bout d'exactement 5  $\tilde{\text{Altapes}}$ :

$$P^5 = \begin{bmatrix} 0,22350 & 0,24385 & 0,53265 \\ 0,24150 & 0,26140 & 0,49710 \\ 0,20595 & 0,22252 & 0,57153 \end{bmatrix}$$

Toujours en reprennant notre exemple, la probabilit Ãľ de passer de l'Ãľ-tat i Ãă l'Ãľ tat j au bout d'exactement 5 Ãľ tapes est donc de :

$$P_{i,j}^{(5)} = \mathbb{P}(X_{k+5} = j \mid X_k = i) = 24,385\%$$

#### 2.3 Classes d'Alquivalence

#### 2.3.1 Classification des Altats

Dans une chaÃőne de Markov, chaque Ãľtat peut Ãľtre classifiÃľ en diffÃľ-rentes catÃľgories en fonction de ses liaisons avec les autres Ãľtats. Ces diffÃľrentes classifications nous permettrons d'analyser le comportement de la chaÃőne en temps long.

#### AccessibilitÃl et communication

Soient i et j deux ÃľlÃľments de E. On dit que j est **accessible** Ãă partir de i si :

$$\exists n \ge 1, \quad P_{i,j}^{(n)} > 0.$$

Ce que l'on note  $i \to j$ .

On dit que les deux Ãltats i et j communiquent si  $i \to j$  et  $j \to i$ . On a ainsi :

$$\exists n \ge 0, \quad P_{i,j}^{(n)} > 0 \quad \text{et} \quad \exists m \ge 0, \quad P_{j,i}^{(m)} > 0.$$

Ce que l'on note  $i \leftrightarrow j$ .

En particulier,  $i \to j$  si et seulement s'il existe une suite d'Âltats  $(i_0, i_1, \dots, i_n)$  avec  $i_0 = i$  et  $i_n = j$  telle que :

$$P(X_n = j, ..., X_1 = i_1 \mid X_0 = i) = P(i_{n-1}, j) \cdot ... P(i, i_1) > 0.$$

Ce qui veut dire qu'il existe un chemin de probabilit à l' strictement positive qui m à l<br/>ne de i  $\tilde{A}$ ă j.

#### ÃLtat rÃlcurrent/transient

Un  $\tilde{\mathbf{A}}$ ltat i est dit  $\mathbf{r}\tilde{\mathbf{A}}$ lcurrent si, en partant de cet  $\tilde{\mathbf{A}}$ ltat, il est certain d'y retourner en un nombre fini de pas. Un  $\tilde{\mathbf{A}}$ ltat non  $\tilde{\mathbf{r}}\tilde{\mathbf{A}}$ lcurrent est dit transient.

On pose:

$$\tau_i = \inf\{\exists n \in \mathbb{N}^*, n \ge 1 \mid X_n = i\}$$

On dit alors que i est r $\tilde{A}$ l'current si :

$$\mathbb{P}_i(\tau_i < \infty) = \mathbb{P}(\tau_i < \infty \mid X_0 = i) = 1$$

Et on dit que i est transient si :

$$\mathbb{P}_i(\tau_i < \infty) = \mathbb{P}(\tau_i < \infty \mid X_0 = i) < 1$$

Ces propriÃltÃles impliquent que si l'Ãltat i est rÃlcurrent (respectivement

transient), on y retournera un nombre infini (respectivement fini) de fois pour une infinit $\tilde{A}$ l' de transitions.

#### ÃĽtat absorbant/Ãľvanescent

Un Ãľtat i est appelÃľ **absorbant** si, une fois atteint, la chaÃőne reste dans cet Ãľtat avec probabilitÃľ 1. Formellement, cet Ãľtat satisfait :

$$P_{i,i} = 1$$
 et  $\forall j \neq i$ ,  $P_{i,j} = 0$ .

A l'inverse, tout  $\tilde{A}$ l'tat ne respectant pas cette condition est appel $\tilde{A}$ l' $\tilde{A}$ l'tat non-absorbant ou encore  $\tilde{A}$ l'tat  $\tilde{A}$ l'vanescent.

#### ÃĽtat pÃľriodique/apÃľriodique

Un Ãltat i est dit **pÃlriodique** si la chaÃone ne peut revenir Ãă cet Ãltat qu'aprÃÍs un nombre d'Ãltapes multiple (un certain entier d > 1), appelÃl la pÃlriode de i. La pÃlriode d(i) est dÃlfinie comme :

$$d(i) = PGCD\{n \ge 1 \mid P_{i,i}^{(n)} > 0\}.$$

Si d(i) = 1, l'Ãltat i est dit **apÃlriodique**, ce qui signifie qu'il est possible de revenir Ãă cet Ãltat Ãă chaque nouvelle transition / sans contrainte de pÃlriodicitÃl.

#### 2.3.2 Classes de communication

#### Classe de communication

Soit deux Ãltats communicants i et j. Selon la dÃlfinition prÃlcÃldente, on a que  $\leftrightarrow$  est une relation d'Ãlquivalence. De plus dans le contexte des chaines de Markov, ces classes d'Ãlquivalences sont appelÃles **classes de communications**. Une classe de communication est donc un ensemble d'Ãltats accessibles les uns depuis les autres.

