IMT Nord Europe
École Mines-Télécom
IMT-Université de Lille

DES CHAÎNES DE MARKOV À L'OPTIMISATION STOCHASTIQUE

DAVID COUPIER & CLÉMENT SARRAZIN

Contents

Chapter 1

Chaînes de Markov

Ce cours s'inspire fortement du livre de Bernard Ycart :
Modèles et algorithmes markoviens, Springer, 2002.

1.1 Introduction

On peut définir un *processus stochastique* comme étant une famille $\{X_t\}_{t\in T}$ de variables aléatoires indéxées par le temps t. Les mots *processus* et *stochastique* signifient respectivement *fonction* et *aléatoire*. Alors qu'une variable aléatoire X associe à chaque $\omega \in \Omega$ une réalisation $X(\omega)$, un processus stochastique $\{X_t\}_{t\in T}$ associe à chaque ω une fonction (ou trajectoire) $\{X_t(\omega)\}_{t\in T}$:

$$\begin{array}{rcl} T & \to & E \\ t & \mapsto & X_t(\omega) \end{array} ,$$

où E est l'espace d'arrivée des variables aléatoires X_t. Passer des variables aléatoires aux processus stochastiques revient à passer en analyse des points aux fonctions. À titre d'exemple, la trajectoire d'une mouche en fonction du temps peut être modélisée par un processus stochastique à valeurs dans $E = \mathbb{R}^3$. Nous ne considérerons que des processus stochastiques *à temps discret*, i.e. lorsque l'ensemble des temps T est au plus dénombrable (par exemple $T = \mathbb{N}$).

Dans tout ce cours, les expressions "variable aléatoire" et "indépendantes et identiquement distribuées" sont abrégées en v.a. et i.i.d.

Les situations réelles pouvant être modélisées par des processus stochastiques à temps discret sont nombreuses. En voici quelques exemples :

EXEMPLES :

• **Problème de la ruine du joueur.** Considérons une suite de v.a. $(Y_n)_{n\geq 1}$ i.i.d. dont la loi commune est définie par

$$\mathbb{P}(Y_1 = 1) = p \;\text{ et }\; \mathbb{P}(Y_1 = -1) = 1 - p$$

et une quantité initiale (déterministe ou aléatoire) $Y_0 \in \mathbb{Z}$ indépendante des v.a. Y_n. On définit la *marche aléatoire simple* par

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= X_n + Y_{n+1} \\ &= Y_0 + Y_1 + \ldots + Y_n + Y_{n+1} , \end{aligned}$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. La suite $(X_n)_{n\geq 1}$ est un processus stochastique à temps discret $T = \mathbb{N}$ (ce sont les instants $n = 0, 1, 2\ldots$) et à valeurs dans $E = \mathbb{Z}$. La suite $(X_n)_{n\geq 1}$ représente l'évolution de la fortune d'un joueur (jouant à pile ou face, à la roulette...) gagnant un montant fixe (ici 1 euro) avec probabilité p et perdant le même montant avec probabilité $1 - p$. Les parties, dont les résultats sont les Y_n, sont supposées indépendantes. La fortune du joueur à l'issue de la n-ième partie est X_n. La quantité Y_0 représente la fortune initiale du joueur.
Le joueur est ruiné (et donc arrête de jouer) dès que la suite $(X_n)_{n\geq 1}$ touche l'axe des abscisses. On peut également ajouter comme condition que le joueur s'arrête de jouer si sa fortune atteint un certain seuil $a > Y_0$. Dans ce jeu, on aimerait connaître l'espérance de gain en fonction des paramètres Y_0, a et p, ou encore la durée moyenne du jeu.

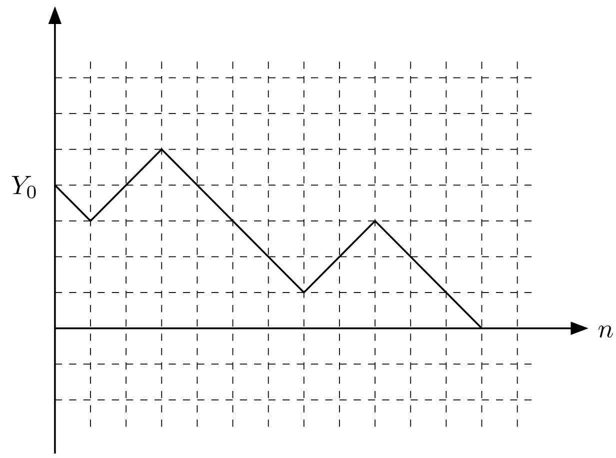


Figure 1.1: Le joueur est ruiné à l'issue de la 12-ième partie.

• **Problème de l'extinction d'une population.** Considérons une suite doublement indéxée de v.a. $\{Y_{n,m}, n \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{N}^*\}$ i.i.d. et à valeurs entières. La variable $Y_{n,m}$ représente le nombre de fils du m-ième individu dans la n-ième génération (s'il existe). Posons $X_0 = 1$; il y a initialement un seul individu (génération 0). Puis, pour tout n,

$$X_{n+1} = \sum_{m=1}^{X_n} Y_{n,m}$$

représente le nombre d'individu dans la $(n + 1)$-ième génération. La suite $(X_n)_{n\geq 1}$ est un processus stochastique à temps discret $T = \mathbb{N}$ (ce sont les générations) et à valeurs dans $E = \mathbb{N}$. Il est connu sous le nom de *processus de branchement* ou *arbre de Galton-Watson*.
Historiquement, Galton et Watson ont introduit ce modèle pour étudier la perpétuation des lignées des Lords en Angleterre au 19-ième siècle : les individus sont des Lords qui transmettent leur titre uniquement à leurs fils. Il s'agit alors d'étudier l'évolution de la population au cours du temps, i.e. la quantité X_n quand n devient grand. Y aura-t'il extinction de la lignée de Lords ? Voici une première réponse pleine de bon sens : si le nombre moyen $\mathbb{E}[Y_{0,1}]$ de fils de chaque individu est élevé, la population devrait rapidement croître. À l'inverse, si $\mathbb{E}[Y_{0,1}]$ est proche de 0, la population devrait s'éteindre.

• **Séries temporelles ou chronologiques.** Les séries temporelles sont des processus stochastiques. Elles peuvent illustrer le nombre de morts suite à des accidents de la route dans un pays donné durant un

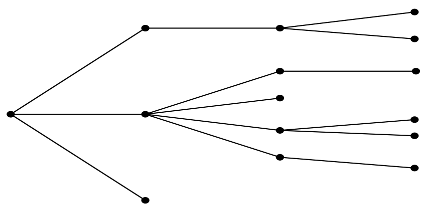


Figure 1.2: Sont représentées les quatre premières générations d'un arbre de Galton-Watson. Le premier individu a $Y_{0,1} = 3$ fils. Ceux-ci auront respectivement $Y_{1,1} = 1$, $Y_{1,2} = 4$ et $Y_{1,3} = 0$ fils. La 2-ième génération comprend donc 5 individus : $X_2 = 5$.

intervalle de temps, le nombre de passagers dans les transports aériens ou encore les valeurs de clôtures journalières du CAC40.

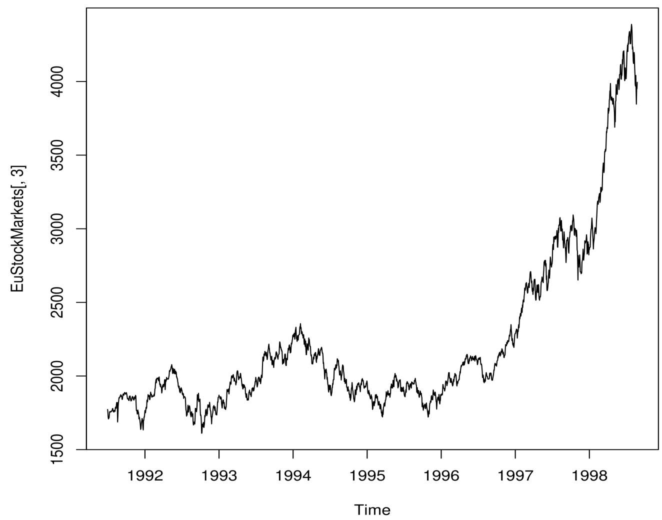


Figure 1.3: Valeurs de clôtures journalières du CAC40 de 1991 à 1998.

Un des objectifs principaux de l'étude d'une série temporelle est la prévision des réalisations futures, très souvent pour des raisons économiques (prévoir l'évolution de la demande d'un produit pour ajuster au mieux les moyens de production, prévoir l'évolution d'un marché financier...).

Vous avez déjà vu des processus stochastiques : n'importe quelle suite de v.a. i.i.d. en est un exemple ! L'indépendance entre les variables facilite les calculs et permet d'obtenir sans trop d'efforts des théorèmes limites intéressants (Loi des Grands Nombres, Théorème Central Limite...). Malheureusement, l'indépendance n'est pas un phénomène courant dans la nature. Intégrer de la dépendance entre les variables permet de modéliser plus fidèlement la réalité. Il y a néanmoins un coût à payer ; les calculs sont plus durs et les théorèmes plus chers.
Les processus stochastiques que nous étudierons dans ce cours prendront en compte une certaine dépendance entre les variables ; une dépendance de type *markovienne* (ou de *Markov*). Cela signifie que l'évolu-

tion future du processus ne dépend de son passé que par l'intermédiaire du présent. Par exemple, pour décider au mieux du 21-ième coup à jouer dans une partie d'échecs, il suffit de connaître la configuration du jeu à l'issue du 20-ième coup, le détail des 19 premiers coups n'ayant alors aucune importance.
Les deux premiers exemples décrits précédemment sont markoviens. La fortune du joueur à l'issue de la $(n+1)$-ième partie ne dépend que de sa fortune à l'issue de la n-ième et du résultat de la $(n+1)$-ième partie, mais pas de l'évolution totale de sa fortune depuis le début du jeu. Pour un processus de Galton-Watson, le nombre d'individus dans la génération à venir ne dépend que du nombre d'individus dans la génération actuelle et du nombre de fils qu'ils auront. Par contre, dans le but de prédire plus fidèlement le futur, l'évolution dynamique des séries temporelles peut dépendre du passé. Elles ne rentrent donc pas dans le cadre de ce cours.

1.2 Définitions

Un modèle d'évolution dynamique en temps discret dans lequel on fait dépendre l'évolution future de l'état présent et du hasard est une chaîne de Markov. C'est un processus stochastique à temps discret. On en rencontre dans de nombreux domaines d'applications...

Définition 1.2.1 Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite de v.a. à valeurs dans un espace E fini ou dénombrable, appelé *espace d'états*. On dit que $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une *chaîne de Markov* si

$$\mathbb{P}(X_{n+1}=j \mid X_n=i, X_{n-1}=i_{n-1},\ldots,X_1=i_1,X_0=i_0) = \mathbb{P}(X_{n+1}=j \mid X_n=i) \ ,$$

pour tout entier $n\in\mathbb{N}$, pour tout état j et pour toute suite d'états $i_0,i_1,\ldots,i_{n-1},i$ pour lesquels la probabilité conditionnelle a un sens, i.e.

$$\mathbb{P}(X_n=i, X_{n-1}=i_{n-1},\ldots,X_1=i_1,X_0=i_0) > 0 \ .$$

Si de plus la quantité $\mathbb{P}(X_{n+1}=j \mid X_n=i)$ ne dépend pas de n, i.e.

$$\mathbb{P}(X_{n+1}=j \mid X_n=i) = \mathbb{P}(X_1=j \mid X_0=i)$$

alors la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est dite *homogène*.