#### DÃľmonstration

Montrons que la relation  $\leftrightarrow$  est une relation d'Alquivalence.

Il nous suffit alors de vĂlrifier les trois propriĂltĂls suivantes :

1. **RĂlflexivitĂl**: Pour tout Ăltat  $i \in E$ ,  $i \leftrightarrow i$ . Pour tout Ăltat  $i \in E$ , il existe trivialement un chemin  $i \to i$ . En effet, en considĂlrant le chemin de longueur zĂlro (via le fait que  $P_{ii}^{(0)} = 1$  en dĂlfinissant  $P^{(0)}$  comme la matrice identitĂl), on conclut directement que  $i \leftrightarrow i$ .

- 2. **SymÃl'trie** : Si  $i \leftrightarrow j$ , alors  $j \leftrightarrow i$ . Si  $i \leftrightarrow j$ , par dÃl'finition il existe un chemin  $i \to j$ , (et inversement un chemin de  $j \to i$ ). Ainsi, la relation est symÃl'trique :  $i \leftrightarrow j \Rightarrow j \leftrightarrow i$ .
- 3. **TransitivitÃI** : Si  $i \leftrightarrow j$  et  $j \leftrightarrow k$ , alors  $i \leftrightarrow k$ . Supposons que  $i \leftrightarrow j$  et  $j \leftrightarrow k$ . En composant ces deux chemins, on obtient un chemin  $i \to k$ . De maniÃÍre analogue, la composition des chemins  $k \to j$  et  $j \to i$  nous fournit un chemin  $k \to i$ . Ainsi,  $i \leftrightarrow k$ .

Comme la relation  $\leftrightarrow$  satisfait les propri $\tilde{A}$ l̃t $\tilde{A}$ ls de r $\tilde{A}$ l̃flexivit $\tilde{A}$ l̃, de sym $\tilde{A}$ l̃trie et de transitivit $\tilde{A}$ l̃, elle est bien une relation d' $\tilde{A}$ l̃quivalence sur E. Les classes d' $\tilde{A}$ l̃quivalences ainsi obtenues sont allors appel $\tilde{A}$ l̃es classes de communication.

L'ensemble des classes de communication, engendr $\tilde{A}$ les par  $\leftrightarrow$ , d'une cha $\tilde{A}$ őne de Markov sont **disjointes** et forment une **partition** de l'ensemble des  $\tilde{A}$ l'tats de cette cha $\tilde{A}$ őne. Autrement dit, la relation d' $\tilde{A}$ l'quivalence  $\leftrightarrow$  partitionne l'ensemble des  $\tilde{A}$ l'tats d'une cha $\tilde{A}$ őne de Markov en classes de communication disjointes.

#### PropriÃľtÃľs de classe

On appelle **propriÃltÃl' de classe** une propriÃltÃl structurelle commune Ãă tous les Ãltats d'une mÃlme classe de communication.

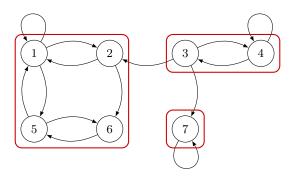
Les propriÃľtÃľs de rÃľcurrence ou transience d'un Ãľtat, ÃľnoncÃľes dans la partie 2.3.1 sont des propriÃľtÃľs de classe.

Cela signifie donc qu'au sein d'une mÃlme classe de communication, tous les Ãltats sont soit rÃlcurrents, soit transients. On parle alors de classes de rÃlcurrence ou de transience.

L'intÃlrÃłt de ces distinctions est de diviser les chaÃones de Markov en sous-ensembles analytiquement indÃlpendants, ce qui permet ensuite de tirer des conclusions sur les sous-ensembles prÃlsentant ces propriÃltÃls.

#### Exemple

Prenons par exemple la chaÃone de Markov suivante, dont la reprÃsentation sous forme de graphe orientÃs est donnÃs ci-dessous :



Dans cette cha Ã<br/>őne de Markov, nous avons trois classes de communication :

- La classe 1, form $\tilde{A}$ le par les  $\tilde{A}$ ltats  $\{1, 2, 5, 6\}$ .
  - Cette classe est fermÃle car il n'est pas possible de quitter cette classe une fois qu'un Ãltat de celle-ci est atteint. En effet, il n'existe pas d'Ãltat j tel que  $P_{i,j} > 0$  pour  $i \in \{1, 2, 5, 6\}$  et  $j \notin \{3, 4, 7\}$ .
  - Chaque Ãl'tat de la classe est alors rÃl'current car il est certain de revenir Ãă un des Ãl'tats  $i \in \{1, 2, 5, 6\}$  aprÃl's un nombre infini de transitions.
- La classe 2, form $\tilde{A}$ le par les  $\tilde{A}$ ltats  $\{3,4\}$ .
  - Cette classe est ouverte car il est possible de la quitter via  $3 \rightarrow 2$  et  $3 \rightarrow 7$ .
  - Chaque Ãltat de la classe est alors transient car nous ne reviendrons pas aux Ãltats  $i \in \{3,4\}$  aprÃls un nombre infini de transitions.
- Et la classe 3, formÃle par l'Ãltat {7}.
  - Cette classe est ferm Ãle car il n'est pas possible de quitter cette classe une fois que l'Âlt at 7 est atteint. En effet, en partant de l'Âlt at 7, nous n'avons que  $7 \rightarrow 7$ .
  - Chaque Ãl'tat de la classe est alors rÃl'ccurent car une fois que l'Ãl'tat 7 est atteint, la chaÃone reste dans cet Ãl'tat avec probabilitÃl' 1.

### 2.4 ProbabilitÃľ invariantes et thÃľorÃÍme ergodique

#### 2.4.1 probabilit $ilde{ ext{A}}$ l' invariantes

La loi stationnaire peut permettre sous certaines conditions Ãă dÃlcrire le comportement Ãă long terme de la chaÃone de Markov.

#### ProbabilitÃl' invariantes/stationnaire

Soit une chaÃone de Markov  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  Ãă espace d'Ãltat E, et ayant pour matrice de transition P.

Une probabilitĂl  $\pi = (\pi_i)_{i \in E}$  sur l'espace d'Ăltat E est dite invariante (ou stationnaire) si elle satisfait la relation  $\pi P = \pi$ .

C'est-Ãă-dire

$$\forall y \in E, \quad \sum_{x \in E} \pi(x) P_{x,y} = \pi(y).$$

Cela signifie que  $\pi$  est un vecteur propre Ãă droite de la transposÃle  $P^{\top}$ , associÃl Ãă la valeur propre 1 :

$$\pi P = \pi \iff P^{\top} \pi^{\top} = \pi^{\top}.$$

De plus dans notre cas, comme  $\pi$  est une probabilit Ãľ, elle respecte les conditions suivantes :

$$\forall i \in E, \quad \pi_i \ge 0 \quad \text{et} \quad \sum_{i \in E} \pi_i = 1.$$

#### Existence d'une probabilitÃl' invariante

Soit  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  une chaÃone de Markov homogÃlne sur un espace d'Ãltats E fini, de matrice de transition P. Alors  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  admet au moins une probabilitÃl invariante.

#### DÃľmonstration

Par dÃlfinition,  $\pi$  est invariante si  $\pi P = \pi$ , ou encore  $P^{\top}\pi^{\top} = \pi^{\top}$ , c'est-Ãă-dire que  $\pi^{\top}$  est un vecteur propre de  $P^{\top}$  associÃl Ãă la valeur propre 1. Or P et sa transposÃle  $P^{\top}$  ont mÃlme valeurs propres (car mÃlme polynÃtme caractÃlristique), et comme P est une matrice stochastique, on a  $P\mathbf{1} = \mathbf{1}$ , oÃź  $\mathbf{1}$  dÃlsigne le vecteur de  $\mathbb{R}^{|E|}$  dont tous les coefficients sont Ãlgaux Ãă 1. Donc 1 est vecteur propre de P et donc de  $P^{\top}$ , donc il existe un vecteur ligne  $\mu$  non nul tel que  $\mu P = \mu$ . Soit  $\pi$  le vecteur

ligne tel que  $\pi(x) = |\mu(x)|$ , pour tout  $x \in E$ , et montrons que  $\pi$  est encore vecteur propre  $\tilde{A}$ ă gauche de P. Comme les coefficients de  $\pi$  sont positifs, il suffira alors de diviser  $\pi$  par la somme de ses coefficients pour obtenir une probabilit $\tilde{A}$ l' invariante. On a, pour tout  $x \in E$ ,

$$\pi(x) = |\mu(x)| = |\mu P_x| = \left| \sum_{y \in E} \mu(y) P_{y,x} \right|,$$

$$\leq \sum_{y \in E} |\mu(y)| P_{y,x} = \sum_{y \in E} \pi(y) P_{y,x} = \pi P_x,$$

donc  $\pi(x) \leq \pi P_x$ , pour tout  $x \in E$ . De plus,

$$\sum_{x \in E} \pi(x) = \sum_{x \in E} |\mu(x)| = \sum_{x \in E} \left| \sum_{y \in E} \mu(y) P_{y,x} \right|,$$

$$\leq \sum_{x \in E} \sum_{y \in E} |\mu(y)| P_{y,x} = \sum_{y \in E} \pi(y) \sum_{x \in E} P_{y,x} = \sum_{y \in E} \pi(y).$$

Finalement,  $\pi(x) \leq \pi P_x$  pour tout  $x \in E$ , et les vecteurs ont mÃlme somme, c'est donc qu'ils sont Ãlgaux : on a

$$\sum_{x \in E} (\pi P_x - \pi(x)) = 0,$$

et comme  $\pi P_x - \pi(x) \ge 0$  pour tout  $x \in E$ , on a  $\pi P_x = \pi(x)$ . Ainsi,  $\pi$  renormalisĂÎ par la somme de ses coefficients est bien une probabilitĂÎ invariante.

#### ChaÃőne de Markov irrÃľductible

Une chaÃone de Markov est dite **irrÃoductible** si le graphe qui lui est associÃo est fortement connexe.

Autrement dit, pour tous les couples (i,j) d'Âltats de E, avec  $i \neq j$ , il existe un chemin (de probabilitÂl strictement positive) permettant d'aller de i Ãă j, et rÂlciproquement :  $i \leftrightarrow j$ .

#### ProbabilitÃľ invariantes d'une chaÃone de Markov irrÃľductible

Toute chaine de Markov homogÃÍne irrÃľductible admet une mesure invariante strictement positive sur E et toutes les probabilitÃľ invariantes sont proportionnelles entre elles.