Il faut comprendre une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ comme une promenade dans l'espace d'états E, la variable X_n indiquant l'état dans lequel on est à l'instant n. La v.a. X_0 représente l'état initial duquel démarre la chaîne. Selon le contexte, X_0 pourra être aléatoire ou déterministe.
La propriété de Markov signifie que, connaissant le dernier état visité (disons à l'instant n), la loi du prochain état visité (i.e. la loi de X_{n+1}) ne dépend pas des états visités depuis l'instant 0 jusqu'à l'instant $n-1$. Plus prosaïquement, on dit que

conditionnellement au présent, le futur ne dépend pas du passé.

Mais il dépend du présent : X_n et X_{n+1} n'ont aucune raison d'être indépendantes !
La propriété d'homogénéité d'une chaîne de Markov exprime quant à elle que la probabilité d'aller de i en j reste la même au cours du temps. Elle permet de regrouper en une seule matrice (indépendante de n) les probabilités de transition entre deux états quelconques.

Définition 1.2.2 Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov homogène à espace d'états E. Soient $i, j \in E$ deux états. La probabilité

$$p_{i,j} := \mathbb{P}(X_1 = j \mid X_0 = i)$$

est appelée *probabilité de transition de i à j*. La matrice $P := (p_{i,j})_{i,j\in E}$ est appelée *matrice de transition* de la chaîne.

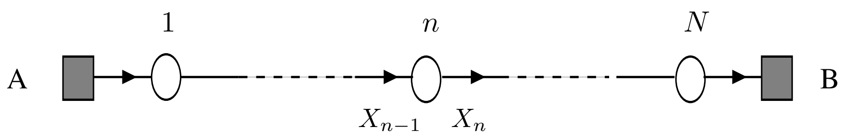
Lorsque l'espace d'états E est fini, la matrice P est carrée de taille $\mathrm{Card}(E)$. Lorsqu'il est infini, elle admet un nombre infini de lignes et de colonnes. Les coefficients de la matrice P sont positifs ou nuls. Leur somme sur une même ligne vaut 1 : pour tout $i \in E$,

$$\sum_{j\in E} p_{i,j} = \sum_{j\in E} \mathbb{P}(X_1 = j \mid X_0 = i) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{j\in E} \{X_1 = j\} \;\middle|\; X_0 = i \right) = 1 \ .$$

Comme nous le verrons dans les exemples suivants, il arrive fréquemment dans les applications que pour un état i donné, le nombre d'états j directement accessibles depuis i (i.e. tel que $p_{i,j} > 0$) soit faible. La matrice de transition est alors très creuse ; elle contient beaucoup de 0. Il est souvent plus économique (et plus pertinent) de résumer les probabilités de transition dans le *diagramme de transition*. C'est un graphe orienté et pondéré dont l'ensemble des sommets est E. Une arête de poids $p_{i,j}$ va de i à j si $p_{i,j} > 0$.

EXEMPLES :

• **Transmission d'un bit informatique.** Un bit informatique valant 0 ou 1 est transmis d'un poste A vers un poste B en passant par N intermédiaires. Chacun de ces intermédiaires transmet correctement le bit avec probabilité p et l'inverse avec probabilité $1 - p$, indépendamment les uns des autres. Le bit (aléatoire) d'entrée, disons X_0, est supposé indépendant des intermédiaires. Pour $n = 1, \ldots, N$, notons X_n le bit sortant du n-ième intermédiaire.



La suite de v.a. $(X_n)_{0\leq n\leq N}$ est à valeurs dans l'espace d'états $E = \{0, 1\}$. Vérifions que c'est une chaîne de Markov. Considérons pour ce faire, une suite $i_0, \ldots, i_n, i_{n+1}$ d'éléments de $\{0, 1\}$.

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0) &= \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \text{ et } X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)}{\mathbb{P}(X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} - X_n = i_{n+1} - i_n \text{ et } X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)}{\mathbb{P}(X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)} \\
&= \mathbb{P}(X_{n+1} - X_n = i_{n+1} - i_n) \ ,
\end{aligned}$$

du fait de l'indépendance entre la v.a. $X_{n+1} - X_n$ (qui représente l'action du $(n+1)$-ième intermédiaire) et l'état du bit à la sortie des n premiers intermédiaires. Pour la même raison ;

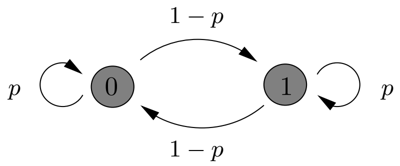
$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0) &= \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} - X_n = i_{n+1} - i_n)\, \mathbb{P}(X_n = i_n)}{\mathbb{P}(X_n = i_n)} \\
&= \mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n) \ .
\end{aligned}$$

Enfin, le caractère homogène de la chaîne $(X_n)_{0 \leq n \leq N}$ résulte du calcul :

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i) = \mathbb{P}(X_{n+1} - X_n = j - i) = \left\{ \begin{array}{ll} p & \text{si } i = j \\ 1-p & \text{sinon.} \end{array} \right. .$$

Voici la matrice et le graphe de transition de cette chaîne :

$$P = \left(\begin{array}{cc} p & 1-p \\ 1-p & p \end{array} \right)$$



• **La marche aléatoire simple.** Soient $(Y_n)_{n \geq 1}$ une suite de v.a. i.i.d., chacune valant 1 avec probabilité p et -1 avec probabilité $1-p$. Soit $Y_0 \in \mathbb{Z}$ une v.a. indépendante des Y_n, représentant le point de départ sur l'axe $\mathbb{Z}$ de la chaîne. On définit la *marche aléatoire simple* par

$$\begin{array}{rcl} X_{n+1} & = & X_n + Y_{n+1} \\ & = & Y_0 + Y_1 + \ldots + Y_n + Y_{n+1} \ , \end{array}$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Le processus stochastique $(X_n)_{n \geq 1}$ est une chaîne de Markov homogène. Son espace d'états $E = \mathbb{Z}$ est cette fois infini. Comme dans l'exemple du bit informatique, le caractère markovien provient de l'indépendance des Y_n :

$$\begin{array}{rcl} \mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0) & = & \dfrac{\mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \text{ et } X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)}{\mathbb{P}(X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)} \\ & = & \dfrac{\mathbb{P}(Y_{n+1} = i_{n+1} - i_n \text{ et } X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)}{\mathbb{P}(X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0)} \\ & = & \mathbb{P}(Y_{n+1} = i_{n+1} - i_n) \\ & = & \dfrac{\mathbb{P}(Y_{n+1} = i_{n+1} - i_n)\, \mathbb{P}(X_n = i_n)}{\mathbb{P}(X_n = i_n)} \\ & = & \dfrac{\mathbb{P}(X_{n+1} - X_n = i_{n+1} - i_n \text{ et } X_n = i_n)}{\mathbb{P}(X_n = i_n)} \\ & = & \mathbb{P}(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n) \ , \end{array}$$

où les $i_0, \ldots, i_n, i_{n+1}$ sont des états. Idem pour le caractère homogène :

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i) = \mathbb{P}(Y_{n+1} = j - i) = \left\{ \begin{array}{ll} p & \text{si } j = i+1 \\ 1-p & \text{si } j = i-1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{array} \right. .$$

La matrice de transition de la chaîne $(X_n)_{n \geq 1}$ est de taille infinie. Sa i-ième ligne est de la forme :

$$\cdots \quad 0 \quad 0 \quad 1{-}p \quad 0 \quad p \quad 0 \quad 0 \quad \cdots$$

où le “0” intercalé entre les coefficients $1-p$ et p est sur la i-ième colonne. Son graphe de transition est donné par la Figure 1.4.

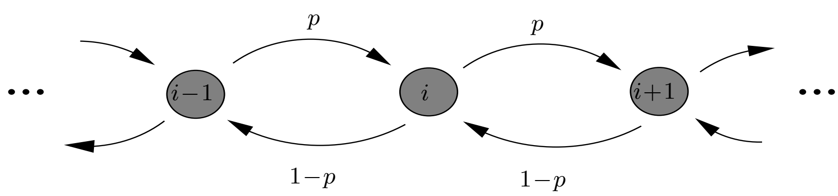


Figure 1.4: Le graphe de transition de la marche aléatoire simple.

• **Le processus de Galton-Watson** décrit en introduction est également une chaîne de Markov homogène.

Dans la pratique, nous prouverons qu'une suite de v.a. est une chaîne de Markov en utilisant le résultat intuitif suivant :

Proposition 1.2.3 Une suite de v.a. $(X_n)_{n\geq 1}$ définie récursivement par $X_{n+1} = f(X_n, Y_{n+1})$ où

- $(Y_n)_{n\geq 1}$ est une suite de v.a. i.i.d. à valeurs dans un espace E',
- $X_0 \in E$ est une v.a. donnée et indépendante des $(Y_n)_{n\geq 1}$,
- $f : E \times E' \to E$ est une application déterministe,

est une chaîne de Markov homogène à espace d'états E.

Ce critère permet d'affirmer très rapidement que la marche aléatoire simple définie précédemment est une chaîne de Markov homogène. En effet, les incréments $Y_0, Y_1, Y_2 \dots$ sont des v.a. i.i.d. à valeurs dans l'espace $E' = \{-1; 1\}$ ($E' = \mathbb{Z}$ convenait également), $X_0 = Y_0$ et $X_{n+1} = f(X_n, Y_{n+1})$ avec comme application déterministe $f : f(x, y) = x + y$.

Proposition 1.2.4 La loi d'une chaîne de Markov homogène $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est entièrement déterminée par la donnée de sa matrice de transition P et de la loi de X_0, appelée *loi initiale* et notée μ_0 :

$$\text{pour tout } i \in E,\ \mu_0(i) := \mathbb{P}(X_0 = i).$$

Plus précisément, pour tout entier n et toute suite d'états $i_0, i_1, \dots, i_{n-1}, i_n$ de E :

$$\mathbb{P}(X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_1 = i_1, X_0 = i_0) = \mu_0(i_0) p_{i_0,i_1} \dots p_{i_{n-1},i_n} . \tag{1.1}$$

La formule (1.1) permet d'écrire la probabilité d'une intersection, i.e.

$$\mathbb{P}(X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_1 = i_1, X_0 = i_0) ,$$

comme un produit de probabilités conditionnelles, les coefficients $p_{i,j}$.
En divisant par $\mu_0(i_0)$ dans (1.1), il s'ensuit que :

$$\mathbb{P}(X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_1 = i_1 \mid X_0 = i_0) = p_{i_0,i_1} \dots p_{i_{n-1},i_n} .$$

Démonstration Le résultat repose sur la formule

$$\mathbb{P}\left(\bigcap_{k=0}^{n} A_k\right) = \mathbb{P}(A_0)\, \mathbb{P}(A_1 \mid A_0)\, \mathbb{P}(A_2 \mid A_1 \cap A_0) \dots \mathbb{P}(A_n \mid A_{n-1} \cap \dots \cap A_0)$$

à démontrer par récurrence sur $n \in \mathbb{N}$ et appliquée aux événements $A_k = \{X_k = i_k\}$. Il ne reste plus qu'à identifier les termes : $\mathbb{P}(A_0) = \mathbb{P}(X_0 = i_0)$ vaut $\mu(i_0)$, $\mathbb{P}(A_1 \mid A_0) = \mathbb{P}(X_1 = i_1 \mid X_0 = i_0)$ vaut par définition p_{i_0,i_1} et