#### 2.4.2 ThÃľorÃÍme ergodique

#### ThÃľorÃĺme ergodique (admis)

Soit E fini et  $(X_n)$  une cha Ã<br/>őne de Markov irr Âlductible, pour toute fonction f, et toute loi initial  $\nu_0$ 

$$\forall k > 0 : \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n - k + 1} \sum_{i=k}^{n} f(X_k) = \int_E f(x) \, d\mu(x)$$

avec  $\mu$  la probabilit Ãľ invariante.

On peut donc estimer  $\mu(x)$  avec  $\mathbb{1}_{\{x\}}$ , oÃź :

$$\mathbb{1}_A: B \to \{0,1\}, \ A \subseteq B$$

$$\mathbb{1}_A(x) = \begin{cases} 1, & \text{si } x \in A \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

Le thÃľorÃĺme ergodique nous dit donc que la moyenne de f le long de la trajectoire de la chaÃőne se rapproche empiriquement, lorsque ce temps n est grand, de sa moyenne spatiale par rapport Ãă la loi invariante. En particulier, ceci donne une nouvelle interprÃľtation de la mesure invariante comme la frÃľquence du temps d'occupation d'un Ãľtat en temps long.

Le thÃľorÃĺme ergodique peut Ãľgalement Ãłtre perÃğu comme une sorte de loi des grands nombres pour les chaÃőnes de Markov.

#### 2.5 Comportement en temps long

Maintenant que nous avons dÃlfini la loi stationnaire, nous pouvons Ãl'noncer le thÃl'orÃlme de convergence d'une chaine de Markov homogÃlne.

#### ThÃľorÃÍme de convergence

Soit  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  une chaÃőne de Markov homogÃÍne, irrÃľductible et apÃľriodique Ãă espace d'Ãľtats fini. Soit P sa matrice de transition. Alors, il existe une unique mesure invariante  $\pi$ , et pour tout Ãľtat initial  $i \in E$  et tout  $j \in E$ ,

$$\lim_{n\to\infty} P_{i,j}^n = \pi_j.$$

Ce qui implique:

$$\lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \pi_i P^k = \pi_j.$$

Donc la loi de  $X_n$  converge vers  $\pi$  indÃlpendamment de l'Ãltat initial, on a une convergence en loi.

#### DÃľmonstration

Commen Ã<br/>gons par montrer l'unicit Ãl de la probabilit Ãl invariante. La transpos Ãle d'une probabilit Ãl invariante est un vecteur propre de <br/>  $P^\top$ associ Ãl Ãă la valeur propre 1. Comme les valeurs propres de <br/> P et de  $P^\top$ sont les m Ãlmes et ont m Ãlme multiplicit Ãl, il suffit donc de montrer que l'espace propre associ Âl Ãă<br/> P pour la valeur propre 1 est de dimension 1.

Soit f un vecteur propre de P pour la valeur propre 1, i.e., Pf = f. Comme le vecteur 1 est vecteur propre, il s'agit de montrer que f est constante.

Soit  $x_i$  le point o $\tilde{A}$ ź f atteint son maximum, i.e.  $f(x_i) = \max\{f(x) \mid x \in E\}$ . Soit y un autre  $\tilde{A}$ Itat. Comme P est irr $\tilde{A}$ Iductible, y communique avec  $x_i$ , donc il existe  $n \geq 1$  tel que  $P^n(x_i, y) > 0$ . Comme Pf = f, on a aussi  $P^n f = f$ . Alors, d'une part,

$$f(x_i) = P^n f(x_i) = \sum_{y \in E} f(y) P^n(x_i, y),$$

et d'autre part,

$$f(x_i) = \sum_{y \in E} f(x_i) P^n(x_i, y),$$

donc on a

$$\sum_{y \in E} P^{n}(x_{i}, y) (f(x_{i}) - f(y)) = 0,$$

qui est une somme de termes positifs. Ainsi, comme  $P^n(x_i, y) > 0$ , on a  $f(y) = f(x_i)$ , et donc, f est constante, et la chaÃone admet une unique probabilitÃl invariante, notÃle  $\pi_j$ .

#### Valeur de convergence

Soit  $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$  une cha Ã<br/>őne de Markov homog ÂÍne irr Âlductible. Soit Alors, pour toute mesure initiale<br/>  $\lambda$  et pour tout Altat j :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} 1_{\{X_k = j\}} \to \pi_j,$$

o Ã<br/>ź $\pi$ est l'unique probabilit Ãľ invariante.

#### Convergence des mÃlthodes de Monte-Carlo

Soit X une chaine de Markov homog $\tilde{A}$ Íne irr $\tilde{A}$ Iductible, alors pour toute mesure initiale  $\lambda$  et pour toute fonction mesurable born $\tilde{A}$ Ie f, on a :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(X_k) \xrightarrow{n \to \infty} \int f \, d\pi \quad \text{p.s. sous } \mathbb{P}_{\lambda}.$$

Il s'agit de la mÃl'thode utilisÃl'e dans les algorithmes de Monte-Carlo.

Ces thÃlorÃlmes nous permettront de conclure quant Ãă la preuve de Hasting-Metropolis.

# 3 Fonctionnement de l'Algorithme de Hasting-Metropolis

#### 3.1 Qu'est-ce qu'une mAlthode dite MCMC?

Les mÃl'thodes MC dites de Monte-Carlo ont pour but d'approcher de maniÃl're empirique des valeurs par un processus alÃl'atoire rÃl'pÃl'tÃl' un nombre suffisant de fois. Elles interviennent quand une rÃl'solution dÃl'terministe est trop difficile Ãă obtenir, comme pour calculer des intÃl'grales ou gÃl'nÃl'rer des Ãl'chantillon de distributions statistiques. Les mÃl'thodes MC sont trÃl's fiables malgrÃl' l'alÃl'atoire utilisÃl', pourvu que l'algorithme ait les bonnes optimisations telles que le nombre de rÃl'pÃl'titions, la prÃl'cision exigÃl'e, la vitesse de convergence vers les valeurs cherchÃl'e, etc.

Les mÃlthodes MC sont utilisÃles dans beaucoup de domaines des sciences (comme la physique, la chimie, la biologie, les mathÃlmatiques statistiques, l'intelligence artificielle, la finance et la cryptographie).

Les mÃlthodes MCMC (Monte-Carlo par chaÃőnes de Markov) sont une sous-famille des algorithmes MC qui construisent, dans leur fonctionnement, une chaÃőne de Markov dont la distribution stationnaire est celle que l'on souhaite estimer.

Il devient ainsi possible d'exploiter les propriÃľtÃľs des chaÃőnes de Markov, notamment leur convergence vers une distribution stationnaire et leur propriÃľtÃľ d'ergodicitÃľ, qui peuvent Ãltre plus utiles que la loi des grands nombres seule, utilisÃľe dans les mÃľthodes MC classiques.

La principale diffĂlrence entre les mÃlthodes MC et MCMC rÃlside dans la dÃlpendance entre les points gÃlnÃlrÃls. Les mÃlthodes MC choisissent alÃlatoirement des points de l'espace, rÃlalisant ainsi un Ãlchantillonnage direct de la distribution cible, avec des Ãlchantillons indÃlpendants les uns des autres. Leur seul point commun est d'appartenir Ãă l'intervalle des valeurs possibles de la distribution de dÃlpart. En revanche, les mÃlthodes MCMC reposent sur une marche alÃlatoire : elles gÃlnÃlrent chaque nouveau point Ãă partir du prÃlcÃldent selon une rÃlgle de transition dÃlterminÃle. Cela crÃle une chaÃone de points corrÃllÃls, qui possÃlde les propriÃltÃls des chaÃones de Markov.

Ainsi, lorsque la distribution est concentrÂle sur une certaine partie de l'espace, l'utilisation de MCMC sera gÂlnÂlralement prÂlfÂlrable, car elle permet d'obtenir, dans un temps raisonnable, des Âlchantillons reprÂlsentatifs de cette distribution.

On pourra citer les mÃlthodes MCMC d'Ãlchantillonnage de Gibbs (et ses variantes comme le Blocked Gibbs Sampling ou l'Adaptive Gibbs Sampling), qui prennent leur intÃlrÃlt lorsque les variables de la distribution sont conditionnelles. Il existe aussi l'Ãlchantillonnage par tranches, qui Ãlchantillonne progressivement la distribution par "tranches" de valeurs, ou bien des optimisa-

tions de HM, telles que la mÃl'thode hamiltonienne de Monte-Carlo, qui calcule le gradient pour faciliter la marche du programme et rejeter moins de valeurs, tout en gagnant en performances.

#### 3.2 Definitions

TODO

#### 3.3 Description des Altapes de l'algorithme

Voici une description de cet algorithme :

#### **Hasting Metropolis**

- 1. Il faut avant tout choisir un point  $x_0$ , comme Ãltant le premier Ãlchantillon de notre loi cible, et aussi une probabilitÃl de transition g, en donnant les fonctions correspondant Ãă  $g_y(x)$  et g(x),  $\forall x, y \in E$ .
- 2. Ensuite nous it Ã<br/>ľrons sur t allant de 0 Ã<br/>ăN (notre nombre d'it Ãľrations voulu)
  - On tire x avec  $g_{x_t}(x)$
  - On pose  $\alpha := \frac{\pi(x)g_x(x_t)}{\pi(x_t)g_{x_t}(x)}$  (notons que si nous ne possÃldons qu'une densitÃl proportionnelle Ãă  $\pi$ , f nous pouvons poser  $\alpha := \frac{f(x)g_x(x_t)}{f(x_t)g_{x_t}(x)}$ )
  - On tire  $u \in [0, 1]$ , tel que  $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ 
    - Si  $u \leqslant \alpha$  alors :  $x_{t+1} := x$
    - Sinon : on conserve l'Altat prAlcAldent  $x_{t+1} := x$
- 3. La sÃľquence  $\{x_0,x_1,...,x_{N-1}\}$  constitue donc l'Ãľchantillon obtenue Ãă partir de la chaÃőne de Markov associÃľ Ãă la loi  $\pi$

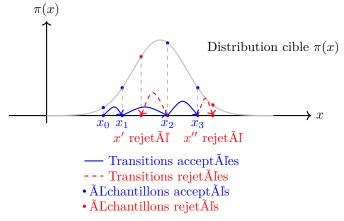
#### 3.4 Preuve de l'algorithme

TODO

## 3.5 Exemples d'applications simples de HM

Afin de comprendre le dĂlroulement de l'algorithme, on peut s'appuyer sur un graphique illustrant le dĂlbut d'une simulation de Metropolis-Hastings dans un espace d'Ăltats continu. Bien que cet exemple diffĂlre du reste du rapport qui traite d'Ăltats discrets, les propriĂltĂls ĂlnumĂlrĂles de l'algorithme restent les mÃlmes.