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(A_2 \mid A_1 \cap A_0) &= \mathbb{P}(X_2 = i_2 \mid X_1 = i_1, X_0 = i_0)\\ &= \mathbb{P}(X_2 = i_2 \mid X_1 = i_1)\\ &= p_{i_1,i_2}\ ,\end{aligned}$$

par la propriété de Markov. C'est pareil pour les autres termes. ■

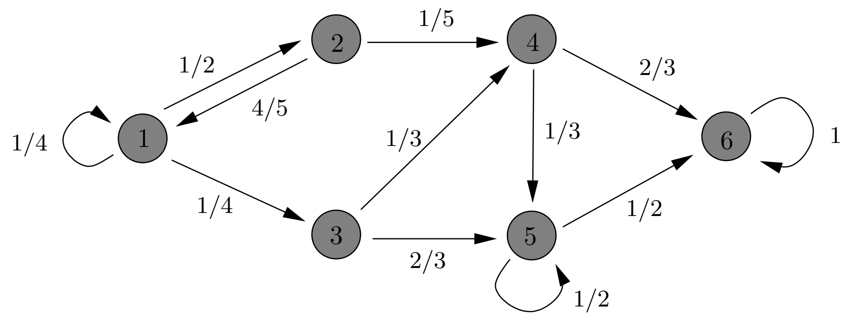


Figure 1.5: Un graphe de transition sur l'espace d'états $E = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

Partant de $X_0 = 1$, quel est le chemin le plus probable permettant $X_3 = 6$? On dénombre 3 chemins permettant de rejoindre l'état 6 depuis 1 en 3 coups : $1 \to 2 \to 4 \to 6$, $1 \to 3 \to 4 \to 6$ et $1 \to 3 \to 5 \to 6$. Leurs probabilités respectives sont :

$$\mathbb{P}(X_3 = 6, X_2 = 4, X_1 = 2 \mid X_0 = 1) = p_{1,2}\, p_{2,4}\, p_{4,6} = \frac{1}{2} \times \frac{1}{5} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{15}\ ,$$

$$\mathbb{P}(X_3 = 6, X_2 = 4, X_1 = 3 \mid X_0 = 1) = p_{1,3}\, p_{3,4}\, p_{4,6} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{18}\ ,$$

$$\mathbb{P}(X_3 = 6, X_2 = 5, X_1 = 3 \mid X_0 = 1) = p_{1,3}\, p_{3,5}\, p_{5,6} == \frac{1}{4} \times \frac{2}{3} \times \frac{1}{2} = \frac{1}{12}\ .$$

Le plus probable est donc $1 \to 3 \to 5 \to 6$.

Dans toute la suite, considérons une chaîne de Markov homogène $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à valeurs dans E, de matrice de transition P et de loi initiale μ_0.

Proposition 1.2.5 La loi de la chaîne de Markov homogène $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est invariante par translation dans le temps. Autrement dit, pour tous entiers n, m, toute suite d'états $i_0, i_1, \ldots, i_n, i_{n+1}, \ldots, i_{n+m}$ pour lesquels

$$\mathbb{P}(X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \ldots, X_1 = i_1, X_0 = i_0) > 0\ ,$$

il vient :

$$\mathbb{P}(X_{n+m} = i_{n+m}, \ldots, X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_n = i_n, \ldots, X_0 = i_0) = \\ \mathbb{P}(X_m = i_{n+m}, \ldots, X_1 = i_{n+1} \mid X_0 = i_n)\ .$$

La probabilité conditionnelle d'une trajectoire donnée (i.e. les états $i_{n+1}, \ldots, i_{n+m}$) reste la même au cours du temps, qu'elle ait lieu entre les instants $n+1$ et $n+m$ ou entre les instants 1 et m. Seul compte le dernier état visité, en l'occurrence i_n. Dans l'exemple donné dans la Figure 1.5, $1 \to 3 \to 5 \to 6$ reste le chemin le plus probable pour rejoindre l'état 6 depuis l'état 1 en 3 coups, que ce soit entre les instants 0 et 3, 47 et 50, ou encore 1234 et 1237 !

Une généralisation de ce résultat est connue sous le nom de *relation de Chapman-Kolmogorov* :

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

Il faut la lire comme suit : aller de i à j en $n+m$ pas, c'est aller de i à un certain état k en n pas puis de k à j en m pas.

Notons par μ_n la loi de X_n. C'est une mesure de probabilité sur E que l'on peut écrire sous la forme d'un vecteur ligne $(\mu_n(j))_{j\in E}$ (i.e. un élément de $\mathbb{R}^{\mathrm{Card}(E)}$). L'objectif de la fin de cette section consiste à établir une relation matricielle liant μ_n à la loi initiale μ_0 et à la matrice P
Pour ce faire, notons par $(p_{i,j}^{(n)})_{i,j\in E}$ les coefficients de la matrice P^n, puissance n-ième de P. L'expression brute de $p_{i,j}^{(n)}$ est

$$p_{i,j}^{(n)} = \sum_{i_1,\ldots,i_{n-1}\in E} p_{i,i_1} p_{i_1,i_2} \ldots p_{i_{n-1},j}\ .$$

Cette formule étant purement algébrique, voici une nouvelle expression du coefficient $p_{i,j}^{(n)}$ lui donnant davantage de sens :

Proposition 1.2.6 Soient n un entier et i, j des états.

(1) $\mathbb{P}(X_n = j \mid X_0 = i) = p_{i,j}^{(n)}$.

(2) $\mu_{n+1} = \mu_n P$.

(3) $\mu_n = \mu_0 P^n$, ce qui signifie que $\mathbb{P}(X_n = j)$ est le j-ième élément du vecteur ligne $\mu_0 P^n$.

En utilisant des vecteurs colonnes pour décrire les lois de X_n et X_{n+1}, le point (2) devient

$${}^t\mu_{n+1} = {}^tP\, {}^t\mu_n\ .$$

On peut donc voir l'évolution en loi de la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ comme un système itératif linéaire dont ${}^tP$ est la matrice d'évolution : on obtient la loi de X_{n+1} en multipliant (matriciellement et par la gauche) la loi de X_n par ${}^tP$.

Reprenons l'exemple donné dans la Figure 1.5. La probabilité de rejoindre l'état 6 depuis l'état 1, en 3 coups et quel que soit le chemin emprunté, se calcule :

$$\begin{aligned} p_{1,6}^{(3)} &= \sum_{i,j\in E} p_{1,i}\, p_{i,j}\, p_{j,6} \\ &= p_{1,2}\, p_{2,4}\, p_{4,6} + p_{1,3}\, p_{3,4}\, p_{4,6} + p_{1,3}\, p_{3,5}\, p_{5,6} \\ &= \frac{1}{15} + \frac{1}{18} + \frac{1}{12} \simeq 0.20\ . \end{aligned}$$

En partant de l'état 1 avec probabilité 1, les lois de X_1 et X_2 se calculent de la manière suivante.

$$\mu_1 = \mu_0 P = (1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0) \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 4/5 & 0 & 0 & 1/5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 2/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (0.25\ 0.5\ 0.25\ 0\ 0\ 0) .$$

$$\mu_2 = \mu_1 P \simeq (0.46\ 0.12\ 0.07\ 0.18\ 0.17\ 0) .$$

Démonstration Seul le cas $n = 2$ sera traité pour donner l'intuition concernant le point (1). Le coefficient $p_{i,j}^{(2)}$ de la i-ième ligne et de la j-ième colonne de la matrice P^2 vaut

$$p_{i,j}^{(2)} = \sum_{k \in E} p_{i,k} p_{k,j} .$$

La formule des probabilités totales et la Proposition 1.2.4 permettent d'écrire les égalités :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_2 = j, X_0 = i) &= \sum_{k \in E} \mathbb{P}(X_2 = j, X_1 = k, X_0 = i) \\ &= \mu_0(i) \sum_{k \in E} p_{i,k} p_{k,j} , \end{aligned}$$

desquelles on en déduit le résultat ; $\mathbb{P}(X_2 = j | X_0 = i) = p_{i,j}^{(2)}$. Par ailleurs,

$$\begin{aligned} \mu_{n+1}(j) = \mathbb{P}(X_{n+1} = j) &= \sum_{i \in E} \mathbb{P}(X_{n+1} = j, X_n = i) \\ &= \sum_{i \in E} \mathbb{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i)\, \mathbb{P}(X_n = i) \\ &= \sum_{i \in E} p_{i,j}\, \mathbb{P}(X_n = i) . \end{aligned}$$

Cette égalité implique la relation matricielle $\mu_{n+1} = \mu_n P$ (i.e. le point (2)). Enfin, le point (3) s'obtient par une récurrence immédiate. ■

1.3 Classification des états

1.3.1 Classes irréductibles

Définition 1.3.1 Soient i et j deux états de E. On dit que l'état j est *accessible* depuis l'état i si

$$\exists n \in \mathbb{N},\ p_{i,j}^{(n)} = \mathbb{P}(X_n = j \mid X_0 = i) > 0 .$$

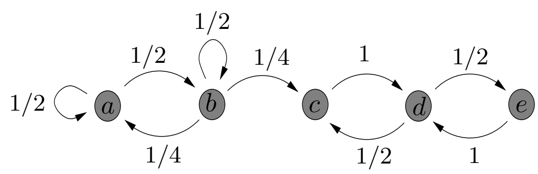
On dit que les états i et j *communiquent* si chacun est accessible depuis l'autre. On note alors $i \leftrightarrow j$.

L'espace E peut donc être partitionné en classes d'équivalence pour la relation $\leftrightarrow$, appelées *classes irréductibles*. Nous insisterons dans les paragraphes suivants sur le fait que les états d'une même classe irréductible ont des propriétés équivalentes vis à vis de la chaîne (périodicité).

Lorsque l'espace E est réduit à une seule classe (i.e. tous les états communiquent), on dit que la chaîne est *irréductible*. En général, E se partitionne en états isolés dans lesquels on ne revient jamais une fois qu'on les a quittés, et en classes irréductibles disjointes.
Pour déterminer les classes irréductibles d'une chaîne de Markov, il est commode de travailler sur le graphe de transition plutôt que sur la matrice de transition P.

EXEMPLE : Considérons une chaîne de Markov à valeurs dans $E = \{a, b, c, d, e\}$ et dont la matrice et le graphe de transition sont données par :

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



La chaîne comporte deux classes irréductibles : $\{a, b\}$ et $\{c, d, e\}$.

1.3.2 Périodicité

Définition 1.3.2 La *période* d'un état i est l'entier $d(i)$ défini par

$$d(i) = \mathrm{PGCD}\{n \geq 1,\ p_{i,i}^{(n)} > 0\} .$$

Lorsque $d(i) = 1$, l'état i est qualifié de *apériodique*.

Un état en lequel on peut rester avec probabilité non nulle, i.e. $p_{i,i} > 0$, est automatiquement apériodique.