Ce cas a  $\tilde{A}$ l't $\tilde{A}$ l' choisi pour sa clart $\tilde{A}$ l' visuelle : il permet de suivre facilement les  $\tilde{A}$ l'tapes de l'algorithme, voici le sch $\tilde{A}$ l'ma :



Dans cet exemple, la distribution cible  $\pi(x)$  est reprÃlsentÃle par la courbe grise, ici une distribution normale. L'axe des ordonnÃles indique les valeurs prises par cette densitÃl, tandis que l'axe des abscisses correspond aux diffÃlrents Ãltats que la chaÃone de Markov peut atteindre au fil des itÃlrations.

Nous choisissons arbitrairement l'Āltat  $x_0$  comme dÃlpart et cherchons Ãă crÃler un Ãlchantillon de taille 4. Cet Ãltat fait donc partie de l'Ãlchantillon. L'algorithme propose un nouvel Ãltat  $x_1$ , tirÃl avec la loi de transition  $g(x_1 \mid x_0)$  Ãă partir de l'Ãltat courant. On tire alors le taux d'acceptation  $\alpha = \min\left(1, \frac{\pi(x')\,g(x|x')}{\pi(x)\,g(x'|x)}\right)$  connu Ãă un coefficient prÃls, et un tirage de la loi uniforme  $u \sim \mathcal{U}(0,1)$ . Si  $u \leqslant \alpha$  on accepte ce nouvel Ãltat, sinon on le rejette. Sur le schÃlma,  $x_1$  est proposÃl puis acceptÃl, suivi de  $x_2$  Ãlgalement acceptÃl. Un autre candidat x' est ensuite rejetÃl, ce qui conduit Ãă conserver  $x_2$  pour l'itÃlration suivante, et ainsi de suite.

 $\tilde{A}\tilde{A}$  noter que certains  $\tilde{A}$ l'tats peuvent  $\tilde{A}$ ltre selectionn $\tilde{A}$ l's m $\tilde{A}$ lme s'ils semblent se situer dans des zones de faible densit $\tilde{A}$ l' (c'est le cas ici de  $x_3$ ).

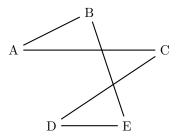
ConsidÃlrons maintenant un cas simple du TSP avec 5 villes A,B,C,D et E, donc dans un systÃlme d'Ãltats finis par lequel on essaie d'obtenir le chemin de longueur minimale.

La diffÃlrence notable avec le prÃlcÃldent exemple est que l'on ne cherche plus Ãă Ãlchantilloner des points sur une courbe de densitÃl mais des chemins entre les villes. Chaque possibilitÃl est donc un ordre de visite des villes, et il en existe 5! = 120 au total.

ÃĂ l'issue de l'exĂlcution, on obtient alors un Ãlchantillon de chemins optimisÃls les plus courts qui ont ÃltÃl sÃllectionnÃl plus frÃlquemment. On peut ainsi approcher de maniÃlre probabiliste une solution optimale au problÃlme du voyageur de commerce.

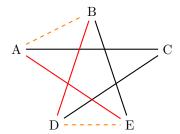
Le sch $\tilde{\mathbf{A}}$ lma suivant repr $\tilde{\mathbf{A}}$ lsente la situation initiale x

#### Diagramme initial Ãă optimiser



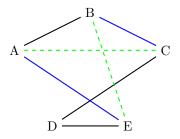
Voici un exemple de chemin refus Ãl par HM, en noir et rouge, les pointill Ãls repr Ãlsentant les diff Ãl<br/>rences avec l'Āltat d'origine :

#### Exemple de proposition rejetÃle par HM



Et un exemple de chemin acceptÃl par HM, en noir et bleu :

#### Exemple de proposition retenue par HM



#### 3.6 Application au cas du voyageur de commerce

Dans le cas du problÃÍme du voyageur de commerce (dit "TSP"), l'algorithme nÃſcessite une application adaptÃſe. Notre espace d'Ãſtat E correspond aux permutations des points. Par exemple, dans le cas de 3 points  $x_1, x_2, x_3, E = \{(x_1, x_2, x_3), (x_2, x_1, x_3), (x_2, x_3, x_1), (x_1, x_3, x_2), (x_3, x_2, x_1), (x_3, x_1, x_2)\}$ , ce qui, avec notre implÃſmentation actuelle, nÃſcessiterait de manipuler une matrice  $6 \times 6$ . Lorsque le nombre de villes augmente, nous aurions besoin d'une matrice carrÃſe de taille n!, oÃź n est le nombre de points, ce qui devient rapidement irrÃſaliste.

Nous d $\tilde{A}$ lfinissons donc des fonctions adapt $\tilde{A}$ les sur l'espace d' $\tilde{A}$ ltat E:

Une fonction de distance totale sur les permutations des coordonnÂles des villes  $D: E \to \mathbb{R}$ ,

$$D(p) = \sum_{i=1}^{n} ||x_i - x_{i+1}|| : \forall p = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in E, x_{n+1} = x_1$$

— Une distribution cible, avec  $\beta \in \mathbb{R}$  un paramAltre ajustable

$$\pi(p) = e^{-\beta \cdot D(p)}$$

— Une variable alÃľatoire  $S: E \to E$ , suivant une loi de chaÃőne de Markov. Nous pouvons mod Alliser cette transition par une fonction permutation(  $[x_1,\ldots,x_n]$ ), qui renvoie la mÃtme liste avec seulement deux villes permutÃles.

Nous pouvons donc redĂlfinir l'algorithme avec le pseudo code suivant : Hasting Metropolis TSP

- 1. On prend  $p_0$ , une permutation donn $\tilde{A}$ le
- 2. Ensuite nous it Ã<br/>lrons sur t allant de 0 Ã<br/>ă N (notre nombre d'it Ãl<br/>rations
  - On tire p avec la variable al $\tilde{A}$ latoire $S_{p_t}$ , on peut utilis $\tilde{A}$ l la fonction "permutation" dÃlfini plus tÃtt.
  - Calculer  $\alpha := \frac{\pi(p)}{\pi(p_t)}$  si la transition est symÃltrique, c'est-Ãă-dire  $\mathbb{P}(S_{p_t} = p) = \mathbb{P}(S_p = p_t)$ .

     Sinon  $\alpha := \frac{\pi(p)\mathbb{P}(S_p = p_t)}{\pi(p_t)\mathbb{P}(S_{p_t} = p)}$ )

  - On tire  $u \in [0; 1]$ , tel que  $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ 
    - Si  $u \leqslant \alpha$  alors :  $p_{t+1} \coloneqq x$
    - Sinon : on conserve l'Altat prAlcAldent  $p_{t+1} := x$
- 3. La sÃl'quence  $\{p_0, p_1, \dots, p_{N-1}\}$  constitue donc l'Ãl'chantillon obtenue Ãă partir de la cha Ã<br/>őne de Markov associ Ãľ Ã<br/>ă la loi $\pi$

On peut retirer de la sÃl'quence  $\{p_0, p_1, \dots, p_{N-1}\}$  le meilleur rÃl'sultat en prenant la  $p_m \in E : D(p_m) = \min(D(E))$ 

#### Comparaison avec d'autres mÃlthodes d'Ãlchantillon-3.7nage

TODO

# 4 Conclusion

TODO

#### 5 Annexe

#### 5.1 Code source

Cette section contient des implÄlmentations des algorithmes abordÄls. Le code source complet est disponible Ää l'adresse suivante : https://github.com/CorentinVaillant/ProjetMath-HastingMetropolis

#### 5.1.1 Code utilitaires

Voici le code source de 'utilis.py' qui contient des fonctions utiles au reste du projet. Seul le code des utilitaires math Ãlmatiques est prÃlsent Ãl ici â<br/>ĂT les fonctions utilitaires liÃles aux graphiques sont disponibles directement dans le dÃlpÃtt.

```
import numpy as np
import networkx as nx
import matplotlib.pyplot as plt

from math import factorial, comb

def poisson(1):
    return lambda k: ((1**k)/(factorial(k)))*np.exp(-1)

def binomial(n, p):
    return lambda k: comb(n, k) * p**k * (1-p)**(n-k)

def geo(p):
    return lambda k: p * ((1-p)**(k-1))
```

#### 5.1.2 ImplAmentation de l'algorithme de Hastings-Metropolis

L'implAlmentation de l'algorithme de Hastings-Metropolis, comme dAlcrit en 3.2 et relativement idiomatique, voici son implAlmentation, en diffAlrentes fonctions :

La fonction next\_state\_markov(x, transitions) renvoie un  $\tilde{A}$ l'tat y (un entier), avec une probabilit $\tilde{A}$ l' donn $\tilde{A}$ le par  $g_x(y)$ :

```
def next_state_markov(x: int, transitions: np.array) -> int:
    return np.random.choice(len(transitions), p=transitions[x])
```

La fonction markov\_chain\_from\_tirage(tirage, nb\_etats) transforme un tirage en une matrice de transition, repr\( \tilde{A} \) sentant une cha\( \tilde{A} \) one de Markov :

La fonction hasting\_metropolis\_tirage(x0, distribution\_cible, proposition, iterations) renvoie un tirage en suivant l'algorithme de Hastings-Metropolis:

```
def hasting_metropolis_tirage(x0: int, distribution_cible,
                                  proposition: np.array, iterations
                                  : int = 1000) -> np.array:
   x_t = x0
   tirage = [x_t]
    for _ in range(iterations):
       x = next_state_markov(x_t, proposition)
       pi_xt = distribution_cible(x_t)
       pi_x = distribution_cible(x)
       g_xt_x = proposition[x_t][x]
        g_x_xt = proposition[x][x_t]
        if pi_xt * g_xt_x == 0:
            alpha = 1 # Evite la division par zero
            alpha = min(1, (pi_x * g_x_xt) / (pi_xt * g_xt_x))
       u = np.random.uniform(0, 1)
        if u <= alpha:</pre>
           x_t = x
        tirage.append(x_t)
```

```
return np.array(tirage)
```