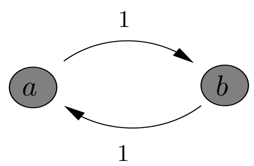
Voici deux exemples. À gauche, l'état a est de période 2 (idem pour b). En effet, chaque chemin de probabilité non nulle partant de a et y revenant comprend un nombre pair de pas. À droite, tous les états sont apériodiques. Étudions en particulier le cas de l'état 1. Depuis cet état, il est possible d'y revenir en 3 pas (en faisant $1 \to 2 \to 3 \to 1$) :

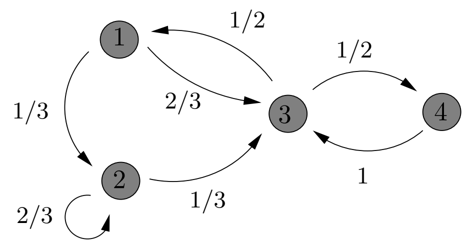
$$p_{1,1}^{(3)} = \sum_{i,j \in E} p_{1,i}\, p_{i,j}\, p_{j,1} \geq p_{1,2}p_{2,3}p_{3,1} > 0 .$$

Il est également possible d'y revenir en 5 pas : $p_{1,1}^{(5)} > 0$ (en faisant $1 \to 2 \to 3 \to 4 \to 3 \to 1$). Puisque 3 et 5 sont premiers entre eux, l'état 1 est apériodique.

Proposition 1.3.3 Si les états i et j communiquent alors ils ont la même période.

Démonstration Soient i et j deux états qui communiquent. Il suffit de montrer que $d(j)$ divise $d(i)$. En effet, par symétrie, on aura également $d(i)$ divise $d(j)$, et donc $d(j) = d(i)$. Comme i et j communiquent,





il existe deux entiers l et m tels que $p_{i,j}^{(l)} > 0$ et $p_{j,i}^{(m)} > 0$. Considérons maintenant un entier n tel que $p_{i,i}^{(n)} > 0$. Les inégalités

$$p_{j,j}^{(m+n+l)} \geq p_{j,i}^{(m)} p_{i,i}^{(n)} p_{i,j}^{(l)} > 0$$

et

$$p_{j,j}^{(m+l)} \geq p_{j,i}^{(m)} p_{i,j}^{(l)} > 0$$

impliquent respectivement que $d(j)$ divise les entiers $m+n+l$ et $m+l$: il divise donc la différence, i.e. n. Autrement dit, $d(j)$ divise tous les entiers n tels que $p_{i,i}^{(n)} > 0$. Il divise donc leur PGCD $d(i)$. ■

1.4 Théorèmes limites

Étant donné une chaîne de Markov homogène $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$, l'objectif de cette dernière partie est d'approximer la loi de la v.a. X_n lorsque n tend vers l'infini.

1.4.1 Les mesures stationnaires

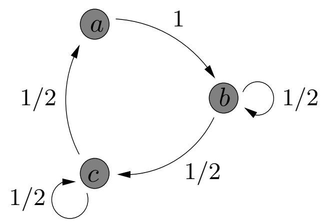
Définition 1.4.1 Une *mesure stationnaire* (ou *invariante*) d'une chaîne de Markov de matrice de transition P est une loi de probabilité sur E, disons $\pi = (\pi(j))_{j\in E}$, vérifiant $\pi = \pi P$.

Soit π une mesure stationnaire pour la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de matrice de transition P. Rappelons que le vecteur ligne $(\mu_n(j))_{j\in E}$ désigne la loi de la v.a. X_n. La formule $\mu_{n+1} = \mu_n P$ (Proposition 1.2.6) implique que si la loi de X_n est π (i.e. $\mu_n = \pi$) alors il en est de même pour la loi de X_{n+1} (i.e. $\mu_{n+1} = \pi$). Par conséquent, si la loi initiale μ_0 (celle de X_0) est π alors toutes les v.a. X_n seront distribuées selon π. C'est ce qui justifie le qualificatif de stationnaire. Cela signifie que la probabilité de se trouver dans un état donné reste constante au cours du temps, bien que la chaîne saute constamment d'état en état. Une mesure stationnaire doit donc être comprise comme un équilibre dynamique en loi.

EXEMPLE :
Considérons une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à espace d'états $E = \{a, b, c\}$ dont la matrice et le graphe de transition sont donnés par :

Résolvons le système linéaire $\pi = \pi P$ où les coordonnées du vecteur π sont notées (π_a, π_b, π_c). On obtient une droite vectorielle de solutions, engendrée par le vecteur $(1/2, 1, 1)$. Par ailleurs, la mesure stationnaire π est une mesure de probabilité. Elle doit donc satisfaire la condition $\pi_a + \pi_b + \pi_c = 1$. Ceci détermine π de manière unique ; $\pi = (1/5, 2/5, 2/5)$.

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$



Attention, contrairement à l'exemple ci-dessus, une chaîne de Markov peut ne pas admettre de mesure stationnaire, ou même en admettre plusieurs...
Considérons enfin une chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à espace d'états E fini et de matrice de transition P. Supposons de plus que la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ converge en loi vers une mesure de probabilité sur E, notée ν :

$$\text{pour tout } \ j \in E, \ \lim_{n\to+\infty} \mu_n(j) = \nu(j) \ .$$

Puisque E est fini, l'application linéaire ${}^tP$ est continue donc ${}^tP^t\mu_n$ converge (coordonnée par coordonnée) vers ${}^tP^t\nu$, lorsque n tend vers l'infini. D'autre part, ${}^tP^t\mu_n = {}^t\mu_{n+1}$ converge également (coordonnée par coordonnée) vers la loi ${}^t\nu$. Celle-ci vérifie donc ${}^tP^t\nu = {}^t\nu$, ou encore $\nu = \nu P$. En conclusion, si la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ converge en loi vers une mesure de probabilité alors cette loi limite est nécessairement une mesure stationnaire pour la chaîne de Markov correspondante.

1.4.2 Lorsque l'espace d'états E est fini

Considérons une chaîne de Markov homogène $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à espace d'états fini E et de matrice de transition P. Comme la somme des coefficients sur chaque ligne de P vaut 1, tout vecteur à coordonnées constantes est vecteur propre de P associé à la valeur propre 1. Une matrice carrée et sa transposée ayant les mêmes valeurs propres, 1 est donc également valeur propre de ${}^tP$. Notons E_1 l'espace propre associé à la valeur propre 1 pour ${}^tP$:

$$E_1 = \{v \in \mathbb{R}^{\mathrm{Card}(E)}, \ {}^tPv = v\} \ .$$

On vient de montrer que $\dim E_1 \geq 1$. Dès lors, tout vecteur (colonne) ${}^t\pi$ appartenant à E_1 et dont la somme des coordonnées vaut 1, produit un vecteur ligne π, loi de probabilité sur E et vérifiant $\pi = \pi P$. C'est donc une mesure stationnaire pour la chaîne de Markov de matrice de transition P. En conclusion, l'existence d'au moins une mesure stationnaire est automatique lorsque l'espace d'états E est fini.
Lorsque la chaîne est irréductible, l'espace propre E_1 est de dimension 1, ce qui implique l'unicité de la mesure stationnaire.

Proposition 1.4.2 Considérons une chaîne de Markov homogène à espace d'états fini E et de matrice de transition P. Elle admet au moins une mesure stationnaire. Si la chaîne est irréductible alors il y a unicité de la mesure stationnaire (notons-la π). Dans ce cas, elle charge tous les états

$$\pi(i) > 0, \ \text{ pour tout } i \in E$$

et le temps moyen de retour en i est égal à l'inverse de $\pi(i)$:

$$\mathbb{E}[T(i) \mid X_0 = i] = \frac{1}{\pi(i)}, \ \text{ pour tout } i \in E.$$

Cependant, l'existence et l'unicité de la mesure stationnaire π n'assure pas la convergence en loi de la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ vers π. Cette convergence repose en fait sur l'apériodicité de la chaîne.
Le résultat suivant est non trivial. Il ne sera pas démontré.

Théorème 1.4.3 Considérons une chaîne de Markov homogène $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à espace d'états fini E et de matrice de transition P. Supposons de plus que la chaîne est irréductible et apériodique. Notons π sa mesure stationnaire.

(1) La matrice P^n converge quand n tend vers l'infini vers une matrice dont toutes les lignes sont égales à π.

(2) Quelle que soit la loi de X_0, la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ convergence en loi quand n tend vers l'infini vers π : pour tout état i, $\mathbb{P}(X_n = i) \to \pi(i)$.

Les points (1) et (2) s'interprètent par de l'indépendance asymptotique : en deux instants éloignés l'un de l'autre, la chaîne se comporte de manière presque indépendante. En effet, les quantités $\mathbb{P}(X_n = j|X_0 = i)$ et $\mathbb{P}(X_n = j)$ tendent toutes les deux vers la même limite $\pi(j)$. Elles sont donc proches asymptotiquement, ce qui donne

$$\mathbb{P}(X_n = j\ ,\ X_0 = i) \simeq \mathbb{P}(X_n = j)\ \ \mathbb{P}(X_0 = i)\ .$$

En utilisant l'invariance par translation dans le temps, la relation ci-dessus se généralise en

$$\mathbb{P}(X_{n+m} = j\ ,\ X_m = i) \simeq \mathbb{P}(X_{n+m} = j)\ \ \mathbb{P}(X_m = i)\ .$$

Considérons une nouvelle fois l'exemple du bit informatique dont la matrice de transition est donnée par

$$P = \begin{pmatrix} p & 1-p \\ 1-p & p \end{pmatrix}\ .$$

La chaîne de Markov correspondante est irréductible si et seulement si $p < 1$. Dans ce cas, l'unique mesure stationnaire est le vecteur ligne $\pi = (1/2, 1/2)$. Si de plus $p > 0$, alors la chaîne est apériodique. Le théorème limite s'applique :

$$\forall i \in \{0,1\},\ \lim_{n\to+\infty} \mathbb{P}(X_n = i) = \frac{1}{2}\ .$$

Autrement dit, quelque soit le bit initial X_0 et quelle que soit la valeur de $0 < p < 1$, au bout d'un certain temps, le bit sortant suit une loi uniforme sur $\{0,1\}$.
Lorque $p = 0$, la matrice de transition devient

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\ .$$

La chaîne est alors $2-$périodique. Puisque P^2 est égale à la matrice identité, il en va de même pour toutes les puissances paires de P, tandis que les puissances impaires sont égales à P. Par conséquent, le coefficient $p_{0,0}^{(n)}$ prend alternativement les valeurs 0 et 1 : la suite $(p_{0,0}^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ ne peut converger.

Chapter 2

Optimisation stochastique

2.1 Introduction

2.1.1 Explosion combinatoire

Imaginons que vous ayez invité chez vous 3 amis, disons Alban, Blanche et Chris (pour travailler ou vous amuser, ou les deux en même temps) et que vous devez maintenant les ramener chacun chez eux avant de rentrer chez vous. Les itinéraires entre les domiciles d'Alban et Blanche, ou entre ceux d'Alban et Chris etc. sont parfaitement connus et fixés. Seul compte l'ordre dans lequel vous ramenez vos 3 amis chez eux. Plusieurs possibilités s'offrent à vous, 6 exactement qui sont :

ABC (Alban puis Blanche puis Chris), ACB, BAC, BCA, CAB et enfin CBA.

Remarquons que ABC et CBA représentent tous les deux le même chemin parcouru dans deux sens différents : ils ont donc la même longueur– rappelons que vous partez de chez vous et que vous y retournez après avoir ramené tous vos amis. Il en va de même pour ACB et BCA, et pour BAC et CAB. Nous avons ainsi divisé par 2 le nombre de chemins à mesurer ; il ne reste que ABC, ACB et BAC. Utilisons Mappy pour mesurer chacun de ces 3 chemins et choisissons le plus court !

C'est en fait 4 amis qui sont venus chez vous et que vous devez maintenant ramener chez eux. Le même raisonnement que précédemment conduit à

$$\frac{1}{2} \times (4 \times 3 \times 2 \times 1) = 12 \text{ chemins différents}$$

(4 possibilités pour l'ami que vous ramenez en premier, puis 3 pour celui que vous ramenez en second etc.). Il est encore envisageable de mesurer chacun de ces 12 chemins par Mappy puis de choisir le plus court.

Si vous avez 10 amis à ramener chez eux (il vous faudra un mini-bus !) alors ce sont

$$\frac{1}{2} \times (10 \times 9 \times \ldots \times 1) = 1814800 \text{ chemins différents.}$$

Un petit programme s'impose (en Python ?), listant chacun de ces chemins, mesurant chacun d'eux via Mappy et sélectionnant le plus court. Cette méthode est qualifiée d'*exhaustive* puisqu'on mesure tous les chemins et qu'on choisit ensuite le plus court.

C'était en fait votre anniversaire ! Vous devez ramener chez eux 20 amis, ce qui donne par le calcul précédent environ 10^{18} chemins... Supposons que votre ordinateur puissant puisse mesurer un milliard de chemins à la seconde et sachant qu'une année correspond à (plus ou moins) 32 millions de seconde, il faudra environ 30 ans à votre ordinateur puissant pour déterminer quel est le chemin le plus court. Autant dire que vous n'allez pas fêter votre anniversaire tous les ans.

Pour conclure, le nombre de chemins différents augmente extraordinairement vite avec le nombre d'amis à ramener ; pour ramener 30 amis, il faudrait à votre ordinateur très puissant de l'ordre d'un million de fois l'âge de l'univers pour identifier le plus court chemin ! On parle d'*explosion combinatoire* que même un ordinateur super-puissant ne saurait compenser. La méthode exhaustive devient rapidement inutile.

2.1.2 Le problème du voyageur de commerce

Le problème précédent, à savoir trouver le meilleur chemin parmi un très grand nombre, est très connu en Mathématiques et en Informatique théorique. On le nomme le *probème du voyageur de commerce* (on parlerait davantage de commercial ou de VRP de nos jours plutôt que de voyageur de commerce ; *Travelling Salesman Problem* en anglais). Il s'énonce très simplement comme suit.

Étant donné m villes et les distances séparant chaque ville, trouver le chemin de longueur totale minimale qui passe exactement une fois par chaque ville et revienne au point de départ.

Remarquons que c'est exactement le même problème que de ramener ses amis chez eux et de rentrer ensuite chez soi.

Le problème du voyageur de commerce intervient dans de nombreux domaines :

- En logistique : le facteur doit livrer plusieurs colis en le moins de temps possible.
- Dans les GPS, pour calculer le plus court chemin.
- En sport : en NBA, chaque équipe doit faire de grands déplacements (car le pays est vaste) pour rencontrer ses adversaires et il s'agit de trouver un calendrier qui minimise les déplacements pour chaque équipe.

Cependant, à l'heure actuelle (et pour encore un certain temps), on ne sait pas résoudre le problème du voyageur de commerce *en un temps raisonnable* lorsque le nombre m de villes à visiter devient grand... Si le meilleur chemin est hors de portée, nous nous contenterons d'un bon chemin. Il existe plusieurs familles de méthodes ou d'algorithmes permettant d'obtenir de tels chemins. Dans ce cours, nous présenterons des algorithmes stochastiques, i.e. dans lesquels intervient le hasard.

2.1.3 Modélisation mathématique du problème

Le voyageur de commerce doit se rendre dans m villes différentes $v_1, \ldots, v_m$ et revenir à son point de départ. Il connaît les distances $d(v_i, v_j)$, pour $1 \leq i, j \leq m$, séparant chacune d'entre elles. Soit $\sigma = (\sigma_1, \ldots, \sigma_m)$ une permutation de l'ensemble des villes $\{v_1, \ldots, v_m\}$: σ représente un chemin ou une façon pour le voyageur de commerce de visiter une et une seule fois chacune des m villes dans un ordre donné. Notons E l'ensemble (fini) de tous les chemins possibles. Au chemin $\sigma \in E$, nous associons la distance totale parcourue :

$$H(\sigma) := \sum_{i=1}^{m-1} d(\sigma_i, \sigma_{i+1}) + d(\sigma_m, \sigma_1) .$$

Le problème du voyageur de commerce revient à identifier un chemin σ minimisant $H(\sigma)$.

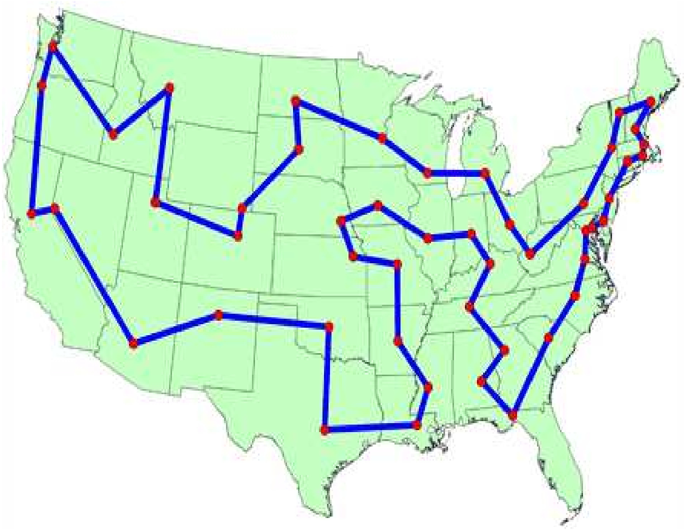


Figure 2.1: Le chemin le plus court passant par les capitales des 48 états américains (excepté l'Alaska). S'il est extrêmement difficile et long de trouver le plus court chemin, vérifier qu'un chemin est bien le plus court se fait en un temps raisonnable.

Donnons désormais une interprétation Physique et Probabiliste à notre problème. Le chemin σ est appelé une *configuration* et $H(\sigma)$ désigne son *énergie* (H pour Hamiltonien). En Physique, une configuration σ de faible énergie, i.e. $H(\sigma) \simeq 0$, est considérée comme stable et on s'attend à l'observer. Tandis qu'une configuration ayant une énergie élevée, i.e. $H(\sigma) \gg 1$, est considérée comme instable et donc rare.

Il est classique d'associer à la configuration σ la probabilité d'apparition (ou de réalisation) $\mathbb{P}(\sigma) \simeq e^{-\frac{1}{T}H(\sigma)}$ où $T > 0$ est un paramètre supposé connu qui sera interprété comme la *température*. Ainsi $\mathbb{P}(\sigma)$ est proche de 0 quand σ est instable (et rare) et proche de 1 lorsqu'elle est stable (et à laquelle on s'attend). Pour faire de $\mathbb{P}(\cdot)$ une loi de probabilité (avec une masse totale égale à 1), il faut introduire la constante de normalisation

$$Z := \sum_{\sigma \in E} e^{-\frac{1}{T}H(\sigma)} . \tag{2.1}$$

On obtient alors une loi de probabilité sur E, appelée *mesure de Gibbs*, et définie comme suit : pour tout $\sigma \in E$,

$$\mathbb{P}(\sigma) := \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{T}H(\sigma)} . \tag{2.2}$$

Ainsi, un bon chemin pour le problème du voyageur de commerce correspond à une configuration σ stable, qui a donc une probabilité "forte" de se réaliser selon la loi $\mathbb{P}(\cdot)$. Ceci nous amène à notre premier objectif.

Objectif 1 : Simuler une configuration σ réalisée selon la loi $\mathbb{P}(\cdot)$. Nous avons insisté sur ce point plus haut, lorsque le nombre m de villes à visiter est grand (à partir de 20), l'ensemble E de tous les chemins devient gigantesque et le calcul de la constante de normalisation Z par la formule (2.1) devient algorithmiquement impossible. Or nous ne disposons pas de formule pour Z plus explicite que (2.1)... Dés lors, nous sommes incapables de calculer la probabilité $\mathbb{P}(\sigma)$ du chemin σ alors que son énergie (ou distance totale) $H(\sigma)$ est connue. Comment faire ?

Les *méthodes MCMC* viennent alors à notre secours et nous permettent d'obtenir une réalisation approchée de la loi $\mathbb{P}(\cdot)$. Plus de détails en Section 2.2.

Insistons désormais sur le paramètre de température T en notant Z_T au lieu de Z et $\mathbb{P}_T(\sigma)$ au lieu de $\mathbb{P}(\sigma)$. Une particularité de cette loi de probabilité est qu'elle se concentre, à basse température, sur les configurations d'énergie minimale, i.e. sur

$$E_{min} := \{\sigma \in E : H(\sigma) \leq H(\sigma'), \forall \sigma' \in E\} ,$$

qui sont, pour le problème du voyageur de commerce, les chemins les plus courts. En effet, nous prouvons que :

$$\forall \sigma \in E, \lim_{T \to 0^+} \mathbb{P}_T(\sigma) = \begin{cases} \frac{1}{\# E_{min}} & \text{si } \sigma \in E_{min} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} . \tag{2.3}$$

Démonstration Soient $\sigma \in E_{min}$ et $\sigma' \notin E_{min}$. Ainsi $H(\sigma) - H(\sigma') < 0$ et le rapport

$$\frac{\mathbb{P}_T(\sigma')}{\mathbb{P}_T(\sigma)} = e^{-\frac{1}{T}(H(\sigma') - H(\sigma))}$$

tend vers 0 quand $T \to 0^+$, ce qui signifie que $\mathbb{P}_T(\sigma')$ est négligeable devant $\mathbb{P}_T(\sigma)$. De plus, si σ et σ' appartiennent toutes deux à E_{min}, leurs probabilités sont égales. Enfin, en utilisant le fait que l'ensemble E des chemins est fini, la masse de la loi de probabilité $\mathbb{P}_T(\cdot)$ doit donc se concentrer de manière équiprobable sur les configurations de E_{min}. ■

Ainsi, en revenant au problème du voyageur de commerce, une réalisation de la loi de probabilité $\mathbb{P}_T(\cdot)$ lorsque $T \to 0^+$ devrait être proche des éléments de E_{min}, i.e. devrait être un bon chemin :

Objectif 2 : Simuler une configuration σ réalisée selon la loi $\mathbb{P}_T(\cdot)$ lorsque $T \to 0^+$. La méthode utilisée se nomme *recuit simulé* et sera présentée en Section 2.3.

2.2 Méthodes MCMC

L'acronyme MCMC signifie *Monte Carlo Markov Chain*, i.e. méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov. On parle également d'exploration markovienne ce qui, vous le verrez, a plus de sens.

Considérons une loi de probabilité $\pi = (\pi(i), i \in E)$ définie sur un ensemble fini E que l'on ne sait pas simuler directement ; soit parce qu'elle est inconnue, soit parce qu'on ne dispose pas de méthode directe ou algorithmiquement raisonnable pour le faire. C'est le cas de la loi de probabilité $\mathbb{P}(\cdot)$, définie en (2.2) sur l'ensemble E de tous les chemins passant par les m villes $\{v_1, \ldots, v_m\}$. L'idée (géniale !) des méthodes MCMC consiste à construire une chaîne de Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sur E admettant π comme mesure stationnaire et convergeant vers π (quel que soit le point de départ $X_0 = x_0$ de la chaîne). Supposons avoir à disposition une telle chaîne de Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Alors, en partant d'un élément quelconque $x_0 \in E$ et au bout d'un temps n très grand, le loi de la v.a. X_n est proche de π. Autrement dit, la valeur X_n qu'il est facile d'obtenir puisque les chaînes de Markov se simulent en général aisément, est une *réalisation approchée* de la loi π.