Enfin, la fonction hasting\_metropolis combine tout pour gÃlnÃlrer directement une chaÃö́ne de Markov Ãĕ partir de l'algorithme :

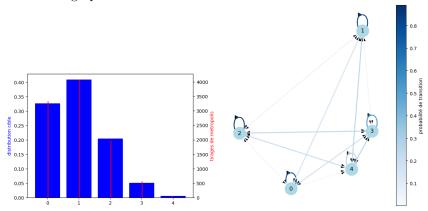
#### 5.1.3 Applications du code d'Hasting Metropolis

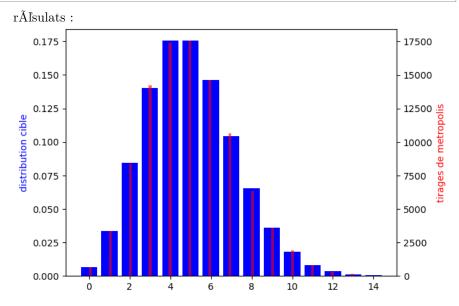
Dans cette section vous trouverais des exemples d'application des diff Ãlrents algorithmes impl Ãlment Ãls

Exemples Hastings-Metropolis Voici les exemples d'application d'Hasting-Metropolis que nous avons effectuer, Ãă partir de la librairie mathplotlib, le code source est trouvable sur https://github.com/CorentinVaillant/ProjetMath-HastingMetropolis.

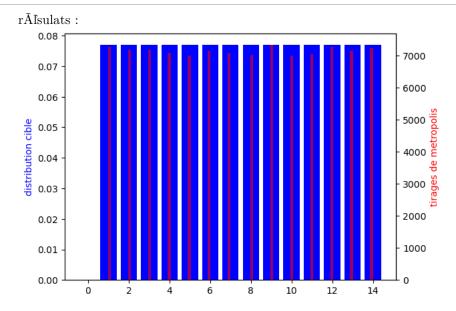
#### Application Ãă une loi binomial :

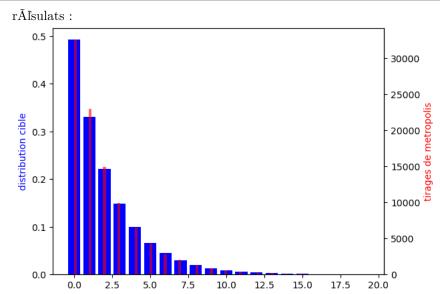
rAlsulat et graphe de la matrice de transition :

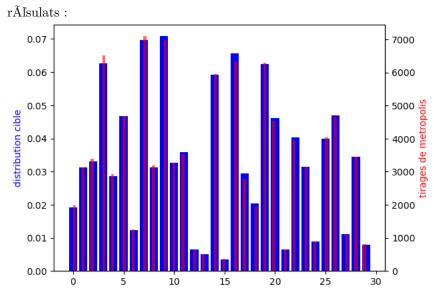




# 







#### 5.2 Sources

#### Documents textuels:

- https://fr.wikipedia.org/wiki/ChaÃone\_de\_Markov
- https://dms.umontreal.ca/~bedard/BergeronL\_rapport\_final.pdf
- https://www.math.univ-paris13.fr/~tournier/fichiers/agreg/ 2014/cours\_markov.pdf
- https://www.math.u-bordeaux.fr/~mchabano/Agreg/ ProbaAgreg1213-COURS5-CM.pdf
- https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~pierre-loic. meliot/agreg/markov.pdf
- https://www.college-de-france.fr/fr/agenda/cours/ apprentissage-et-generation-par-echantillonnage-aleatoire/ algorithme-de-metropolis-hasting
- https://www.math.u-bordeaux.fr/~mibonnef/mimse-markov/
   recurrence-transience.pdf
- https://perso.univ-rennes1.fr/jean-christophe.breton/agreg/ AGREG/COURS/ch-mark2.pdf
- https://fr.wikipedia.org/wiki/Processus\_stochastique
- https://fr.wikipedia.org/wiki/MÃl'thode\_de\_Monte-Carlo\_par\_ chaÃónes\_de\_Markov
- https://www.math.u-bordeaux.fr/~mchabano/Agreg/ ProbaAgreg1314-COURS5-CM.pdf
- https://fr.wikipedia.org/wiki/Algorithme\_de\_ Metropolis-Hastings#cite\_note-2
- https://www.radcliffe.harvard.edu/news-and-ideas/ flash-of-genius
- https://fr.wikipedia.org/wiki/Probl%C3%A8me\_du\_voyageur\_de\_ commerce
- https://www.cambridge.org/core/journals/ mathematical-proceedings-of-the-cambridge-philosophical-society/ article/abs/shortest-path-through-many-points/ F1C28B5730B94887F4659FCBF8A1F2BB

#### Documents vidÃlos:

- https://www.youtube.com/watch?v=yCv2N7wGDCw
- https://www.youtube.com/watch?v=MxI78mpq\_44
- https://www.youtube.com/watch?v=e0ZHDK4DSEI&list= PLWoShwK0FEjovcc32x9LbpDTf8pquPimV
- https://www.youtube.com/playlist?list= PLWoShwK0FEjovcc32x9LbpDTf8pquPimV