Il s'agit donc de construire une chaîne de Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$, i.e. une matrice de transition P, ayant de bonnes propriétés. Pour cela, nous utiliserons le résultat précieux ci-dessous. Quitte à restreindre l'espace d'états E, nous supposerons dorénavant que la mesure de probabilité ciblée π charge chaque état : $\forall i \in E$, $\pi(i) > 0$.

Proposition 2.2.1 Soit π une mesure de probabilité sur E telle que $\pi(i) > 0, \forall i \in E$. Soit $Q = (q_{i,j})_{i,j\in E}$ une matrice de transition sur un ensemble fini E vérifiant :

$$q_{i,j} > 0 \text{ si et seulement si } q_{j,i} > 0 \; . \tag{2.4}$$

Définissons une matrice carrée $P = (p_{i,j})_{i,j\in E}$ comme suit. Si $i \neq j$, posons

$$p_{i,j} := \begin{cases} q_{i,j} \min\left\{\frac{\pi(j)q_{j,i}}{\pi(i)q_{i,j}} \, , \, 1\right\} & \text{si } q_{i,j} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{2.5}$$

et, pour tout i, le coefficient $p_{i,i}$ est choisi de telle sorte que

$$\sum_{j\in E} p_{i,j} = 1 \; .$$

Alors P est une matrice de transition et toute chaîne de Markov sur E ayant P pour matrice de transition admet π comme mesure stationnaire.

La Proposition 2.2.1 permet donc de modifier une matrice de transition Q en une nouvelle matrice de transition P qui cette fois admet π comme mesure stationnaire.

Démonstration Remarquons tout d'abord que par construction, pour $i \neq j$, $p_{i,j} \leq q_{i,j}$, ce qui implique pour tout $i \in E$ fixé :

$$\sum_{j,j\neq i} p_{i,j} \leq \sum_{j,j\neq i} q_{i,j} \leq 1 \; ,$$

car Q est une matrice de transition. Il est donc possible de choisir le coefficient diagonal $p_{i,i} \geq 0$ de telle sorte que $\sum_j p_{i,j} = 1$.
Pour que π soit une mesure stationnaire pour la matrice de transition P, il suffit qu'elle vérifie les équations de la balance vue en cours, i.e. que pour tous indices $i \neq j$, on a

$$\pi(i)p_{i,j} = \pi(j)p_{j,i} \; .$$

Si $q_{i,j} = 0$ alors il en est de même pour $q_{j,i}$ par hypothèse sur Q, et les coefficients $p_{i,j}$ et $p_{j,i}$ sont tous deux nuls d'après (2.5). Dans ce cas, $\pi(i)p_{i,j} = 0 = \pi(j)p_{j,i}$. Supposons désormais que $q_{i,j} > 0$ et que

$$\frac{\pi(j)q_{j,i}}{\pi(i)q_{i,j}} \leq 1$$

(l'autre alternative se traitant exactement de la même manière). D'après (2.5), $p_{i,j}$ vaut

$$q_{i,j} \min\left\{\frac{\pi(j)q_{j,i}}{\pi(i)q_{i,j}} \, , \, 1\right\} = \frac{\pi(j)q_{j,i}}{\pi(i)} \; .$$

Par hypothèse, le rapport $\frac{\pi(i)q_{i,j}}{\pi(j)q_{j,i}}$ est plus grand que 1, ce qui implique $p_{j,i} = q_{j,i}$ d'après (2.5). On déduit de ce qui précède l'identité recherchée :

$$p_{i,j} = \frac{\pi(j)q_{j,i}}{\pi(i)} = \frac{\pi(j)p_{j,i}}{\pi(i)} \; .$$

■

Supposons avoir construit grâce à la Proposition 2.2.1 une chaîne de Markov admettant π comme mesure stationnaire. Il reste toutesfois à s'assurer de la convergence de cette chaîne de Markov vers π. L'espace d'états E étant fini, il s'agit de prouver l'irréductibilité et l'apériodicité de la chaîne (ou de la matrice de transition P).

• **Irréductibilité de** P**.** D'après (2.5), $q_{i,j} > 0$ implique $p_{i,j} > 0$ (pour $i \neq j$). Ainsi, la matrice P hérite de l'irréductibilité de la matrice de transition Q (si celle-ci l'est).

• **Apériodicité de** P**.** En combinant le fait que $q_{i,j} > 0$ implique $p_{i,j} > 0$ (pour $i \neq j$) et $p_{i,i} \geq q_{i,i}$, on obtient que l'apériodicité de Q (si tel est le cas) se transmet à P. Vérifions que

$$\begin{aligned} p_{i,i} = 1 - \sum_{j,j\neq i} p_{i,j} = 1 - \sum_{j,j\neq i} p_{i,j} \mathbb{1}_{\{p_{i,j}>0\}} &= 1 - \sum_{j,j\neq i} q_{i,j} \min\left\{ \frac{\pi(j)q_{j,i}}{\pi(i)q_{i,j}}\,, 1 \right\} \mathbb{1}_{\{p_{i,j}>0\}} \\ &\geq 1 - \sum_{j,j\neq i} q_{i,j} \mathbb{1}_{\{q_{i,j}>0\}} \qquad (2.6) \\ &= 1 - \sum_{j,j\neq i} q_{i,j} \\ &= q_{i,i}\,. \end{aligned}$$

Mais il se peut qu'en pratique la matrice P soit apériodique sans que Q le soit (et ce sera le cas dans le problème du voyageur de commerce : voir la Section 2.2.1). Supposons qu'il existe des indices i et j tels que le rapport

$$\frac{\pi(j)q_{j,i}}{\pi(i)q_{i,j}}$$

soit strictement plus petit que 1. Dès lors, l'inégalité (2.6) devient stricte : $p_{i,i} > q_{i,i} \geq 0$. L'état i est donc apériodique, tout comme la matrice P si celle-ci est irréductible.

En conclusion, un choix judicieux de la matrice de transition Q permet de construire grâce à la Proposition 2.2.1 une matrice de transition P et donc une chaîne de Markov $(X_n)_{n\geq 0}$ qui converge vers la loi inconnue π.

Terminons cette section avec l'*algorithme de Metropolis* qui permet de simuler une pseudo-réalisation, notée ici X_N, de la loi π en suivant la méthode proposée ci-dessus.

```
Initialiser X = x_0
n = 0
Répéter jusqu'à n = N
 { i = X
   Choisir j avec probabilité q_{i,j}
   ρ = π(j)q_{j,i} / π(i)q_{i,j}
   If (ρ ≥ 1) then { X = j }
               else { Choisir U uniforme sur [0,1]
                      If (U < ρ) then { X = j } }
   n = n+1
 }
X
```

Vérifions que les transitions données par cet algorithme correspondent bien à la matrice de transition P. Lorsque $\rho \geq 1$, la chaîne saute de i vers j avec probabilité $q_{i,j}$, qui vaut justement $p_{i,j}$ dans ce cas. Lorsque $\rho < 1$;

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(\text{aller en } j \,|\, X = i) &= \mathbb{P}(U < \rho, \text{ choisir } j \,|\, X = i) \\
&= \mathbb{P}(U < \rho \,|\, \text{choisir } j,\, X = i)\ \mathbb{P}(\text{choisir } j \,|\, X = i) \\
&= \rho \times q_{i,j} \ ,
\end{aligned}$$

qui vaut encore $p_{i,j}$ dans ce cas. Est laissé en exercice le fait qu'on reste en i avec probabilité $p_{i,i}$.

2.2.1 Répondre à l'objectif 1

L'objectif est de simuler une réalisation de la loi de probabilité $\mathbb{P}(\cdot)$ définie par

$$\forall \sigma \in E,\ \mathbb{P}(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{T}H(\sigma)}$$

où $Z = \sum_{\sigma \in E} e^{-\frac{1}{T}H(\sigma)}$ est la constante de normalisation. Rappelons que Z est inconnue, ce qui rend impossible la simulation directe de la loi $\mathbb{P}(\cdot)$.

Commençons par définir une structure de graphe sur l'ensemble des configurations E qui est, pour rappel, l'ensemble de tous les chemins parcourant les m villes $\{v_1, \ldots, v_m\}$. Nous dirons que deux configurations (ou chemins) $\sigma, \sigma' \in E$ sont voisines, et nous noterons $\sigma \sim \sigma'$, si on peut passer de l'une à l'autre en permutant deux villes. Chaque configuration σ admet donc

$$\#\{\sigma' \in E,\ \sigma' \sim \sigma\} = \binom{m}{2} = \frac{m(m-1)}{2}$$

comme autant de façons de choisir 2 villes à échanger parmi m (noté aussi C_m^2). On obtient alors un graphe non orienté $\mathcal{G}$ sur l'ensemble E : ses sommets sont justement les éléments de E et ses arêtes sont les paires $\{\sigma, \sigma'\}$ avec $\sigma \sim \sigma'$.

On peut alors définir une chaîne de Markov et une matrice de transition Q associée au graphe $\mathcal{G}$ dont la dynamique peut être simplement décrite de la manière suivante : on passe d'une configuration σ à l'une de ses voisines avec équiprobabilité (sur l'ensemble des configurations voisines). Autrement dit, en notant $Q = (q_{\sigma,\sigma'})_{\sigma,\sigma' \in E}$, on a

$$q_{\sigma,\sigma'} := \begin{cases} \frac{1}{\binom{m}{2}} = \frac{2}{m(m-1)} & \text{si } \sigma' \sim \sigma \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} .$$

On vérifie aisément que Q est bien une matrice de transition.

Quelques outils algébriques sur les permutations nous permettent d'affirmer que :

Proposition 2.2.2 La matrice de transition Q définie ci-dessus est irréductible et 2-périodique.

Démonstration Souvenons-nous que toute permutation σ de l'ensemble $\{v_1, \ldots, v_m\}$ est engendrée par des transpositions, i.e. qu'en échangeant un certain nombre de paires $\{v_i, v_j\}$ de villes, on peut passer de la permutation identité $(v_1\, v_2 \ldots v_m)$ à la permutation σ. Ce qui signifie que le graphe $\mathcal{G}$ est connexe ($\mathcal{G}$ est en fait le graphe de tansition correspondant à Q, sans les poids) et donc que la matrice de transition Q est irréductible.

Sans rentrer dans les détails, la notion de *signature* d'une permutation assure qu'on ne peut revenir en la permuation σ qu'avec un nombre pair de transpositions. ■

Il s'agit désormais d'appliquer la Proposition 2.2.1 à la matrice de transition Q qui au passage vérifie bien l'hypothèse (2.4) puisque, soit σ et σ' sont voisines et dans ce cas

$$q_{\sigma,\sigma'} = q_{\sigma',\sigma} = \frac{2}{m(m-1)} ,$$

soit elles ne le sont pas et $q_{\sigma,\sigma'} = q_{\sigma',\sigma} = 0$. Nous définissons donc une nouvelle matrice de transition $P = (p_{\sigma,\sigma'})_{\sigma,\sigma' \in E}$, comme modification de Q en suivant l'expression donnée en (2.5) : pour tous $\sigma, \sigma' \in E$,

$$p_{\sigma,\sigma'} := \begin{cases} \frac{2}{m(m-1)} \min\left\{ e^{\frac{1}{T}(H(\sigma)-H(\sigma'))} , 1 \right\} & \text{si } \sigma \sim \sigma' \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et $p_{\sigma,\sigma} := 1 - \sum_{\sigma' \neq \sigma} p_{\sigma,\sigma'}$.

Notons $(X_n)_{n\geq 0}$ la chaîne de Markov, sur l'espace des chemins E, associée à la matrice de transition P. La Proposition 2.2.1 affirme que la chaîne $(X_n)_{n\geq 0}$ (ou la matrice de transition P) admet la loi de probabilité cible $\mathbb{P}(\cdot)$ comme mesure stationnaire. Il ne reste plus qu'à vérifier que la chaîne est ergodique, i.e. qu'elle converge en loi vers son unique mesure stationnaire $\mathbb{P}(\cdot)$. D'une part, P est irréductible car Q l'est. D'autre part et même si Q est 2-périodique, la matrice P est apériodique car il existe certainement deux chemins σ et σ' (disons σ' plus long que σ ; $H(\sigma') > H(\sigma)$) assurant ainsi que le rapport

$$\frac{\pi(\sigma')q_{\sigma',\sigma}}{\pi(\sigma)q_{\sigma,\sigma'}} = \frac{\mathbb{P}(\sigma')}{\mathbb{P}(\sigma)} = e^{\frac{1}{T}(H(\sigma)-H(\sigma'))}$$

est strictement inférieur à 1.

En conclusion, nous pouvons dérouler l'algorithme de Metropolis décrit en Section **??** : quelque soit le chemin (ou configuration) de départ $X_0 = \sigma_0$, au bout d'un grand nombre d'étapes (autant que puisse supporter votre ordinateur en une nuit !), la réalisation X_n renvoyée par l'algorithme est une pseudo-réalisation (ou une réalisation approchée) de la loi de probabilité $\mathbb{P}(\cdot)$.

Pour mettre en œuvre l'algorithme de Metropolis, il nous faut être capable à chaque passage dans la boucle for de calculer le rapport

$$\frac{\pi(\sigma')q_{\sigma',\sigma}}{\pi(\sigma)q_{\sigma,\sigma'}} = \frac{\mathbb{P}(\sigma')}{\mathbb{P}(\sigma)} .$$

Et c'est là qu'un miracle se produit !!! Alors que nous ne savons pas calculer individuellement les quantités $\mathbb{P}(\sigma)$ et $\mathbb{P}(\sigma')$ à cause de cette fichue constante de normalisation Z qui est inconnue, celle-ci disparaît dans le rapport

$$\frac{\mathbb{P}(\sigma')}{\mathbb{P}(\sigma)} = e^{\frac{1}{T}(H(\sigma)-H(\sigma'))} .$$

C'est dans cette simplification miraculeuse qu'apparaît le génie de ces méthodes MCMC.

2.3 Le recuit simulé : Répondre à l'objectif 2

Dans cette section, nous notons Z_T au lieu de Z et $\mathbb{P}_T(\sigma)$ au lieu de $\mathbb{P}(\sigma)$ car le paramètre de température $T > 0$ va enfin jouer un rôle !

Puisque, d'après (2.3), la loi de probabilité $\mathbb{P}_T(\cdot)$ se concentre sur les configurations d'énergie minimale (i.e. les chemins les plus courts, i.e. dans E_{min}) lorsque $T \to 0^+$, nous souhaitons obtenir une réalisation de la loi $\mathbb{P}_T(\cdot)$ lorsque $T \to 0^+$. Il s'agit donc de reproduire l'algorithme de Metropolis expliqué dans la section précédente mais en faisant tendre la température T vers 0 au fur et à mesure des passages dans la boucle for. Autrement dit, le paramètre T est remplacé par une suite $(T(n))_{n\geq 0}$ qui tend vers 0 et telle que $T(n)$ est le paramètre de température utilisé lors du n-ième passage dans la boucle for. Cet algorithme de simulation, dans lequel le paramètre de température varie et tend vers 0, est appelé *recuit simulé*. La suite $(T(n))_{n\geq 0}$ indiquant à quelle vitesse la température doit tendre vers 0 est appelée un *schéma de température*.

Mais attention ! Le fait de modifier la température au cours du temps n n'est pas anodin : cela modifie également les probabilités de transition. Du coup, la chaîne de Markov correspondante n'est plus homogène en le temps n (i.e. la matrice de transition varie avec n) ce qui, d'un point de vue théorique, complique considérablement notre étude... Il existe bien quelques Théorèmes de convergence de la chaîne de Markov non-homogène $(X_n)_{n\geq 0}$ vers des configurations de E_{min} mais les schémas de température qu'ils proposent sont inexploitables en pratique. Si bien qu'en pratique, et afin que notre algorithme puisse produire un chemin disons satisfaisant en un temps raisonnable, nous utiliserons des schémas de température qui ne sont validés par aucun résultat théorique ! De tels algorithmes sont appelés des *heuristiques*.

L'algorithme du recuit simulé repose sur deux principes issues de la Thermodynamique que nous allons décrire sur un exemple simple.

Principe 1 : un système physique préfère être dans un état où son énergie est minimale.

Un état d'énergie plus faible correspond à un état plus stable pour un système physique. Ce dernier s'orientera naturellement vers cet état d'énergie plus faible s'il le peut. Considérons comme système physique une simple balle, représentée par un rond noir dans la Figure 2.2, qu'on lache sans vitesse initiale dans différents environnements, représentés en Figure 2.2 par de simples profils. Dans cet exemple, l'énergie de notre système physique, i.e. de notre balle, est une énergie potentielle qui diminue avec la hauteur (ou l'ordonnée) de la balle. Dans le profil de gauche, le système physique peut atteindre un état d'énergie minimal tout en diminuant continuellement son énergie : c'est exactement ce qu'il va faire en allant se stabiliser au creux de la vallée.

Parfois, comme dans le profil de droite, le système va se diriger vers un état qui est pour l'énergie un minimum local mais pas un minimum global. Il ne pourra atteindre ce minimum global sans une aide extérieure. Autrement dit, sans aide extérieure, la balle reste emprisonnée dans la vallée dans laquelle elle était positionnée initialement.

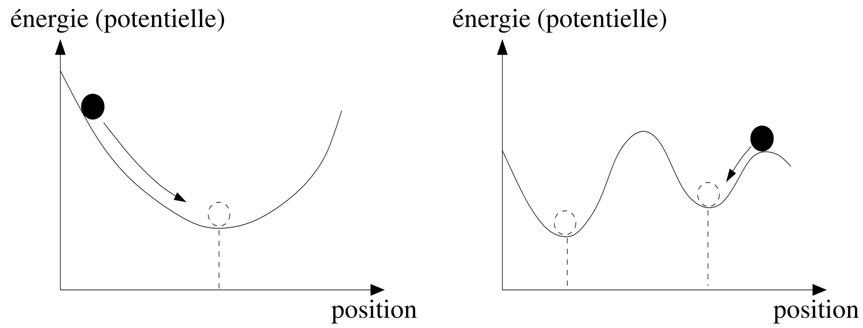


Figure 2.2: Illustration du Principe 1

Principe 2 : En chauffant puis en refroidissant lentement un système, celui-ci présentera de meilleures propriétés physiques.

L'idée physique derrière ce principe issu de la métallurgie, est qu'un refroidissement trop brutal peut bloquer le métal dans un état peu favorable, alors qu'un refroidissement lent permettra aux molécules de s'agencer au mieux dans une configuration stable. C'est cette opération de chauffage puis de refroidissement qui donne le nom de *recuit* à notre méthode. En chauffant notre système physique (notre balle), nous lui fournissons l'énergie (potentielle) nécessaire pour échapper à la vallée à laquelle elle appartient initialement et visiter d'autres vallées dont éventuellement celle contenant le minimum global d'énergie. Puis l'étape de refroidissement a pour objectif de stabiliser notre balle dans une "meilleure vallée".

Dans l'algorithme du recuit simulé, le choix du schéma de température $(T(n))_{n\geq 0}$ est primordial. Lorsque la température est élevée, la chaîne de Markov $(X_n)_{n\geq 0}$ explore bien l'espace E des configurations (i.e. elle visite plusieurs vallées) mais ne se fixe pas sur les minima d'énergie si elle en rencontre. C'est exactement le contraire lorsque la température est basse ; l'exploration est très lente et la chaîne de Markov peut rester longtemps piégée dans une vallée peu intéressante. Il s'agit donc de trouver un compromis entre ces deux comportements.

Dans le contexte du voyageur de commerce, l'énergie du système (ou du chemin σ) est la longueur totale $H(\sigma)$ et les minima globaux sont les plus courts chemins passant par les m villes $\{v_1, \ldots, v_m\}$. Voici donc un pseudo-code de l'algorithme du recuit simulé :

```
Initialiser X = σ_0
n = 0
Répéter jusqu'à n = N
 { T = T(n)
   σ = X
   Choisir σ' avec probabilité q_{σ,σ'} = 2/(m(m−1))
   ρ = e^{(1/T)(H(σ)−H(σ'))}
   If (ρ ≥ 1) then { X = σ' }
               else { Choisir U uniforme sur [0,1]
                      If (U < ρ) then { X = σ' } }
   n = n+1
 }
X
```

La ligne $T = T(n)$ est la mise à jour de la température à l'étape n. À chaque passage dans la boucle for, σ est la configuration courante (celle en laquelle on est) et σ' est une configuration voisine (choisie de manière équiprobable) qu'on nous propose en échange de σ.

- Si le rapport ρ est supérieur à 1 alors $H(\sigma) \geq H(\sigma')$ ce qui signifie que le chemin σ' est plus court que σ : on le sélectionne.

- Si au contraire le rapport ρ est inférieur à 1 alors σ' est plus long que σ. Dans ce cas, l'algorithme préconise de sélectionner tout de même ce plus mauvais chemin avec probabilité ρ. Sinon, on reste en σ. La probabilité $\rho = \rho(T)$ dépend de la température ! Lorsque la température est élevée, ρ est proche de 1. On sélectionnera donc très souvent σ' même s'il est plus long que σ, ce qui permet à la chaîne de Markov de franchir des cols et de changer de vallées. Lorsque la température est basse, ρ est proche de 0. On ne choisira que très rarement le chemin σ' s'il est plus long que σ, ce qui permet de stabiliser la chaîne dans un minimal local (que l'on espère de bonne qualité).

2.4 Et le football dans tout ça !

Discussion.

2.5 Un peu d'art...

Terminons par une section récréative : dessinons avec le problème du voyageur de commerce ! Voilà comment procéder.

1. On se donne pour commencer une image en niveaux de gris que l'on va discrétiser en "gros pixels".
2. Dans chaque gros pixel, on jette des points (au hasard ou pas...) et d'autant plus de points que le gros pixel est foncé dans l'image originale. Ainsi, un gros pixel sans aucun point correspond à une zone très claire de l'image originale.
3. Oublions maintenant cette discrétisation pour ne conserver que les points jetés : c'est l'image de gauche dans la Figure 2.4.
4. L'ensemble de ces points correspond à l'ensemble des villes $\{v_1, \ldots, v_m\}$: faisons passer un voyageur de commerce par ces villes. Il revient en son point de départ formant ainsi une courbe fermée passant une et une seule fois par chacun des points jetés. C'est l'image de droite dans la Figure 2.4.

Très certainement, le chemin proposé dans l'image de droite de la Figure 2.4 n'est pas le plus court passant par tous les points jetés. Mais ce n'est pas grave, ce bon chemin est tout à fait suffisant pour produire l'effet visuel recherché.

Vous trouverez sur le web de nombreux autres exemples.

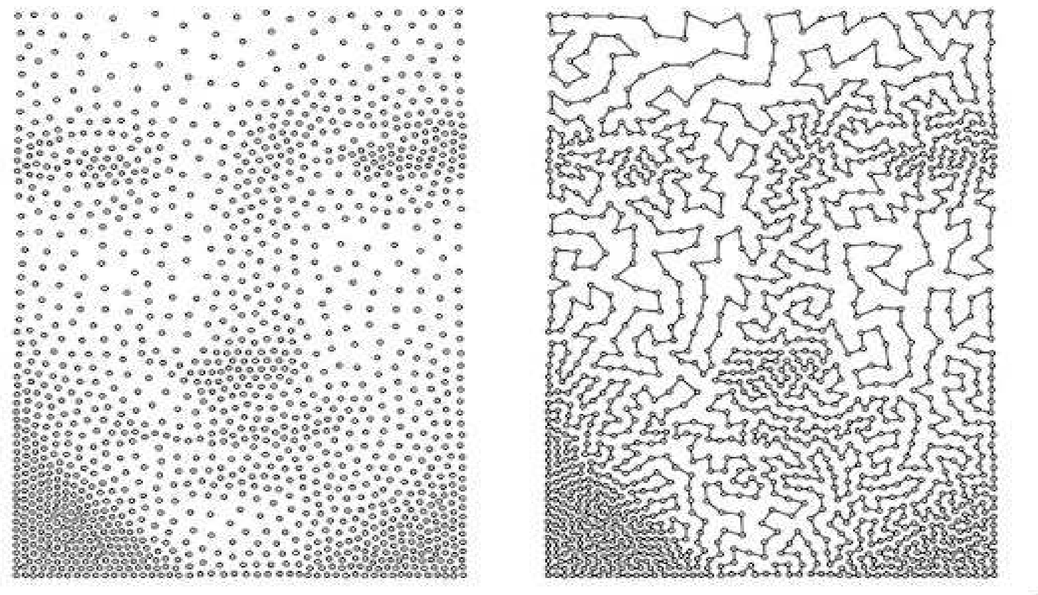


Figure 2.3: Le voyageur de commerce sur Mona Lisa.

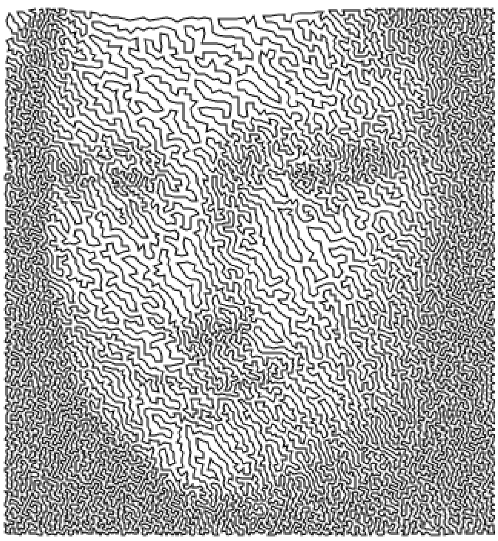


Figure 2.4: Plus on s'éloigne de l'image et plus le visage de Mona Lisa apparaît distinctement.

Chapter 3

Exercices

Exercice 1 :

Partie 1. Considérons la marche aléatoire simple $(S_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à valeurs dans $\mathbb{Z}$, définie par

$$\begin{cases} S_0 = y_0 \in \mathbb{Z} \\ S_n = y_0 + X_1 + \ldots + X_n, \ \forall n \geq 1 \end{cases}$$

où $(X_n)_{n\geq 1}$ est une suite de v.a. i.i.d., chacune valant 1 avec probabilité p et -1 avec probabilité $1-p$, et $y_0 \in \mathbb{Z}$.

1. Quelles sont les valeurs que peut prendre S_{100} ? Notons E_{100} cet ensemble.

2. Soit $y \in E_{100}$. Combien y-a-t'il de trajectoires vérifiant $S_{100} = y$? Préciser ce nombre lorsque $y = y_0 + 100$, $y = y_0 - 100$ et $y = y_0$.

3. Soit $y \in E_{100}$. Montrer que toutes les trajectoires vérifiant $S_{100} = y$ ont la même probabilité. Quelle est cette probabilité ?

4. *Principe de réflexion.* Soient x, x', y, y' des entiers tels que $0 \leq x \leq x'$ et $yy' \geq 0$. Justifier heuristiquement qu'il y a autant de trajectoires de la marche aléatoire allant de (x, y) à (x', y') en touchant l'axe des abscisses, que de trajectoires allant de de $(x, -y)$ à (x', y').

Partie 2. Application au distributeur automatique de boissons.
Considérons un distributeur automatique de boissons, chacunes valant 1 euro. Supposons que 60% des clients désirant acheter une boisson la paie avec une pièce de 1 euro, et le reste, avec une pièce de 2 euros. Dans ce dernier cas, le distributeur rend au consommateur sa monnaie, i.e. une pièce de 1 euro. À condition qu'il en ait... Il s'agit donc pour l'appariteur de prévoir dans le distributeur, en début de journée, un stock suffisant de pièces de 1 euro. Mais pas trop pour ne pas bloquer inutilement de la trésorerie !

5. Modéliser par une marche aléatoire l'évolution au cours du temps du stock du distributeur.

6. Supposons que dans une journée donnée, 100 clients se présentent et que exactement 60 d'entre eux paient avec une pièce de 1 euro. Quel stock initial permet d'assurer (disons à 95%) que chaque client récupère sa monnaie ?

Exercice 2 :

Trois produits de consommation courante : $P_1,\ P_2,\ P_3$ sont en concurrence sur le marché. Au 15 janvier, une enquête réalisée sur un échantillon représentatif de consommateurs a donné les résultats suivants :

- 30% des personnes interrogées ont déclaré consommer P_1,

- 50% ont déclaré consommer P_2,
- 20% ont déclaré consommer P_3.

Les fabricants du produit P_1 lancent une campagne de publicité qui dure 15 jours afin d'accroître leur part de marché.

Une enquête réalisée au 31 janvier sur le même échantillon donne :

- Parmi les clients de P_1 (au 15 janvier) : 50% continuent d'acheter P_1, 40% achètent P_2, 10% achètent P_3.
- Parmi les clients de P_2 : 70% continuent d'acheter P_2, 30% achètent P_1.
- Parmi les clients de P_3 : 80% continuent d'acheter P_3, 20% achètent P_1.

1. Déterminer l'état du marché au 31 Janvier.
2. Les fabricants de P_1 décident d'effectuer une succession de campagne de publicité de même type que la précédente. En supposant que l'impact que chaque campagne est le même que celle de Janvier, modéliser l'évolution du choix d'un client typique à l'aide d'une chaîne de Markov. (Par exemple, à l'instant 0, on aura une probabilité de $0,3$ que le client choisisse P_1). Donner la matrice et le graphe de transition de la chaîne.
3. Re-déterminer l'état du marché au 31 Janvier en utilisant la condition initiale et la matrice de transition.
4. Quel sera l'état du marché au bout de la seconde campagne ?
5. Le marché possède-t-il un état stationnaire ? Si oui, quel est-il ?

Exercice 3 :

Une route comprend 4 voies. Chacune d'entre elles peut être traversée en une seconde. La probabilité pour qu'une automobile arrive pendant une seconde déterminée est $0,8$.On s'interroge sur la probabilité de traverser la route en 4 secondes, 5 secondes, 6 secondes, etc ...

1. Représenter le problème par une chaîne de Markov homogène $(X_n)_{n\geq 0}$. Donner sa matrice et son graphe de transition.
2. Si on note μ_n la loi de la v.a. X_n, déterminer μ_0, μ_1, μ_2 et μ_3. Que pouvez-vous dire de μ_n lorsque $n \to \infty$?

Exercice 4 :

On étudie le fonctionnement d'une imprimante. Celle-ci peut être dans 3 états distincts : 1. en attente d'un caractère à imprimer, 2. impression d'un caractère ou 3. interruption après avoir reçu un caractère de contrôle. Lorsque l'imprimante est en attente, elle reçoit un caractère à imprimer avec probabilité $0,8$. Lorsqu'elle est en impression, elle reçoit : un caractère "normal" avec probabilité $0,95$ (caractère courant du fichier à imprimer) ; un caractère de fin de fichier avec probabilité $0,04$ et l'imprimante retourne alors dans l'état d'attente ; un caractère d'interruption avec probabilité $0,01$ et l'imprimante passe alors dans l'état 3. Lorsque l'imprimante est dans l'état 3, elle retourne dans l'état d'attente avec probabilité $0,3$. Sinon elle reste dans l'état 3.

1. Modéliser ce système par une chaîne de Markov. Déterminer son graphe de transition et sa matrice de transition.

2. Quel est le temps moyen d'une interruption ?

3. Identifier la mesure stationnaire de cette chaîne de Markov.

4. Au bout d'un temps long, quelle est la probabilité de trouver l'imprimante à l'arrêt ?

Exercice 5 :
Un installateur d'ascenceurs dispose d'une seule équipe dont les membres travaillent sur le même chantier. Les demandes d'installation des clients qui lui parviennent peuvent être réparties en 2 classes :

- Type A : travaux de moyenne importance durant 1 semaine.
- Type B : travaux plus importants durant 2 semaines.

Il n'y a pas de liste d'attente. Les demandes d'installation parviennent à l'entrepreneur en début de chaque semaine. Une observation statistique a montré que les probabilités de recevoir (un lundi donné) au moins une demande de type A et au moins une demande de type B valent respectivement $p = 0,5$ et $q = 0,6$. Ces deux événements sont supposés indépendants. Lorsque l'équipe est déjà occupée sur une installation de type B, les demandes de travaux sont refusées. Il se peut aussi que l'équipe soit inactive durant une semaine faute de demande de travaux. Lorsque l'entrepreneur reçoit simultanément deux demandes, une du type A et une du type B, il donne systématiquement suite à celle du type B.

1. On désire représenter par une chaîne de Markov l'évolution de l'activité de l'équipe d'une semaine sur l'autre. Donner son graphe et sa matrice de transition.

2. En supposant que l'entreprise fonctionne depuis plusieurs semaines, déterminer la probabilité de chacun des états.

3. Une installation de type A (resp. type B) produit un bénéfice de 5000 euros (resp. 12000 euros). L'inactivité de l'équipe pendant une semaine génère une perte de 2500 euros. Calculer le gain moyen de l'entreprise pendant une semaine de fonctionnement.

Exercice 6 :
Soit le petit jeu de l'oie suivant. Les cases sont $0, 1, 2, 3$ et forment un cycle. Sur la case 3, il est écrit "au prochain tour, reculez de deux cases". On part de la case 0 et on gagne dès que l'on y retourne. À chaque étape, on lance une pièce symétrique : on avance d'une case si c'est face et de deux si c'est pile. On note X_n la suite des états (le joueur continue de jouer après avoir gagné).

1. Montrer que la suite $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov homogène issue de 0 et donner sa matrice de transition.

2. Étudier la convergence en loi de la chaîne.

3. En déduire le nombre moyen de coups joués pour gagner.

Exercice 7 :
Considérons la chaîne de Markov $(X_n)_{0\leq n\leq N}$ à valeurs dans $E = \{a, b, c, d\}$ et dont la matrice de

transition est donnée par :

$$P = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

1. Déterminer les classes irréductibles.

2. Montrer que la matrice P^n converge (coefficient par coefficient) vers une matrice P^∞ que l'on déterminera.

3. En déduire l'existence de plusieurs mesures stationnaires.